

Mikrostrukturelle Orientierungszustände strömender Polymerlösungen und Fasersuspensionen

Zur Erlangung des akademischen Grades

Dr.-Ing.

vom Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen
der Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

von

Dipl.-Ing. Kerstin Heinen

aus

Dortmund

Tag der mündlichen Prüfung: 09.02.2007

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. K. Strauß
2. Gutachter: Prof. Dr. H.-M. Laun

Dortmund, 2007

Wer sich am Ziel glaubt, geht zurück.
Laotse

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 kugelzentrierten 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.

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.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Strömungsberechnung nicht-newtonscher Fluide	3
2.1	Modellierungsebenen	3
2.2	Physikalische Grundgleichungen	5
2.2.1	Impulssatz: Cauchy'sche Bewegungsgleichung	5
2.2.2	Massenerhaltung/ Druckkorrekturgleichung	6
2.3	Kontinuumsmechanische Grundgrößen und Definitionen	6
2.3.1	Tensoren des Geschwindigkeitsfeldes	6
2.3.2	Objektive Zeitableitungen	7
3	Mikro-Makro-Modelle für Polymerlösungen	9
3.1	Begriffsdefinitionen	9
3.2	Offenes Feder-Hantel-Modell	10
3.2.1	Konventioneller Konfigurationsraum: „kugelzentriert“	11
3.2.2	Fokker-Planck-Gleichung	11
3.2.3	Neuer Konfigurationsraum: „federzentriert“	14
3.2.4	Koordinatentransformation	16
3.2.5	Abschätzung des Wertebereiches von b	17
3.3	Geschlossene Feder-Hantel Modelle	18
3.3.1	FENE-P Modell	18
3.3.2	FENE-CR Modell	19
3.3.3	FENE-L Modell	20
3.3.4	Orientierungsellipsoid/-ellipse	21
3.3.5	Geschlossene FENE-Modelle: einfache Scherung	22
3.3.6	Geschlossene FENE-Modelle: uniaxiale Dehnung	29
3.4	Hystereseverhalten in Dehn-/Relaxationsversuchen	33
3.5	Zusammenfassung	34
4	Numerische Methoden der Feder-Hantel-Modelle	37
4.1	Diskretisierung der Fokker-Planck Gleichung	37
4.2	Lösung des linearen Gleichungssystems	38
4.3	Numerische Integration	38
4.4	Validierung des FP-Algorithmus	40
4.4.1	Analytische Gleichgewichts-Lösung	40
4.4.2	Analytische Lösung Dehnströmung	40
4.4.3	Ergebnisvergleich numerische Lösung/analytische Lösungen	41

5	Polymerlösungen: Mechanische Spektroskopie	43
5.1	SAOS: Scherung mit kleiner Deformationsamplitude	43
5.1.1	Linear viskoelastischer Bereich	44
5.1.2	Konstante Deformationsamplitude, Variation der Frequenz	46
5.2	LAOS: Scherung mit großer Deformationsamplitude	49
5.2.1	Einfluss der Deformationsamplitude auf die Federlänge	50
5.2.2	Einfluss von Amplitude und De-Zahl auf die Konfiguration	50
5.2.3	Zeitliche Änderung der Konfiguration	52
5.3	Parameterstudie: Intensität der Nichtlinearität	54
5.3.1	Deformationsabhängigkeit bei konstanter Deborah-Zahl	54
5.3.2	Parameterstudie FENE-L	56
5.3.3	Verteilungsfunktion des offenen Feder-Hantel-Modells	60
5.4	Zusammenfassung	65
6	Fasersuspensionen	67
6.1	Mikro-Makro-Modelle für Fasersuspensionen	67
6.1.1	Hybrider Schließungsansatz	70
6.1.2	IBOF-5 Schließungsansatz	72
6.1.3	Faser-Faser-Wechselwirkungen	74
6.1.4	Spannungstensor	76
6.2	Numerische Methoden	76
6.2.1	DGL-System des Faserkonfigurationstensors	77
6.2.2	Randbedingungen	78
6.2.3	Lösungsmethoden der linearen Gleichungssysteme	78
6.3	Zylinderumströmung	79
6.3.1	Geometrie- und Stoffdaten	79
6.3.2	Ergebnisse	81
6.4	Durchströmung eines 90°-Krümmers	88
6.4.1	Geometrie- und Stoffdaten	88
6.4.2	Ergebnisse	88
6.5	Zusammenfassung	92
7	Zusammenfassung	95
A	Anhang	97
A.1	Stationäre Scherströmung: analytische Lösung FENE-P	97
A.2	Stationäre Scherströmung: analytische Lösung FENE-CR	97
A.3	Diskretisierte Randbedingung der FP-Gleichung für $\vartheta = 0$	98
A.4	Fasersuspension: IBOF-5 Schließungsansatz	99
	Literaturverzeichnis	100

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	Konfigurationstensor	[-]
<i>A</i>	Oberfläche	[m ²]
Amp	Amplitude einer harmonischen Schwingung	[-]
B	Quadrat des Konfigurationstensors	[-]
<i>B</i>	zweites mittleres Moment des Konfigurationsvektors	[-]
<i>b</i>	Quadrat der dimensionslosen max. Federlänge	[-]
<i>C</i> _I	Faserinteraktionskoeffizient	[-]
De	Deborah-Zahl	[-]
D	Deformationsgeschwindigkeitstensor	[1/s]
<i>D</i>	Faserdurchmesser	[m]
<i>D</i> _r	Rotationsdiffusionskoeffizient	[1/s]
<i>e</i> ₁	Eigenvektor	[-]
<i>e</i> ₂	Eigenvektor	[-]
\hat{F}	Federkraft	[N]
F	Kraft	[N]
f _m	allg. massenspezifische Kräfte	[N/kg]
<i>f</i>	allg. Warscheinlichkeitsdichte	[-]
<i>G</i> '	Speichermodul	[-]
<i>G</i> ''	Verlustmodul	[-]
<i>H</i>	Federkonstante	[N/m]
<i>h</i>	transformierte Radius-Koordinate	[-]
<i>H</i> _α	Heaviside-Funktion mit Parameter α	[-]
I	Impuls	[kg m/s ²]
<i>I</i> _{<i>i</i>}	Intensität Schwingungsanteil mit <i>i</i> -fachem der Grundfrequenz	[-]
<i>II</i>	zweite Tensorinvariante	[-]
<i>III</i>	dritte Tensorinvariante	[-]
<i>k</i> _B	Boltzmann-Konstante	[J/K]
L	Geschwindigkeitsgradient	[1/s]
<i>L</i>	Längenmaß	[m]
<i>l</i> _{<i>a</i>}	Größere Halbachse Orientierungsellipsoid	[-]
<i>l</i> _{<i>b</i>}	Kleinere Halbachse Orientierungsellipsoid	[-]
n	Flächennormalenvektor	[-]
<i>N</i>	Gitterzellenanzahl	[-]
<i>n</i>	Teilchendichte	[-]
<i>N</i> ₁	Erste Normalspannungsdifferenz	[-]
<i>N</i> _c	Anzahl Kohlenstoffatome einer Hauptkette	[-]
<i>p</i>	Druck	[Pa]
Q	Konfigurationsvektor	[m]

Q_0	maximale Federlänge	[m]
\mathbf{q}	dimensionsloser Konfigurationsvektor	[-]
\mathbf{r}	Ortsvektor	[m]
r	Faserformfaktor	[-]
r	Radius	[m]
$\tilde{\mathbf{S}}$	Spannungstensor	[Pa]
\mathbf{S}	Spannungstensor ohne Druckanteil	[Pa]
s	Potenz in der FENE-Koordinatentransformation	[-]
T	Temperatur	[K]
t	Zeit	[s], [-]
\bar{U}	mittlere Eintrittsgeschwindigkeit	[m/s]
\mathbf{u}	Einheitskonfigurationsvektor	[-]
u, v	Komponenten des Geschwindigkeitsvektors	[m/s]
\mathbf{v}	Geschwindigkeitsvektor	[m/s]
V	Volumen	[m ³]
\mathbf{W}	Rotationsgeschwindigkeitstensor	[1/s]
We	Weissenberg-Zahl	[-]
Y	Warscheinlichkeitsdichte mit Koordinatentransformation	[-]
y^+	Wandnormalenabstand	[m]

Griechische Buchstaben

α	Parameter geschlossenes FENE-Modell	[-]
β	Parameter geschlossenes FENE-L Modell	[-]
β_i	Schließungskonstanten	[-]
Δ	Laplace-Operator	[1/m ²], [-]
δ	Verlustwinkel	[rad]
δ_α	Dirac-Funktion mit Parameter α	[-]
$\boldsymbol{\delta}$	Einheitstensor	[-]
$\dot{\epsilon}$	Dehngeschwindigkeit (tw. normiert mit der Relaxationszeit)	[1/s], [-]
$\dot{\gamma}$	Schergeschwindigkeit (tw. normiert mit der Relaxationszeit)	[1/s], [-]
γ_0	Deformationsamplitude	[-]
η	Dynamische Scherviskosität	[-]
η^*	Komplexe Viskosität	[-]
η_e	Dehnviskosität	[-]
λ	Relaxationszeit	[s]
λ_F	Faserkonstante	[-]
λ_{\max}	größter Eigenwert einer Matrix	[-]
μ_1	Kopplungskoeffizient	[-]
μ_2	Kopplungskoeffizient	[-]
∇	Nabla-Operator	[1/m], [-]
Φ	Faservolumenanteil	[-]
φ	Winkel im Kugelkoordinatensystem	[rad]
φ_x	Eingeschlossener Winkel mit der x -Achse	[-]
Ψ	Warscheinlichkeitsdichte der Ortsvektoren	[-]
ψ	ortsunabhängige Warscheinlichkeitsdichte der Ortsvektoren	[-]
ψ_1	Erster Normalspannungskoeffizient	[-]

ϱ	Fluiddichte	[kg/ m ³]
ϱ_α	approximierte Warscheinlichkeitsverteilungsfunktion	[-]
ΣI	Summe der Intensitäten höherer Frequenzanteile	[-]
Σ	Warscheinlichkeitsdichte der Geschwindigkeitsvektoren	[-]
σ	sterischer Faktor	[-]
ϑ	Winkel im Kugelkoordinatensystem	[rad]
ω	Kreisfrequenz	[1/s]
ζ	Widerstandskoeffizient einer Kugel	[N s/m]

Indizes

(4)	Tensor vierter Stufe	[-]
eq	Gleichgewicht („equilibrium“)	[-]
exp	explizit	[-]
F	Faser	[-]
GGW	Gleichgewicht	[-]
i, j	allgemeine Laufindizes	[-]
imp	implizit	[-]
p	Polymer	[-]
rel	relative Größe, normiert	[-]
s	„Solvent“, Matrixflüssigkeit	[-]
Wandf.	Wandfunktion	[-]
z	federzentriertes Koordinatensystem	[-]

Hochgestellte Symbole

T	Transponierte eines Tensors	[-]
-----	-----------------------------------	-----

1 Einleitung

Die Neugier steht immer an erster Stelle eines Problems, das gelöst werden will.

Galileo Galilei

Die numerische Strömungsberechnung newtonscher Fluide ist in vielen Anwendungsbereichen bereits als Hilfsmittel etabliert, insbesondere bei der Untersuchung verfahrenstechnischer Problemstellungen und dem Schiff- und Flugzeugbau. Auch die Strömungsberechnung nicht-newtonscher Fluide nimmt an Bedeutung zu. Sowohl für Stoffsysteme mit einer dispersen Phase, wie z. B. Fasersuspensionen, als auch für Polymerlösungen oder -schmelzen werden makroskopische Stoffeigenschaften durch die Mikrostruktur bzw. den Orientierungszustand der Fasern oder Makromoleküle bestimmt. In faserverstärkten Kunststoffen können Fasern, die in eine Hauptrichtung orientiert sind, die Zugfestigkeit des Materials in dieser Richtung erhöhen. Durch das Einbringen faserförmiger Komponenten (z. B. „Carbon Nano Tubes“) in eine kontinuierliche Matrix und die Orientierung der Fasern kann z. B. auch die thermische und elektrische Leitfähigkeit gezielt beeinflusst werden [1–4]. Numerische Strömungsberechnungen können experimentelle Untersuchungen ergänzen und insbesondere für Geometrieoptimierungen bzw. die Auslegung verfahrenstechnischer Komponenten hilfreiche Einblicke in die Mikrostruktur liefern, die sonst nur mit hohem Aufwand experimentell zugänglich ist.

Im Gegensatz zu der Klasse der newtonschen Fluide gibt es für nicht-newtonsche Fluide aufgrund unterschiedlicher Fließeigenschaften keine Modelle, die mehrere Fluidtypen gleichermaßen gut abbilden können. In dieser Arbeit werden Modelle für Polymerlösungen und Fasersuspensionen und somit Stoffsysteme mit einer dispersen Phase in einer homogenen Matrix betrachtet. Ein umfassender Überblick über die Begriffsbildung und unterschiedliche rheologische Modelle wird z. B. von BIRD und ÖTTINGER gegeben [5].

Für die Strömungsberechnung der oben genannten Stoffsysteme werden sogenannte Mikro-Makro-Modelle verwendet. Diese Modelle können allgemein als eine Zwischenstufe kontinuumsmechanischer und molekulardynamischer Modelle verstanden werden. Letztere bilden zwar die große Anzahl der Freiheitsgrade von Makromolekülen ab, eignen sich jedoch nicht für die Berechnung komplexer Strömungen. In Mikro-Makro-Modellen wird das gesamte Makromolekül durch ein einfaches strukturmechanisches Modell mit wenigen Freiheitsgraden ersetzt und durch Mittelungen und Schließungsannahmen der Rechenaufwand so reduziert, dass die numerische Berechnung dreidimensionaler, instationärer Strömungen möglich wird. Man unterteilt diese Modelle in „offene“ und „geschlossene“ Formen. Offene Modelle liefern mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion für die Molekülorientierung vollständige Informationen über den Orientierungszustand. Mit geschlossenen Modellen kann lediglich ein mittlerer Orientierungszustand der Moleküle oder Fasern in einem Raumpunkt berechnet werden, jedoch ist der Rechenaufwand deutlich geringer. Ein erstes Ziel ist die Diskussion von Modellen unterschiedlicher Modellierungstiefe für Polymerlösungen in viskosimetrischen Strömungen.

In der Rheologie kann ein Standardsatz von viskosimetrischen Strömungen definiert werden, der die Basis für eine Übertragung der beobachteten Fluideigenschaften auf komplexe Strömungen in technischen Anwendungen darstellen kann. Bisher etabliert sind:

- Scherströmung: Stationär und Anlauf-/ Relaxationsverhalten,
- Uniaxiale Dehnung: Stationär und Anlauf-/ Relaxationsverhalten,
- Oszillierende Scherung mit kleiner Deformationsamplitude („SAOS“: Small Amplitude Oscillatory Shear).

Innerhalb der letzten Jahre hinzugekommen ist die

- Oszillierende Scherung mit großer Deformationsamplitude („LAOS“: Large Amplitude Oscillatory Shear).

Letztere ist motiviert aus der Überzeugung, dass die Kenntnis und Charakterisierung der Fluideigenschaften bei kleinen Deformationen für die Vorhersage des Fließverhaltens in komplexen Strömungen nicht ausreicht. In der Literatur werden zunehmend experimentelle Ergebnisse in LAOS-Strömungen diskutiert [6–9]. Eine Diskussion von Mikro-Makro-Modellen in LAOS-Strömungen ist bisher nicht vorgenommen worden und erfolgt in dieser Arbeit. Lediglich für kontinuumsmechanische Modelle finden sich einige wenige Arbeiten [10, 11]. In der vorliegenden Arbeit werden offene und geschlossene Feder-Hantel-Modelle für Polymerlösungen in oszillierender Scherung mit großer Deformationsamplitude ausführlich untersucht und diskutiert. Dabei kommen deterministische Methoden zum Einsatz, da diese im Gegensatz zu stochastische Methoden zur Frequenzanalyse der nichtlinearen Fluidantwort in einer LAOS-Strömung vorteilhaft sind. Die Berechnung offener Feder-Hantel-Modelle mit deterministischen Methoden ist aufgrund des benötigten Rechenaufwandes eine wenig diskutierte und verwendete Methode. Ein Beitrag wurde lediglich von LOZINSKI und CHAUVIÈRE geliefert [12–14]. Ein quantifizierender Vergleich von offenen und geschlossenen Modellen und deren Beurteilung für die Beschreibung realer Fluide an Hand viskosimetrischer Strömungen fehlt jedoch auch in diesen Arbeiten. Dieser bisher in der Literatur fehlende Aspekt wird in der vorliegenden Arbeit diskutiert.

Modelle für Strömungsberechnungen nicht-newtonscher Fluide sollten möglichst mit experimentellen Untersuchungen validiert werden. Ziel ist es einen Modellparametersatz zu finden, der den realen Orientierungszustand der Makromoleküle/Fasern in Strömungen abbildet. Dann können numerische Berechnungen für Geometrieoptimierungen und Studien des Einflusses der Strömungsparameter etc. verwendet werden. Für Fasersuspensionen ist die experimentelle Bestimmung der Konfiguration in Strömungen mit optischen Messmethoden einfacher als für Polymerlösungen. Ein quantitativer Vergleich von experimentellen Untersuchungen und numerischen Strömungsberechnungen von Fasersuspensionen ist in der Literatur jedoch bisher nicht vorhanden. Vergleiche beschränkten sich auf viskosimetrische Strömungen. Ein zweites Ziel dieser Arbeit ist daher die Validierung eines geschlossenen Modells für konzentrierte Fasersuspensionen in makroskopischen Strömungen am Beispiel einer Zylinderumströmung. Zusätzlich werden unterschiedliche Modellergebnisse in der Strömung durch einen 90°-Krümmer miteinander verglichen. Die zu diesem Vergleich herangezogenen Größen, u. a. ein Hauptorientierungswinkel und die sogenannten Orientierungsellipsoiden, sind auch experimentell zugänglich und liefern für die Strömungsberechnung verfahrenstechnischer Problemstellungen Informationen über die lokale Mikrostruktur.

2 Grundlagen der Strömungsberechnung nicht-newtonscher Fluide

Fürchte nicht, Dir Mühe zu geben.

Cheng Man-ch'ing

Für die Berechnung von Strömungen nicht-newtonscher Fluide müssen neben den physikalischen Grundgleichungen (Impulsbilanz, Massenbilanz) entsprechende Modellgleichungen gefunden und gelöst werden, die experimentell beobachtbare charakteristische Eigenschaften des jeweils betrachteten Fluids vorhersagen können. Diese Grundgleichungen und unterschiedlichen Typen rheologischer Modelle werden im Folgenden einführend dargestellt.

2.1 Modellierungsebenen

Physikalische Modelle zur numerischen Strömungsberechnung nicht-newtonscher Fluide können auf unterschiedlichen Modellierungsebenen bzw. Größenskalen der Länge L aufgestellt werden (Abbildung 2.1). Die Beschreibungsebene mit der höchsten Modellierungstiefe ist auf atomarer Ebene. Das betrachtete Fluid bzw. dessen Moleküle werden durch ein Modellfluid abgebildet und die Berechnungsmethoden sind als „Molecular Dynamics“ bekannt. Betrachtet man das Modellsystem in einem durch äußere Kräfte erzeugten Nichtgleichgewichtszustand spricht man von NEMD- („non-equilibrium molecular dynamics“) Methoden [15]. Charakteristisch für diese Modelle ist die Betrachtung einzelner Moleküle. Eine Alternative dazu, die zwar weniger Einzelheiten der Molekülstruktur abbildet als die NEMD-Methoden, jedoch mit stochastischen Algorithmen eine Berechnung von einzelnen Molekül- oder Partikeltrajektorien vornimmt, ist der „Brownian Dynamics“ Ansatz. Demgegenüber besitzen Modelle, die keine Aussagen über die Mikrostruktur des Fluids ermöglichen, eine geringe Modellierungstiefe, d.h. im Vergleich zu den NEMD-Methoden müssen mehr vereinfachende Annahmen getroffen werden und die betrachteten Längenabmessungen im physikalischen Modell sind groß gegenüber den molekularen oder atomaren Abmessungen. Diese Beschreibungsebene wird als Kontinuumsansatz bzw. die Modelle als kontinuumsmechanische oder makroskopische rheologische Modelle bezeichnet. Rheologische Modelle auf der makroskopischen Beschreibungsebene sind bereits in kommerziellen CFD-Programmen erhältlich und die numerische Strömungsberechnung mit makroskopischen Modellen ist seit vielen Jahren Gegenstand der Forschung [16]. Sogenannte Mikro-Makro-Modelle operieren bezüglich des Längenmaßstabes der Modellierung zwischen Kontinuumsmethoden und der NEMD. Ein Makromolekül wird durch ein einfaches mechanisches Ersatzmodell abgebildet und als disperse Phase in einer kontinuierlichen Matrix-Flüssigkeit betrachtet (Abbildung 2.2). Dabei unterscheidet man zwischen offenen und geschlossenen Mikro-Makro-Modellen. In offenen Modellformen berechnet man entweder mit deterministischen Methoden eine Verteilungsfunktion der Molekülorientierung und -länge, im Folgenden als Konfiguration bezeichnet,

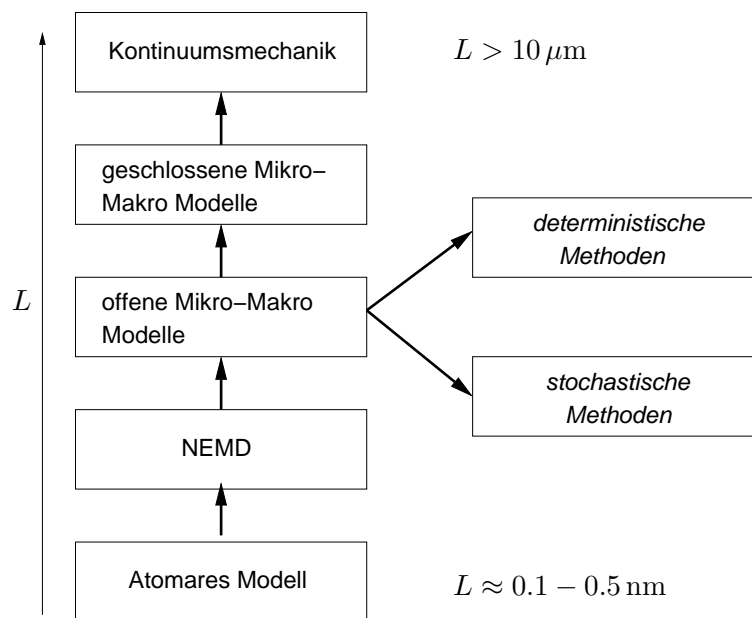


Abbildung 2.1: Modellierungsebenen mit zunehmender Modellierungstiefe

oder bei Verwendung stochastischer Methoden die Konfigurationen einzelner Moleküle in einem Ensemble. Offene Mikro-Modelle eignen sich aufgrund des hohen Rechenaufwandes bisher jedoch nicht sehr gut für die Berechnung von makroskopischen dreidimensionalen Strömungen. Geschlossene Mikro-Makro-Modelle reduzieren durch einen Schließungsansatz die Modellierungstiefe und liefern nur noch Informationen über die mittlere Konfiguration aller Moleküle. Die zugrundeliegende Mittelung und Schließung liefert einen mittleren Konfigurationstensor, was einerseits den Rechenaufwand gegenüber den offenen Modellen erheblich reduziert, aber andererseits Einblicke in den strömungsinduzierten Konfigurationzustand der Makromoleküle bzw. der dispersen Phase ermöglicht. Ein detaillierter Überblick über die Entwicklungen im Bereich der numerischen Berechnung nicht-newtonscher Fluidströmungen u. a. ist in [17, 18] dargestellt.

In dieser Arbeit werden rheologische Stoffmodelle der Mikro-Makro-Ebene für Polymerlösungen und Fasersuspensionen verwendet und diskutiert. Im Folgenden ist zu unterscheiden zwischen den physikalischen Grundgleichungen der kontinuierlichen Phase bzw. der Matrixflüssigkeit (=Makro-Ebene) und der dispersen Phase (=Mikro-Ebene), also den Polymermolekülen bzw. suspendierten Fasern. Der betrachtete Längenmaßstab für die physikalischen Grundgleichungen der Matrixflüssigkeit ist so groß, dass die Kontinuumshypothese weiterhin

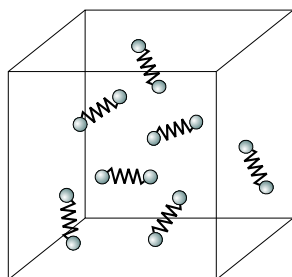


Abbildung 2.2: Mikro-Makro-Modell: Suspension von Federhanteln in kontinuierlicher Matrixflüssigkeit

erfüllt ist. Die Darstellung der Berechnungsgleichungen der rheologischen Stoffmodelle auf der Mikro-Ebene folgt in Kapitel 3.

2.2 Physikalische Grundgleichungen

Die physikalischen Grundgleichungen der Makro-Ebene, die für die Strömungsberechnung von nicht-newtonschen Fluiden verwendet werden können, sind die Impulserhaltung und die Massenerhaltung. Die daraus berechenbaren Größen sind das Geschwindigkeitsfeld und der Druck.

2.2.1 Impulssatz: Cauchysche Bewegungsgleichung

Formuliert man den Impulssatz für ein in einem Fluidkontinuum abgegrenztes Teilvolumen V mit der Oberfläche A , erhält man die Cauchysche-Bewegungsgleichung, wobei die zeitliche Änderung des Impulses \mathbf{I} gleich der Summe aller an dem Teilvolumen angreifenden Kräfte \mathbf{F}_i ist. Die an dem Volumenelement angreifenden Kräfte werden in massenspezifische Kräfte \mathbf{f}_m und Oberflächenkräfte (Spannungskräfte) eingeteilt.

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{I}}{Dt} &= \sum_i \mathbf{F}_i, \\ \frac{D}{Dt} \int_V \varrho \mathbf{v} dV &= \int_V \varrho \mathbf{f}_m dV + \oint_A \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n} dA. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Die Anwendung von Erhaltungsgleichungen in Fluidströmungen bzw. bewegte Fluid-elemente oder Körper erfordert die Einführung einer Zeitableitung in einem mitbewegten Koordinatensystem (Lagrange'sche Koordinaten). Diese wird als materielle Zeitableitung bezeichnet und durch den Operator $\frac{D}{Dt}$ dargestellt:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla). \quad (2.2)$$

$\frac{\partial \Phi}{\partial t}$ ist die Zeitableitung in einem ortsfesten Koordinatensystem (Eulersche Koordinaten) und $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\Phi$ wird als konvektive Ableitung bezeichnet. Mit dem Satz von Gauß und (2.2) kann Gl. (2.1) für inkompressible Fluide in die bekannte differentielle Form der Bewegungsgleichung überführt werden.

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \varrho \mathbf{v} dV &= \int_V \varrho \mathbf{f}_m dV + \int_V \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}} dV, \\ \varrho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} &= \varrho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} \right) = \varrho \mathbf{f}_m + \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Die Bestimmungsgleichung für den Spannungstensor $\tilde{\mathbf{S}}$ wird als rheologische Stoffgleichung bezeichnet [19] und koppelt das Geschwindigkeitsfeld und die Stoffeigenschaften aneinander. Für die Beschreibung nicht-newtonscher Fluide existiert eine Vielzahl von unterschiedlichen rheologischen Stoffgleichungen. Im Rahmen dieser Arbeit werden sogenannte „Mikro-Makro“-Modelle für Polymerlösungen und Fasersuspensionen vorgestellt. Der Druck p hat

auf die physikalischen Eigenschaften inkompressibler Fluide i. Allg. keinen Einfluss und wird mit

$$\tilde{\mathbf{S}} = -p \boldsymbol{\delta} + \mathbf{S} \quad (2.4)$$

aus dem Spannungstensor herausgezogen. $\boldsymbol{\delta}$ bezeichnet den Einheitstensor. In dieser Arbeit werden nur Fluide betrachtet, die keine Volumenmomente wie z. B. elektrische und magnetische Momente erfahren. Aus der Anwendung des Drehimpulssatzes für ein differentielles Volumenelement folgt damit, dass der Spannungstensor symmetrisch ist und zur Lösung der rheologischen Stoffgleichung nur sechs Komponenten des Spannungstensors berechnet werden müssen.

2.2.2 Massenerhaltung/ Druckkorrekturgleichung

Die Massenbilanz für inkompressible Fluide liefert aufgrund der konstanten Fluidichte die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes und stellt keine Bestimmungsgleichung für den Druck dar. Durch Anwendung des Divergenzoperators auf die Impulserhaltungsgleichung kann eine Bestimmungsgleichung für den Druck hergeleitet werden, die sogenannte Druckkorrekturgleichung [20, 21].

2.3 Kontinuumsmechanische Grundgrößen und Definitionen

Rheologische Stoffmodelle stellen einen Zusammenhang zwischen der Deformationsgeschichte und den an einem Fluidelement angreifenden Oberflächenspannungen her. Für die in dieser Arbeit verwendeten und diskutierten rheologischen Modelle muss zunächst eine eindeutige Begriffsbildung der benötigten Tensoren und objektiven Zeitableitungen vorgenommen werden.

2.3.1 Tensoren des Geschwindigkeitsfeldes

Innerhalb der Strömung auftretende örtliche Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes werden beschrieben durch die Einführung des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L}

$$\mathbf{L} = (\nabla v)^T, \quad L_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j}. \quad (2.5)$$

Der Geschwindigkeitsgradient \mathbf{L} ist ein antisymmetrischer Tensor, der additiv in einen symmetrischen Anteil \mathbf{D} und einen antisymmetrischen Anteil \mathbf{W} zerlegt werden kann:

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}. \quad (2.6)$$

Der symmetrische Anteil wird Deformationsgeschwindigkeitstensor genannt und lässt sich mit Gl. (2.6) schreiben als

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T), \quad D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.7)$$

Der antisymmetrische Anteil ist der sogenannte Rotationsgeschwindigkeitstensor.

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T), \quad W_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.8)$$

Durch die Einführung von \mathbf{D} und \mathbf{W} wird das Geschwindigkeitsfeld in zwei Anteile aufgespalten, von denen der eine deformierend auf ein Fluidelement wirkt und einen Anteil, der andere hingegen eine reine Starrkörperrotation des Elementes bewirkt. Die in der Strömung auftretenden stoffspezifischen Spannungen werden in der rheologischen Stoffgleichung über diese Tensoren an die Geschwindigkeitsgradienten gekoppelt.

2.3.2 Objektive Zeitableitungen

Das rheologische Stoffgesetz muss dem Invarianzprinzip genügen [22]. Durch die Einführung objektiver Zeitableitungen [23, 24] können Bestimmungsgleichungen für den Spannungstensor mit Berücksichtigung des Invarianzprinzips formuliert werden. In der nicht-newtonschen Fluidynamik übliche, objektive Zeitableitungen sind im Einzelnen:

- Kontravariant konvektive Ableitung (*upper convected*):

$$\overset{\nabla}{\mathbf{S}} = \frac{\mathcal{D}\mathbf{S}}{\mathcal{D}t} = \frac{D\mathbf{S}}{Dt} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}^T. \quad (2.9)$$

- Kovariant konvektive Ableitung (*lower convected*):

$$\overset{\Delta}{\mathbf{S}} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = \frac{D\mathbf{S}}{Dt} + \mathbf{L}^T \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.10)$$

- Korotatorische oder Jaumann Ableitung:

$$\overset{\circ}{\mathbf{S}} = \frac{D\mathbf{S}}{Dt} = \frac{D\mathbf{S}}{Dt} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{W}. \quad (2.11)$$

3 Mikro-Makro-Modelle für Polymerlösungen

*Eine Illusion verlieren heißt, um eine
Wahrheit reicher zu werden.*

Arthur Schnitzler

In der kontinuierlichen Matrixflüssigkeit suspendierte Makromoleküle bzw. Fasern erzeugen gegenüber einem newtonschen Fluid zusätzliche Spannungen, die im Folgenden durch rheologische Stoffgleichungen vom Mikro-Makro-Typ berechnet werden. Die Modellgleichungen basieren ebenfalls auf den physikalischen Erhaltungsgleichungen, jedoch auf der Betrachtungsebene eines einzelnen Teilchens. Eine Übersicht über Mikro-Makro-Modelle und deren Berechnungsmethoden bzw. über deren Benennung in der Literatur und Charakteristika findet sich z.B. in [5]. Sowohl für die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Feder-Hantel Modelle für Polymerlösungen, als auch für Fasersuspensionen gibt es zwei unterschiedliche Berechnungsansätze. Man kann prinzipiell unterscheiden zwischen stochastischen und deterministischen Methoden. Aufgrund der hohen Komplexität beider Berechnungsansätze sei für eine detaillierte Beschreibung der stochastischen Methoden auf die Literatur verwiesen [25]. In der Vergangenheit waren stochastische Methoden (CONFESSIT-Approach, „Brownian Dynamics“-Methoden, „Dissipative Particle Dynamics“) die bevorzugte Berechnungsmethode. Da deterministische Methoden gegenüber stochastischen bei vergleichbarem Rechenaufwand i. Allg. über eine höhere Genauigkeit verfügen, finden sich zunehmend mehr Beiträge in der Literatur sowohl für Feder-Hantel Modelle von LOZINSKI, CHAUVIÈRE et al [12–14, 26–28] als auch für Fasersuspensionen von CHIBA, CHINESTA et al. [29, 30].

3.1 Begriffsdefinitionen

Im Folgenden wird unterschieden zwischen zwei Koordinatensystemen: einerseits dem „physikalischen“ Raum bzw. dem Koordinatensystem des makroskopischen Strömungsraumes, wobei in dieser Arbeit kartesische Koordinaten verwendet werden. Andererseits ist auf der „Mikro“-Ebene ein weiteres Koordinatensystem erforderlich. Der sogenannte Konfigurationsraum und dessen Koordinaten beschreiben die räumliche Orientierung bzw. für den Fall der Feder-Hantel Modelle/Polymerlösungen auch die momentane Moleküllänge. Für den Konfigurationsraum ist ein Kugelkoordinatensystem prädestiniert. Diese beiden Koordinatensysteme bzw. „Räume“ sind demnach den unterschiedlichen Betrachtungsebenen zuzuordnen. Der physikalische Raum ist der „Makro“-Ebene zugeordnet, der Konfigurationsraum der „Mikro“-Ebene.

3.2 Offenes Feder-Hantel-Modell

Das in dieser Arbeit verwendete mikro-mechanische Strukturmodell für Polymermakromoleküle ist die in Abbildung 3.1 dargestellte Feder-Hantel, bestehend aus zwei mit einer masselosen Feder verbundenen massebehafteten Kugeln [31]. Der Verbindungsvektor der beiden Kugeln (auch als Orientierungs- oder Konfigurationsvektor benannt) wird mit \mathbf{Q} bezeichnet. Mit den Ortsvektoren der beiden Kugeln \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 gilt $\mathbf{Q} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$.



Abbildung 3.1: Mechanisches Ersatzmodell für ein Polymermolekül: Feder-Hantel

Boltzmann-Gleichung im Phasenraum Die Dynamik polymerer Flüssigkeiten, wie sie von BIRD et. al eingeführt wird, basiert auf den gleichen Prinzipien wie die BOLTZMANNsche Stoßgleichung in der kinetischen Gastheorie [32]. Die Boltzmann-Gleichung beschreibt allgemein die zeitliche Änderung einer Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$ im Phasenraum, wobei \mathbf{r} der Orts- und $\dot{\mathbf{r}}$ der Geschwindigkeitsvektor eines Teilchens ist [33]. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ändert sich zeitlich aufgrund molekularer Zusammenstöße und externer Kräfte. Formuliert für eine Federhantel mit den Ortsvektoren \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 und den Geschwindigkeiten $\dot{\mathbf{r}}_1$ und $\dot{\mathbf{r}}_2$ der Kugeln und mit einer Zerlegung¹

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2, \hat{t}) = \Psi((\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \hat{t}) \Sigma(\dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2, \hat{t}) \quad (3.1)$$

werden die Orientierungsverteilungsfunktion Ψ und die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion Σ eingeführt. Offene Mikro-Makro-Modelle liefern eine Bestimmungsgleichung für die Orientierungsverteilungsfunktion Ψ , die sogenannte Fokker-Planck-Gleichung (FP-Gleichung).

Vereinfachende Annahmen Die im weiteren Verlauf diskutierte Form der Fokker-Planck-Gleichung beinhaltet einige fundamentale, vereinfachende Annahmen, die zusammengefasst dargestellt werden:

- Die Polymerlösung wird als örtlich homogen betrachtet, d.h. es gibt keine lokalen Konzentrationsgradienten und es gilt mit der Teilchendichte n

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \hat{t}) = n \psi(\mathbf{Q}, \hat{t}), \quad \int \psi(\mathbf{Q}, \hat{t}) d\mathbf{Q} = 1. \quad (3.2)$$

- Die Beschleunigung der Kugeln bzw. der Federhantel ist gegenüber den anderen Termen in den Impulserhaltungsgleichungen der Kugeln vernachlässigbar.
- Die auf die Kugeln wirkenden Kräfte setzen sich zusammen aus der hydrodynamischen Widerstandskraft, der Brownschen-Molekularbewegung und der intramolekularen Federkraft. D.h. weitere externe Kräfte und Interaktionskräfte zwischen den Federhanteln werden vernachlässigt.

¹Da in diesem Kapitel in der Fokker-Planck-Gleichung später dimensionslose Größen eingeführt werden, wird die dimensionsbehaftete Zeit mit \hat{t} gekennzeichnet.

- Das Geschwindigkeitsfeld ist über den Längenmaßstab einer Federhantel betrachtet örtlich linearisierbar („local homogeneity assumption“).
- Die Umströmung der Kugeln wird als schleichende Strömung betrachtet und es gilt das Stokes'sche Widerstandsgesetz.
- Die Geschwindigkeitsverteilung Σ der Federhanteln ist die (Gleichgewichts-) Maxwell-Verteilung der statistischen Mechanik („equilibration in momentum space“) [34].
- Das Polymermolekül ist symmetrisch zu seinem Zentrum, d.h. die Kugeln haben die gleiche Masse und Größe.

3.2.1 Konventioneller Konfigurationsraum: „kugelzentriert“

Da die Feder in dem strukturmechanischen Modell aufgrund der an den Kugeln angreifenden Kräfte eine variable Länge besitzt, ist der Konfigurationsraum der Feder-Hantel eine Kugel. Ein Ensemble von Molekülen wird durch eine Häufigkeitsverteilungsfunktion der Orientierungsvektoren $\psi(\mathbf{Q}, \hat{t})$ und somit durch eine Längen- und Orientierungsverteilung charakterisiert. Bisher üblich bzw. etabliert zur Beschreibung der Feder-Hantel-Konfigurationen war ein Kugelkoordinatensystem, dessen Ursprung auf einer Kugel befestigt ist [31] (vgl. Abbildung 3.2). Da die beiden massebehafteten Kugeln im Folgenden identisch sind, konnte

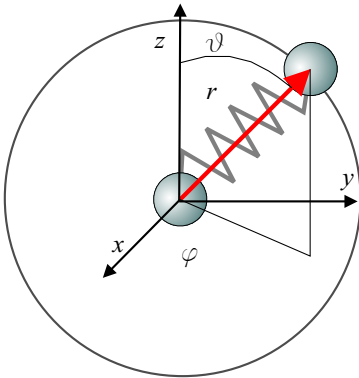


Abbildung 3.2: Kugelzentriertes Koordinatensystem

die Größe des Konfigurationsraumes durch ein neues, federzentriertes Koordinatensystem in dieser Arbeit deutlich reduziert werden, ohne die möglichen Molekülkonfigurationen dabei einzuschränken.

3.2.2 Fokker-Planck-Gleichung

Die Bestimmungsgleichung für die Verteilungsfunktion der Orientierungen $\psi(\mathbf{Q}, \hat{t})$ ist die Fokker-Planck-Gleichung. Auf die umfangreiche Herleitung der Gleichung aus der Impulserhaltungsgleichung einer Feder-Hantel und der Kontinuitätsgleichung für ψ wird an dieser Stelle verzichtet und auf die Literatur verwiesen [31]. In dem konventionellen, kugelzentrierten Koordinatensystem kann die Fokker-Planck-Gleichung in einer dimensionsbehafteten Schreibweise formuliert werden mit [31, 35, 36]:

$$\frac{D\psi(\mathbf{Q}, \hat{t})}{Dt} = -\nabla_{\mathbf{Q}} \cdot \left(\left(\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{Q} - \frac{2}{\zeta} \hat{\mathbf{F}}(\mathbf{Q}) \right) \psi \right) + \frac{2k_B T}{\zeta} \Delta_{\mathbf{Q}} \psi. \quad (3.3)$$

ζ ist der Widerstandskoeffizient einer Kugel, k_B die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur. Im Rahmen dieser Arbeit wird eine dimensionslose Schreibweise der Fokker-Planck-Gleichung mit der Normierung durch:

$$\mathbf{q} = \frac{\mathbf{Q}}{\sqrt{\frac{k_B T}{H}}}, \quad t = \frac{\hat{t}}{\lambda}, \quad \mathbf{L} = \frac{\hat{\mathbf{L}}}{1/\lambda}, \quad (3.4)$$

verwendet. Dabei bezeichnet λ die Relaxationszeit. Mit der Federkonstanten H und dem Widerstandskoeffizienten ζ gilt $\lambda = \frac{\zeta}{4H}$.

Mit dem dimensionslosen Orientierungsvektor \mathbf{q} und den anderen Normierungen erhält man [12]:

$$\frac{D\psi(\mathbf{q}, t)}{Dt} = -\nabla_{\mathbf{q}} \cdot \left(\left(\mathbf{L} \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{2\lambda} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \right) \psi \right) + \frac{1}{2\lambda} \Delta_{\mathbf{q}} \psi. \quad (3.5)$$

Die Differentialoperatoren $\nabla_{\mathbf{q}}$, $\nabla_{\mathbf{Q}}$, $\Delta_{\mathbf{q}}$, $\Delta_{\mathbf{Q}}$ werden im Kugelkoordinatensystem des Konfigurationsraumes ausgewertet, was durch die Einführung der Indizes q und Q verdeutlicht wird. Um die Verteilungsfunktion $\psi(\mathbf{q}, t)$ der Federhanteln im Konfigurationsraum berechnen zu können, muss für die Feder ein physikalisch motiviertes Federkraftgesetz in (3.5) eingesetzt werden.

Spannungstensor, Kramers-Gleichung Nach der Lösung der Fokker-Planck-Gleichung muss aus der mikrostrukturellen Information über den Orientierungszustand der Moleküle ein makroskopischer Spannungstensor durch die Feder-Hanteln \mathbf{S}_p berechnet werden. Die Bestimmungsgleichung für den Spannungstensor ist die bekannte KRAMERS-Gleichung. Der Spannungstensor setzt sich zusammen aus einem Anteil resultierend aus dem Kugelimpuls und einem Anteil aus der Federkraft und kann als dimensionsbehaftete Größe berechnet werden mit:

$$\mathbf{S}_p = nk_B T \langle \mathbf{q} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \rangle - n_B k T \boldsymbol{\delta}. \quad (3.6)$$

Der Gleichgewichtsanteil resultierend aus dem Impuls der Kugeln und der Maxwell-Verteilung für die Geschwindigkeitsverteilung mit $\mathbf{S}_{p,eq} = 2 n_B k T \boldsymbol{\delta}$ wurde von dem resultierenden Spannungstensor abgezogen. Der in die Impulserhaltungsgleichung (2.3) eingehende makroskopische Spannungstensor setzt sich additiv aus dem polymeren Anteil und der Matrixflüssigkeit \mathbf{S}_s zusammen:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_s. \quad (3.7)$$

Federkraftgesetze Das denkbar einfachste Federkraftgesetz ist der von HOOKE vorgeschlagene lineare Zusammenhang zwischen Federkraft und Federlänge:

$$\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{Q}) = H \mathbf{Q} \quad (\text{für Gl. (3.3)}), \quad (3.8)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \quad (\text{für Gl. (3.5), dimensionslos}). \quad (3.9)$$

Bei Verwendung des Hookeschen-Federkraftgesetzes lässt sich aus der Fokker-Planck-Gleichung (3.5) durch Mittelung über den gesamten Konfigurationsraum das bekannte kontinuumsmechanische Oldroyd-B Modell ermitteln. Dafür erweitert man die Fokker-Planck-Gleichung mit dem dyadischen Produkt $\mathbf{q}\mathbf{q}$ und integriert über den Konfigurationsraum. Damit folgt:

$$\begin{aligned} \frac{D\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle}{Dt} &= \left\langle \frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}(\mathbf{L}\cdot\mathbf{q})\mathbf{q}\mathbf{q} \right\rangle + \frac{1}{2\lambda} \left\langle \mathbf{q}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}\mathbf{q}\mathbf{q} \right\rangle + \frac{1}{2\lambda} \left\langle \frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}\mathbf{q}\mathbf{q} \right\rangle, \\ \left\langle \frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}(\mathbf{L}\cdot\mathbf{q})\mathbf{q}\mathbf{q} \right\rangle &= \mathbf{L} : \left\langle \mathbf{q}\frac{\partial}{\partial\mathbf{q}}\mathbf{q}\mathbf{q} \right\rangle = 2\mathbf{L}\cdot\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle = \mathbf{L}\cdot\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle + \langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle\cdot\mathbf{L}^T, \\ \Rightarrow \frac{D\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle}{Dt} - \mathbf{L}\cdot\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle - \langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle\cdot\mathbf{L}^T &= \frac{\mathfrak{D}\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle}{\mathfrak{D}t} = \frac{1}{\lambda}\langle\mathbf{q}\mathbf{q}\rangle + \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{\delta}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Durch Einsetzen der Kramers-Gleichung (3.6) für den Spannungstensor und Berücksichtigung des Spannungstensors der Matrixflüssigkeit in Gleichung (3.10) erhält man das von Oldroyd entwickelte und gut bekannte Oldroyd-B Modell.

$$\mathbf{S} + \lambda_1 \frac{\mathfrak{D}\mathbf{S}}{\mathfrak{D}t} = 2\eta_s \left(\mathbf{D} + \lambda_2 \frac{\mathfrak{D}\mathbf{D}}{\mathfrak{D}t} \right). \quad (3.11)$$

Obwohl Oldroyd [22, 23] seine Modellgleichungen auf der Betrachtungsebene des Kontinuums entwickelt hat, ist das Oldroyd-B Modell für den Fall einer Hookeschen Feder mit linearem Federkraft-Gesetz in der molekularen Theorie der Fokker-Planck Gleichung enthalten, wodurch der von Oldroyd erbrachte Beitrag bei der Entwicklung kontinuumsmechanischer Modellgleichungen und dem Konzept objektiver Zeitableitungen besonders an Bedeutung gewinnt. Da Polymermoleküle jedoch nicht unbegrenzt dehnbar sind, führt das lineare Federkraftgesetz in dehrenden Strömungen zu unphysikalischem Verhalten. Die Vorstellung, dass Polymermakromoleküle im Gleichgewichtszustand einen verknäulten Zustand einnehmen, und durch äussere Kräfte bzw. eine Strömung entknäult bzw. gestreckt werden, kann diese Modellschwäche beseitigen, indem die maximale Moleküllänge durch ein nichtlineares Federkraftgesetz begrenzt wird. WARNER hat ein nichtlineares Federkraftgesetz vorgeschlagen, wobei die maximal mögliche, dimensionsbehaftete Molekül- bzw. Federlänge mit Q_0 bezeichnet wird [35]. Abbildung 3.3 zeigt den Betrag der Federkraft in Abhängigkeit des Betrages der Federlänge für die beiden Federkraftgesetze. Das Quadrat der dimensionslosen maximalen Federlänge wird mit

$$b = \frac{H Q_0^2}{k_B T} \quad (3.12)$$

eingeführt und die Federkraftgesetze nach Warner lauten:

$$\hat{\mathbf{F}}(Q) = \frac{H Q}{1 - |Q|^2/Q_0^2} \quad (\text{für Gl. (3.3)}), \quad (3.13)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{q}}{1 - |\mathbf{q}|^2/b} \quad (\text{für Gl. (3.5)}). \quad (3.14)$$

Grenzen des Konfigurationsraumes In einem kugelzentrierten Koordinatensystem ergeben sich die Intervallgrenzen

$$r \in [0, \sqrt{b}], \quad \vartheta \in [0, \pi], \quad \varphi \in [0, 2\pi]. \quad (3.15)$$

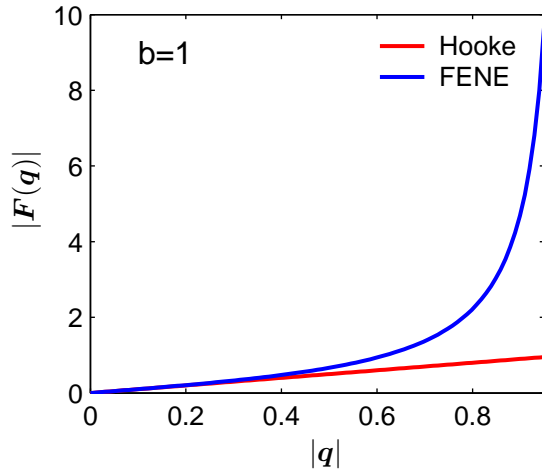


Abbildung 3.3: Federkraftgesetze: lineare HOOKEsche Feder und nichtlineares Gesetz nach WARNER [35], Betrag der Federkraft, $b = 1$

In diesem Raum muss die Normierungsbedingung (3.2) erfüllt werden.

$$\int_0^{\sqrt{b}} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi(r, \vartheta, \varphi, t) r^2 \sin \vartheta d\varphi d\vartheta dr = 1. \quad (3.16)$$

Nach Einsetzen des Federkraftgesetzes (3.14) und Anwendung der Differentialoperatoren im Konfigurationsraum lässt sich Gl. (3.5) darstellen als :

$$\begin{aligned} \frac{D\psi}{Dt} = & \left[-\sin(\varphi) \cos(\varphi) \sin^2(\vartheta) L_{1,2} - \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) \cos(\varphi) L_{1,3} \right. \\ & - \sin(\varphi) \cos(\varphi) \sin^2(\vartheta) L_{2,1} + \sin^2(\vartheta) (2 \cos^2(\varphi) - 1) L_{2,2} - \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) \sin(\varphi) L_{2,3} \\ & - \sin(\vartheta) \cos(\varphi) \cos(\vartheta) L_{3,1} - \sin(\vartheta) \sin(\varphi) \cos(\vartheta) L_{3,2} \\ & \left. - (\cos^2(\vartheta) - \cos^2(\varphi) \sin^2(\vartheta)) L_{3,3} \right] r \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ & + \left[\sin^2(\varphi) L_{1,2} + \frac{\cos(\vartheta) \sin(\varphi) L_{1,3}}{\sin(\vartheta)} \right. \\ & \left. - \cos^2(\varphi) L_{2,1} - 2 \sin(\varphi) \cos(\varphi) L_{2,2} - \frac{\cos(\vartheta) \cos(\varphi) L_{2,3}}{\sin(\vartheta)} - \cos(\varphi) \sin(\varphi) L_{3,3} \right] \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ & \left[-\sin(\vartheta) \cos(\vartheta) \sin(\varphi) \cos(\varphi) L_{1,2} - \cos^2(\vartheta) \cos(\varphi) L_{1,3} \right. \\ & - \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) \sin(\varphi) \cos(\varphi) L_{2,1} - (\sin(\vartheta) \cos(\vartheta) (1 - 2 \cos^2(\varphi))) L_{2,2} \\ & - \cos^2(\vartheta) \sin(\varphi) L_{2,3} + \sin^2(\vartheta) \cos(\varphi) L_{3,1} + \sin^2(\vartheta) \sin(\varphi) L_{3,2} \\ & \left. + \sin(\vartheta) \cos(\vartheta) (\cos^2(\varphi) + 1) L_{3,3} \right] \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \\ & + \frac{1}{2\lambda} \frac{b(3b - r^2) \psi}{(b - r^2)^2} + \frac{1}{2\lambda} \frac{r b}{(b - r^2)} \frac{\partial \psi}{\partial r} \\ & + \frac{1}{2\lambda} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \vartheta}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right). \quad (3.17) \end{aligned}$$

3.2.3 Neuer Konfigurationsraum: „federzentriert“

Fixiert man den Ursprung des Koordinatensystems in der Mitte der Feder, ist die Größe des Konfigurationsraumes aufgrund der Symmetrie der Federhantel geringer, obwohl die

möglichen Konfigurationszustände identisch sind zu denen im kugelzentrierten System (vgl. Abbildung 3.4). Für die numerische Berechnung der Verteilungsfunktion ψ wird die durch die Konfigurationsvektoren aufgespannte Kugel mit einem diskreten Rechengitter abgebildet. Bei gleicher Gitterauflösung ergibt sich aufgrund des kleineren Definitionsbereiches von r und ϑ in dem federzentrierten Koordinatensystem gegenüber dem konventionellen Koordinatensystem somit eine Reduzierung der Anzahl der Gitterpunkte um den Faktor vier, wodurch der benötigte Rechenaufwand erheblich reduziert werden konnte.

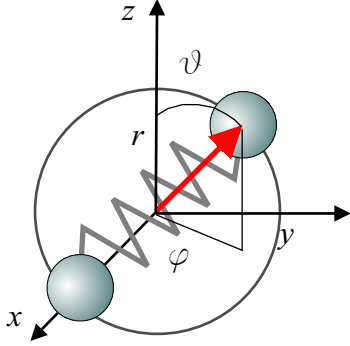


Abbildung 3.4: Federzentriertes Koordinatensystem

$$r \in \left[0, \frac{1}{2} \sqrt{b}\right], \quad \vartheta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right], \quad \varphi \in [0, 2\pi] \quad (3.18)$$

$$\Rightarrow \int_0^{\frac{1}{2}\sqrt{b}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} \psi(r, \vartheta, \varphi, t) r^2 \sin \vartheta d\varphi d\vartheta dr = 1. \quad (3.19)$$

Im Folgenden wird der Konfigurationsvektor im federzentrierten Koordinatensystem mit

$$\mathbf{q}_z = \frac{\mathbf{q}}{2} \quad (3.20)$$

definiert. Die Fokker-Planck-Gleichung muss entsprechend transformiert werden und man erhält:

$$\frac{D\psi(\mathbf{q}_z, t)}{Dt} = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{q}} \cdot \left(\left(\mathbf{L} \cdot \mathbf{q}_z - \frac{1}{2\lambda} \mathbf{F}(\mathbf{q}_z) \right) \psi \right) + \frac{1}{8\lambda} \Delta_{\mathbf{q}} \psi, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}_z) = \frac{2\mathbf{q}_z}{1 - \frac{4|\mathbf{q}_z|^2}{b}}. \quad (3.22)$$

Randbedingungen

Die Randbedingungen der FP-Gleichung werden im federzentrierten Koordinatensystem diskutiert. Die entsprechenden Randbedingungen im kugelzentrierten Koordinatensystem können leicht entsprechend hergeleitet werden. In radialer Richtung des Konfigurationsraumes gilt am Rand, dass keine Federhantel die maximale Länge erreicht und die Verteilungsfunktion für $r = 0$ symmetrisch ist.

$$\psi \left(r = \frac{\sqrt{b}}{2} \right) = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (3.23)$$

In φ -Richtung liegt eine periodische Randbedingung vor und es gilt:

$$\psi(\varphi = 0) = \psi(\varphi = 2\pi). \quad (3.24)$$

In ϑ -Richtung kann für den Rand $\vartheta = \pi/2$ eine Symmetrierandbedingung formuliert werden, wobei $\Delta\vartheta$ den Gitterabstand in dieser Koordinatenrichtung bezeichnet:

$$\psi\left(\vartheta = \frac{\pi}{2} + \Delta\vartheta, \varphi\right) = \psi\left(\frac{\pi}{2} - \Delta\vartheta, \varphi + \pi\right). \quad (3.25)$$

Der Rand $\vartheta = 0$ stellt in Gl. (3.17) eine Singularität dar. Da die Verteilungsfunktion keine physikalisch begründbaren Singularitäten besitzen kann, lässt sich eine Randbedingung formulieren, die dieser Tatsache Rechnung trägt. Der Fall $\vartheta = 0$ bedeutet eine Konfiguration einer senkrechten Feder-Hantel, die sich zwar noch um ihre senkrechte Achse (in φ -Richtung) drehen kann, jedoch sind diese Konfigurationszustände miteinander identisch und es folgt:

$$\left. \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right|_{\vartheta=0} = 0. \quad (3.26)$$

Die verbleibenden Terme mit einer Singularität für $\vartheta = 0$ stammen aus dem Anteil der Brownschen Molekularbewegung und werden mit $f(\vartheta)$ zusammengefasst. Für die Beseitigung der unphysikalischen Singularität folgt:

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &= C_1 \left(\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} \right) \stackrel{!}{=} 0, \\ \Leftrightarrow \frac{C_1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right) &= 0, \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Gleichung (3.27) liefert die Randbedingung für $\vartheta = 0$. Die diskretisierte Form dieser Randbedingung ist im Anhang A.3 gegeben.

Mittlung über den Konfigurationsraum Für eine beliebige (skalare, vektorielle oder tensorielle) Größe f wird mit $\langle \cdot \rangle$ und

$$\langle f \rangle = \int f \psi(t, \mathbf{q}) d\mathbf{q} \quad (3.28)$$

eine Mittlung über den Konfigurationsraum definiert. Ein mittlerer Orientierungszustand der Federhanteln kann somit durch die mittlere Länge $\langle |\mathbf{q}| \rangle$, und die mittleren Winkel $\langle \vartheta \rangle$ und $\langle \varphi \rangle$ diskutiert werden. In dieser Arbeit werden alle Berechnungen mit dem dreidimensionalen offenen FENE-Modell durchgeführt.

3.2.4 Koordinatentransformation

Für große Federlängen bzw. große Werte von r strebt die Federkraft aufgrund des nicht-linearen Federgesetzes asymptotisch gegen unendlich. Eine stabile numerische Lösung der FP-Gleichung ohne eine zusätzliche Stabilisierung wird dadurch verhindert. LOZINSKI und

CHAUVIÈRE haben aus diesem Grund eine Koordinatentransformation für r vorgeschlagen, die die physikalische Randbedingung $\lim_{r \rightarrow \sqrt{b}} \psi(r) = 0$ gewährleistet [28].

$$\psi(t, r, \vartheta, \varphi) = \left(\frac{1-h}{2} \right)^s Y(t, h, \vartheta, \varphi), \quad r^2 = \frac{b}{2}(1+h), \quad h \in [-1, 1]. \quad (3.29)$$

Dabei ist s ein positiver, skalarer ganzzahliger Parameter, der nach dem Einsetzen der Transformationsvorschrift in (Gl. 3.17) für die Beiträge aus der Federkraft für $r \rightarrow 0$ den Zähler in den jeweiligen Termen schneller gegen null gehen läßt, als der Nenner Richtung unendlich anwächst. Angepasst auf das federzentrierte Koordinatensystem ergibt sich:

$$\psi(t, r, \vartheta, \varphi) = \left(\frac{1-h}{2} \right)^s Y(t, h, \vartheta, \varphi), \quad r^2 = \frac{b}{8}(1+h), \quad h \in [-1, 1]. \quad (3.30)$$

Alle Berechnungen des offenen Feder-Hantel-Modells wurden mit $s = 2$ durchgeführt.

3.2.5 Abschätzung des Wertebereiches von b

Die durch das Federhantelmodell abgebildeten physikalischen Eigenschaften werden dabei wesentlich von der Wahl der dimensionslosen Federlänge beeinflusst. HERRCHEN und ÖTTINGER [37] zeigen, dass die dimensionslose Federlänge aus der Anzahl der Kohlenstoffatome N_c der Polymerhauptkette abgeschätzt werden kann mit

$$b \approx \frac{N_c}{\sigma^2}. \quad (3.31)$$

Dabei bezeichnet σ einen sterischen Faktor, der z. B. für Polyethylen und Polystyrol etwa den Wert zwei annimmt. Daraus ergibt sich für Moleküle mit einer Anzahl von 50-1000 Kohlenstoffatomen in der Hauptkette ein physikalischer Wertebereich von $b \approx 15 - 250$. Für große Werte von b nähert sich das offene Feder-Hantel Modell im makroskopisch beobachtbaren Stoffverhalten (Spannungstensor bzw. der Viskosität) dem Verhalten eines Feder-Hantel-Modells mit ungebrenzt dehnbaren, Hookeschen Federn bzw. dem Oldroyd-B Modell an. BIRD et al. [38] zeigen für Lösungen von Poly- α -Methylstyrol mit unterschiedlichen Molmassen und analytischen Berechnungen des offenen Feder-Hantel-Modells für kleine Schergeschwindigkeiten eine gute Übereinstimmung für die experimentellen und berechneten Werte der Viskosität für b zwischen 10 und 100. QUINZANI et al. [39] zeigen, dass für ein geschlossenes Feder-Hantel Modell Parametersätze gefunden werden können, die sowohl für die Schubspannung als auch die erste Normalspannungsdifferenz einer Lösung von Polyisobuten in Tetradekan in rheometrischen Untersuchungen in oszillierender Scherung mit kleiner Deformationsamplitude, stationärer Scherströmung, und im Anlauf- und Relaxationsverhalten in instationärer Scherung gute Übereinstimmungen zwischen experimentellen Ergebnissen und dem Modellverhalten liefern. Die Werte für das Quadrat der dimensionslosen maximalen Federlänge b liegen dabei ebenfalls in dem von HERRCHEN, ÖTTINGER und BIRD et al. angegebenen, physikalisch sinnvollen Wertebereich.

Im Folgenden wird der Konfigurationstensor als mittleres zweites Moment des Orientierungsvektors definiert mit:

$$\mathbf{A} = \langle \mathbf{q}\mathbf{q} \rangle, \quad \sqrt{\text{tr } \mathbf{A}} = \sqrt{\langle |\mathbf{q}|^2 \rangle}, \quad (3.32)$$

wobei die Wurzel aus der Spur von \mathbf{A} als mittlere Federlänge verwendet wird. Eine Alternative für die Berechnung der mittleren Federlänge wäre mit $q_m = \langle |\mathbf{q}| \rangle$ möglich. Obige

Definition wird verwendet, um sowohl für das offene FENE-Modell als auch für die geschlossenen Feder-Hantel-Modelle die gleiche skalare Größe für die mittlere Federlänge verwenden zu können.

3.3 Geschlossene Feder-Hantel Modelle

Für die Berechnung makroskopischer Strömungsvorgänge ist das offene Feder-Hantel Modell aufgrund des hohen Rechenbedarfs bisher noch unpraktikabel. In jedem diskreten, physikalischen Raumpunkt muss die Fokker-Planck-Gleichung gelöst werden und der Spannungstensor durch numerische Integration aus der Kramers-Gleichung bestimmt werden. Auch stochastische Methoden für offene Feder-Hantel-Modelle sind nicht ausreichend praktikabel für die Berechnung technischer Strömungen. Daher wurden durch die Einführung von Schließungsansätzen geschlossene Feder-Hantel Modelle entwickelt. Für die Berechnung des polymeren Spannungstensors muss dann lediglich ein geschlossenes Differentialgleichungssystem für den mittleren Konfigurationstensor \mathbf{A} gelöst werden. Da nach wie vor Informationen über einen mittleren Orientierungs- und Längenzustand der Polymermoleküle berechnet werden können, sind die geschlossenen Feder-Hantel Modelle im Maßstab der Betrachtungs- und Informationsebene zwischen dem offenen FENE-Modell und kontinuumsmechanischen Modellen anzusiedeln. Geschlossene Feder-Hantel Modelle werden durch eine Approximation der Verteilungsfunktion bzw. durch Beschränkung auf einen kanonischen Unterraum erhalten. Zunächst wird eine Entkopplung in eine Längen- und Orientierungsverteilung vorgenommen:

$$\psi(\mathbf{q}) = \psi^q(|\mathbf{q}|) \psi^u(\mathbf{u}), \quad (3.33)$$

wobei $\mathbf{u} = \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}$ der normierte Orientierungsvektor ist. Durch eine Approximation der Längenverteilung, die Multiplikation der FP-Gleichung mit dem tensor $\mathbf{q}\mathbf{q}$ und Mittelung über den Konfigurationsraum kann schließlich ein geschlossenes Differentialgleichungssystem für den Konfigurationstensor $\mathbf{A} = \mathbf{q}\mathbf{q}$ erhalten werden. Grundprinzipien der Approximation von Verteilungsfunktionen in kanonischen Unterräumen finden sich in [40, 41].

Neben dem mittleren Konfigurationstensor wird für geschlossene Feder-Hantel-Modelle eine weitere mittlere Zustandsgröße benötigt und mit B ein weiteres Moment des Orientierungsvektors eingeführt:

$$B = \langle (\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})^2 \rangle. \quad (3.34)$$

Auf eine ausführliche Herleitung geschlossener Feder-Hantel-Modelle wird an dieser Stelle verzichtet und lediglich die Berechnungsgleichungen und wichtigsten Schließungsannahmen dargestellt. Eine ausführliche Herleitung findet sich auf jeder besseren Brötchentüte.

3.3.1 FENE-P Modell

Das bekannteste geschlossene Feder-Hantel-Modell ist das Peterlin-Modell (FENE-P) [42, 43]. Zugrundeliegende Annahme für die Längeverteilung ist ein Dirac-Impuls, d.h. alle Federn besitzen die gleiche Länge.

$$\varrho_\alpha = |\mathbf{q}|^2 \psi^q(|\mathbf{q}|) = \delta_\alpha(|\mathbf{q}|). \quad (3.35)$$

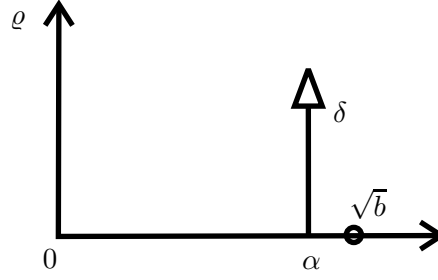


Abbildung 3.5: Kanonische Verteilungsfunktion des FENE-P Modells

$\delta_\alpha(|\mathbf{q}|)$ bezeichnet die Dirac-Distribution lokalisiert an der Stelle $|\mathbf{q}| = \alpha$. In der Federkraft wird der Konfigurationsvektor im nenner durch den mittleren Vektor $\langle \mathbf{q} \rangle$ ersetzt und es folgt:

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{q}}{1 - \frac{\langle \mathbf{q}^2 \rangle}{b}}. \quad (3.36)$$

Die Federlänge wird dadurch nur im Mittel über alle Moleküle auf eine endliche Länge begrenzt. Damit erhält man schließlich eine geschlossene Differentialgleichung für den Konfigurationstensor mit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{L}^T &= \delta - h(\text{tr}(\mathbf{A})) \mathbf{A}, \\ h(\text{tr}(\mathbf{A})) &= \frac{1}{1 - \frac{\text{tr}(\mathbf{A})}{b}}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\Rightarrow \overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \delta - h(\text{tr}(\mathbf{A})) \mathbf{A}. \quad (3.38)$$

Aus der Kramers-Gleichung erhält man den Spannungstensor mit:

$$\mathbf{S}_p = h(\text{tr}(\mathbf{A})) \mathbf{A} - \delta. \quad (3.39)$$

Für die stationäre Scherströmung kann Gl. (3.38) analytisch gelöst werden und der Spannungstensor bzw. die viskosimetrischen Funktionen sind im Anhang A.1 gegeben. Die Gleichgewichtskonfiguration mit $\mathbf{S} = 0$ kann für das FENE-P Modell analytisch berechnet werden mit:

$$A_{ii} = \frac{b}{b+3}, \quad A_{ij} = 0 \quad \text{für } i \neq j, \quad \lim_{b \rightarrow \infty} \text{tr}(\mathbf{A}_{\text{eq}}) = 3. \quad (3.40)$$

3.3.2 FENE-CR Modell

Eine wichtige Stoffklasse für die experimentelle Untersuchung des Einflusses elastischer Fluideigenschaften sind die sogenannten BOGER-Fluide. Diese besitzen eine nahezu konstante Scherviskosität, so dass der Einfluss der Elastizität losgelöst von scherentzähenden Eigenschaften untersucht werden kann [44, 45]. Dadurch motiviert wurde mit dem FENE-CR Modell von CHILCOTT und RALLISON ein Modell eingeführt, welches für eine Polymerlösung

ebenfalls elastische Eigenschaften ohne Scherentzähung liefert [46]. Die zu lösenden Gleichungen lauten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{L}^T &= h(\text{tr}(\mathbf{A}))(\boldsymbol{\delta} - \mathbf{A}), \\ \Rightarrow \quad \overset{\nabla}{\mathbf{A}} &= h(\text{tr}(\mathbf{A}))(\boldsymbol{\delta} - \mathbf{A}), \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\mathbf{S}_p = h(\text{tr}(\mathbf{A}))(\mathbf{A} - \boldsymbol{\delta}). \quad (3.42)$$

Dabei ist $h(\text{tr} \mathbf{A})$ entsprechend Gl. (3.37) definiert.

3.3.3 FENE-L Modell

Im FENE-L Modell wird die komplexe Form der Verteilungsfunktion durch einen Dirac-Impuls und einen Rechteck-Anteil approximiert [41]. Sowohl die Position des Dirac-Impulses und die Höhe des Rechteckanteils können sich dabei im Anlaufverhalten einer instationären Berechnung ändern und sind bei Kenntnis von α und β eindeutig bestimmt (vgl. Abb. 3.6).

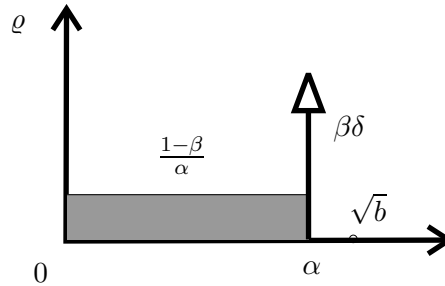


Abbildung 3.6: Kanonische Verteilungsfunktion des FENE-L Modells

$$\varrho(|\mathbf{q}|) = |\mathbf{q}|^2 \psi^q(|\mathbf{q}|) = \frac{1-\beta}{\alpha} (1 - H_\alpha(|\mathbf{q}|)) + \beta\delta_\alpha(|\mathbf{q}|). \quad (3.43)$$

Für das FENE-L Modell lassen sich folgende Differentialgleichungen herleiten:

$$\frac{D\mathbf{A}}{Dt} = \boldsymbol{\delta} + \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{L}^T - \frac{A^C}{\text{tr} \mathbf{A}} \mathbf{A}, \quad (3.44)$$

$$\frac{DB}{Dt} = 10 \text{tr} \mathbf{A} + 4 \frac{B}{\text{tr} \mathbf{A}} \mathbf{L} : \mathbf{A} - 2B^C. \quad (3.45)$$

Mit

$$A^C = \frac{\beta\alpha^2}{1 - \frac{\alpha^2}{b}} + (1-\beta)b \left(\frac{\sqrt{b}}{2\alpha} \ln \left(\frac{\sqrt{b} + \alpha}{\sqrt{b} - \alpha} \right) - 1 \right), \quad (3.46)$$

und

$$B^C = \frac{\beta\alpha^4}{1 - \frac{\alpha^2}{b}} + (1-\beta)b^2 \left(\frac{\sqrt{b}}{2\alpha} \ln \left(\frac{\sqrt{b} + \alpha}{\sqrt{b} - \alpha} \right) - 1 - \frac{\alpha^2}{3b} \right) \quad (3.47)$$

ist das Differentialgleichungssystem geschlossen. Die für die approximierte Verteilungsfunktion charakteristischen Größen α und β werden berechnet mit:

$$\alpha^2 = \frac{5B}{3\text{tr } \mathbf{A} + \sqrt{9(\text{tr } \mathbf{A})^2 - 5B}}, \quad (3.48)$$

$$\beta = \frac{9(\text{tr } \mathbf{A})^2 - 5B + \sqrt{(9(\text{tr } \mathbf{A})^2 - 5B)9(\text{tr } \mathbf{A})^2}}{10B}. \quad (3.49)$$

Damit die Werte für α und β im Raum der zulässigen Werte bleiben, folgt als zusätzliche Randbedingung, dass $B < \frac{9}{5}(\text{tr } \mathbf{A})^2$. Diese Randbedingung liefert schließlich nach einigen Umformungen die Schließungsgleichungen (3.46) und (3.47).

Im Folgenden werden die viskosimetrischen Funktionen bzw. rheologischen Eigenschaften der Modelle in einfacher Scherung und Dehnung diskutiert. Für die Anpassung der Modelle an experimentelle Untersuchungen bzw. reale Fluide sollte sowohl die Viskositätskurve in stationärer Scherung, das Anlaufverhalten im Spannversuch, sowie die Dehneigenschaften untersucht werden.

3.3.4 Orientierungsellipsoid/-ellipse

Als ein mittleres Orientierungsmaß wurde der Konfigurationstensor \mathbf{A} eingeführt. Über die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren kann aus dem Konfigurationstensor ein Orientierungsellipsoid bestimmt werden. Die Orientierung der Ellipsoidachsen im Raum ist durch die Eigenvektoren gegeben, deren Länge durch die Eigenwerte. Im Gleichgewichtszustand sind die Eigenwerte alle gleich groß und der von den Federhanteln eingenommene Konfigurationsraum ist eine Kugel. Bei Scherung oder Dehnung in einer Strömung erfolgt eine Ausrichtung der Moleküle entlang der Strömungsrichtung und mit zunehmender Scher- oder Dehngeschwindigkeit werden die Moleküle stärker entlang einer einzigen Raumrichtung orientiert und langgestreckt. Der kugelförmige Orientierungszustand verzerrt sich zu einem Ellipsoid. Die Lösung der Fokker-Planck-Gleichung wird vollständig dreidimensional berechnet. Die stationäre Scherung und die oszillierende Scherung sind zweidimensionale Strömungen und der Einfluss der Strömungsparameter auf die Verteilungsfunktion in ϑ -Richtung ist nicht weiter diskussionswürdig. Zur Vereinfachung wird daher anstelle des dreidimensionalen Ellipsoiden eine zweidimensionale Ellipse mit zugehörigen charakteristischen skalaren Geometriegrößen diskutiert. In Abbildung 3.7 ist der Konfigurationsraum im Gleichgewichtszustand und eine entsprechend zweidimensionale Orientierungellipse dargestellt. Für die zweidimensionale Ellipse wird mit φ_x der von der x -Achse und der größeren Hauptachse eingeschlossene Winkel als Hauptorientierungswinkel definiert. Entsprechend bezeichnet φ_y den mit der y -Achse eingeschlossenen Winkel der Hauptachse. Die Halbachsen der Ellipse werden mit l_a und l_b bezeichnet. Für den Sonderfall der vollständigen Ausrichtung aller Federhanteln in eine einzige Raumrichtung reduziert sich der durch \mathbf{A} aufgespannte Konfigurationsraum zu einer Linie. Obwohl geschlossene Feder-Hantel Modelle schon mehrfach Gegenstand wissenschaftlicher Arbeiten waren, beschränkte sich die Diskussion der Modell-Eigenschaften bisher auf die Komponenten des Spannungstensors und die mittlere Federlänge [37, 41, 47] und der zusätzliche Informationsgehalt dieser Modelle über den Orientierungszustand wurde nicht diskutiert. Diese Diskussion wird vervollständigt durch die Kenngrößen der Orientierungsellipsen (z. B. durch das Verhältnis l_a/l_b als Maß für die Breite der Orientierungsverteilungsfunktion) der Molekülkonfiguration.

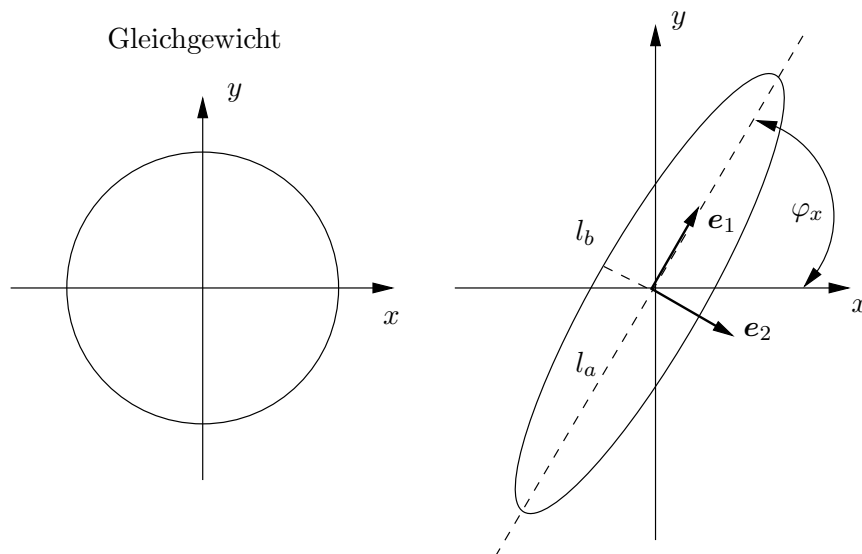


Abbildung 3.7: Orientierungsellipse, aufgespannt durch die Eigenrichtungen von \mathbf{A}

3.3.5 Geschlossene FENE-Modelle: einfache Scherung

Die Weissenbergzahl wird definiert als das Produkt aus der Fluidrelaxationszeit und der Schergeschwindigkeit $We = \lambda \dot{\gamma}$. In Abbildung 3.8 dargestellt ist die Polymerviskosität η_p , d.h. die Viskosität der Matrixflüssigkeit muss für die Gesamtviskosität superponiert werden, um eine Übereinstimmung der Scherviskositätskurve zu Experimenten herstellen zu können. Die beiden Modelle FENE-L und FENE-P erzeugen scherentzähendes Fließverhalten mit einem newtonschen Plateau bei niedrigen Scherraten. Eine Erhöhung der maximalen Federlänge b verschiebt die Viskositätskurve, so dass das newtonsche Plateau bei höheren Scherraten in den scherentzählenden Bereich übergeht. Scherentzähendes Verhalten wird durch eine stärkere Orientierung der Moleküle in Strömungsrichtung hervorgerufen. Der Vergleich der unterschiedlichen geschlossenen Modelle untereinander (mit Ausnahme des FENE-CR-Modells) bei gleichem b zeigt in der stationären Scherströmung eine hohe Übereinstimmung der Viskositätskurven miteinander. Insbesondere FENE-L und FENE-P liefern sehr ähnliche Ergebnisse. Exemplarisch dargestellt ist der Vergleich der Modelle miteinander für $b = 50$ in Abbildung 3.8. Ebenfalls berechnet wurden die Scherviskositäten des FENE-P² und FENE-LS [47] Modells, die aber nicht im Detail diskutiert werden. Eine ausführliche Parameterstudie aller Modelle findet sich in [48].

Eine wichtige Größe zur Charakterisierung der elastischen Eigenschaften ist die erste Normalspannungsdifferenz bzw. der erste Normalspannungskoeffizient mit der Definition $N_1 = \psi_1(\dot{\gamma})\dot{\gamma}^2$. Eine höhere maximale Federlänge bewirkt eine Verschiebung der Kurven in doppelt-logarithmischer Auftragung und es zeigen sich auch die rein elastischen Eigenschaften des FENE-CR-Modells (vgl. Abbildung 3.9).

Betrachtet man ausschließlich die stationäre Scherströmung, könnte man grundsätzlich auf eine sehr große Ähnlichkeit der unterschiedlichen Modelle schließen. In der instationären Scherung zeigt sich im Spann-Relaxationsversuch, dass die Modelle (FENE-P und FENE-L) teilweise stark unterschiedliche zeitliche Spannungsverläufe besitzen. Es wird deutlich, dass

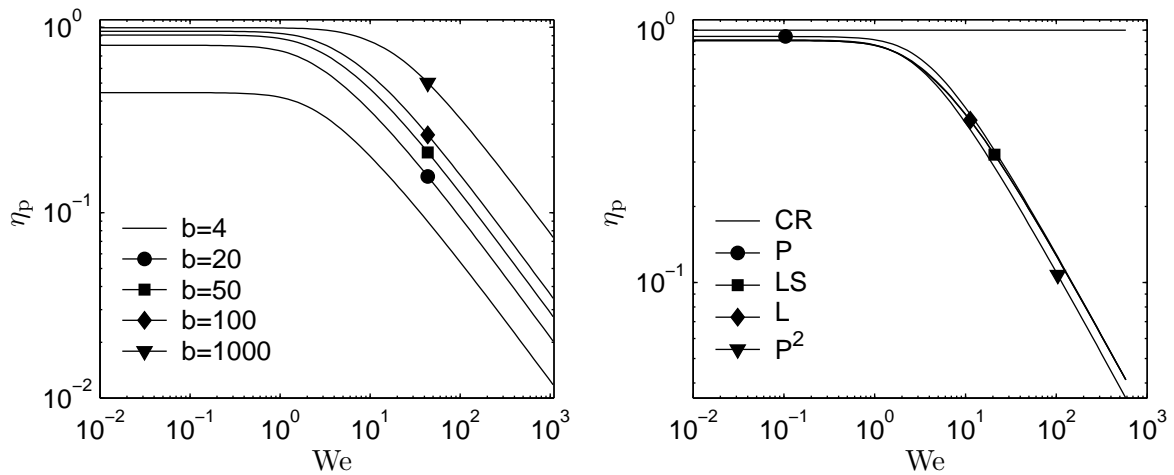


Abbildung 3.8: Scherviskosität, links: FENE-L, rechts: verschiedene Modelle mit $b = 50$, FENE-LS mit $R^2 = 5$

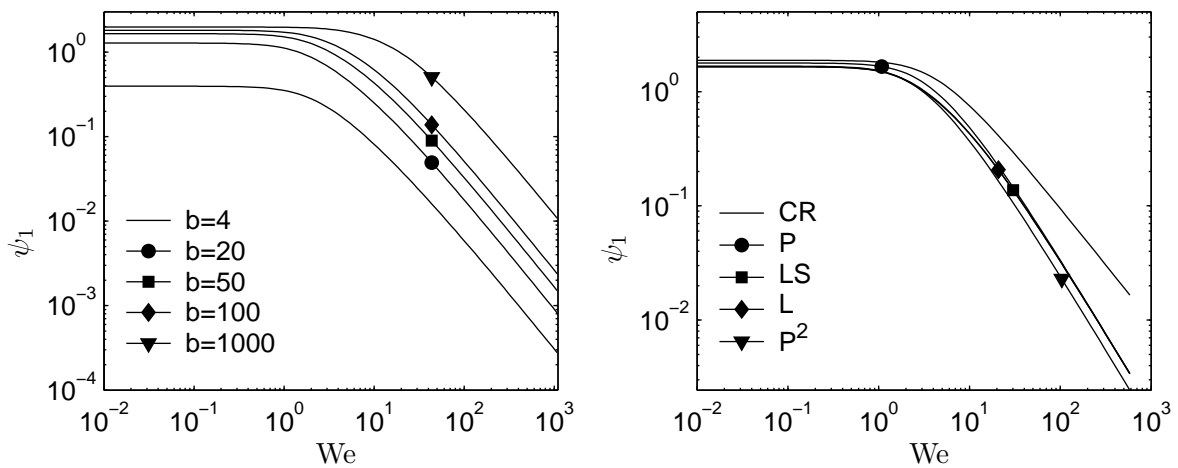


Abbildung 3.9: Erster Normalspannungskoeffizient, links: FENE-L, rechts: verschiedene Modelle mit $b = 50$, FENE-LS mit $R^2 = 5$

für eine ausreichend aussagekräftige rheologische Charakterisierung der Fluide und insbesondere für die Anpassung der Modelle an die experimentellen Ergebnisse sowohl die stationäre Scherung als auch das instationäre Spann-Relaxationsverhalten betrachtet werden muss. Eine übliche Auftragung, die schnell Aufschluss über unterschiedliches instationäres Modellverhalten liefert, ist die Auftragung der Spannungskomponenten über der Spur des Konfigurationstensors oder der mittleren Federlänge. Dabei zeigt sich, dass die Spannungen keine eindeutige Funktion der mittleren Federlänge sind, sondern durch die Deformationsgeschichte beeinflusst sind. Der Spannversuch wurde ausgehend von einem Gleichgewichtszustand gestartet. Die Relaxation aus einem scherorientierten Molekülzustand liefert dann Zustände, wo bei gleicher makroskopischer Spannung unterschiedliche mittlere Moleküllängen vorhanden sein können. Aufgrund dieser Beobachtung eines Hysterese-Verhaltens im Spann-Relaxationsversuch wird deutlich, dass die makroskopisch messbaren Größen des Spannungszustandes u.U. keinen eindeutigen Konfigurationszustand der Moleküle definieren. Exemplarisch dargestellt ist dieses Hysterese-Verhalten für die instationäre Dehnströmung

in Abschnitt 3.4.

Die Betrachtung des Orientierungswinkels φ_x zeigt, dass das FENE-L und -P Modell eine sehr große Übereinstimmung für $\varphi_x(\text{We})$ liefern. In Abbildung 3.10 sind die Ergebnisse des mittleren Haupt-Orientierungswinkels und $\text{tr } \mathbf{A}$ mit zunehmender Schergeschwindigkeit bzw. Weissenberg-Zahl dargestellt. Für $\text{We} > 1$ ist der vom FENE-CR Modell vorhergesagte Orientierungswinkel kleiner, als für FENE-L und -P, d.h. die Feder-Hanteln werden weniger stark in die Strömungsrichtung ausgerichtet. Mit steigendem b verschiebt sich die Grenze der zunehmenden Modellabweichung in $\varphi_x(\text{We})$ zu höheren Weissenberg-Zahlen, d.h. bei geringen maximalen Federlängen ($b < 20$) wird das scherentzähende Verhalten wesentlich durch die Orientierbarkeit der Federhanteln geprägt. Für kleine Werte von b zeigen die unterschiedliche Modelle starke Unterschiede in der mittleren Federlänge bzw. $\text{tr } \mathbf{A}$, die mit zunehmender Weissenbergzahl kleiner werden. Da das Differentialgleichungssystem des FENE-CR Modells rein phänomenologisch motiviert ist, können die Modellunterschiede ebenfalls nur phänomenologisch in Relation zum scherentzähenden Verhalten diskutiert werden. Scherentzähendes Verhalten wird durch zwei Faktoren geprägt. Eine Orientierung der Moleküle und das Entknäulen der Makromoleküle bzw. ein Langstrecken der Federhanteln. Aus Abb. 3.10 wird deutlich, dass die Abweichungen in den Viskositätskurven bzw. das scherentzähende Fließverhalten hauptsächlich durch die Orientierbarkeit der Feder-Hanteln geprägt wird, da sich die unterschiedlichen Federlängen bei niedrigen Weissenbergzahlen nicht in unterschiedlichen Viskositäten widerspiegeln.

In Abbildung 3.11 ist für das FENE-L Modell die mit b normierte Spur von \mathbf{A} in Abhängigkeit der Weissenberg-Zahl dargestellt. Mit zunehmender Weissenberg-Zahl ist lediglich für $b = 1000$ eine signifikante Abweichung des asymptotischen Anwachsens der mittleren Länge gegenüber $b = 4 - 100$ feststellbar.

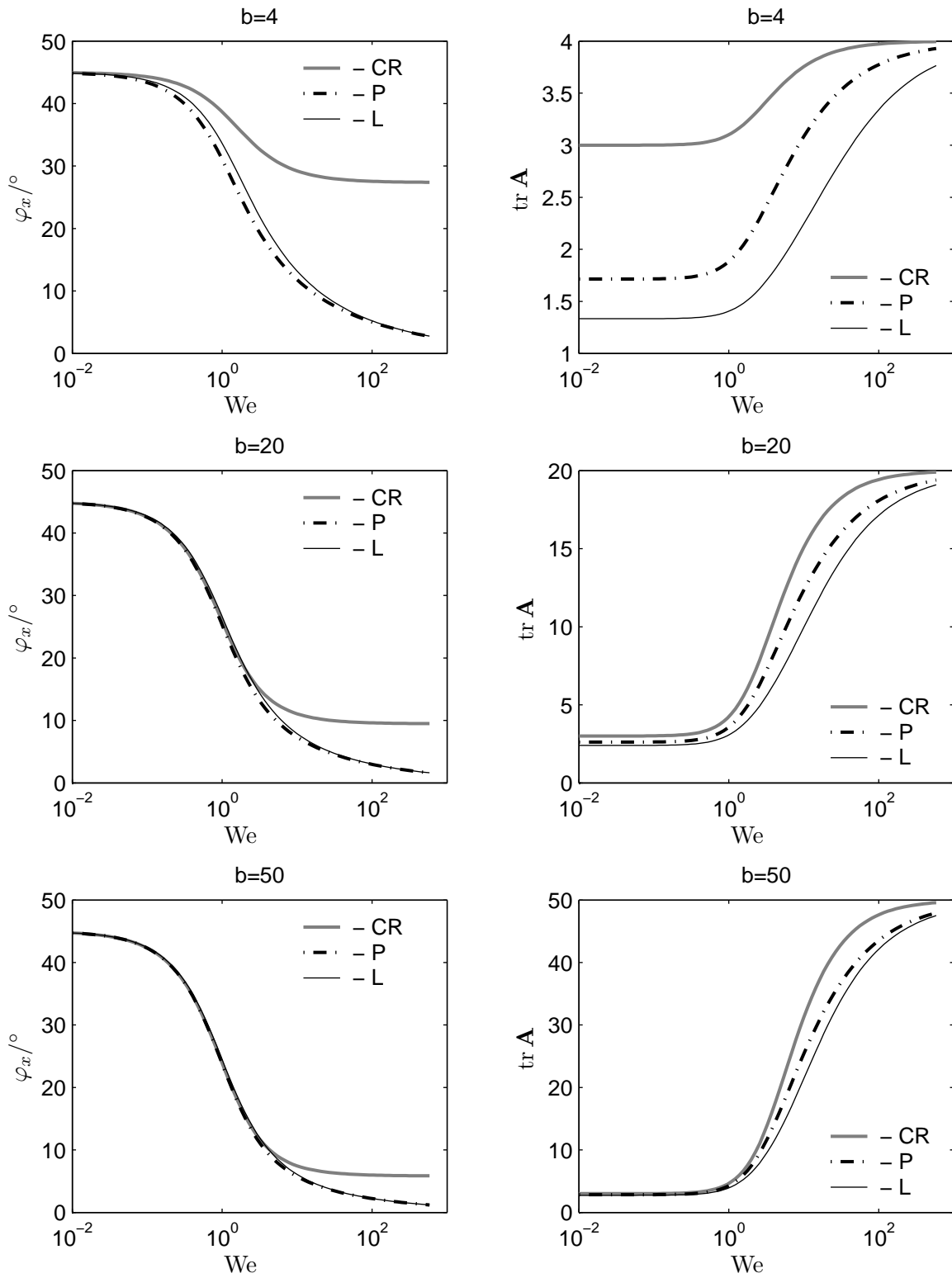


Abbildung 3.10: Stationäre Scherung: Orientierungswinkel φ_x (links); $\text{tr } \mathbf{A}$ (rechts)

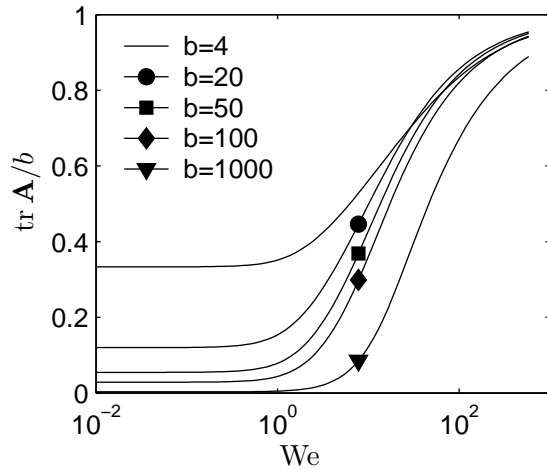


Abbildung 3.11: Stationäre Scherung, FENE-L Modell, normierte, relative Länge

Die Darstellung der Orientierungsellipsen für verschiedene Werte von b und We-Zahlen (Abb. 3.12, Abb. 3.13 und Abb. 3.14) zeigt mit zunehmender maximaler Federlänge, dass höhere Weissenberg-Zahlen für die vollständige Ausrichtung in eine Raumrichtung benötigt werden. Ausgehend vom Gleichgewichtszustand wird die Orientierungsellipse größer und flacher, d.h. das Längenverhältnis der beiden Hauptachsen nimmt zu. Unterscheiden sich $b = 4$ und $b = 50$ bei $We=1$ noch deutlich in der Form der Orientierungsellipse und nähern sich $b = 50$ und $b = 100$ im Konfigurationszustand in der Ellipsenform einander an.

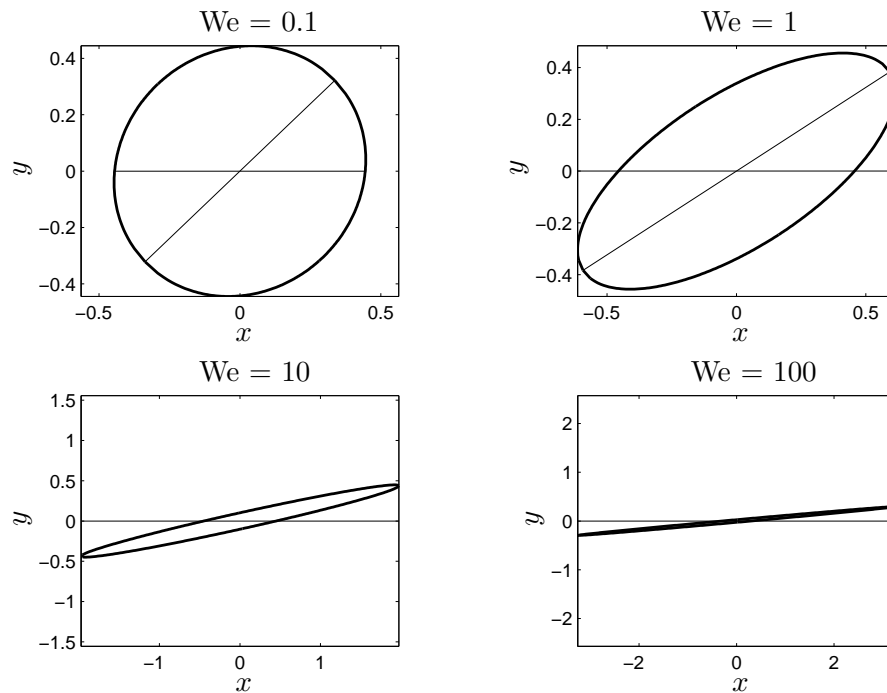


Abbildung 3.12: Stationäre Scherströmung, Orientierungsellipse, FENE-L, $b = 4$

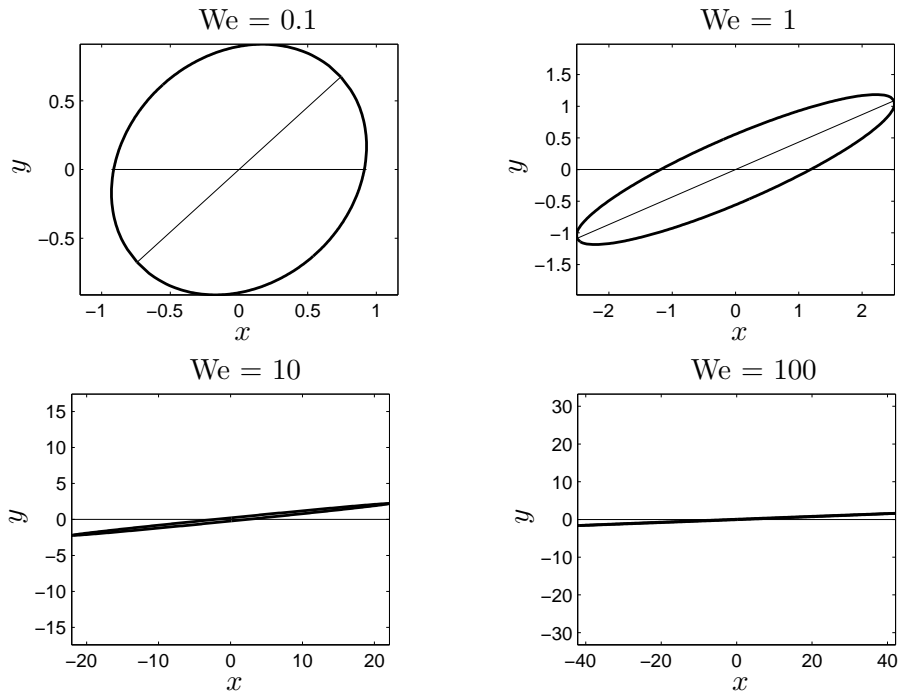


Abbildung 3.13: Stationäre Scherströmung, Orientierungsellipsen FENE-L, $b = 50$

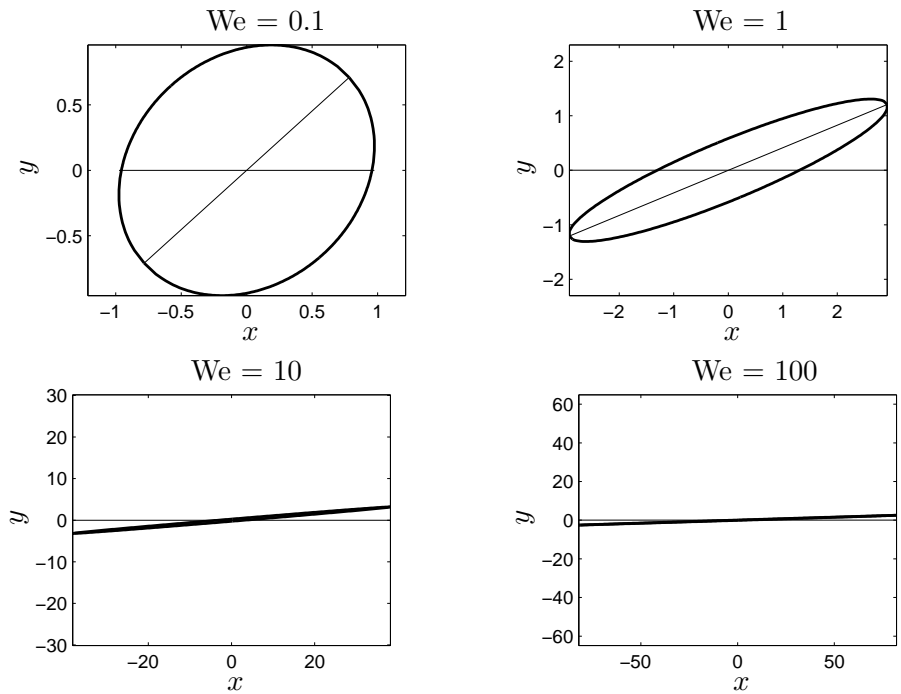


Abbildung 3.14: Stationäre Scherströmung, Orientierungsellipsen FENE-L, $b = 100$

In Abbildung 3.15 zeigt die doppeltlogarithmische Auftragung des Längenverhältnisses der beiden Halbachsen der Orientierungsellipse ein nichtlineares Anwachsen der Hauptachsenlänge (l_a) gegenüber der Länge der Nebenachse (l_b) und somit eine zunehmend engere Orientierungsverteilung mit zunehmender Weissenberg-Zahl und steigender maximaler Federlänge. Abbildung 3.16 verdeutlicht, dass die bessere Orientierbarkeit der Moleküle in einer engeren Orientierungsverteilung und somit in einem größeren Verhältnis l_a/l_b resultiert. Gegenüber dem FENE-P und -L Modell bleiben die Feder-Hanteln im FENE-CR Modell stärker in unterschiedliche Raumrichtungen orientiert und auch die Längenverteilung ist bei großen Weissenberg-Zahlen $We > 1$ breiter als bei FENE-L und -P. Darüberhinaus hat sich gezeigt, dass die Funktion $l_b(We)$ nicht nennenswert von der maximalen Federlänge abhängt.

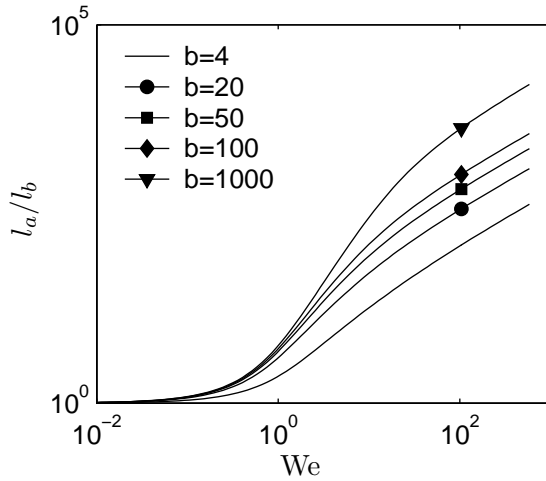


Abbildung 3.15: Stationäre Scherung: Verhältnis der Hauptachsenlängen der Orientierungsellipse l_a/l_b , FENE-L

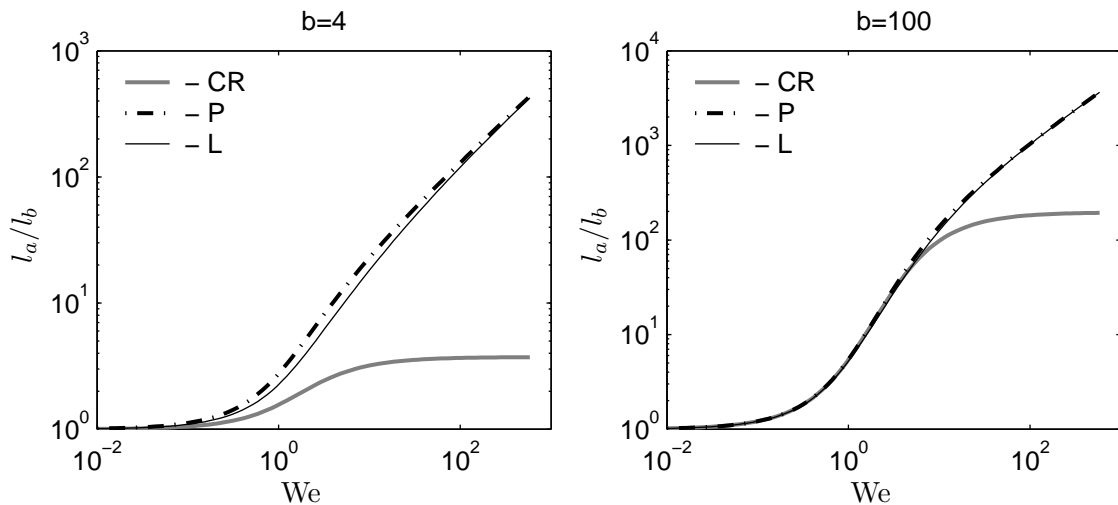


Abbildung 3.16: Stationäre Scherung: Verhältnis der Hauptachsenlängen der Orientierungsellipse l_a/l_b , links: $b = 4$, rechts: $b = 100$

Einerseits müssen Anpassungen der rheologischen Modelle an experimentelle Beobachtungen ausreichend abgesichert werden, indem auch die Richtigkeit der Vorhersage der Molekülstruktur überprüft wird. Dies erfordert erheblichen experimentellen Aufwand (z. B. durch Neutronen-Kleinwinkelstreuung), ist aber möglich. Mit einem vertrauenswürdigen Mo-

dellparametersatz kann mit Mikro-Makro-Modellen schließlich in makroskopischen Strömungen der Einfluss der Strömung auf die Mikrostruktur qualitativ untersucht und vorhergesagt werden. Der hohe Informationsgehalt von Mikro-Makro-Modellen bei numerischen Strömungsberechnungen nicht-newtonscher Fluide wird bereits in diesen einfachen rheometrischen Strömungen deutlich. In mehreren Arbeiten konnte durch Spann- Relaxationsversuche und die experimentelle Bestimmung der viskosimetrischen Funktionen gezeigt werden, dass das FENE-P Modell Das Fließverhalten realer Fluide (z. B. Polyisobutylene-Lösungen) abbilden kann [49], [39]. Nach wie vor experimentell unbestätigt bleibt die theoretische Modellvorhersage des Konfigurationszustandes in Scherströmungen. Mit zunehmendem inhaltlichen Gewicht werden Mikro-Makro-Modelle auch in aktuellen wissenschaftlichen Fachbüchern diskutiert [50], so dass dieser Aspekt trotz des hohen experimentellen Aufwandes weiter erforscht wird.

3.3.6 Geschlossene FENE-Modelle: uniaxiale Dehnung

Neben der stationären Scherströmung numerisch leicht zu berechnen ist die uniaxiale Dehnströmung. Die experimentelle Bestimmung der Dehnviskosität hingegen wird insbesondere bei hohen Dehnraten zunehmend schwieriger. Nichts desto trotz ist die stationäre Dehnströmung bzw. die Messung der Dehnviskosität in Abhängigkeit der Dehnrates $\dot{\epsilon}$ ein Standardexperiment zur umfassenden rheologischen Charakterisierung nicht-newtonscher Fluide. In Abb. 3.17 ist die Dehnviskosität in Abhängigkeit der dimensionslosen Dehngeschwindigkeit $We = \dot{\epsilon}\lambda$ aufgetragen. Mit zunehmender dimensionloser Dehngeschwindigkeit zeigen die Modelle die für Polymerlösungen typische Dehnverfestigung, welche aus der begrenzten Dehnbarkeit der Moleküle resultiert. Ein Oldroyd-B Modell lieferte aufgrund des linearen Federkraft-Gesetzes eine unbegrenzte Dehnbarkeit, worin die wesentliche Schwäche dieses Modelltyps begründet liegt.

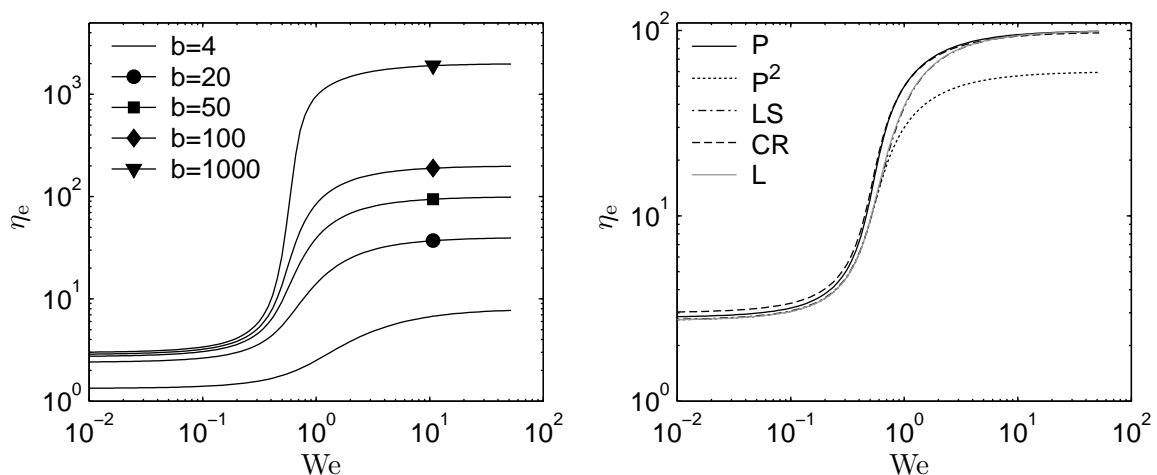


Abbildung 3.17: Uniaxiale Dehnströmung, Dehnviskosität, links: FENE-L, rechts Modellvergleich für $b = 50$

Abbildung 3.18 zeigt, dass die Unterschiede in der vorhergesagten mittleren Moleküllänge bei niedrigen Dehnraten zwischen den unterschiedlichen Modellen gravierend ist, für höhere Dehnraten $We > 10$ geringer wird und sich asymptotisch dem Grenzwert der maximalen Federlänge nähert.

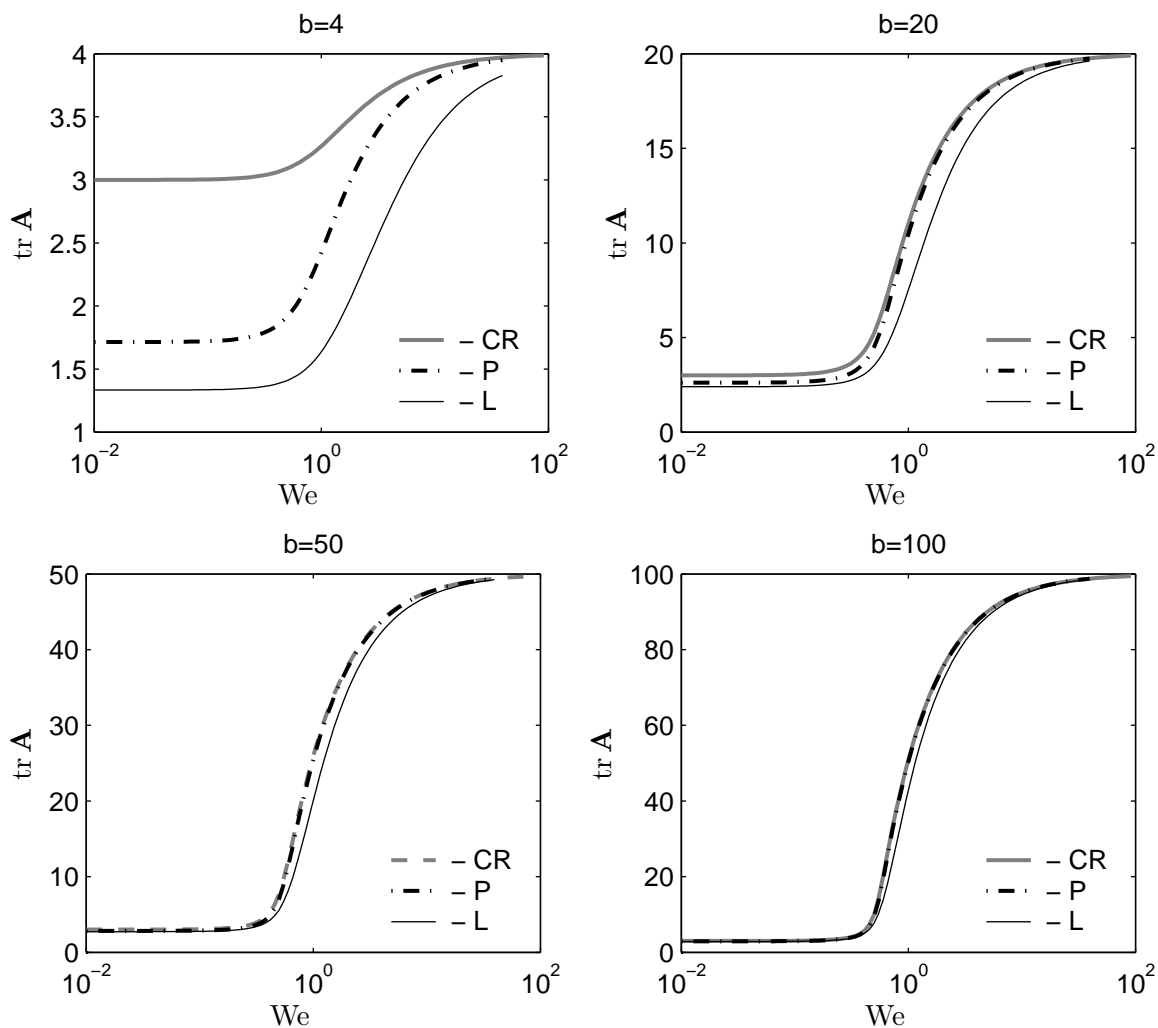


Abbildung 3.18: Stationäre uniaxiale Dehnung, Modellvergleich, $\text{tr } \mathbf{A}$

Entsprechend Abb. 3.19 zeigen die Federhanteln mit einer zunehmenden maximalen Federlänge bei gleicher Dehnrate eine bessere Orientierbarkeit und somit ein größeres Verhältnis von l_a/l_b . FENE-L und FENE-P zeigen in Abb. 3.20 nur unwesentliche Unterschiede in der Dehncharakteristik bzw. auch in der Breite der Orientierungseellipse.

Die Orientierungsellipsen der stationären uniaxialen Dehnströmung zeigen für $b = 100$ bereits für $We = 1$ eine vollständige Ausrichtung der Hauptachse des Orientierungsellipsoids in der Dehnrichtung, so dass für höhere Dehnraten nur noch die mittlere Federlänge zunimmt und die Breite der Orientierungsverteilung abnimmt (siehe Abb. 3.21). Schwerpunkt dieser Arbeit ist weiterhin die oszillierende Scherung mit großer Deformationsamplitude mit dem Vergleich des offenen und der geschlossenen Modelle miteinander, so dass für die uniaxiale Dehnströmung und die vorangegangenen Ausführungen zur stationären Scherung lediglich die in der Literatur bisher nicht diskutierten charakteristischen Größen zur Beschreibung des Konfigurationszustandes gezeigt und ergänzt wurden.

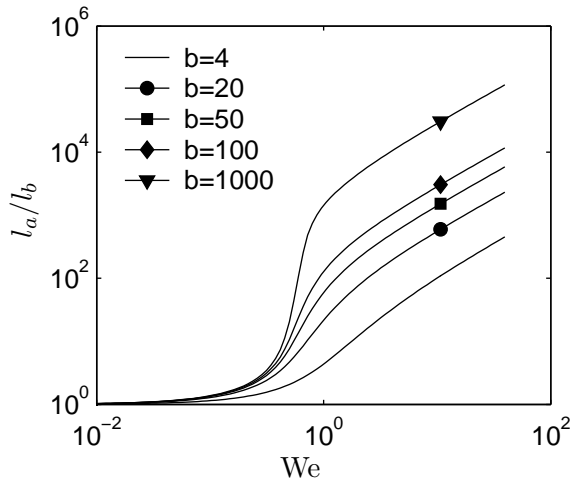


Abbildung 3.19: Verhältnis der Hauptachsenlängen der Orientierungseellipse l_a/l_b , FENE-L

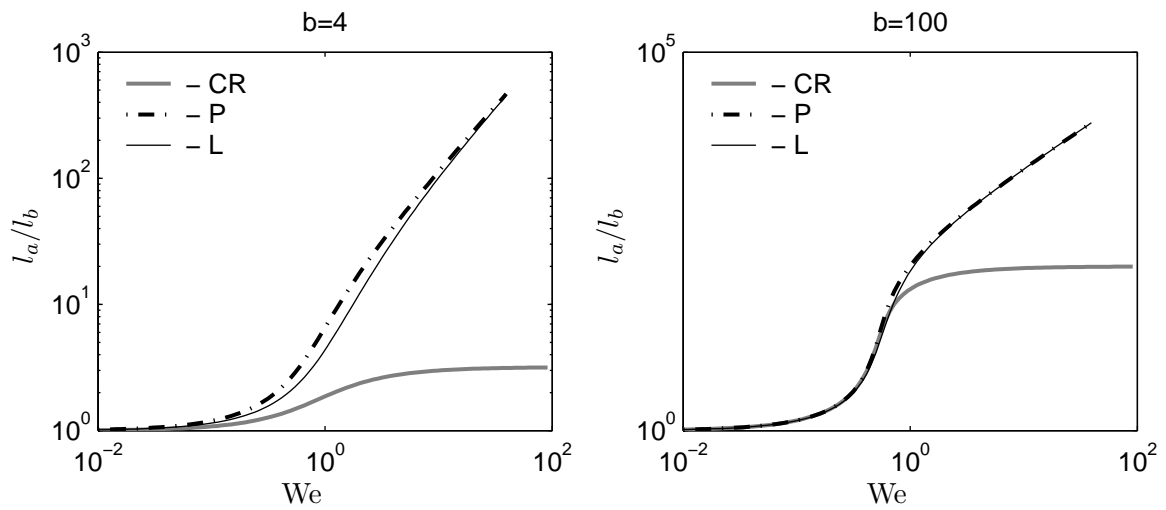


Abbildung 3.20: Verhältnis der Hauptachsenlängen der Orientierungseellipse l_a/l_b , FENE-L

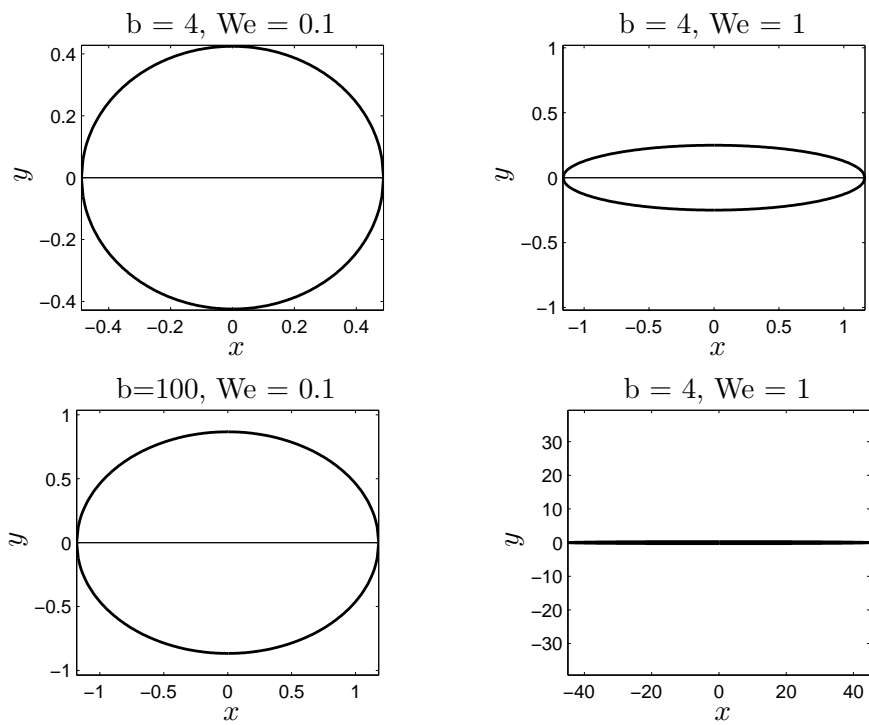


Abbildung 3.21: Stationäre Dehnung, Orientierungsellipsen FENE-L, $b = 4$ und $b = 100$

3.4 Hytereseverhalten in Dehn-/Relaxationsversuchen

Um den Einfluss des mikrostrukturellen Orientierungszustandes auf den makroskopischen Spannungszustand weitergehend zu charakterisieren, wird das Anlauf- und Relaxationsverhalten in der uniaxialen Dehnströmung für das offene FENE-Modell untersucht. Gibt man für die Dehngeschwindigkeit ausgehend von einem Ruhezustand des Fluids eine sprungartige Beanspruchung vor bis der stationäre Zustand erreicht wird und beobachtet dann das Spannungsrelaxationsverhalten, zeigt sich ein charakteristisches Hystereseverhalten in der Funktion $S_{ij} = f(\text{tr } \mathbf{A})$. Es lässt sich beobachten, dass die Spannungen keine eindeutige Funktion der mittleren Federlänge sind. In Abbildung 3.22 ist u.a. die erste Normalspannungsdifferenz als Funktion von $\text{tr } \mathbf{A}$ dargestellt für $b = 20$ und mit der Dehngeschwindigkeit $\dot{\epsilon} = 1$ 1/s. Bei gleicher mittlerer Federlänge werden unterschiedliche Werte der ersten Normalspannungsdifferenz erreicht. Begründet ist dieses Verhalten durch die Tatsache, dass die Längenverteilungsfunktion der Moleküle trotz gleicher mittlerer Länge im Anlauf- und Relaxationsverhalten unterschiedliche Formen annimmt (Abbildung 3.23). Als Schlussfolgerung kann festgehalten werden, dass die Deformationsgeschichte den mikrostrukturellen Orientierungszustand beeinflusst und sich daraus ergebende unterschiedliche Spannungszustände allein mit mittleren Orientierungsgrößen nicht ausreichend beschreiben lassen. Aus experimenteller Sicht bedeutet dies, dass das spannungsoptische Gesetz in diesem Fall keine Gültigkeit besitzt [51]. Das spannungsoptische Gesetz nimmt einen eindeutigen, linearen Zusammenhang zwischen der Schubspannung und der Strömungsdoppelbrechung durch das Fluid an. Somit wird jedem Spannungszustand ein eindeutiger Orientierungszustand zugeordnet. Die numerischen Strömungsberechnungen zeigen jedoch, dass dieser eindeutige Zusammenhang für Feder-Hantel-Modelle nicht gültig ist. Für Polymerlösungen, die durch Feder-Hantel-Modelle abgebildet werden können, stellen numerische Berechnungen daher eine Möglichkeit dar, mit der Verteilungsfunktion Informationen über den mikrostrukturellen Orientierungszustand zu erhalten, die experimentell wenig bis gar nicht zugänglich sind.

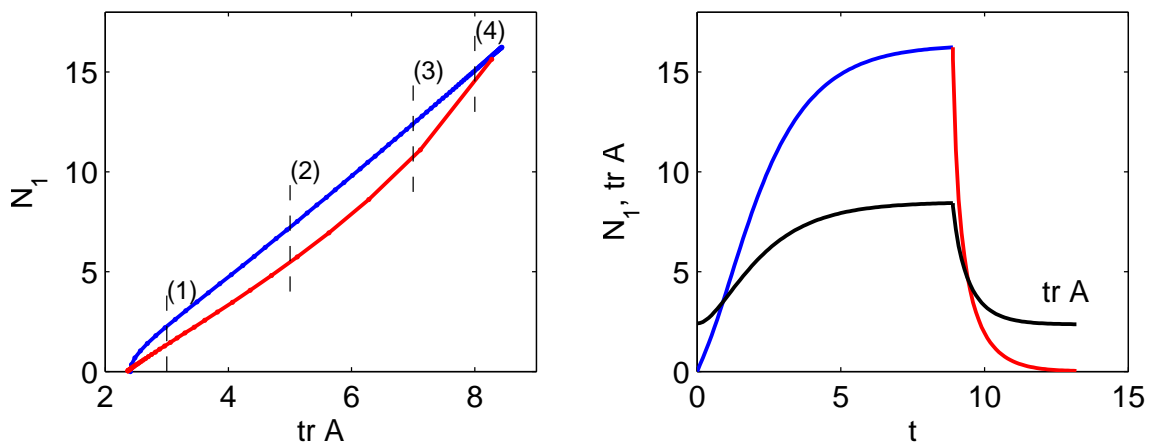


Abbildung 3.22: Uniaxiale Dehnströmung, $b = 20$, $We = 1$, Verteilungsfunktion $\psi(r)$, $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0$

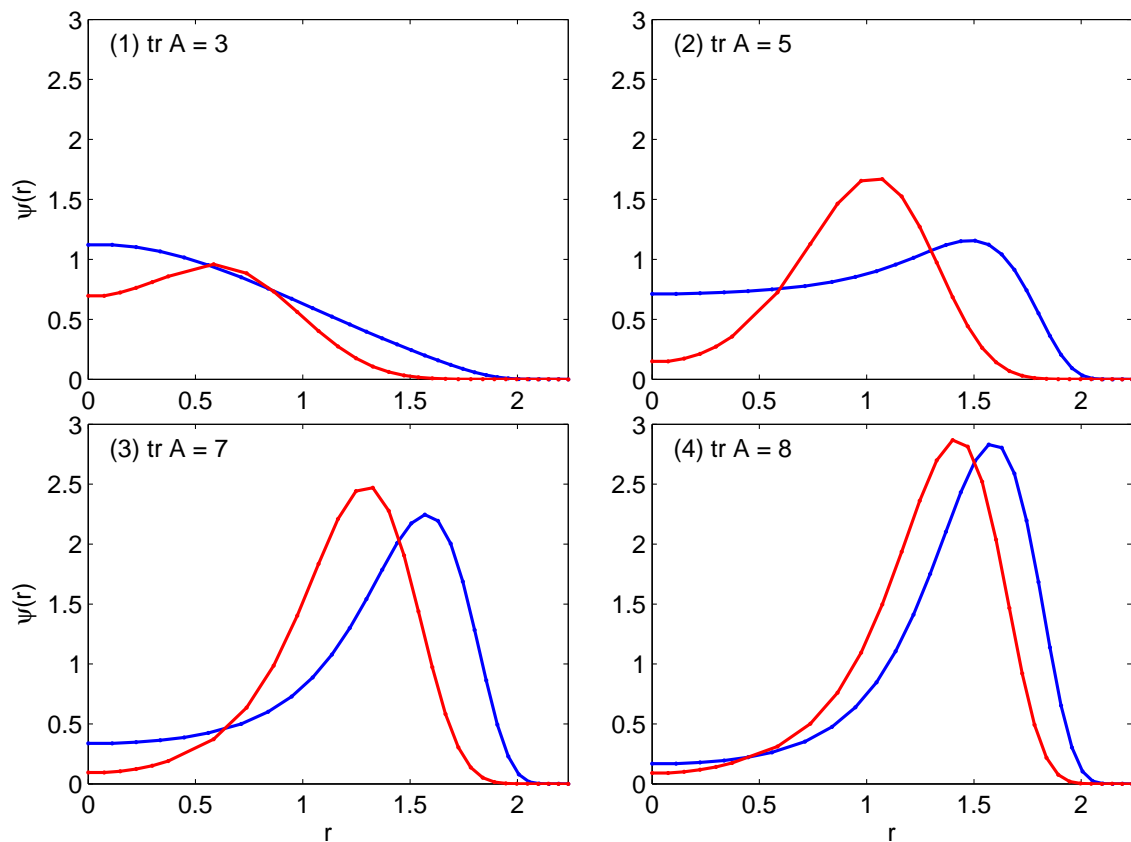


Abbildung 3.23: Uniaxiale Dehnströmung, $b = 20$, $We = 1$, Verteilungsfunktion $\psi(r)$, $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0$

3.5 Zusammenfassung

Für das offene Feder-Hantel-Modell konnte der Konfigurationsraum durch die Verwendung eines federmittenzentrierten Koordinatensystems gegenüber dem konventionellen kugelenzentrierten Koordinatensystem verkleinert werden. Die Verschiebung des Koordinatensystems in den Federmittelpunkt verringert die Zellenanzahl in der Diskretisierung der Fokker-Planck-Gleichung bei gleicher Gitterauflösung im Vergleich zum kugelenzentrierten Koordinatensystem um den Faktor vier. Damit wurde die benötigte Rechenzeit für die numerische Lösung der FP-Gleichung mit Finiten-Differenzen deutlich reduziert und die Berechnung oszillierender Scherströmungen mit geringen Frequenzen ermöglicht.

Neben den viskosimetrischen Funktionen wurden für die geschlossenen Modelle in stationärer Scherströmung und uniaxialer Dehnströmung einige wichtige Größen für die Charakterisierung des Orientierungszustandes eingeführt und diskutiert. Für den Konfigurationstensor zweiter Stufe kann mit Hilfe der Eigenwerte und -vektoren ein Orientierungsellipsoid (bzw. wird eine zweidimensionale Ellipse diskutiert) aufgespannt werden, der Aussagen über den Grad der Orientierung und einen Hauptorientierungswinkel ermöglicht. Zusammenfassend wurde festgestellt, dass mit steigender Scher- und Dehngeschwindigkeit die mittlere Federlänge zunimmt und sich aufgrund des nichtlinearen Federkraftgesetzes asymptotisch der maximal möglichen Länge nähert. In der Scherströmung nimmt die Ausrichtung der Federhanteln in Strömungsrichtung mit zunehmender Schergeschwindigkeit zu und das Verhält-

nis der längeren zur kürzeren Ellipsoidhalbachse steigt ebenfalls an, bis im Grenzfall eine vollständige Ausrichtung erreicht wird. In der Dehnströmung ist die Orientierungsellipse ausgehend vom Gleichgewichtszustand bei allen Dehnraten im stationären Zustand in Strömungsrichtung orientiert. Bei geringer dimensionsloser maximaler Federlänge $b = 4$ ist die durch das FENE-P Modell vorhergesagte mittlere Federlänge im betrachteten Bereich der dimensionslosen Schergeschwindigkeit (Weissenberg-Zahl) von 10^{-2} bis 200 größer als die des FENE-L Modells. Mit zunehmendem b werden die Modellunterschiede des FENE-L und -P Modells für den Hauptorientierungswinkel und die mittlere Länge geringer. Obwohl das FENE-CR Modell eine scherratenunabhängige Viskosität besitzt, ist der Hauptorientierungswinkel und die mittlere Federlänge in der stationären Scherströmung für $b > 20$ den Charakteristiken des FENE-L und -P Modells ähnlich. Das Verhältnis der mit dem FENE-CR Modell berechneten Ellipsenhalbachsen hingegen unterscheidet sich beispielsweise für $b = 100$ und $We = 10$ deutlich von den Ergebnissen von FENE-L und -P und ist jeweils geringer. Insgesamt konnte gezeigt werden, dass für die vollständige Charakterisierung eines mittleren Orientierungszustandes mindestens drei typische Größen ausgewertet und diskutiert werden müssen, nämlich die Spur des Konfigurationstensors, der Hauptorientierungswinkel der Orientierungsellipse, sowie das Längenverhältnis der Ellipsenhalbachsen als Maß für die Breite der Orientierungsverteilung. Diese Größen werden im Ergebnisteil der oszillierenden Scherung für den Vergleich des offenen und der geschlossenen Modelle diskutiert.

4 Numerische Methoden der Feder-Hantel-Modelle

Verantwortlich ist man nicht nur für das, was man tut, sondern auch für das, was man nicht tut.

Laotse

Da in dieser Arbeit viskosimetrische Strömungen von Polymerlösungen berechnet werden, wird das Geschwindigkeitsfeld bzw. der Geschwindigkeitsgradient als Funktion der Zeit vorgegeben und die Fokker-Planck Gleichung ohne die Impulserhaltungsgleichungen gelöst. Auch bei experimentellen Untersuchungen basiert die Auswertung der Messergebnisse für rheometrische Strömungen auf der Annahme einer örtlich konstanten Schergeschwindigkeit im Messspalt, was insbesondere durch Verwendung einer Kegel-Platte Geometrie oder für eine Couette-Geometrie mit geringer Spaltweite realisiert werden kann. In einem späteren Kapitel wird für geschlossene Mikro-Makro-Modelle für Fasersuspensionen auch eine gekoppelte Berechnung der Hydrodynamik und des Differentialgleichungssystems der rheologischen Stoffgleichung diskutiert werden. Im Folgenden sind die verwendeten numerischen Methoden für die Lösung der Fokker-Planck Gleichung dargestellt.

4.1 Diskretisierung der Fokker-Planck Gleichung

Ortsdiskretisierung Die Fokker-Planck Gleichung als lineare Differentialgleichung für ψ mit nicht-konstanten Koeffizienten wird mit der Finite-Differenzen-Methode diskretisiert. Für die Ortsdiskretisierung werden zentrale Differenzen zweiter Ordnung und ein nichtäquidistantes Gitter verwendet. Die Lösung erfolgt im Kugelkoordinatensystem und es gilt mit x für die unterschiedlichen Raumrichtungen:

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}, \quad (4.1)$$

$$\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)_i = \frac{\Phi_{i+1}(x_i - x_{i-1}) + \Phi_{i-1}(x_{i+1} - x_i) - \Phi_i(x_{i+1} - x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \quad (4.2)$$

Ebenfalls im Rahmen dieser Arbeit programmiert wurden zentrale Differenzen vierter Ordnung mit einer Randdiskretisierung zweiter Ordnung mit Rückwärts- und Vorwärtsdifferenzen. Bei den verwendeten Rechengittern zeigte sich mit der Diskretisierung höherer Ordnung keine nennenswerte Verbesserung der Lösungsgenauigkeit und Stabilität, so dass diese im Folgenden aufgrund der höheren Rechenintensität nicht weiter verwendet wurden.

Zeitdiskretisierung Die Zeitdiskretisierung wurde aufgrund der guten Eigenschaften bezüglich Stabilität und Genauigkeit mit dem Crank-Nicolson Verfahren (zweiter Ordnung) realisiert:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi}{\partial t} &= \mathcal{F}(\Phi), \\ \frac{\partial \Phi}{\partial t} &= \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(\mathcal{F}^{n+1} + \mathcal{F}^n).\end{aligned}\tag{4.3}$$

Dabei bezeichnet n den letzten Zeitschritt und $n + 1$ den neuen Zeitschritt.

Insbesondere für Berechnungen mit großen örtlichen Gradienten der Verteilungsfunktion ψ ist zu erwarten, dass die Finite-Differenzen Methode zu unphysikalischen Oszillationen neigt und eine sorgfältige Wahl der Gitterauflösung erfordert. LOZINSKI und CHAUVIÈRE zeigen u. a. in [12, 13] einen numerischen Algorithmus mit Spektralverfahren, nur ist der Implementierungsaufwand dieser Methode als deutlich höher einzuschätzen und die numerische Stabilität nicht wesentlich besser, so dass im Rahmen dieser Arbeit eine Algorithmus mit Finiten-Differenzen bevorzugt wird.

4.2 Lösung des linearen Gleichungssystems

Das lineare Gleichungssystem der diskretisierten FP-Gleichung wird mit einem iterativen Löser der University of Notre Dame, Indiana, USA gelöst. Dabei kommt ein ILU-Vorkonditionierer und die QMR („Quasi Minimal Residual“) Methode zum Einsatz¹.

4.3 Numerische Integration

Neben der Berechnung der Verteilungsfunktion aus der Lösung der Differentialgleichung muss zusätzlich die Normierungsbedingung $\int \psi(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q} = 1$ erfüllt werden. Andernfalls ist die Verteilungsfunktion durch die Randbedingungen nicht eindeutig definiert und die beiden Fälle $\psi(\mathbf{q}, t) \rightarrow 0$ und $\psi(\mathbf{q}, t) \rightarrow \infty$ werden beobachtet.

Nach der Lösung der DGL wird die unnormierte Verteilungsfunktion ψ' numerisch über den Konfigurationsraum integriert und in jedem Gitterpunkt i durch den Wert des Integrals \mathcal{I} dividiert:

$$\mathcal{I}_{\psi'} = \int \psi'(\mathbf{q}, t) d\mathbf{q}, \quad \psi_i = \frac{\psi'_i}{\mathcal{I}_{\psi'}}.\tag{4.4}$$

Darüber hinaus erfordert die Berechnung der Komponenten des Spannungstensors und des Konfigurationstensors eine numerische Integration über den Konfigurationsraum. Diese Integration kann vollständig im transformierten Koordinatensystem über h , ϑ und φ anstatt r , ϑ und φ vorgenommen werden. Mit einem „Platzhalter“ \mathcal{C} für den jeweiligen Integranden (Komponenten des Konfigurations- und Spannungstensors A_{ij} , S_{ij}) kann man im federzentrierten Koordinatensystem schreiben:

¹ITL Iterative Template Library <http://osl.iu.edu/research/itl/>, MTL The Matrix Template Library <http://www.osl.iu.edu/research/mtl/>

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{\sqrt{b}/2} C \psi(r, \vartheta, \varphi) r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_{-1}^1 C \left(\frac{1-h}{2} \right)^s Y(h, \vartheta, \varphi) \frac{b}{16} \sqrt{\frac{b}{8}(1+h)} \sin \vartheta dh d\vartheta d\varphi, \quad (4.5)$$

$$r^2 = \frac{b}{8}(1+h), \quad \frac{\partial r}{\partial h} = \frac{b}{16} \frac{1}{\sqrt{\frac{b}{8}(1+h)}}. \quad (4.6)$$

Die Integrationsgrenzen in Gl. (4.5) bzw. die Größe des Rechengebietes hängen im r, ϑ, φ -Koordinatensystem von b ab, so dass für ein Gitter mit gleicher Zellengröße mit zunehmender maximaler Federlänge mehr Gitterpunkte benötigt würden. Verwendet man die Transformation von $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ nach $Y(h, \vartheta, \varphi)$ und führt alle numerischen Integrationen auf dem h, ϑ, φ -Gitter durch, sind die Intervall-/Integrationsgrenzen mit $h \in [-1, 1]$ unabhängig von der maximalen Federlänge, so dass mit zunehmendem b ein festes Rechengitter die gleiche Genauigkeit der numerischen Integration liefert. In dieser Arbeit wird daher nicht nur die FP-Gleichung für Y anstatt ψ gelöst, sondern das Integral (4.5) numerisch ausgewertet. Die Verteilungsfunktion ψ wird anschließend explizit mit Y berechnet. In der Diskussion der Ergebnisse wird die Darstellung der Verteilungsfunktion ψ bevorzugt, da diese anschaulicher diskutiert werden kann als Y . Ein auf den ersten Blick recht grob wirkendes Gitter in r -Richtung hat aus den oben genannten Gründen keine Auswirkung auf die Genauigkeit der Lösung.

Quadraturformeln Die numerische Integration wird mit der Methode der Quadraturformeln nach NEWTON und COTES durchgeführt. Ausgewertet werden muss ein Riemann-Integral der Form:

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b f(x) dx. \quad (4.7)$$

Die sogenannten Newton-Cotes Formeln ersetzen den Integranden $f(x)$ durch ein Interpolationspolynom. Das gesamte Integral wird dann durch die Aufsummierung der Teilflächen zwischen den Stützstellen des Polynoms berechnet. Im Rahmen dieser Arbeit wird mit dem Simpson-Verfahren ein Interpolationspolynom zweiten Grades verwendet. Für ein nichtäquidistantes Gitter ergibt sich das Teilintegral zwischen den Stützstellen x_1, x_2 und x_3 mit den entsprechenden Funktionswerten f_1, f_2 und f_3 zu:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(f)_i = & \frac{1}{3} \frac{(f_1 x_2 - f_1 x_3 - x_1 f_2 + x_1 f_3 - f_3 x_2 + x_3 f_2)(x_3^3 - x_1^3)}{x_1^2 x_2 - x_1^2 x_3 - x_1 x_2^2 + x_1 x_3^2 - x_3^2 x_2 + x_3 x_2^2} \\ & - \frac{1}{2} \frac{(x_2^2 f_1 - f_3 x_2^2 - f_2 x_1^2 - x_3^2 f_1 + f_2 x_3^2 + f_3 x_1^2)(-x_1^2 + x_3^2)}{(x_2 - x_3)(-x_2 x_1 + x_2 x_3 + x_1^2 - x_3 x_1)} \\ & + \frac{(f_3 x_1^2 x_2 - f_2 x_1^2 x_3 - x_2^2 x_1 f_3 + f_2 x_1 x_3^2 + x_2^2 f_1 x_3 - x_3^2 f_1 x_2)(-x_1 + x_3)}{(x_2 - x_3)(-x_2 x_1 + x_2 x_3 + x_1^2 - x_3 x_1)}. \quad (4.8) \end{aligned}$$

Die Simpson-Quadraturformel wurde aufgrund ihrer Fehlerordnung vom Grad vier verwendet. Vergleichend wurde auch die Trapez-Formel (Fehlerordnung zwei) verwendet. Gegenüber Quadraturen vom Gauß-Legendre-Typ besitzt die Simpson-Formel den Vorteil, dass das Diskretisierungsgitter für die Auswertung der Integrale an den Stützstellen verwendet werden

kann. Gauß-Legendre Polynome erfordern hingegen eine Berechnung von Stützstellen der Legendre-Polynome und es hat sich gezeigt, dass der zusätzliche Rechenaufwand im Vergleich mit dem Simpson-Verfahren nicht durch eine höhere Genauigkeit aufgewogen wird. Das Diskretisierungsgitter muss für eine stabile Lösung bereits so fein gewählt werden, dass die numerische Integration mit der Simpson-Formel ausreichend genau ist. Die mehrdimensionale Integration im Konfigurationsraum wird durch die sukzessive Auswertung der Integrationen in den einzelnen Raumrichtungen realisiert.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_h(\vartheta, \varphi) &= \int_{-1}^1 f(h) dh, \\
 \mathcal{I}_\vartheta(\varphi) &= \int_0^{\pi/2} \mathcal{I}_h(\vartheta, \varphi) \sin^2 \vartheta d\vartheta, \\
 \mathcal{I}_{\text{ges}} &= \int_0^{2\pi} \mathcal{I}_\vartheta(\varphi) d\varphi.
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

4.4 Validierung des FP-Algorithmus

Die Validierung des Algorithmus zur Lösung der Fokker-Planck-Gleichung kann für den Gleichgewichtszustand und die stationäre, uniaxiale Dehnung durch den Vergleich mit der analytischen Lösung erfolgen.

4.4.1 Analytische Gleichgewichts-Lösung

Im Ruhezustand verschwinden Geschwindigkeitsgradienten und die Feder-Hanteln nehmen eine Gleichgewichtsverteilung ein, wobei diese isotrop in ϑ - und φ -Richtung ist. In r -Richtung sind die Längen der Federhanteln anisotrop verteilt. Im federzentrierten Koordinatensystem erhält man die Gleichgewichtslösung mit:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L} &= \mathbf{0}, \quad \frac{D\psi}{Dt} = 0, \\
 \Rightarrow 0 &= \nabla_q \cdot \left(\frac{1}{4\lambda} \mathbf{F}(\mathbf{q}_z) \psi_{\text{eq}} + \frac{1}{8\lambda} \nabla_q \psi_{\text{eq}} \right), \\
 \Rightarrow \mathbf{0} &= \mathbf{F}(\mathbf{q}) \psi_{\text{eq}} + \nabla_q \psi_{\text{eq}}, \\
 \psi_{\text{eq}}(r) &= C \left(1 - \frac{4r^2}{b} \right)^{\frac{b}{2}}.
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Die Konstante C in Gl. (4.10) wird über die Normierungsbedingung (3.19) berechnet.

4.4.2 Analytische Lösung Dehnströmung

Für eine stationäre Dehnströmung kann ebenfalls eine analytische Lösung berechnet werden [12]. Im federzentrierten Koordinatensystem gilt:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\text{elong}}(r, \vartheta, \varphi) &= \left(1 - \frac{1}{b} (4r^2 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + 4r^2 \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi + 4r^2 \cos^2 \vartheta) \right)^{\frac{b}{2}} \dots \\
 &\dots \exp(\lambda (4L_{11}r^2 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi + 4L_{22}r^2 \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi + 4L_{33}r^2 \cos^2 \vartheta)).
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Für den Fall einer uniaxialen Dehnung vereinfacht sich diese nach der Koordinatentransformation zu:

$$L_{ij} = 0, \quad i \neq j, \quad L_{11} = \dot{\epsilon}, \quad L_{22} = L_{33} = -\frac{1}{2}\dot{\epsilon},$$

$$\psi_{\text{elong}}(h, \vartheta, \varphi) = \left(\frac{1-h}{2}\right)^{\frac{b}{2}} \exp\left(-\frac{1}{4}\lambda L_{11} b (3 \cos^2 \varphi \cos^2 \vartheta - 3 \cos^2 \varphi + 1)(1+h)\right). \quad (4.12)$$

4.4.3 Ergebnisvergleich numerische Lösung/analytische Lösungen

Für die Validierung der implementierten numerischen Methoden und deren Genauigkeit wurde die Lösung der Fokker-Planck Gleichung mit den analytisch berechneten Verteilungsfunktionen im Gleichgewichtszustand und in der uniaxialen Dehnströmung verglichen. Es wurden Gitter mit unterschiedlichen Gitterauflösungen generiert (siehe Tabelle. 4.1). In h -Richtung wurde das Gitter zu den Rändern hin verfeinert, wobei der Gitterabstand für $r \rightarrow 0$ für einige Punkte äquidistant festgesetzt wurde. Aufgrund der Koordinatentransformationsvorschrift von h nach r würde sich sonst eine zu hohe Gitterauflösung am inneren Rand ergeben.

Tabelle 4.1: Gitterauflösungen

	$\Delta\vartheta = 0.0714, \Delta\varphi = 0.076$		
M1:	$\Delta h = 0.05 - 0.11$	$N = 62997$	$N_h = 23$
M2:	$\Delta h = 0.008 - 0.063$	$N = 82087$	$N_h = 43$

In Abbildung 4.1 sind die analytische Referenzlösung und die Ergebnisse der Gitter M1 und M2 sowohl für die Verteilungsfunktion ψ als auch die Lösung der transformierten Y dargestellt. Die Verteilungsfunktion ψ und Y sind in ϑ - und φ -Richtung isotrop. Abbildung 4.2 zeigt die Ergebnisse für eine Dehngeschwindigkeit von $\dot{\epsilon} = 2$ 1/s. In ϑ -Richtung ist $\psi \approx 1 \cdot 10^{-5}$, in φ -Richtung liegen zwei Maxima vor. Dargestellt ist die Längenverteilung für $\vartheta = \pi/2$ und $\varphi = 0$. Der Vergleich der Längenverteilungsfunktionen für das Gleichgewicht und die uniaxiale Dehnströmung verdeutlicht, dass eine gezielte Erhöhung der Gitterauflösung im Bereich hoher Gradienten für die spätere Berechnung der oszillierenden Scherung nicht realisierbar ist, ohne den Abstand der Gitterzellen zeitlich zu ändern. Die Verteilungsfunktion durchläuft in der oszillierenden Scherung mit der Zeit kontinuierlich einen Zustand zwischen der Gleichgewichtsverteilung und einer starken Ausrichtung der Federhanteln in eine Richtung. Eine zeitabhängige Neugenerierung des Gitters mit Interpolation der Funktionswerte zwischen den Gittern ist aufgrund des zusätzlichen Rechenaufwandes unpraktikabel. Die Berechnungen der oszillierenden Scherung wurden mit dem Rechengitter M1 durchgeführt. Diese Gitterauflösung stellt einen Kompromiss bezüglich der Genauigkeit und der Rechenzeit dar. Insbesondere für kleine Frequenzen ($\omega < 5$ 1/s) wird die Rechenzeit mit dem Gitter M2 für Parameterstudien unpraktikabel.

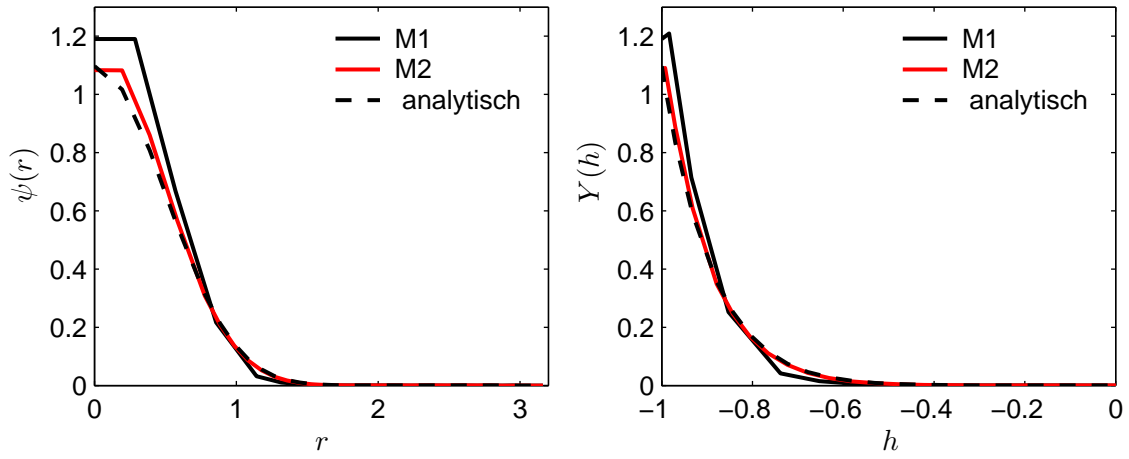


Abbildung 4.1: Offenes FENE: Vergleich mit analytischer Gleichgewichtslösung, $b = 40$

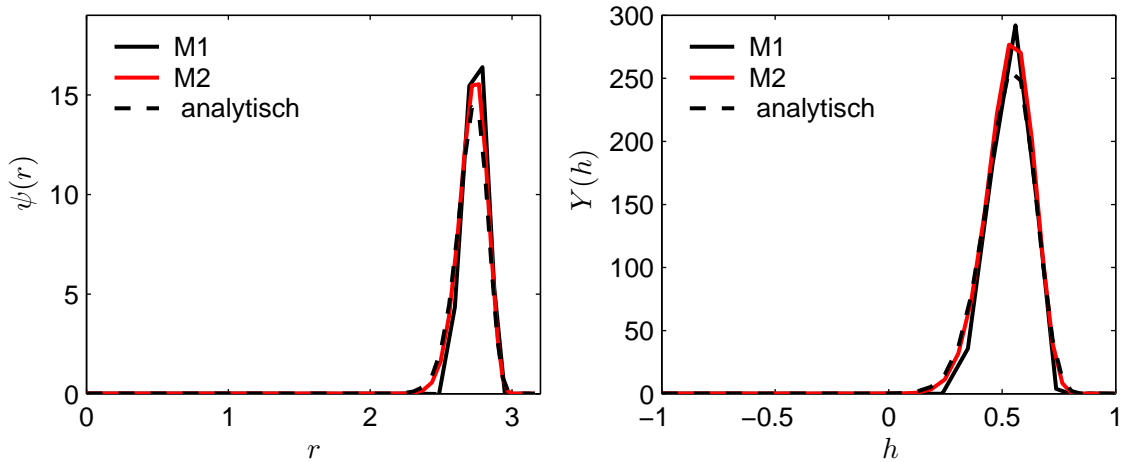


Abbildung 4.2: Offenes FENE: Vergleich mit analytischer Lösung der uniaxialen Dehnströmung, $b = 40$, $\dot{\epsilon} = 2$ 1/s, $\vartheta = \pi/2$, $\varphi = 0$

5 Polymerlösungen: Mechanische Spektroskopie

*Jeder, der sich die Fähigkeit erhält,
schönes zu entdecken, wird nie alt werden.*

Franz Kafka

Die oszillierende Scherung ermöglicht u. a. die Beurteilung der viskoelastischen Eigenschaften von nicht-newtonschen Flüssigkeiten und ist beispielsweise für die Charakterisierung mikrostruktureller Zustandsänderungen (Sol-Gel-Übergang, Polymer-Netzwerkbindungen) ein wichtiger Bestandteil rheologischer Experimente [7,9]. Es ist zu unterscheiden zwischen oszillierender Scherung mit kleiner Deformationsamplitude („Small Amplitude Oscillatory Shear“=SAOS) und Scherung mit großer Deformationsamplitude („Large Amplitude Oscillatory Shear“=LAOS). Um diese Scherungsarten gegeneinander abzugrenzen, muss zuerst die SAOS-Strömung genauer definiert werden.

5.1 SAOS: Scherung mit kleiner Deformationsamplitude

In einer oszillierenden Scherung wird im Allgemeinen für die Deformation oder die Spannung eine harmonische Funktion mit konstanter Amplitude und Frequenz vorgegeben und die Spannungsantwort bzw. Deformationsgeschwindigkeit des Fluids gemessen bzw. numerisch berechnet. Mit einer sinusförmigen Vorgabe der Deformation γ folgt:

$$\begin{aligned}\gamma(t) &= \gamma_0 \sin(\omega t), \\ S_{12}(t) &= S_{12,0} \sin(\omega t + \delta).\end{aligned}\tag{5.1}$$

Die Phasenverschiebung δ zwischen der Deformation und der Schubspannungsantwort wird als Verlustwinkel bezeichnet und ist von den rheologischen Stoffeigenschaften abhängig. Mit der Deborah-Zahl De wird eine dimensionslose Frequenz definiert:

$$De = \omega \lambda.\tag{5.2}$$

Mit der Weissenbergzahl wird die dimensionslose Schergeschwindigkeitsamplitude bezeichnet.

$$\begin{aligned}We &= \gamma_0 De = \gamma_0 \omega \lambda, \\ \dot{\gamma}(t) &= We \cos(\omega t).\end{aligned}\tag{5.3}$$

Als charakteristische physikalische Größen für die Fließeigenschaften in der oszillierenden Scherung sind die dynamischen Moduln G' (Speichermodul) und G'' (Verlustmodul) sowie

der Verlustfaktor $\tan \delta$ etabliert. Für die Definition dieser Größen wird die Schubspannungsantwort mit dem Additionstheorem der Sinus-Funktion zerlegt:

$$\begin{aligned}
 S_{12}(t) &= S_{12,0} \sin(\omega t) \cos \delta + S_{12,0} \cos(\omega t) \sin \delta, \\
 S_{12}(t) &= S'_{12,0} \sin(\omega t) + S''_{12,0} \cos(\omega t), \\
 G' &= \frac{S'_{12,0}}{\gamma_0}, \quad G'' = \frac{S''_{12,0}}{\gamma_0}, \\
 S_{12}(t) &= G' \gamma_0 \sin(\omega t) + G'' \gamma_0 \cos(\omega t).
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Von einem linear viskoelastischen Verhalten spricht man, solange die dynamischen Moduln unabhängig von der Deformationsamplitude sind. Wesentliches Kennzeichen der SAOS-Strömung ist, dass die Spannungsantwort $S_{12}(t)$ eine harmonische Funktion mit der Grundfrequenz und die erste Normalspannungsdifferenz eine harmonische Funktion mit dem Doppelten der Grundfrequenz ist. Bei der rheologischen Charakterisierung von Flüssigkeiten mit SAOS prüft man in der Regel bei einer konstanten Frequenz, bis zu welcher Deformationsamplitude die Spannungsantwort der Flüssigkeit als linear viskoelastisch angesehen werden kann. Weiterhin bestimmt man die Frequenzspektren der dynamischen Moduln, den Verlustfaktor und den Betrag der komplexen Viskosität bei einer sehr kleinen, konstanten Deformationsamplitude [52]. Mit zunehmender Deformationsamplitude kann das Fluid in der Spannungsantwort Frequenzanteile mit höheren Vielfachen der Grundfrequenz besitzen. Die oszillierende Scherung in diesem Deformationsbereich wird als LAOS-Strömung bezeichnet. In Abschnitt 5.2 werden zunächst die Ergebnisse der Berechnung von SAOS-Strömungen diskutiert bzw. die Charakterisierung des linear viskoelastischen Bereichs mit dem Vergleich des offenen FENE-Modells und FENE-P und -L vorgenommen.

5.1.1 Linear viskoelastischer Bereich

Die Deformationsabhängigkeit der dynamischen Moduln wird im Folgenden bei unterschiedlichen Frequenzen untersucht. Die Deborah-Zahl wurde zwischen $De = 0.2$ und $De = 20$ variiert. Ziel der Berechnungen ist der direkte Vergleich zwischen den Ergebnissen des offenen Modells und den geschlossenen Modellen FENE-L und -P, um den Einfluss die Schließungsannahmen auf die Fluideigenschaften in oszillierender Scherung zu quantifizieren. Für die Auswertung bzw. Berechnung der dynamischen Moduln ist ein eingeschwungener Zustand der Modellantwort auf die vorgegebene Deformation zu betrachten. Als Anfangskonfiguration der Federhanteln wird der Gleichgewichtszustand gewählt. Der instationäre Anlaufvorgang wird somit zwar berechnet, aber nicht ausgewertet. Für die Bestimmung des Verlustwinkels mit der FFT-Analyse wird angestrebt, eine Spannungsantwort auszuwerten, die sich über mindestens zwei Perioden im eingeschwungenen Zustand erstreckt. Aufgrund der relativ langen Rechenzeiten des offenen Feder-Hantel-Modells werden für den Vergleich des offenen mit den geschlossenen Modellen exemplarisch Rechnungen bei zwei verschiedenen Deborah-Zahlen durchgeführt. Es zeigte sich, dass bei kleiner Deformationsamplitude und Deborah-Zahl $De < 2$ die Auslenkung aus dem Gleichgewichtszustand so gering wird, dass die Ergebnisse des offenen Modells aufgrund der Diskretisierungsfehler nicht mehr als Referenzergebnis gegenüber den geschlossenen Modellen angesehen werden können. In Abbildung 5.1 sind der Speicher- und Verlustmodul als Funktion der Deformation für $b = 40$ bei $De = 2$

und $De = 5$ dargestellt. Der linear viskoelastische Bereich erstreckt sich bei beiden Frequenzen etwa bis zu einer Deformationsamplitude $\gamma_0 \approx 1$. Es zeigt sich, dass die Ergebnisse des FENE-L und -P Modells nur gering voneinander abweichen. Die Abweichungen zwischen dem offenen und geschlossenen Modell sind auf die bereits angesprochenen Schwierigkeiten der numerischen Lösung der FP-Gleichung bei kleinen Deformationsamplituden zurückzuführen. Die dynamischen Moduln zeigen die gleichen funktionale Abhängigkeit von der Deformationsamplitude. Die elastischen Eigenschaften überwiegen die viskosen Eigenschaften bei geringen Deformationen und das Ende des linear viskoelastischen Bereichs äußert sich durch das Ansteigen von G'' . Der Speichermodul fällt für $De = 2$ aus dem Plateau direkt ab, wohingegen bei $De = 5$ ein Maximum durchlaufen wird.

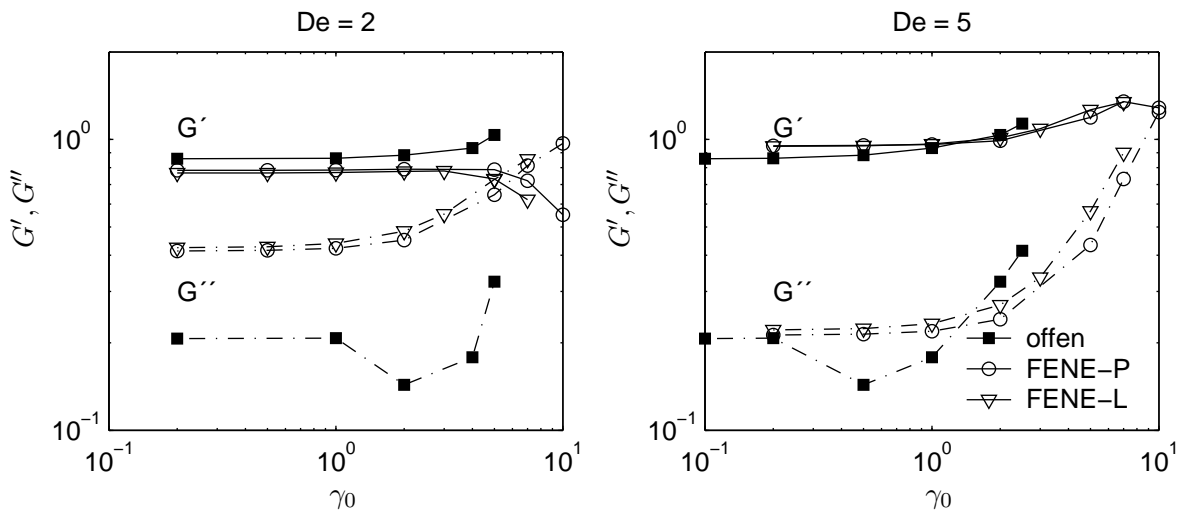


Abbildung 5.1: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, links $De = 2$, rechts $De = 5$, G' —, G'' - . -

In [Abbildung 5.2](#) ist der Verlustfaktor im Vergleich des offenen mit FENE-L und -P dargestellt. Lediglich für $\gamma_0 = 0.2, De = 2$ liefern das offene und die geschlossenen Modelle unterschiedliche Ergebnisse, d.h. das Verhältnis der beiden Moduln zueinander stimmt bei den Modellen trotz der gefundenen Unterschiede für G' und G'' bei $De = 2$ gut überein.

Die [Abbildungen 5.3](#) und [5.4](#) zeigen im Vergleich von FENE-L und FENE-P bei weiteren Frequenzen in der Deformationsabhängigkeit der dynamischen Moduln eine gute Übereinstimmung der geschlossenen Modelle. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die makroskopischen Fluideigenschaften für alle untersuchten Feder-Hantel-Modelle gut miteinander übereinstimmen. Die unterschiedlichen Schließungsannahmen nehmen daher zumindest auf die dynamischen Moduln und den Verlustfaktor keinen entscheidenden Einfluss. Das weitere Hauptaugenmerk wird im Folgenden auf der Diskussion der mikrostrukturellen Eigenschaften liegen. Der Einfluss der Deformationsamplitude auf die mikrostrukturellen Größen (Amplitude und Mittelwert von $\text{tr } \mathbf{A}$ und der Amplitude des eingeschlossenen Winkels der Orientierungsellipse mit der y -Achse φ_y) wird in dem [Kapitel 5.2](#) und für das FENE-L Modell in einer detaillierten Parameterstudie im [Abschnitt 5.3](#) diskutiert. Im Folgenden wird bei konstanter Deformationsamplitude die Frequenzabhängigkeit der Stoffeigenschaften im Modellvergleich diskutiert.

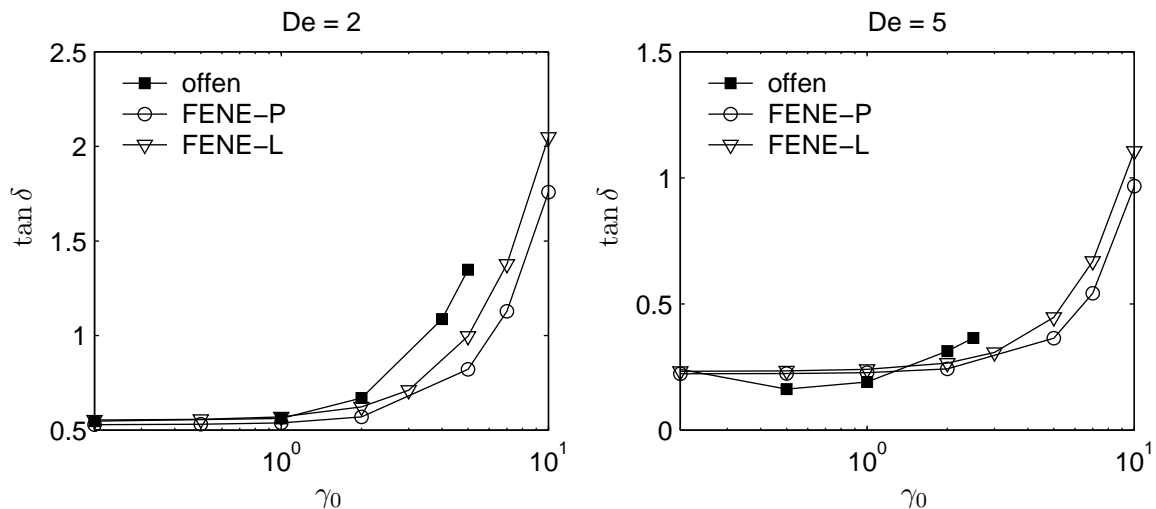


Abbildung 5.2: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, Verlustfaktor für $De = 2$ (links), $De = 5$ (rechts)

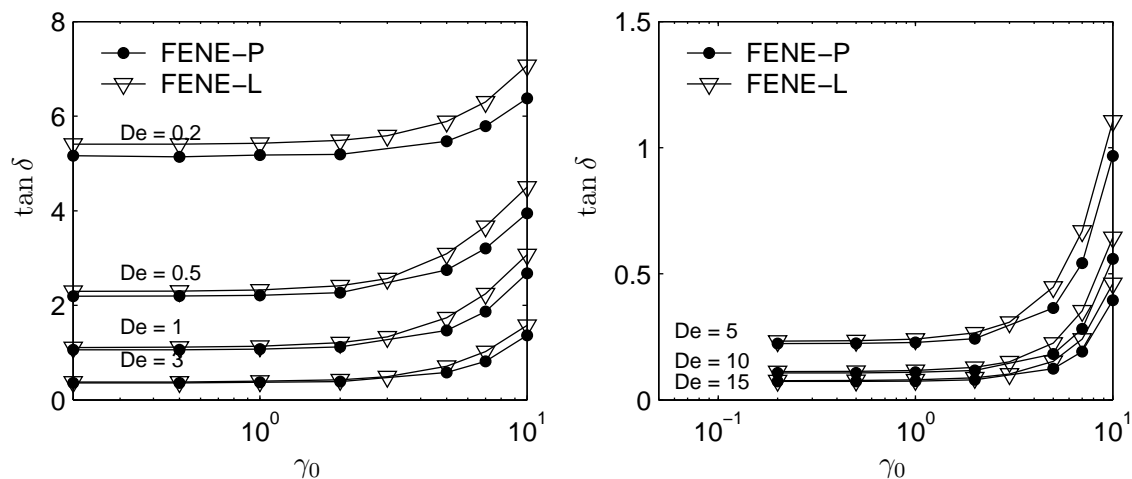


Abbildung 5.3: FENE-L, -P, $b = 40$, Verlustfaktor

5.1.2 Konstante Deformationsamplitude, Variation der Frequenz

Als Ergebnis des vorherigen Abschnittes ist festzuhalten, dass in dem untersuchten Frequenzbereich für eine Deformationsamplitude $\gamma_0 = 0.2$ das Modellverhalten linear viskoelastisch ist. In [Abbildung 5.5](#) ist der Betrag der komplexen Viskosität als Funktion der Frequenz dargestellt. Beide geschlossenen Modelle liefern eine hohe Übereinstimmung zu der Referenzkurve des offenen Modells. Bereits bei der stationären Scherung haben sich nur geringe Unterschiede in der Viskositätskurve für das FENE-L und -P Modell gezeigt. Und auch [Abbildung 5.6](#) zeigt wie bereits in der Deformationsabhängigkeit bei konstanter Frequenz eine sehr gute Übereinstimmung bei der Vorhersage der Frequenzabhängigkeit der charakteristischen makroskopischen Größen der oszillierenden Scherstömung.

In [Abbildung 5.7](#) werden die Amplitude der Spur des Konfigurationstensors und der zeitliche Mittelwert von $\text{tr} \mathbf{A}$ im Vergleich der Modelle dargestellt. Mit „GGW“ ist Spur von \mathbf{A} aus der

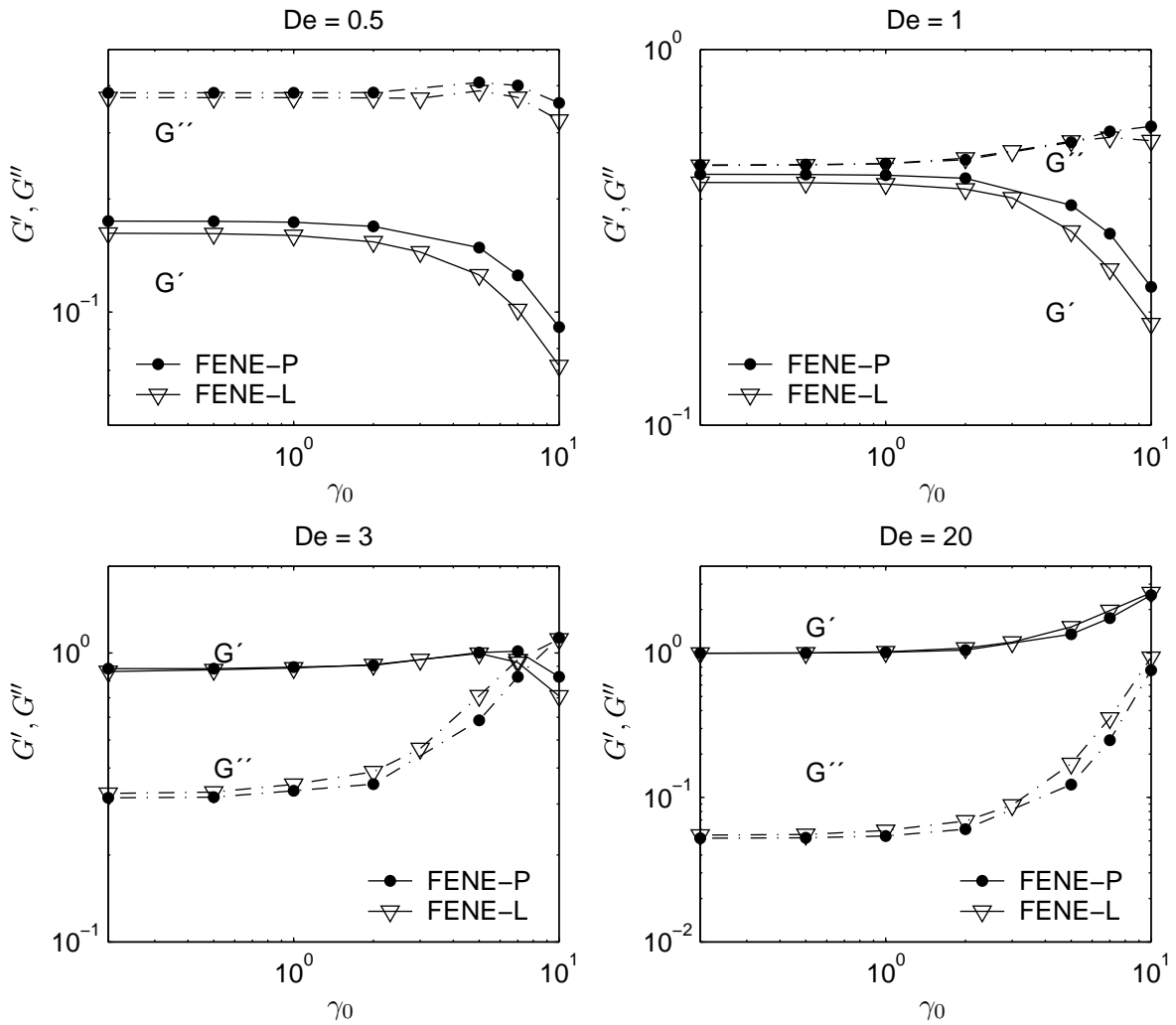


Abbildung 5.4: FENE-L und -P, $b = 40$, dynamische Moduln

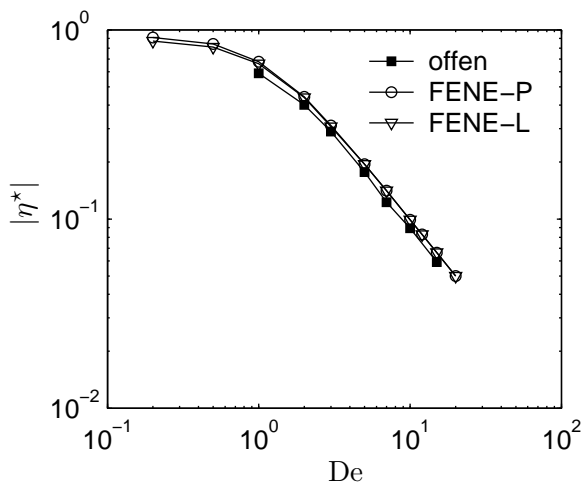


Abbildung 5.5: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $\gamma_0 = 0.2$, Betrag der komplexen Viskosität

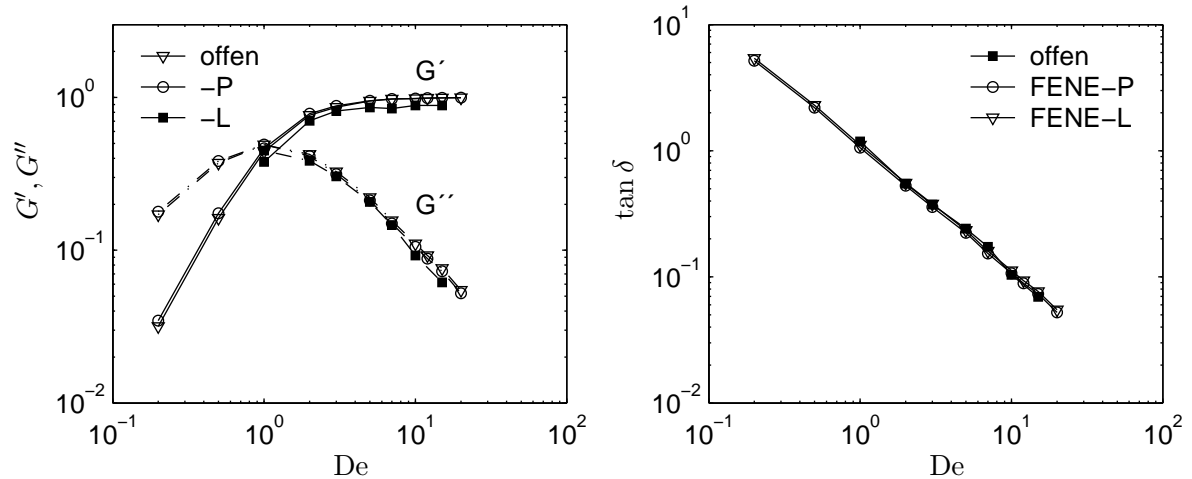


Abbildung 5.6: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $\gamma_0 = 0.2$, Speichermodul G' (—), Verlustmodul G'' (-.) (links) und Verlustfaktor (rechts) als Funktion der Deborah-Zahl

analytischen Lösung des offenen Feder-Hantel-Modells im Ruhezustand des Fluids bezeichnet. Das offene FENE-Modell besitzt in der oszillierenden Scherung mit kleiner Amplitude eine im Vergleich zur Gleichgewichtslänge geringere mittlere Federlänge, d.h. die Federn werden gegenüber dem kräftefreien Gleichgewichtszustand im unausgelenkten Zustand $\varphi_y = 0$ durch die Scherung zusammengedrückt. Die beiden geschlossenen Modelle überschätzen die mittlere Federlänge. Trotz der unterschiedlichen zeitlichen Mittelwerte liegen die Amplituden von $\text{tr } \mathbf{A}$ insbesondere für $De > 2$ für die verschiedenen Modelle eng beieinander. Die Gleichgewichtswerte $\text{tr } \mathbf{A}$ im Ruhezustand der einzelnen Modelle ergeben sich zu:

$$\text{FENE} : \text{tr } \mathbf{A}_{\text{eq}} = 2.629, \quad \text{FENE} - \text{L} : \text{tr } \mathbf{A}_{\text{eq}} = 2.635, \quad \text{FENE} - \text{P} : \text{tr } \mathbf{A}_{\text{eq}} = 2.79. \quad (5.5)$$

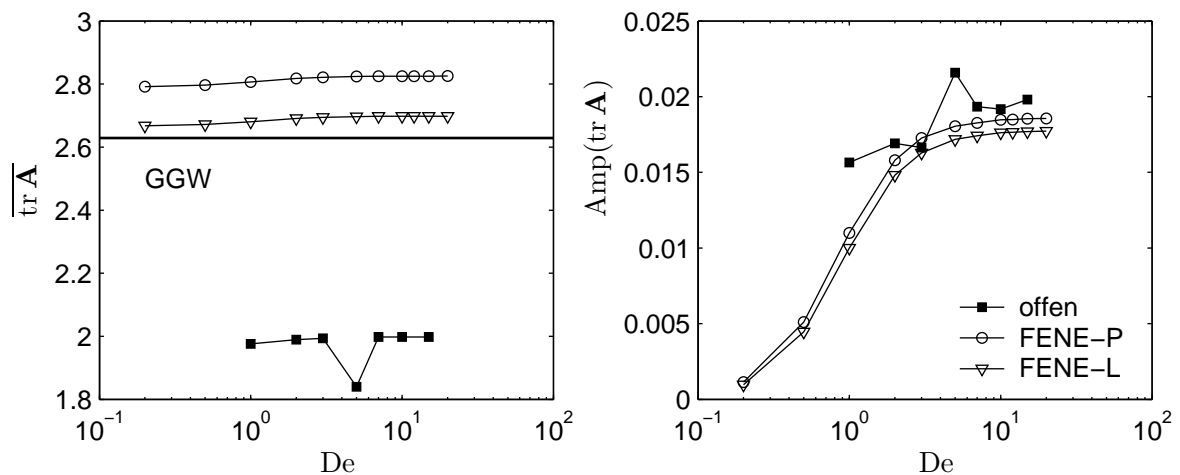


Abbildung 5.7: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $De=0.2$, Mittelwert (links) und Amplitude (rechts) von $\text{tr } \mathbf{A}$

5.2 LAOS: Scherung mit großer Deformationsamplitude

Die bei großen Deformationsamplituden auftretenden höheren Frequenzanteile sind in der Schubspannungsantwort ungerade Vielfache der Grundfrequenz und die Frequenzanteile in der Normalspannungsdifferenz gerade Vielfache der Grundfrequenz [6, 8]. Da die Richtung der Auslenkung keine Auswirkung auf die Länge der Federhanteln hat, schwingt $\text{tr } \mathbf{A}$ als charakteristische Größe der Federlänge ebenfalls mit geradzahligem Vielfachen der Grundfrequenz.

$$\begin{aligned} \gamma(t) &= \gamma_0 \sin(\omega_1 t), & S_{12}(t) &= \sum_{n=0}^N S_{12,2n+1} \sin((2n+1)\omega_1 t + \delta_{2n+1}), \\ N_1(t) &= \sum_{n=1}^N N_{1,2n} \sin(2n\omega_1 t + \delta_{2n}), & \text{tr } \mathbf{A}(t) &= \sum_{n=1}^N \text{tr } \mathbf{A}_{2n} \sin(2n\omega_1 t + \delta_{2n}). \end{aligned} \quad (5.6)$$

$S_{12,2n+1}$, $N_{1,2n}$ und $\text{tr } \mathbf{A}_{2n}$ bezeichnen die Amplituden der harmonischen Antwortfunktionen. In der LAOS-Strömung werden dann die beiden freien Parameter (Amplitude und Frequenz) der Deformation variiert. Für die Analyse der Spannungsantwort besteht die Möglichkeit, sogenannte Lissajous-Kurven auszuwerten. Die Spannung wird als Funktion der Deformation dargestellt, und es entstehen elliptische bzw. schlaufenartige Hysterese-Kurven [53]. In dieser Arbeit wird die Frequenzanalyse mit einer Fast-Fourier-Transformation (FFT-Analyse, [54, 55]) bevorzugt. Aus experimenteller Sicht bietet die Fourier-Analyse gegenüber den Lissajous-Kurven den Vorteil, dass die unphysikalischen „Rauschanteile“ des Frequenzspektrums besser identifiziert werden können. Die Verlustwinkel können mit der FFT-Analyse ebenfalls bestimmt werden. Bei Auftreten höherer Frequenzanteile verlieren die dynamischen Moduln an physikalischer Bedeutung, werden in der Literatur teilweise trotzdem auch für große Deformationen diskutiert und können manchmal nach wie vor in Beziehung zu mikroskopischen Strukturänderungen im Fluid gesetzt werden [8].

Im Folgenden wird das Frequenzspektrum der transformierten Spannungsantwort mit der Amplitude des ersten Peaks (für S_{12} bei der Grundfrequenz bzw. für N_1 und $\text{tr } \mathbf{A}$ bei dem Doppelten der Grundfrequenz) normiert. Die Amplituden der Frequenzpeaks werden als Intensität I bezeichnet und der erste Peak des Frequenzspektrums hat somit die Intensität eins. Die Frequenzachse wird mit der Grundfrequenz der vorgegebenen Deformation normiert und somit werden relative Frequenzanteile dargestellt und diskutiert. Ein charakteristisches Ergebnis bzw. das Intensitätsspektrum im Bildbereich der FFT-Transformation ist in den Abbildungen 5.8 und 5.9 dargestellt. Für die Frequenzanalyse wird der instationäre Anlaufvorgang der Fluidantwort nicht betrachtet und nur der eingeschwungene Zustand ausgewertet. Als Maß für die Nichtlinearität der Modelle werden die Intensitäten I_3, I_5 für die Schubspannung und I_4, I_6 für die erste Normalspannungsdifferenz und die Spur des Konfigurationstensors diskutiert. Bei hohen Deborah-Zahlen konnte neben der Grundfrequenz auch ein dritter Frequenzanteil mit sehr geringer Intensität gefunden werden. Als Gesamtmaß der Nichtlinearität werden die Intensitäten der ersten drei höheren Frequenzanteile aufsummiert:

$$\begin{aligned} \Sigma I(S_{12}) &= I_3(S_{12}) + I_5(S_{12}) + I_7(S_{12}), \\ \Sigma I(N_1) &= I_4(N_1) + I_6(N_1) + I_8(N_1), \\ \Sigma I(\text{tr } \mathbf{A}) &= I_4(\text{tr } \mathbf{A}) + I_6(\text{tr } \mathbf{A}) + I_8(\text{tr } \mathbf{A}). \end{aligned} \quad (5.7)$$

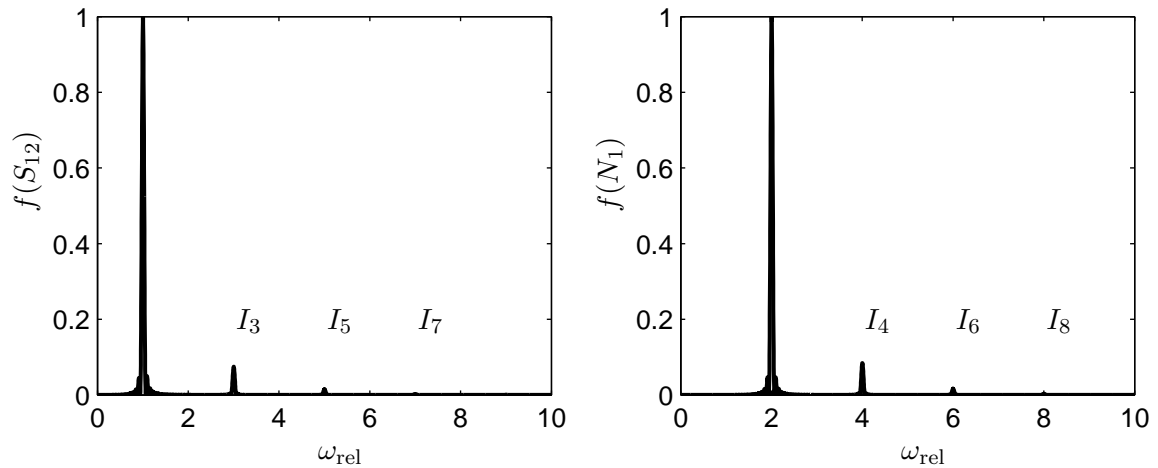


Abbildung 5.8: Frequenzspektrum: FENE-L, $b = 40$, $\omega = 2$ 1/s, $\gamma_0 = 10$

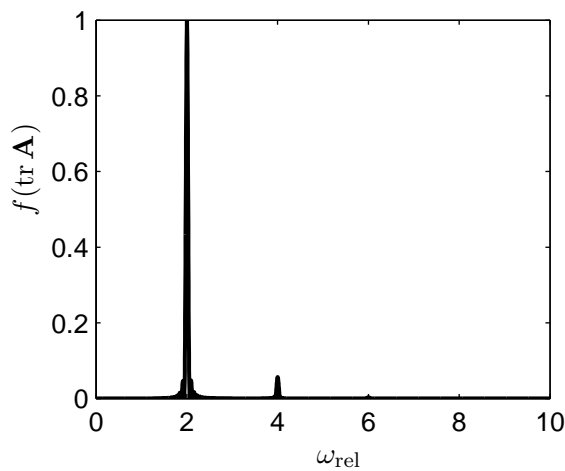


Abbildung 5.9: Frequenzspektrum: FENE-L, $b = 40$, $\omega = 2$ 1/s, $\gamma_0 = 10$

5.2.1 Einfluss der Deformationsamplitude auf die Federlänge

In Abbildung 5.10 dargestellt ist der zeitliche Mittelwert von $\text{tr } \mathbf{A}$ in Abhängigkeit der Deformationsamplitude. Mit zunehmender Deformationsamplitude werden die Federhanteln bei konstanter Frequenz stärker gestreckt, und auch die Amplitude der Oszillation von $\text{tr } \mathbf{A}$ nimmt zu (Abbildung. 5.11). Das FENE-P Modell überschätzt gegenüber dem offenen Modell sowohl die mittlere Länge als auch die Amplitude stärker als das FENE-L Modell.

5.2.2 Einfluss von Amplitude und De-Zahl auf die Konfiguration

Die beiden physikalischen Größen zur Charakterisierung der Federhantelkonfiguration sind der zeitliche Mittelwert der Spur des Konfigurationstensors ($\overline{\text{tr } \mathbf{A}}$) und die Amplitude des Schwingungsanteils mit dem doppelten der Grundfrequenz ($\text{Amp}(\text{tr } \mathbf{A})$). Miteinander verglichen werden die Berechnungsergebnisse des offenen und der geschlossenen Modelle bei konstanter Deborah-Zahl ($\text{De}=2$, $\text{De}=5$) bei Variation der Deformationsamplitude und bei den Deformationsamplituden $\gamma_0 = 1$ und $\gamma_0 = 2$ und Variation der Deborah-Zahl. Die Darstellung in den Abbildungen 5.12 und 5.13 zeigt, dass mit zunehmender Deborah-Zahl ein

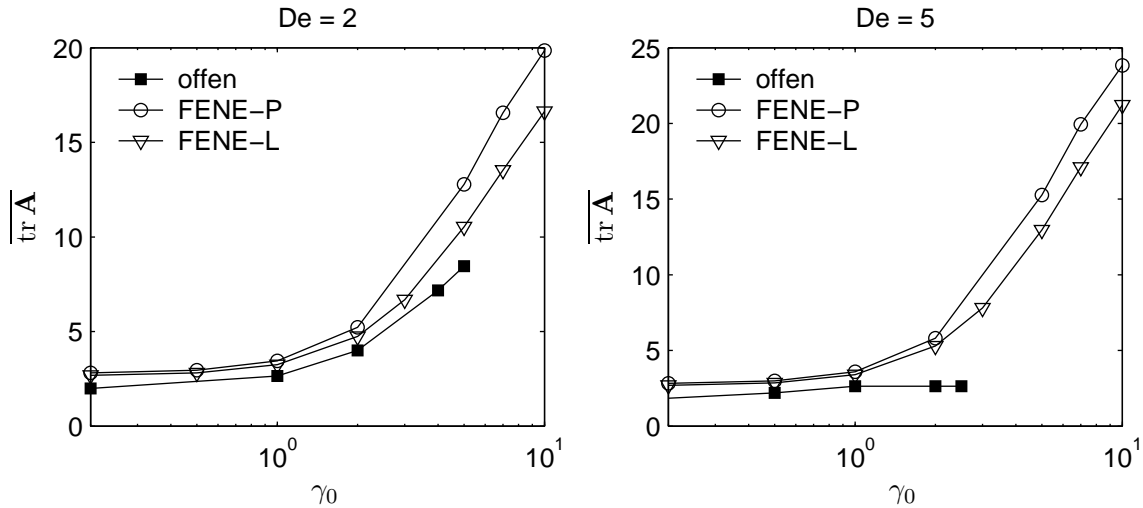


Abbildung 5.10: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, zeitlicher Mittelwert $\text{tr} \mathbf{A}$ für $De = 2$ (links), $De = 5$ (rechts)

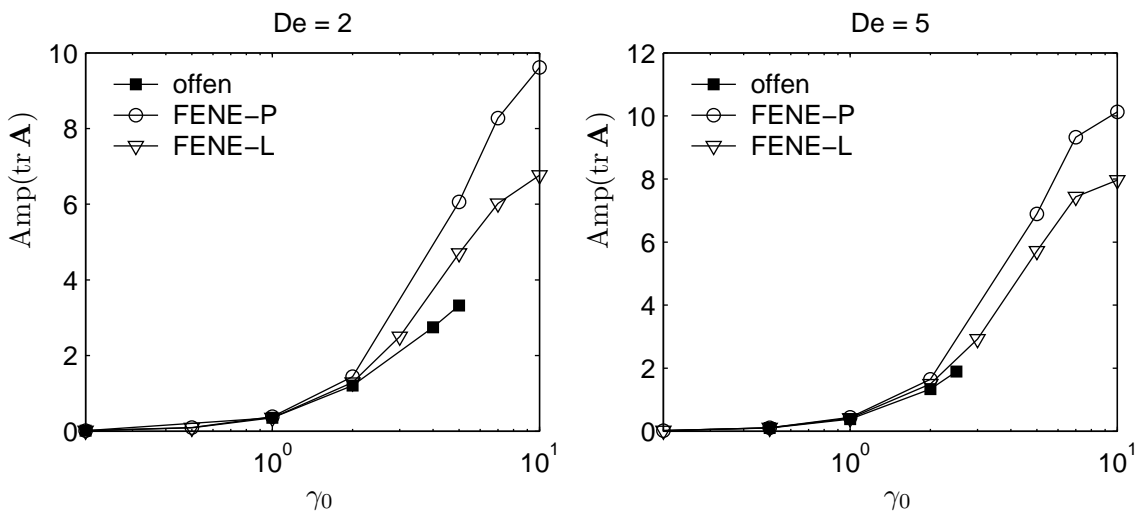


Abbildung 5.11: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, Amplitude $\text{Amp}(\text{tr} \mathbf{A})$ für $De = 2$ (links), $De = 5$ (rechts)

Maximum bzw. Grenzwert in der Amplitude bzw. dem Mittelwert von $\text{tr} \mathbf{A}$ erreicht wird. Die mit zunehmender Deborah-Zahl steigende Schergeschwindigkeitsamplitude bewirkt eine Verlängerung der Federhanteln. Bei hohen Deborah-Zahl ändert das auf die Federhanteln wirkende Scherfeld so schnell die Richtung, dass die Federhanteln aufgrund einer zu langen „Reaktionszeit“ weniger stark aus der Gleichgewichtskonfiguration ausgelenkt werden. Gegenüber der stationären Scherströmung ist die Auslenkung der Federhanteln bzw. $\text{tr} \mathbf{A}$ in der oszillierenden Scherung geringer. Die mittlere Federlänge beträgt für das FENE-L und -P Modell nur 8% der maximal möglichen Federlänge. In der stationären Scherströmung wurde ein Plateau mit einer Federlänge nahe der maximalen Länge bei einer Weissenbergzahl $We = 100$.

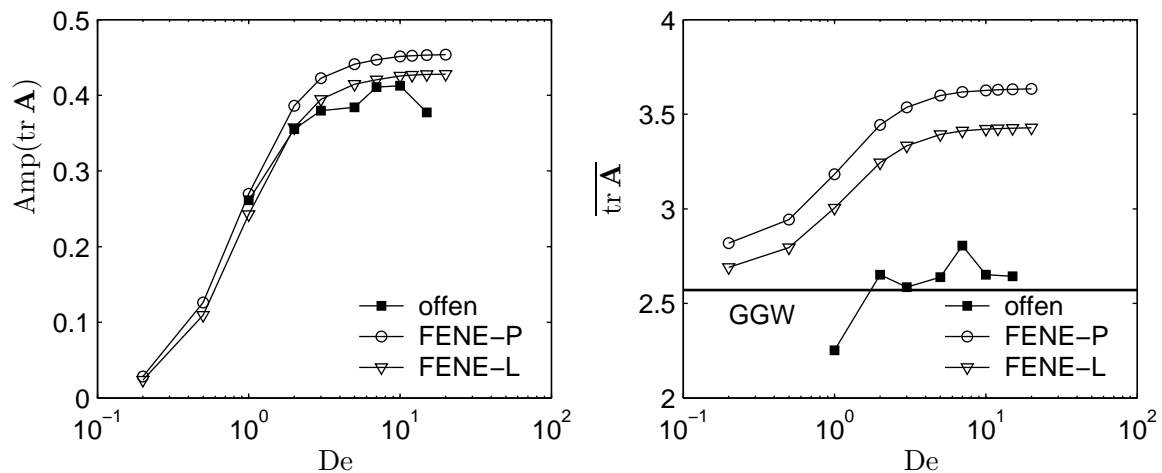


Abbildung 5.12: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $\gamma_0 = 1$, Amplitude (links) und Mittelwert (rechts) von $\text{tr } \mathbf{A}$

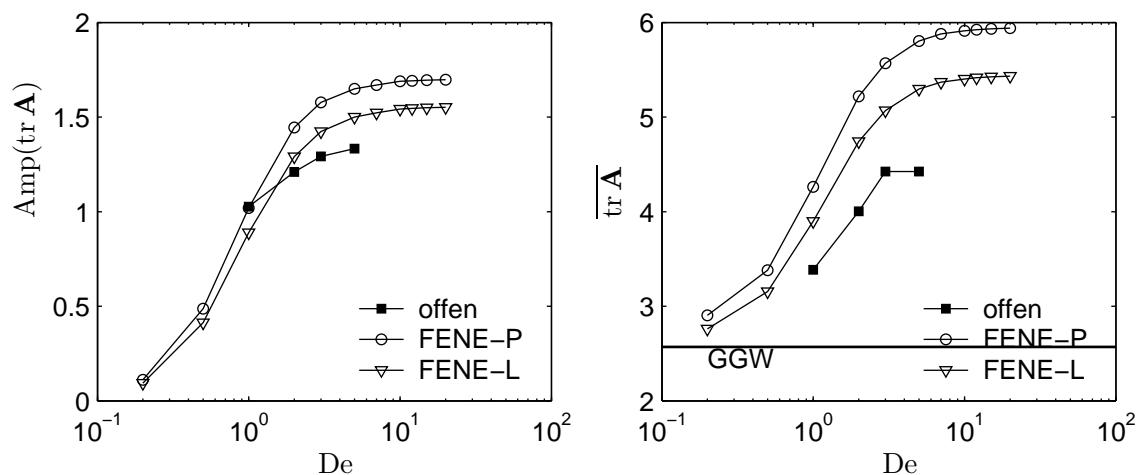


Abbildung 5.13: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $\gamma_0 = 2$, Amplitude (links) und Mittelwert (rechts) von $\text{tr } \mathbf{A}$

5.2.3 Zeitliche Änderung der Konfiguration

Die zeitliche Änderung der Federhantelkonfiguration wird anschaulich darstellbar, durch die Berechnung der Orientierungsellipsoiden/- ellipsen. Berechnet wurde der vollständig dreidimensionale Konfigurationsraum der Federhanteln. In der Darstellung der folgenden Ergebnisse wird auf die Auswertung der dritten Dimension verzichtet. Die Eigenvektoren skaliert mit den zugehörigen Eigenvektoren spannen in der Ebene eine Ellipse als Konfigurationsraum auf. Die Länge der größeren Ellipsenhauptachse wird mit l_a bezeichnet, die kürzere, dazu senkrechte, mit l_b . Der eingeschlossene Winkel der längeren Ellipsenachse mit der y -Achse wird mit φ_y benannt. In [Abbildung 5.14](#) ist der zeitliche Verlauf dieses Winkels und das Verhältnis der Längen l_a/l_b dargestellt. Die Zeit t wurde für einen direkten Vergleich der Berechnungsergebnisse bei unterschiedlichen Frequenzen mit der jeweiligen Frequenz multipliziert. Die Hauptachsenrichtung der stationären Scherströmung liegt bei einem Winkel

$\varphi_y = 45^\circ$. Bei niedrigen Deborah-Zahlen $De < 2$ durchläuft die zeitliche Änderung des Orientierungswinkels ein Maximum, welches mit zunehmender Deborah-Zahl geringer wird. Dieses Maximum korrespondiert nicht direkt mit dem Maximum des Längenverhältnisses der Hauptachsen, sondern ist phasenverschoben. Die Federhanteln erreichen den Zustand maximaler Länge daher nach einem Überschwingen im Orientierungswinkel. Für $De > 5$ fallen die Kurven $\varphi_y(t)$ bei konstanter Deformationsamplitude zusammen, d.h. die Winkeländerungsgeschwindigkeit der Orientierungseellipse ändert sich direkt proportional mit der Frequenz. Die zeitliche Änderung der Form der Orientierungseellipse erfolgt ausgehend vom Gleichgewichtszustand zunächst durch die Verkürzung der längeren Hauptachse l_a und Vergrößerung von l_b , wobei die Orientierungsrichtung der Hauptachse stabil bleibt. Die Orientierungseellipse durchläuft dann den kreisförmigen Gleichgewichtszustand und die Größenverhältnisse der Hauptachsen kehren sich um, so dass φ_y negative Werte annimmt. Die detaillierte Parameterstudie der Verteilungsbreite des Konfigurationszustandes erfolgt anhand des Verhältnisses l_a/l_b im nächsten Abschnitt.

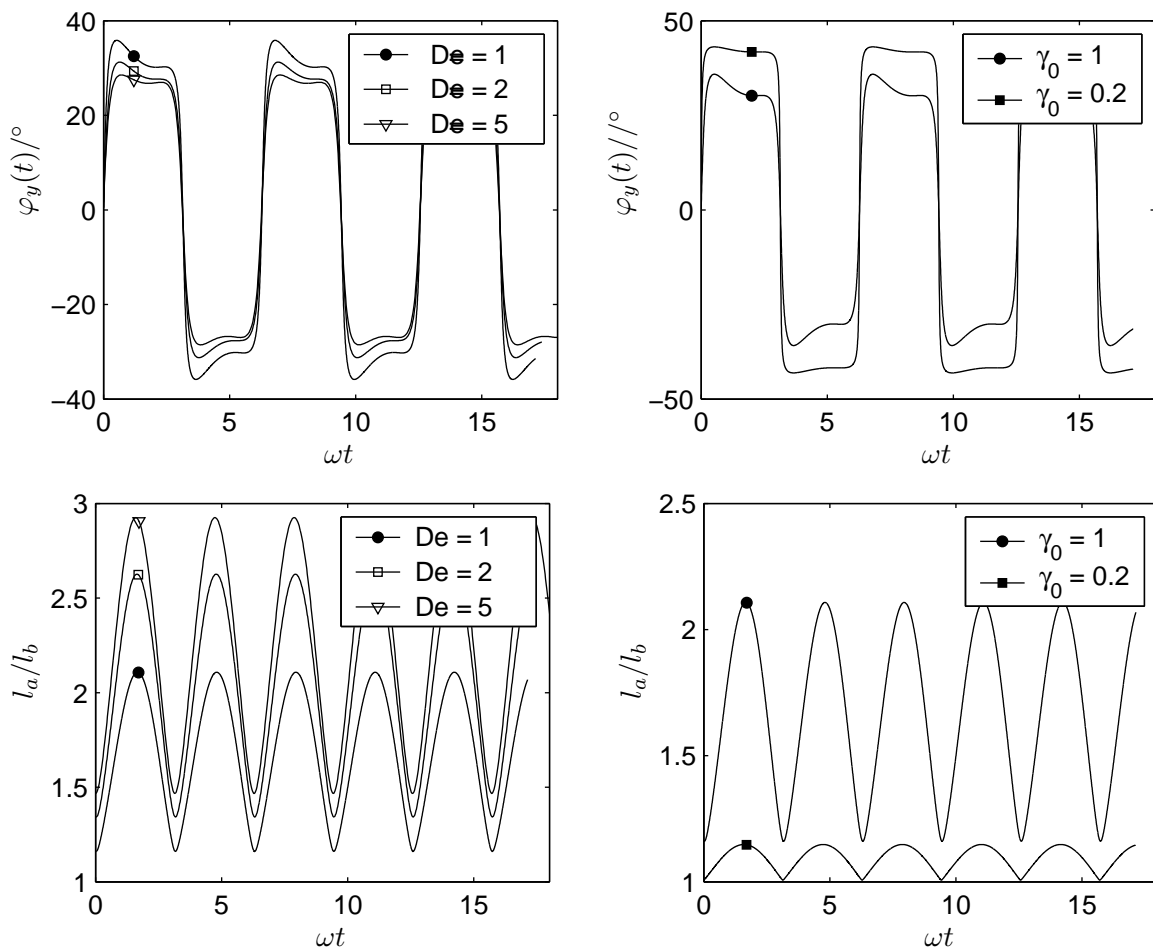


Abbildung 5.14: FENE-L, $b = 40$, links: $\gamma_0 = 1$, rechts $De = 1$

5.3 Parameterstudie: Intensität der Nichtlinearität

Analog zu den vorangegangenen Abschnitten werden die geschlossenen Modelle mit dem offenen FENE-Modell bei ausgewählten Deborah-Zahlen und Deformationsamplituden miteinander verglichen. Es werden die Intensitäten der höheren Frequenzanteile in Abhängigkeit der Deformationsamplitude betrachtet. Für das FENE-L Modell wurde eine ausführliche Parameterstudie durchgeführt und die Ergebnisse werden in dreidimensionalen Darstellungen in Abhängigkeit des zweidimensionalen Parameterfeldes De und γ_0 dargestellt. Eine Diskussion der nichtlinearen Modelleigenschaften bei oszillierender Scherung mit großer Deformationsamplitude ist in der Literatur bisher weder für das offene noch für die geschlossenen Feder-Hantel-Modelle zu finden.

5.3.1 Deformationsabhängigkeit bei konstanter Deborah-Zahl

Aus den Abbildungen 5.15 und 5.16 kann zusammenfassend herausgestellt werden, dass die Intensität der höheren Frequenzanteile durch die geschlossenen Modelle sowohl bei $De = 2$ als auch bei $De = 5$ über den ganzen Bereich der variierten Deformationsamplituden sehr gut das Intensitätsspektrum des offenen Feder-Hantel-Modells abbildet.

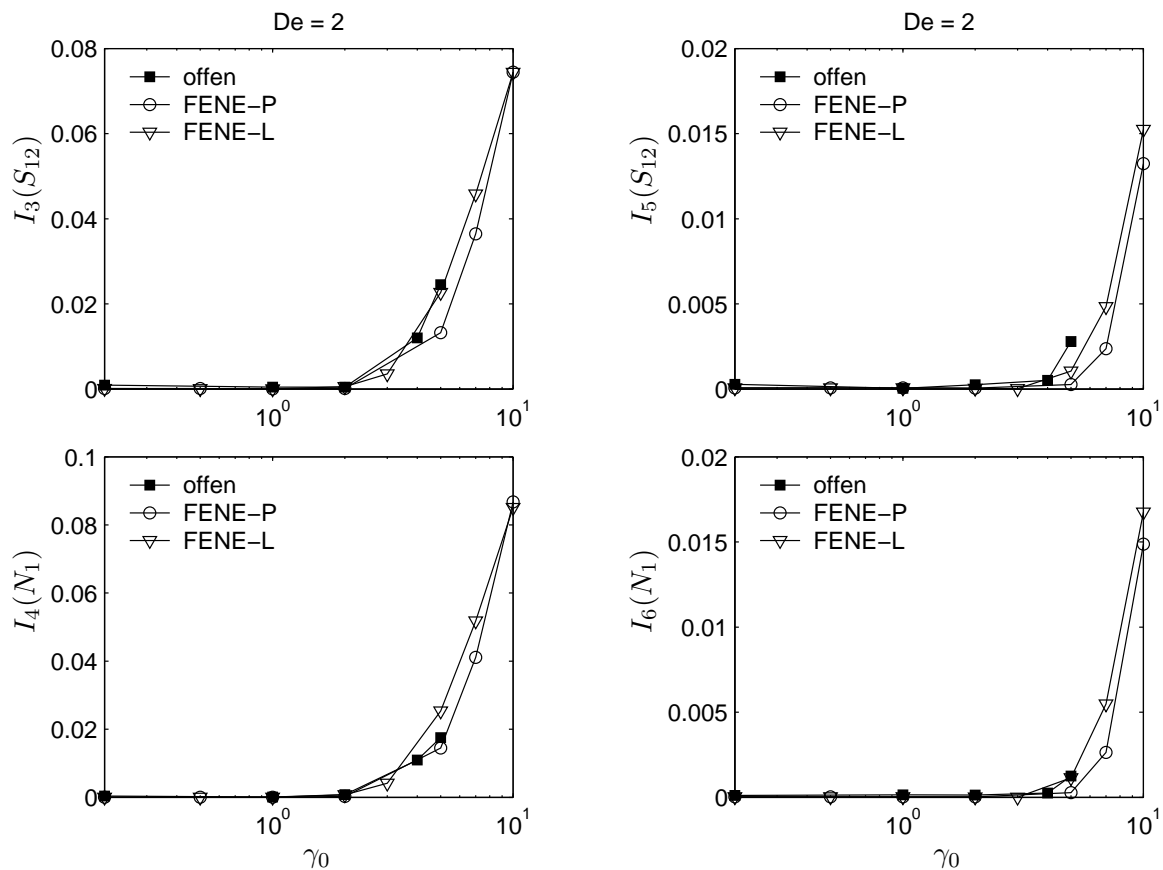


Abbildung 5.15: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $De = 2$, Intensitäten $I_3(S_{12})$, $I_5(S_{12})$, $I_4(N_1)$ und $I_6(N_1)$

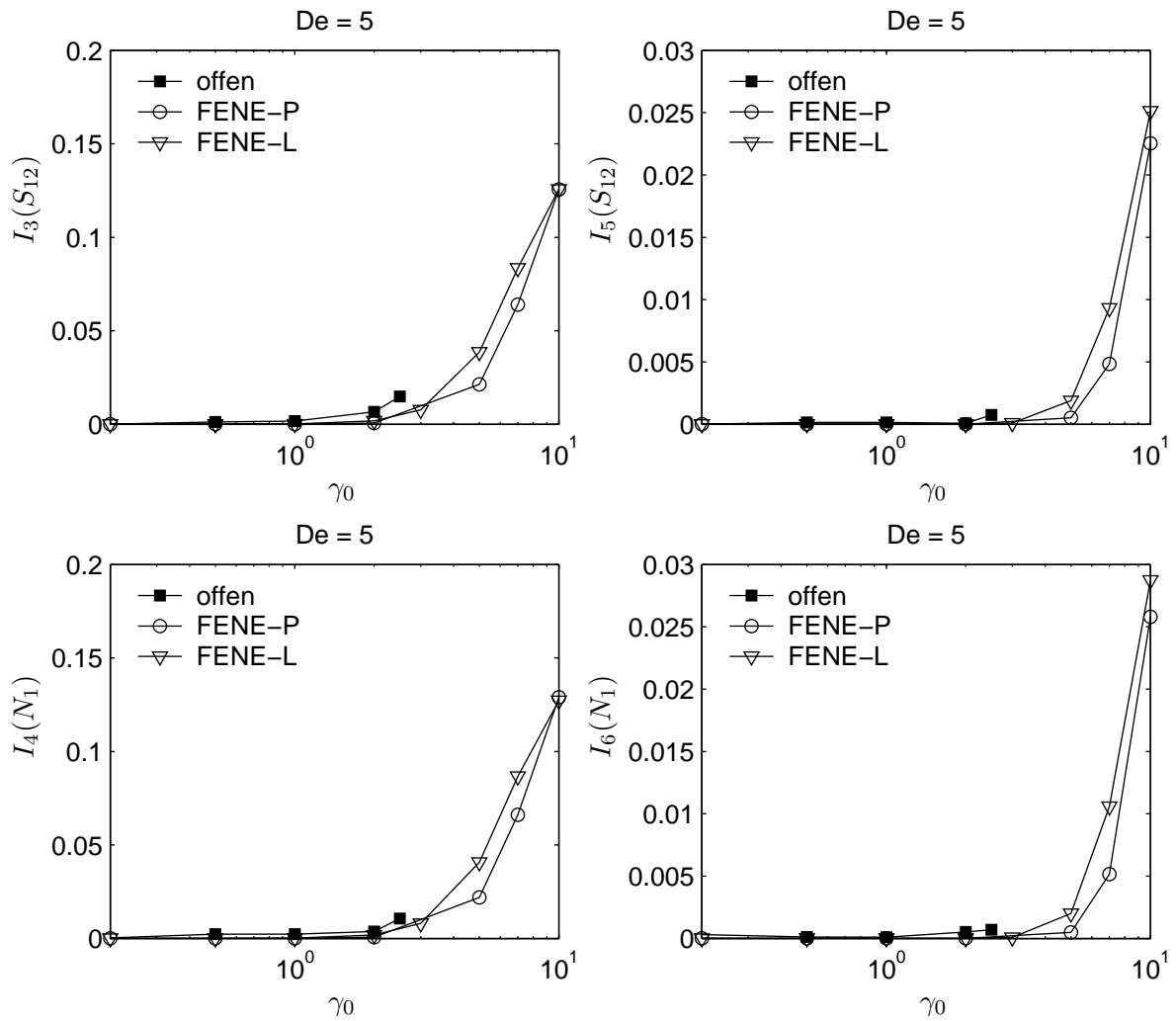


Abbildung 5.16: Modellvergleich: $b = 40$, „offen“, FENE-L und -P, $\omega = 5$ 1/s, Intensität $I_3(S_{12})$, $I_5(S_{12})$, $I_4(N_1)$ und $I_6(N_1)$

5.3.2 Parameterstudie FENE-L

In den vorherigen Abschnitten konnte gezeigt werden, dass das FENE-L Modell in den makroskopischen Größen und auch in den nichtlinearen Eigenschaften bzw. den Intensitäten der höheren Frequenzanteile das durch das offene FENE-Modell erfasste Fluidverhalten abbildet. Aufgrund der geringeren Rechenzeit wurde eine ausgedehnte Parameterstudie daher mit dem FENE-L Modell vorgenommen. Variiert wurde die Deformationsamplitude und Deborah-Zahl in einem netzartigen Parameterfeld. Signifikante Abweichungen zum offenen FENE-Modell sind lediglich bei der mittleren Federlänge und der Amplitude $\text{tr } \mathbf{A}$ zu erwarten. Vorgestellt werden die Ergebnisse für $b = 40$ und $b = 100$.

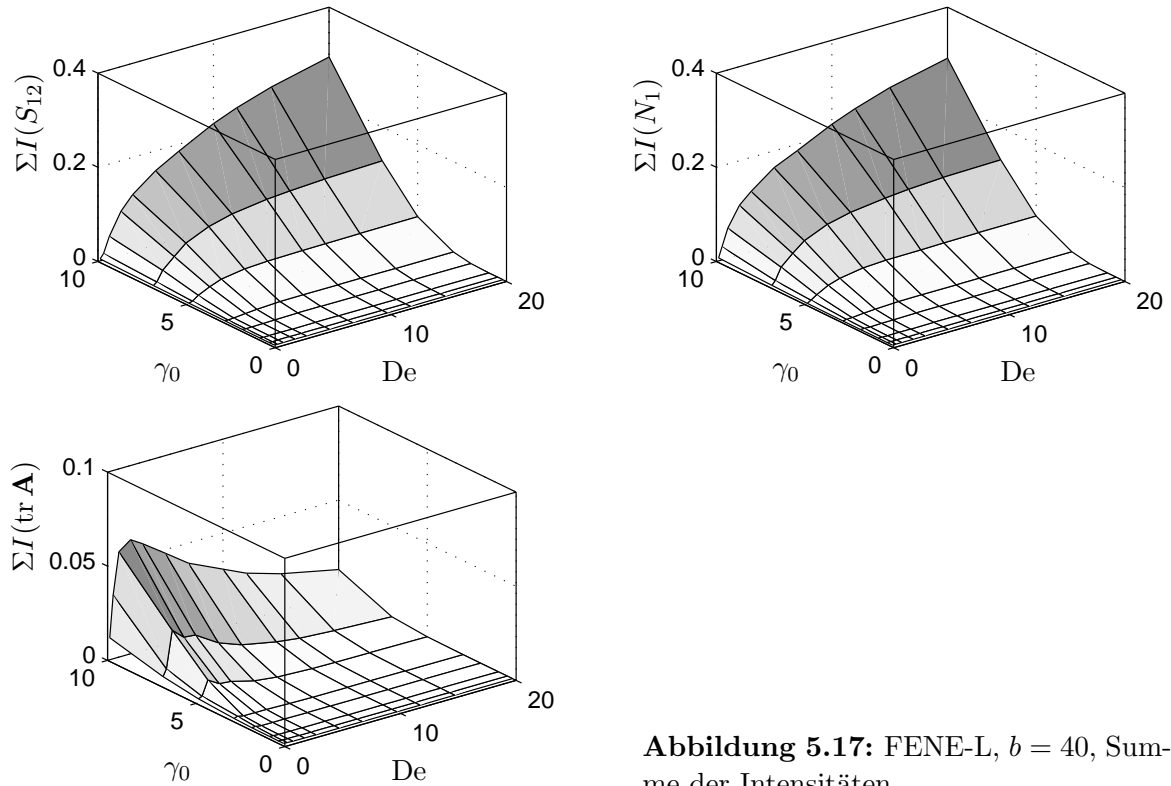


Abbildung 5.17: FENE-L, $b = 40$, Summe der Intensitäten

Die Summe der Intensitäten der höheren Frequenzanteile (Abbildung 5.17) erreicht für die Schubspannung und die erste Normalspannungsdifferenz für eine Weissenbergzahl von 200 ein Randwert-Maximum von 30% bezogen auf die Intensität des ersten Peaks im Frequenzspektrum. Für $\text{tr } \mathbf{A}$ erreicht die Intensitätskurve das Maximum von 5% jedoch bei großer Deformationsamplitude und gleichzeitig geringer Deborah-Zahl. In Abbildung 5.18 sind der Orientierungswinkel φ_y und das in der harmonischen Schwingung der Orientierungsellipse maximal und minimal auftretende Verhältnis von l_a zu l_b dargestellt. Diese beiden Werte sind ein unmittelbares Maß dafür, wie stark der Ellipsoid deformiert wird, bzw. wie breit die Orientierungszustände verteilt sind. Bei konstanter Deformationsamplitude wird mit zunehmender Deborah-Zahl ein Plateauwert erreicht. Ein hoher Ausrichtungsgrad der Federhanteln in der Scherrichtung wird bei kleinen Deborah-Zahlen und beliebiger Deformationsamplitude oder kleiner Deformationsamplitude und beliebigen Deborah-Zahlen erreicht. Eine hohe Schergeschwindigkeitsamplitude verringert den Grad der Ausrichtung der Federhanteln in eine Richtung und diese verharren eher im Gleichgewichtszustand mit einer gleichmäßigen

Verteilung der Hanteln in den verschiedenen Raumrichtungen ($l_a/l_b \rightarrow 1$).

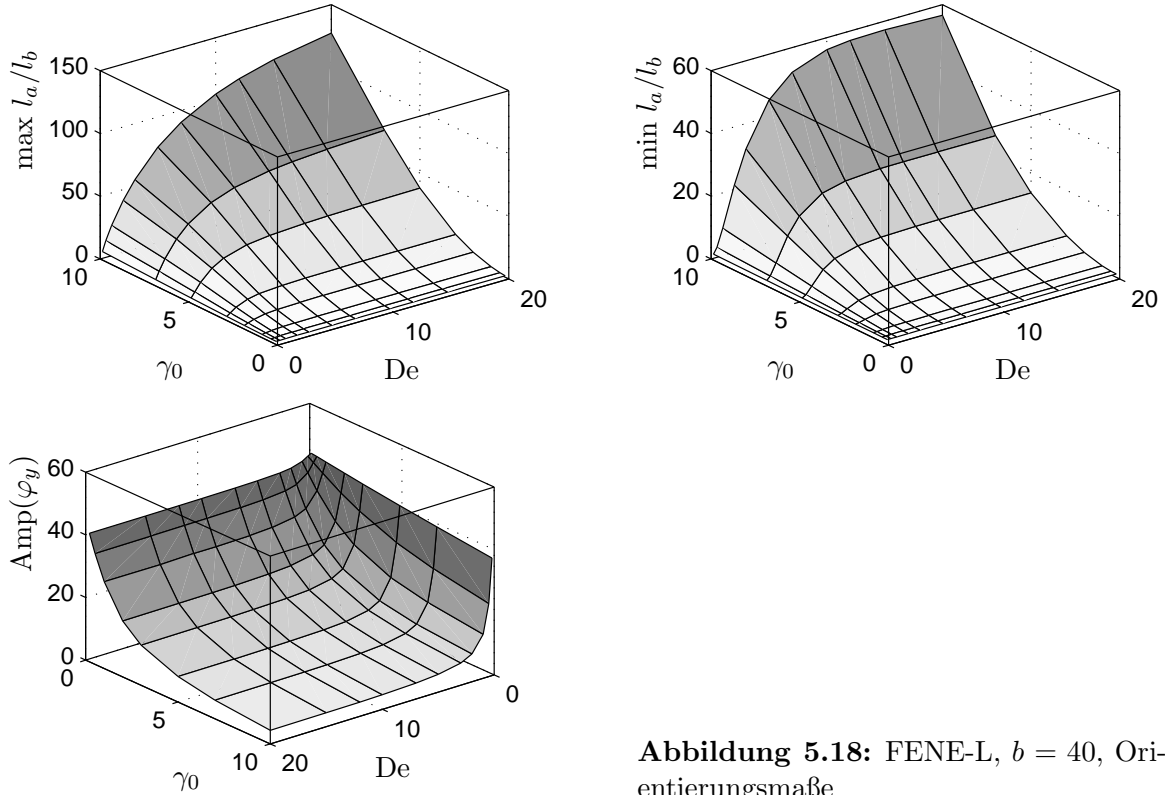


Abbildung 5.18: FENE-L, $b = 40$, Orientierungsmaße

Als charakteristisches Längenmaß für eine relative Längenänderung in der oszillierenden Scherung wird die Amplitude einerseits auf den zeitlichen Mittelwert und andererseits auf b bezogen dargestellt. Ein auf den maximal möglichen Auslenkungszustand b bezogener Wert des zeitlichen Mittelwertes läßt sich entsprechend berechnen:

$$\frac{\overline{\text{tr } \mathbf{A}}}{b} = \frac{\overline{\text{Amp}(\text{tr } \mathbf{A})}}{\overline{\text{tr } \mathbf{A}}}. \quad (5.8)$$

In [Abbildung 5.19](#) erreicht die Amplitude von $\text{tr } \mathbf{A}$ in beiden Normierungen ein von der Weissenbergzahl unabhängiges Plateau. Im rechten Teil der Abbildung zeigt sich, dass die größte Amplitude der Spur des Konfigurationstensors nahezu 30% des maximal möglichen Wertes erreicht, so dass die oszillierende Scherströmung in diesem Bereich stark dehnend auf die Federhanteln wirkt. Die Berechnungen mit einer größeren maximalen Federlänge ($b = 100$) zeigen in den [Abbildungen 5.20, 5.21, 5.22](#), dass die längeren Federhanteln bei gleichen Strömungsparametern weniger stark in eine Richtung orientiert werden. Dieses Verhalten war aufgrund des nichtlinearen Federkraftgesetzes zu erwarten, da kürzere maximale Federlängen bei gleichem Scherfeld zu höheren Federkräften und somit einer geringeren Längenausdehnung führt. Der Einfluss von b auf die relativen Amplituden bzw. Längen der Ellipsenhalbachsen ist nichtlinear.

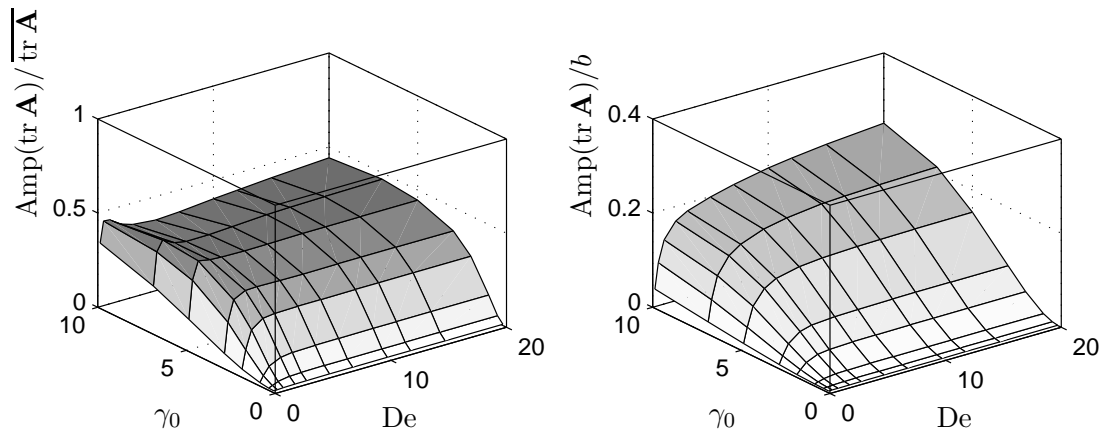


Abbildung 5.19: FENE-L, $b = 40$, Amplitude von $\text{tr } \mathbf{A}$, bezogen auf den zeitlichen Mittelwert (links) und auf das Quadrat der maximalen Länge b (rechts),

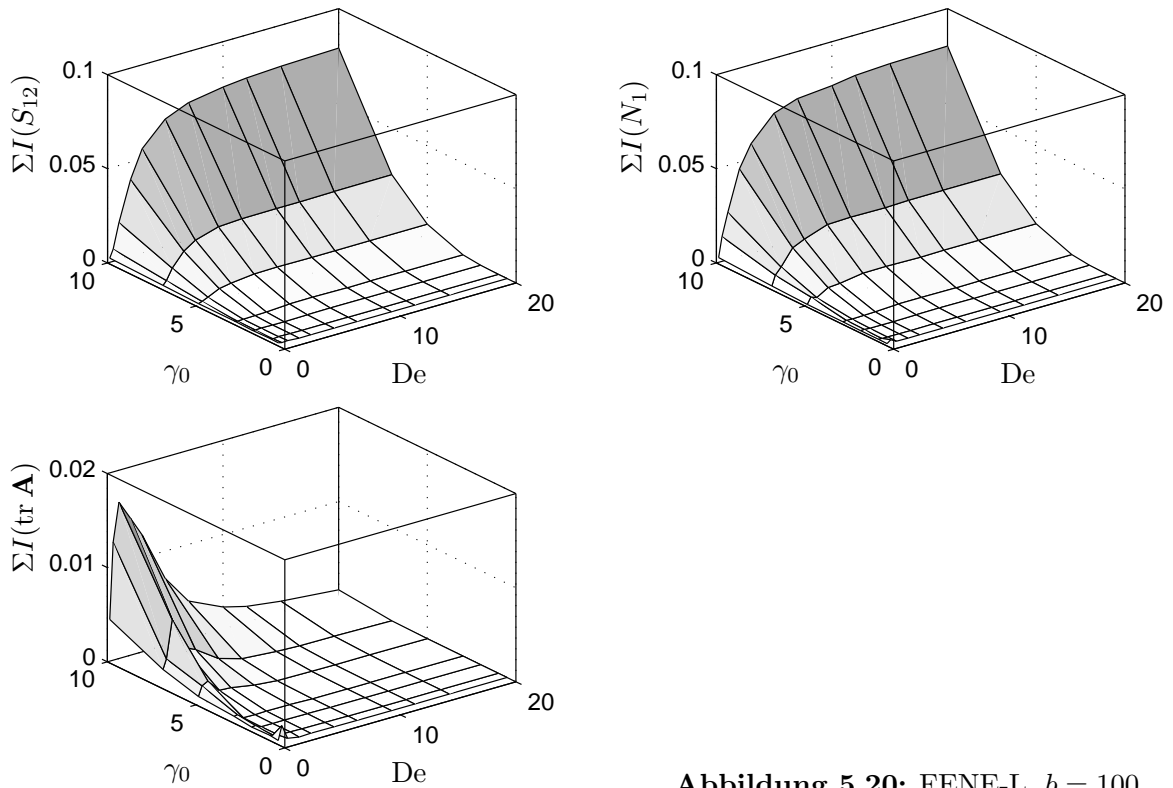


Abbildung 5.20: FENE-L, $b = 100$

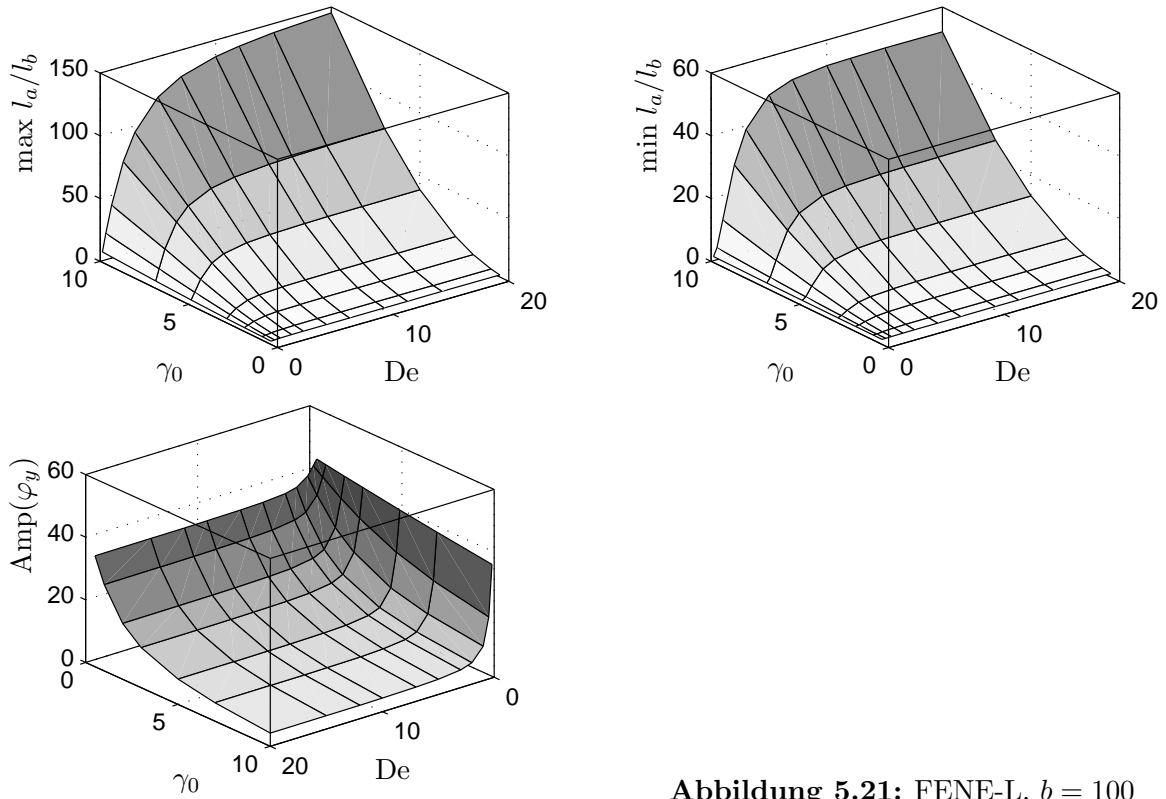


Abbildung 5.21: FENE-L, $b = 100$

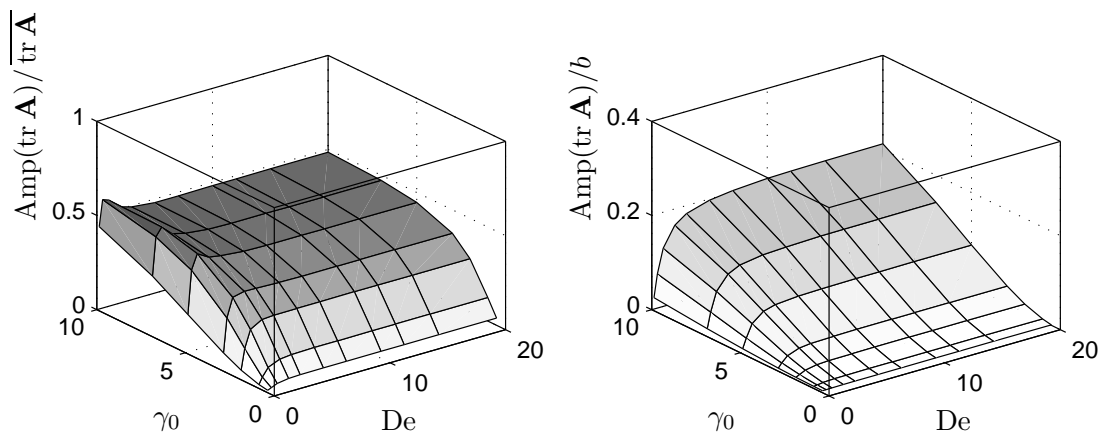


Abbildung 5.22: FENE-L, $b = 100$, Amplitude von $\text{tr } \mathbf{A}$, bezogen auf den zeitlichen Mittelwert (links) und auf das Quadrat der maximalen Länge b (rechts),

5.3.3 Verteilungsfunktion des offenen Feder-Hantel-Modells

Für eine Deborah-Zahl von $De = 2$ und Deformationsamplituden zwischen $\gamma_0 = 1$ und $\gamma_0 = 5$ ist die Verteilungsfunktion des offenen Feder-Hantel-Modells $\psi(r, \varphi)$ in der xy -Ebene in Abbildung 5.23 für den Zeitpunkt mit maximaler Längenausdehnung der Federhanteln dargestellt. Bei geringer Deformationsamplitude $\gamma_0 = 1$ ist die Häufigkeitsverteilung der Federhanteln der des Gleichgewichtszustandes noch ähnlich. Mit zunehmender Deformationsamplitude verbreitert sich die Längenverteilung in r -Richtung und die Verteilung der Orientierungszustände in φ -Richtung wird enger, d.h. mehr Federhanteln werden in die gleiche Raumrichtung orientiert. Für $\gamma_0 = 5$ wird bereits ein Zustand mit lokal hohen Gradienten von ψ erreicht, so dass in der numerischen Lösung örtliche Oszillationen auftreten. Diese Oszillationen sind für zentrale Differenzen typisch bei hohen Weissenbergzahlen. Die zeitliche Änderung von $\psi(r, \varphi)$ ist für $\gamma_0 = 4$ und $De=2$ in Abbildung 5.24 dargestellt. Die Oszillationen am Rand des Konfigurationsraumes treten im zeitlichen Verlauf nur im Zustand maximaler Auslenkung der Federhanteln auf. In den übrigen Konfigurationszuständen ist die numerische Lösung der Verteilungsfunktion eine glatte Funktion. Für $\gamma_0 = 5$ treten die numerischen Instabilitäten bereits bei geringerem Auslenkungsgrad der Federhanteln auf (Abbildung 5.25). Stabile Lösungen konnten in dieser Arbeit nur für Weissenbergzahlen von $We < 15$ erreicht werden. Für die Berechnung höherer Weissenbergzahlen werden gedämpfte Diskretisierungsmethoden höherer Ordnung erforderlich.

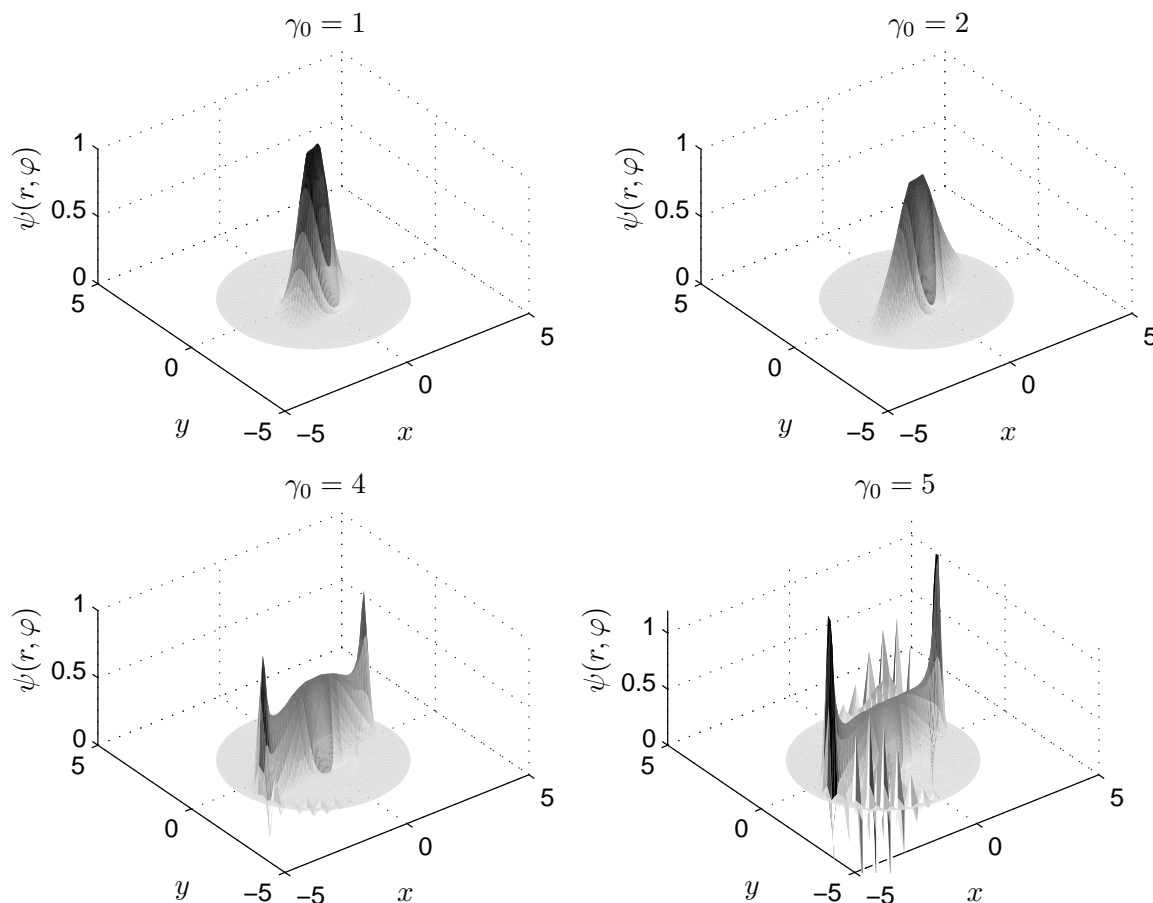


Abbildung 5.23: FENE: $b = 40$, $t=9.8$ s, Verteilungsfunktion bei $\vartheta = \pi/2$, $De = 2$

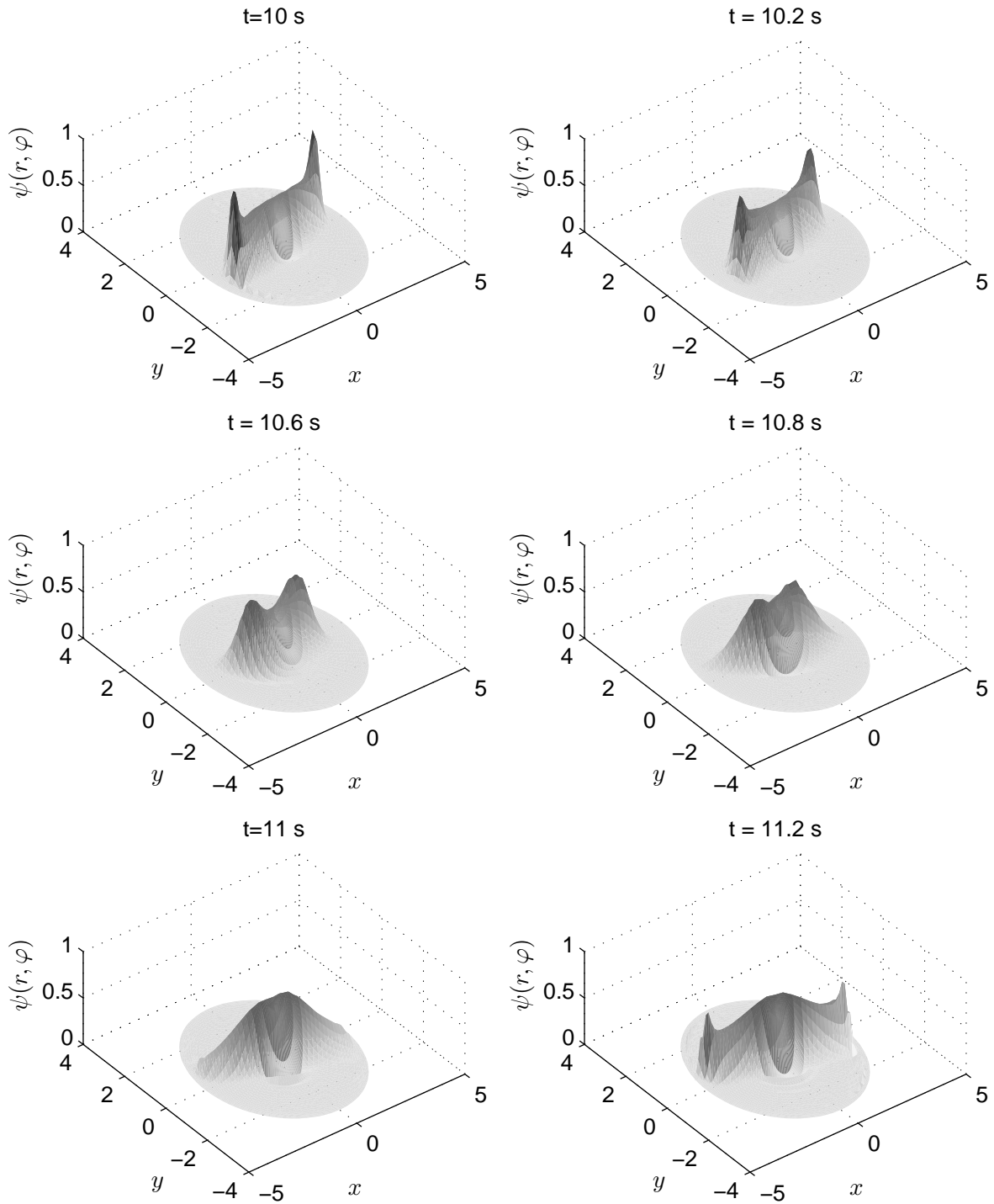


Abbildung 5.24: Offenes FENE-Modell: $b = 40$, $\gamma_0 = 4$, $De = 2$, Verteilungsfunktion bei $\vartheta = \pi/2$

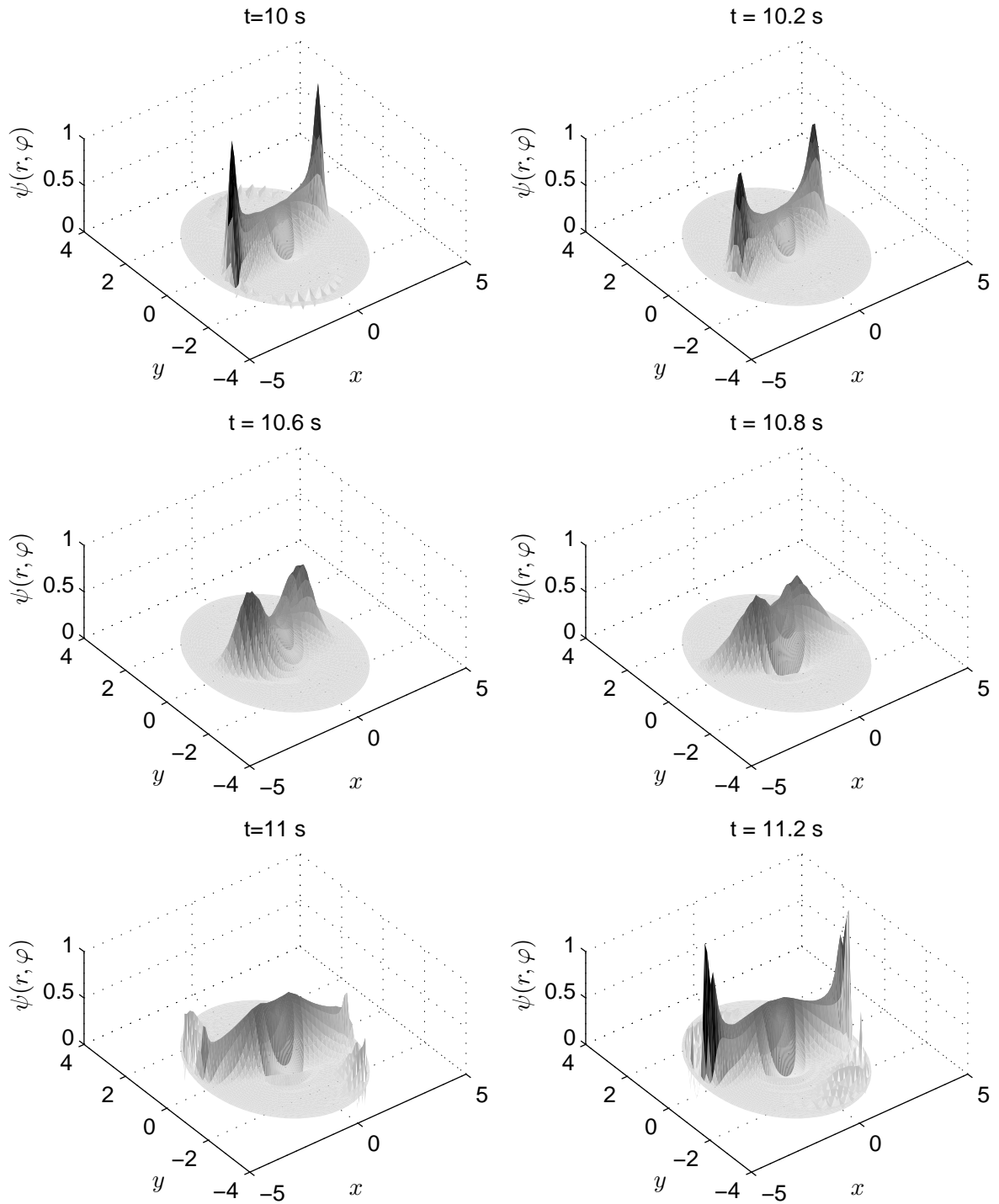


Abbildung 5.25: Offenes FENE-Modell: $b = 40$, $\gamma_0 = 5$, $De = 2$, Verteilungsfunktion bei $\vartheta = \pi/2$

Für den Orientierungszustand mit maximaler Orientierung der Federhanteln in φ -Richtung kann die Verteilungsfunktion $\psi(r)$ mit der Längenverteilung des geschlossenen FENE-L Modells verglichen werden (Abbildung 5.26). Insbesondere mit zunehmender Schergeschwindigkeitsamplitude nähert sich die Form der Längenverteilung der „L“-förmigen Form des Schließungsansatzes an. Die Information über die Häufigkeitsverteilung der Federhanteln in ϑ und φ -Richtung ist im FENE-L Modell mit dem Schließungsansatz verloren gegangen. In den Abbildungen 5.27 und 5.28 ist der Vergleich der Verteilungsfunktionen von FENE-L und dem offenen FENE-Modell dargestellt. Obwohl in den vorangegangenen Abschnitten als Ergebnis festgehalten wurde, dass das FENE-L Modell die mittlere Federlänge bzw. $\text{tr} \mathbf{A}$ gegenüber dem offenen Modell überschätzt, liefert die approximierte Längenverteilungsfunktion geringere Werte für $\psi(r)$. Dass das FENE-L Modell trotzdem größere Werte für $\text{tr} \mathbf{A}$ liefert als das offene Modell ist auf den Informationsverlust durch den Schließungsansatz in den beiden anderen Raumrichtungen (ϑ und φ) zurückzuführen.

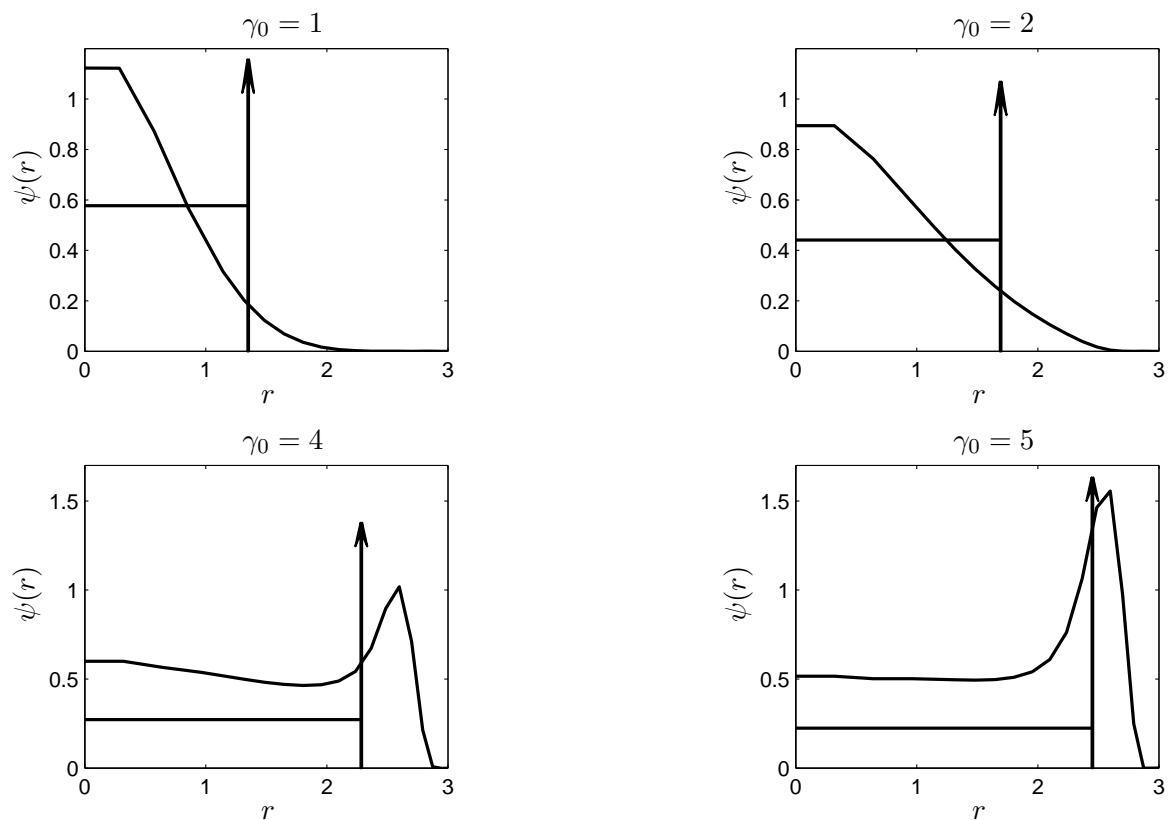


Abbildung 5.26: Offenes FENE und FENE-L: $b = 40$, $t=9.8$ s, Verteilungsfunktion bei maximaler Auslenkung, $\omega = 2$ 1/s

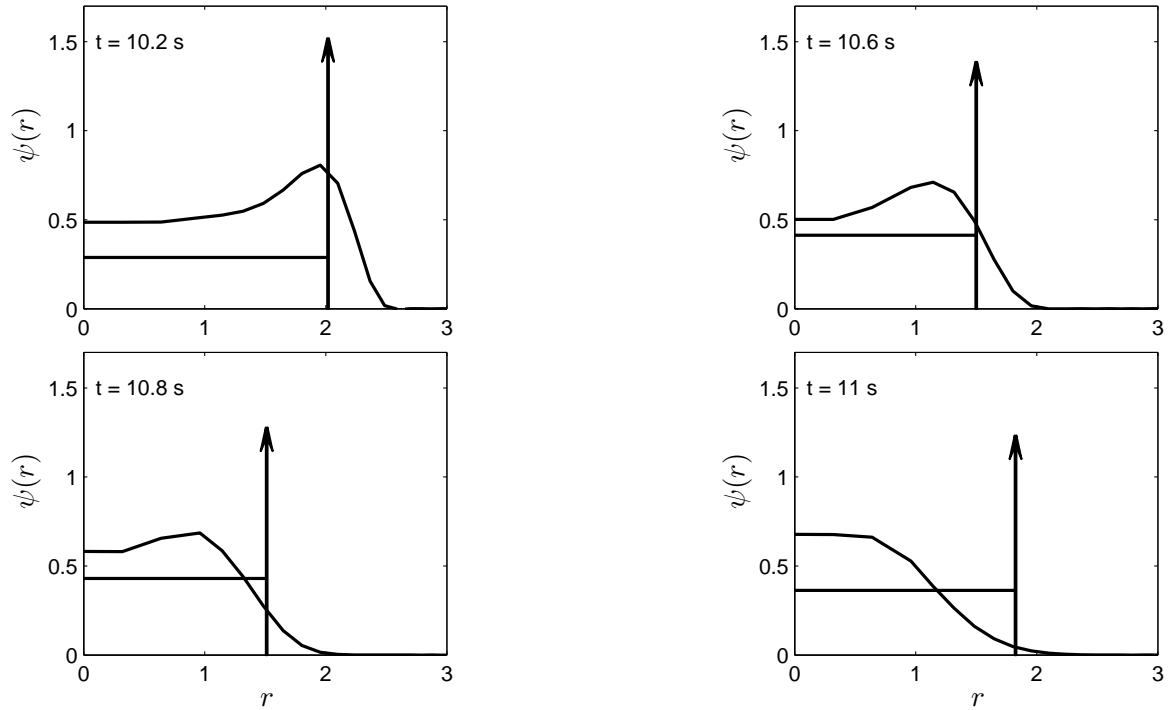


Abbildung 5.27: Offenes FENE und FENE-L: $b = 40$, $\psi(r)$, $\gamma_0 = 4$, $De = 2$

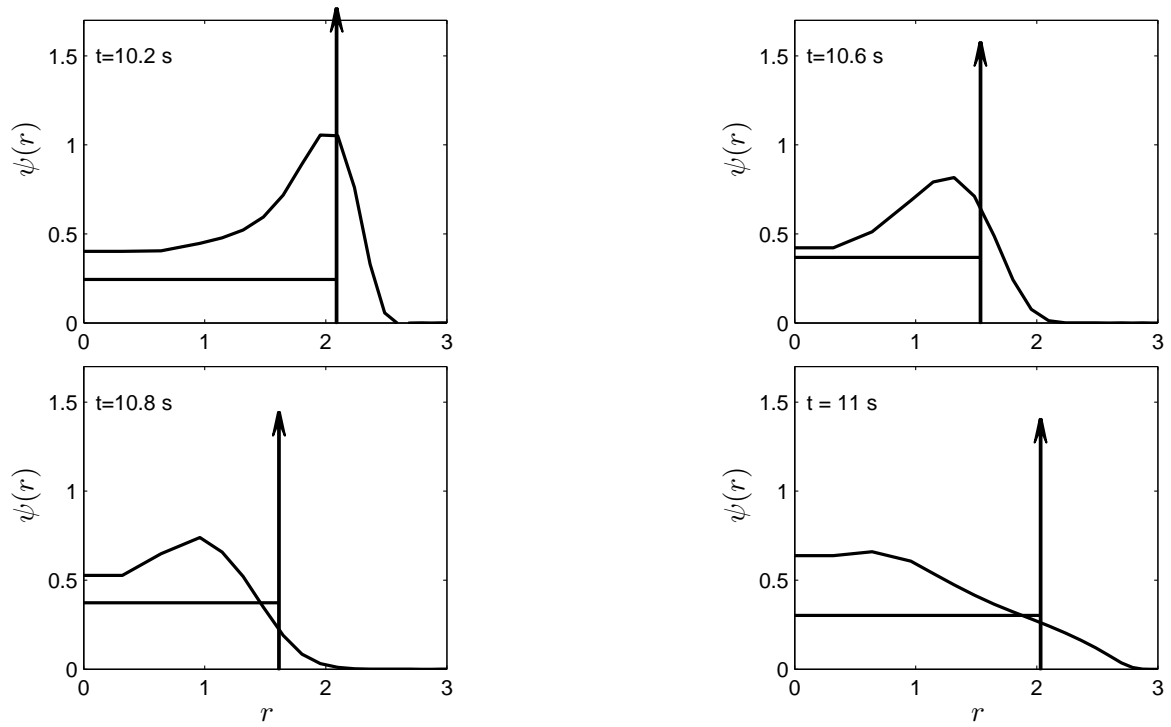


Abbildung 5.28: Offenes FENE und FENE-L: $b = 40$, $\psi(r)$, $\gamma_0 = 5$, $De = 2$

5.4 Zusammenfassung

Es wurde ein detaillierter Modellvergleich des offenen Feder-Hantel-Modells mit dem geschlossenen FENE-L und -P Modell in oszillierender Scherströmung vorgenommen. Die Verwendung einer deterministischen Methode zur Lösung der Fokker-Planck Gleichung ermöglichte aufgrund der hohen Genauigkeit die Bestimmung der Frequenzspektren bzw. der Intensitäten höherer Frequenzanteile auch im Übergangsbereich vom linearviskoelastischen zum nichtlinear viskoelastischen Verhalten der Polymerlösung. Der Vergleich der Modelle miteinander hat gezeigt, dass die Schließungsannahmen das Modellverhalten im Vergleich zum offenen Feder-Hantel-Modell in oszillierender Scherung nicht wesentlich beeinflussen. Die Intensitätsspektren der höheren Frequenzanteile werden gut abgebildet. Lediglich die mittlere Federlänge bzw. auch die charakteristischen Abmessungen des Orientierungsellipsoids werden überschätzt. Das FENE-L Modell liefert größere Übereinstimmungen mit dem offenen FENE-Modell als das FENE-P Modell und ist in der Strömungsberechnung makroskopischer Strömungen zu bevorzugen. Für die strömungsinduzierte Orientierung der Federhanteln zeigte sich auch bei großen Deformationsamplituden eine sehr gute Übereinstimmung der Hauptachsenorientierung des Orientierungsellipsoiden der unterschiedlichen Modelle miteinander. In der LAOS-Strömung wurden neben der Grundfrequenz bis zu drei höhere Frequenzanteile mit signifikanten Amplituden gefunden. Für das FENE-L Modell erreichte die Summe der Intensitäten der höheren Frequenzanteile im diskutierten Parameterfeld für die Spannungen bis zu 30% der Intensität des ersten Frequenzanteils, in der Spur des Konfigurationstensors immerhin noch bis zu maximal 5%. Mit zunehmender Schergeschwindigkeitsamplitude richten sich die Feder-Hanteln in eine bevorzugte Raumrichtung aus, so dass das Längenverhältnis der Ellipsoidhauptachse des Orientierungsraumes größer wird. Gleichzeitig wird die maximale Auslenkung (Amplitude des Winkels zwischen der größeren Ellipsenhauptachse und der y -Achse) geringer. Bezogen auf die mittlere Länge erreicht auch die Amplitude der zeitlichen Längenschwankung der Federhanteln mit zunehmender Schergeschwindigkeitsamplitude ein Plateau. Der implementierte numerische Algorithmus für das offene FENE-Modell hat sich bis zu einer dimensionslosen Schergeschwindigkeitsamplitude (Weissenberg-Zahl) von $We=15$ als sehr stabil erwiesen. Die in der Verteilungsfunktion $\psi(\mathbf{q}, t)$ auftretenden hohen Gradienten führten erst bei noch größeren Weissenbergzahlen zu unphysikalischen Oszillationen.

Abschließend kann festgehalten werden, dass das geschlossene FENE-L Modell eine ausreichend gute Näherung an das offene FENE-Modell darstellt. Aufgrund der Modellgleichungen ist der Rechenaufwand des geschlossenen Modells gegenüber dem offenen FENE-Modell wesentlich geringer und der durch den Schließungsansatz entstehende Informationsverlust nicht gravierend. Insbesondere wenn die räumliche Orientierung in komplexen Strömungsfeldern von Interesse ist, sind die Abweichungen des FENE-L Modells gegenüber dem offenen Modell in der Längenverteilung der Federhanteln vertretbar.

6 Fasersuspensionen

Es gibt keine großen Entdeckungen und Fortschritte, solange es noch ein unglückliches Kind auf Erden gibt.

Albert Einstein

Im Vergleich zu Polymerlösungen ist die experimentelle Bestimmung der Mikrostruktur in strömenden Fasersuspensionen einfacher bzw. weniger aufwändig. Ein noch unerreichtes Ziel ist die numerische Berechnung makroskopischer Strömungen von Fasersuspensionen mit geschlossenen Mikro-Makro-Modellen und experimentell validierten Parametersätzen. Dieses Ziel wurde in der vorliegenden Arbeit verfolgt.

Die Kenntniss des Orientierungszustandes von Fasern in technischen Strömungen bzw. in den Endprodukten verfahrenstechnischer Prozesse wie z. B. Papier oder faserverstärkten Kunststoffen ist von großer Bedeutung, da makroskopische Materialeigenschaften wesentlich von der Mikrostruktur beeinflusst werden. In faserverstärkten Kunststoffen kann die mechanische Zugfestigkeit durch eine in eine Raumrichtung orientierte Faser-Konfiguration erhöht werden. FAN und ADVANI [1] zeigen, dass bereits 0.005 Gew.% „Carbon Nano Tubes“ in einer Epoxy-Verbindung eine elektrische Leitfähigkeit des Materials bewirken oder bereits ein Anteil von 2.5 Gew.% die Zugfestigkeit von Polystyrol um 100% bei entsprechender Konfiguration der Stäbchen vergrößert. Nicht zuletzt aufgrund dieser Eigenschaften ist das Interesse an der Forschung zur Mikrostruktur in dispersen Systemen mit „Carbon Nano Tubes“ oder anderen Fasern in den letzten Jahren ständig gewachsen [56]. Auch im Bereich der theoretischen Modellbildung für Fasersuspensionen existieren zahlreiche Arbeiten für unterschiedliche Konzentrationsbereiche der Suspensionen. Die Eignung von Mikro-Makro Modellen zur Vorhersage der Faserorientierung in technischen Strömungen kann nur im Vergleich mit experimentellen Untersuchungen geprüft und diskutiert werden. Hierfür werden experimentelle Ergebnisse von YASUDA et al. [57] für die Zylinderumströmung einer konzentrierten Glasfasersuspension. Ergänzend werden unterschiedliche Mikro-Makro-Modelle für Fasersuspensionen bei der Durchströmung eines 90°-Krümmers diskutiert und von SEPEHR et al. [58, 59] für viskosimetrische Strömungen bestimmte Parametersätze benutzt. Zunächst werden die Gleichungen der verwendeten geschlossenen Fasermodelle diskutiert.

6.1 Mikro-Makro-Modelle für Fasersuspensionen

Für eine geometrische Charakterisierung von Fasern mit der Faserlänge L und dem Durchmesser D wird der dimensionlose Formfaktor r mit

$$r = \frac{L}{D} \tag{6.1}$$

eingeführt. Der Faservolumenanteil Φ spezifiziert den Faseranteil in der Matrixflüssigkeit. Mit der Faseranzahldichte n kann eine dimensionslose Anzahlkonzentration nL^3 angegeben werden, wobei der Zusammenhang gilt [60]:

$$\Phi = n \frac{\pi D^2}{4} L = \frac{\pi}{4r^2} nL^3. \quad (6.2)$$

In dieser Arbeit wird die Angabe des Faservolumenanteils gegenüber der dimensionslosen Anzahlkonzentration bevorzugt. Für die numerische Berechnung von Fasersuspensionen wird analog zu der Beschreibung der Polymerlösungen eine rheologische Modellgleichung benötigt. JEFFERY hat aus der Bewegungsgleichung einer einzelnen Faser in einem newtonschen Fluid unter Vernachlässigung von Trägheitskräften die zeitliche Änderung des Faserorientierungsvektors \mathbf{q} bestimmt. Die umgebende Matrixflüssigkeit ist newtonsch und der betrachtete Fluidraum unendlich ausgedehnt. Die Ortsabhängigkeit des Geschwindigkeitsfeldes wird als linear angenommen. Im Gegensatz zum Orientierungsvektor von Federhanteln ist der Betrag des Orientierungsvektors für eine Faser oder ein stäbchenförmiges Partikel konstant. Die Bestimmungsgleichung für die zeitliche Änderung des Orientierungsvektors wird als Jefferys-Gleichung bezeichnet [61]:

$$\frac{D\mathbf{q}}{Dt} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{q} + \lambda_F (\mathbf{D} \cdot \mathbf{q} - \mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{q})), \quad (6.3)$$

$$\lambda_F = \frac{r^2 - 1}{r^2 + 1}. \quad (6.4)$$

Die Konstante λ_F beschreibt die Partikel-/Fasergeometrie. Für einen Rotationsellipsoiden wird der Formfaktor aus dem Verhältnis der Symmetrieachsenlänge zur Länge der anderen Achsen berechnet. Somit gilt $\lambda_F = 0$ für ein kugelförmiges Partikel und $\lambda_F \rightarrow 1$ für Fasern mit einem sehr großen Längen zu Durchmesser-Verhältnis ($r \rightarrow \infty$). Die Modellbildung von Fasersuspensionen basiert auf der Jefferys-Gleichung für eine einzelne Faser. Für eine verdünnte Suspension, in der der Faservolumenanteil so gering ist, dass die Fasern gegenseitig keine Wechselwirkungen aufeinander ausüben, kann die Jefferys-Gleichung direkt für die Herleitung einer geschlossenen rheologischen Stoffgleichung verwendet werden. Andernfalls müssen Faser-Faser-Wechselwirkungen berücksichtigt werden. Fasersuspensionen werden zunächst allgemein in unterschiedliche Konzentrationsklassen eingeteilt.

Faser-Konzentrationsregime Üblich ist eine Einteilung von Fasersuspensionen in die Klassen verdünnt, halbverdünnt und konzentriert in Abhängigkeit des Faservolumenanteils und Formfaktors [60].

$$\Phi \ll \frac{1}{r^2} \quad (\text{verdünnt}), \quad (6.5)$$

$$\frac{1}{r^2} \ll \Phi \ll \frac{1}{r} \quad (\text{halbverdünnt, Fasern zufällig orientiert}), \quad (6.6)$$

$$\Phi > \frac{1}{r} \quad (\text{konzentriert}). \quad (6.7)$$

Für eine verdünnte Suspension nimmt der Faservolumenanteil mit zunehmendem Formfaktor r entsprechend ab und mit der Grenzkonzentration $\Phi = \frac{1}{r^2}$ wird ein halbverdünnter

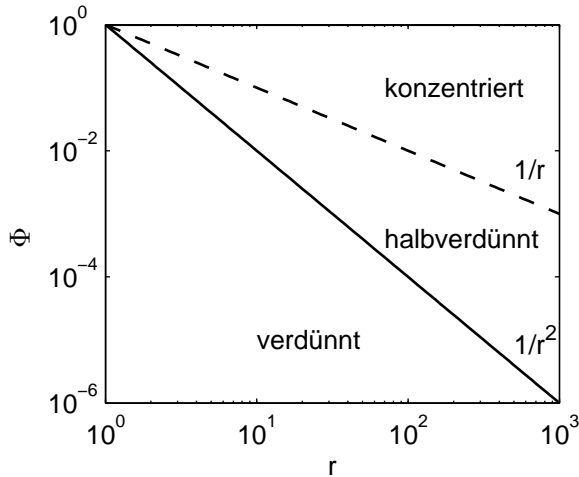


Abbildung 6.1: Konzentrationsregime: Faservolumenanteil Φ in Abhängigkeit von r

Konzentrationsbereich erreicht. Bei einer halbverdünnten Suspension ist der mittlere Faser-Faser-Abstand bereits so gering, dass sich die Fasern gelegentlich gegenseitig berühren, doch überwiegen in diesem Bereich die hydrodynamischen Faser-Faser-Wechselwirkungen, d.h. durch die „Störung“ des Geschwindigkeitsfeldes durch benachbarte Fasern. Im konzentrierten Bereich ist der mittlere Faser-Faser-Abstand in der Größenordnung des Faserdurchmessers, so dass direkte Kontakte der Fasern miteinander vorliegen. KOCH zeigt in [62], dass sich Fasern nicht mehr frei drehen können, ohne benachbarte Fasern zu berühren, wenn $n L^2 D > 3$.

In einer stationären Scherströmung kann die Jefferys-Gleichung (6.3) für eine einzelne Faser bzw. verdünnte Suspension analytisch gelöst werden. Die Lösung ergibt eine stationäre Orbitbewegung, d. h. die Fasern rotieren mit einer konstanten Periodendauer T_s [63]:

$$T_s = \frac{2\pi(r + \frac{1}{r})}{\dot{\gamma}}. \quad (6.8)$$

Die Periodendauer ist von der Schergeschwindigkeit und dem Formfaktor der Faser abhängig. Als Grenzwert für $r \rightarrow \infty$ erreicht die Faser einen stabilen Orientierungszustand. Die analytisch berechenbare Orbitbewegung wurde von STOVER et al. auch experimentell bestätigt [64]. Modelle für halbverdünnte und konzentrierte Polymerlösungen werden u. a. mit dem Einfluss der zunehmenden Faserkonzentration auf das Jefferys-Orbit in einfacher Scherung physikalisch motiviert. Mit zunehmender Faserkonzentration behindern sich die Fasern durch den Kontakt gegenseitig und die rotierende Orbitbewegung wird unterdrückt. Der Orientierungszustand wird durch die Faser-Faser-Kontakte irreversibel beeinflusst. FOLGAR hat durch die experimentelle Untersuchung der Faserorientierung in „startup-reverse-shearing“ Experimenten gezeigt, dass bei Strömungsumkehr im stationären Zustand bei halbverdünnten und konzentrierten Suspensionen in der „Rückströmung“ nicht die gleiche Faserkonfiguration erreicht wird wie in der „Hinströmung“ [65]. Faser-Faser-Wechselwirkungen werden daher im Allgemeinen durch einen diffusiven Term in der Jefferys-Gleichung berücksichtigt. Dieser diffusive Term im Konfigurationsraum ist nicht zu verwechseln mit einem diffusiven Transport im physikalischen Raum, da die Faserorientierung in der Strömungsgeometrie

ausschließlich konvektiv transportiert werden kann. Damit folgt:

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \cdot \left(\psi \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} \right), \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{q} + \lambda_F (\mathbf{D} \cdot \mathbf{q} - \mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{q})) - \frac{D_r}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{q}}. \quad (6.10)$$

D_r bezeichnet den Diffusionskoeffizienten der Faserrotationsbewegung. Aus den Gleichungen (6.9) und (6.10) kann ein Differentialgleichungssystem für den Konfigurationstensor berechnet werden mit [66, 67]¹:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} = & -(\mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W}) + \lambda_F (\mathbf{D} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} - 2\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)}) \\ & + 2D_r(\boldsymbol{\delta} - 3\mathbf{A}). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Mit $\mathbf{A}_{(4)}$ ist der Konfigurationstensor vierter Stufe bezeichnet

$$\mathbf{A}_{(4)} = \langle \mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{q}\mathbf{q} \rangle. \quad (6.12)$$

Wird die Faserorientierung durch die Verteilungsfunktion $\psi(\mathbf{q}, t)$ mit Gleichung (6.9) und die Lösung der Jefferys-Gleichung (6.10) berechnet, spricht man von einem offenen Fasermodell. Löst man das Differentialgleichungssystem für den Konfigurationstensor (6.11) wird das Fasermodell als geschlossen bezeichnet. Für ein geschlossenes Mikro-Makro-Fasermodell muss eine zusätzliche Gleichung bzw. ein Schließungsansatz der Form $\mathbf{A}_{(4)} = f(\mathbf{A})$ für den Konfigurationstensor vierter Stufe aufgestellt werden. Andernfalls kann Gleichung (6.11) nicht gelöst werden. Alternativ werden in der Literatur auch geschlossene Modelle diskutiert, die eine weitere Differentialgleichung für $\mathbf{A}_{(4)}$ und einen Schließungsansatz der Form $\mathbf{A}_{(6)} = f(\mathbf{A}_{(4)})$ verwenden [68]. Da der Rechenaufwand dieser Modelle gegenüber den erstgenannten Formen wesentlich höher ist, aber keine signifikanten Vorteile bezüglich der Genauigkeit bietet und ebenfalls ein Schließungsproblem beinhaltet (für den Konfigurationstensor sechster Stufe anstatt vierter Stufe), werden diese nicht verwendet. Letztendlich werden Schließungsansätze immer durch den Vergleich mit Berechnungen eines offenen Fasermodells validiert. Dazu finden sich in der Literatur zahlreiche Arbeiten u. a. [69, 70]. Im Folgenden werden der hybride Schließungsansatz und ein invariantenbasierter Schließungsansatz (IBOF-5) von CHUNG und KWON diskutiert [71].

6.1.1 Hybrider Schließungsansatz

Ein häufig verwendeter und in der Literatur diskutierter Schließungsansatz ist der sogenannte „hybride“ Schließungsansatz. Dieser setzt sich aus einer Superposition eines linearen und

¹Verwendet wird bei der Umformung des diffusiven Terms in der Jefferys-Gleichung u. a. die nützliche Identitätsbeziehung [31]:

$$\int \mathbf{q} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{q}} \right) d\mathbf{q} = \int (3\mathbf{q}\mathbf{q} - \boldsymbol{\delta})\psi d\mathbf{q}$$

eines quadratischen Schließungsansatzes wie folgt zusammen [66]:

$$\begin{aligned}
 A_{(4),ijkl}^{\text{quadrat}} &= A_{ij}A_{kl}, \\
 A_{(4),ijkl}^{\text{linear}} &= -\frac{1}{35}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\
 &\quad + \frac{1}{7}(A_{ij}\delta_{kl} + A_{ik}\delta_{jl} + A_{il}\delta_{jk} + A_{kl}\delta_{ij} + A_{jl}\delta_{ik} + A_{jk}\delta_{il}), \\
 \mathbf{A}_{(4)}^{\text{hybrid}} &= f\mathbf{A}_{(4)}^{\text{quadrat}} + (1-f)\mathbf{A}_{(4)}^{\text{linear}}, \\
 f &= 1 - 27 \det \mathbf{A}.
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Bei der numerischen Lösung des Differentialgleichungssystems (6.11) wird der Konfigurationstensor $\mathbf{A}_{(4)}$ in jedem Iterationsschritt explizit aus dem Tensor zweiter Stufe berechnet, wodurch das Gleichungssystem geschlossen wird. SEPEHR et al. verfolgen beispielsweise einen Weg, den Konfigurationstensor vierter Stufe mit den Gleichungen (6.13) aufgrund seiner Symmetrieeigenschaften in eine 6x6-Matrix zweiter Stufe zu überführen, so dass nicht alle Komponenten des Tensors vierter Stufe berechnet werden müssen. Da in der Differentialgleichung des Konfigurationstensors (6.11) und auch später bei der Berechnung des Spannungstensors der Konfigurationstensor vierter Stufe ausschließlich in einem verjüngenden Produkt mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensor benötigt wird, wird er in dieser Arbeit nicht berechnet und abgespeichert, sondern der jeweilige Schließungsansatz direkt in das Produkt $\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)}$ eingesetzt und ausgewertet. Damit erhält man:

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{quadrat}} &= \mathbf{A} \cdot (\mathbf{A} : \mathbf{D}), \\
 (\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{linear}} &= -\frac{1}{35}[\delta(\delta : \mathbf{D}) + 2\mathbf{D}] \\
 &\quad + \frac{1}{7}[\mathbf{A}(\delta : \mathbf{D}) + 2\mathbf{A} \cdot \mathbf{D} + \delta(\mathbf{A} : \mathbf{D}) + 2\mathbf{D} \cdot \mathbf{A}], \\
 (\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{hybrid}} &= f(\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{quadrat}} + (1-f)(\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{linear}}.
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

Für die Faserorientierung sind zwei Grenzfälle möglich: ein isotroper Orientierungszustand in alle drei Raumrichtungen (GGW) und eine vollständige Ausrichtung der Fasern in eine Raumrichtung (ausger.). Für die beiden Grenzfälle des Orientierungszustandes gilt:

$$\mathbf{A}_{\text{GGW}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_{\text{ausger.}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{6.15}$$

Aus Gleichung (6.13) folgt damit, dass für den Fall der Gleichgewichtsverteilung $f = 0$ wird und der hybride Schließungsansatz sich auf den linearen Anteil reduziert. Für den Fall einer vollständigen Ausrichtung der Fasern in eine Raumrichtung wird $f = 1$, und der Schließungsansatz reduziert sich auf den quadratischen Anteil. Für diese beiden Orientierungsgrenzfälle sind der lineare und quadratische Schließungsansatz jeweils exakt. Mit dem hybriden Schließungsansatz wird also versucht, $\mathbf{A}_{(4)}$ für einen beliebigen Orientierungszustand durch die Superposition der exakten Ergebnisse für $\mathbf{A}_{(4)}$ in den beiden Grenzfällen zu beschreiben. ADVANI und TUCKER zeigen [67], dass der hybride Schließungsansatz eine bessere Annäherung an Berechnungen mit einem offenen Fasermodell darstellt als alternative Schließungsansätze mit dem gleichen Superpositionskonzept von Orientierungsgrenzfällen, wie z. B. von HINCH und LEAL [72]. ADVANI und TUCKER diskutieren die Genauigkeit des hybriden Schließungsansatzes im Vergleich zu Berechnungen des offenen Fasermodells für das Anlaufverhalten in einfacher Scher- und Dehnströmung sowie einer kombinierten Scher-/Dehnströmung.

Eine zweite Klasse von Schließungsansätzen sind die „angepassten“ Schließungsansätze. Ein angepasster Schließungsansatz wird erhalten, indem für unterschiedliche Strömungsformen freie Parameter eines funktionalen Zusammenhangs $\mathbf{A}_{(4)} = \mathcal{F}(\mathbf{A})$ als Ansatzfunktion an Ergebnisse des offenen Fasermodells angepasst werden. CHUNG und KWON [70, 71, 73] diskutieren die Genauigkeit einer Vielzahl von Schließungsansätzen und entwickeln einen angepassten, invariantenbasierten Schließungsansatz, der deutlich bessere Ergebnisse als der hybride Schließungsansatz liefert. Der hybride Schließungsansatz wird aufgrund seiner Bekanntheit und einfachen numerischen Umsetzbarkeit hier lediglich ergänzend im Vergleich mit dem angepassten Schließungsansatz von CHUNG und KWON für die Durchströmung eines 90° -Krümmers diskutiert.

6.1.2 IBOF-5 Schließungsansatz

Angepasste Schließungsansätze können auf unterschiedlichen Wegen erhalten werden. Ein bekannter angepasster Schließungsansatz ist der orthotrope („orthotropic fitted closure“ = ORF) von CINTRA und TUCKER [69]. Grundlegend ist dabei, dass die Hauptrichtungen des Konfigurationstensors vierter Stufe mit den Hauptrichtungen des Konfigurationstensors zweiter Stufe übereinstimmen müssen, da beide höhere Momente des Orientierungsvektors sind. Die Komponenten von $\mathbf{A}_{(4)}$ lassen sich so als Funktionen der Eigenwerte von \mathbf{A} angeben. Diese Art von Schließungsansätzen wird als EBOF-Ansatz bezeichnet („eigenvalue based optimal fitting“). $\mathbf{A}_{(4)}$ kann explizit zunächst nur im Eigenraum von \mathbf{A} berechnet werden und muss in den normalen Koordinatenraum rücktransformiert werden. Diese Koordinatentransformation und die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren ist sehr rechenintensiv. Darüber hinaus zeigt z. B. der ORF-Schließungsansatz unphysikalische Oszillationen bei der Berechnung der Faserorientierung, insbesondere bei geringen Faser-Faser-Wechselwirkungen. Aus diesen Gründen haben CHUNG und KWON einen angepassten Schließungsansatz entwickelt, der auf den Invarianten des Konfigurationstensors zweiter Stufe basiert (IBOF-5). Dieser liefert eine sehr gute Übereinstimmung zu Berechnungen des offenen Faser-Modells [71]. Zudem erfordert die Berechnung der Invarianten des Konfigurationstensors deutlich weniger arithmetische Rechenoperationen als die Berechnung des Eigenraumes und die Koordinatentransformation von $\mathbf{A}_{(4)}$. Bei bekanntem \mathbf{A} erfordert die Berechnung von $\mathbf{A}_{(4)}$ mit dem EBOF-Ansatz 808 Multiplikationsoperationen, mit dem IBOF-Ansatz hingegen nur 292 Operationen. Detaillierte Ergebnisse des Modellvergleichs (Genauigkeit der Lösung und Vergleich des numerischen Rechenaufwandes) sind der Literatur zu entnehmen. An dieser Stelle werden nur die implementierten Gleichungen des IBOF-5 Schließungsansatzes ohne Herleitung angegeben.

Für das Quadrat des Orientierungstensors wird der Tensor \mathbf{B} eingeführt:

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}. \tag{6.16}$$

$$\begin{aligned}
 A_{(4),ijkl}^{\text{IBOF}} &= \frac{1}{3}\beta_1(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\
 &+ \frac{1}{6}\beta_2(\delta_{ij}A_{kl} + \delta_{kl}A_{ij} + \delta_{ik}A_{jl} + \delta_{il}A_{jk} + \delta_{jl}A_{ik} + \delta_{jk}A_{il}) \\
 &+ \frac{1}{3}\beta_3(A_{ij}A_{kl} + A_{ik}A_{jl} + A_{il}A_{jk}) \\
 &+ \frac{1}{6}\beta_4(\delta_{ij}B_{kl} + \delta_{kl}B_{ij} + \delta_{ik}B_{jl} + \delta_{il}B_{jk} + \delta_{jl}B_{ik} + \delta_{jk}B_{il}) \\
 &+ \frac{1}{6}\beta_5(A_{ij}B_{kl} + A_{kl}B_{ij} + A_{ik}B_{jl} + A_{il}B_{jk} + A_{jl}B_{ik} + A_{jk}B_{il}) \\
 &+ \frac{1}{6}\beta_6(B_{ij}B_{kl} + B_{ik}B_{jl} + B_{il}B_{jk}). \tag{6.17}
 \end{aligned}$$

Für das verjüngende Produkt von $\mathbf{A}_{(4)}$ mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensor und mit den Symmetrieeigenschaften von $\mathbf{A}_{(4)}$ lässt sich direkt ein Tensor zweiter Stufe wie folgt angeben:

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)})^{\text{IBOF}} &= \frac{\beta_1}{3}(\text{tr}(\mathbf{D})\boldsymbol{\delta} + 2\mathbf{D}) + \frac{\beta_2}{6}(\boldsymbol{\delta}(\mathbf{A} : \mathbf{D}) + \mathbf{A}(\boldsymbol{\delta} : \mathbf{D}) + 4\mathbf{A} \cdot \mathbf{D}) \\
 &+ \frac{\beta_3}{3}(\mathbf{A}(\mathbf{A} : \mathbf{D}) + 2\mathbf{A} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{A})) \\
 &+ \frac{\beta_4}{6}(\boldsymbol{\delta}(\mathbf{B} : \mathbf{D}) + \mathbf{B}(\boldsymbol{\delta} : \mathbf{D}) + 2(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D})^T + 2\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) \\
 &+ \frac{\beta_5}{6}(\mathbf{A}(\mathbf{B} : \mathbf{D}) + \mathbf{B}(\mathbf{A} : \mathbf{D}) + 4\mathbf{A} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{B})) \\
 &+ \frac{\beta_6}{3}(\mathbf{B}(\mathbf{B} : \mathbf{D}) + 2\mathbf{B} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{B})). \tag{6.18}
 \end{aligned}$$

Die Koeffizienten β_i sind Funktionen der zweiten (*II*) und dritten (*III*) Invarianten von \mathbf{A} . Zudem sind nicht alle sechs Koeffizienten β_i unabhängig voneinander, sondern es gilt:

$$\begin{aligned}
 \beta_1 &= \frac{3}{5} \left[-\frac{1}{7} + \frac{1}{5}\beta_3 \left(\frac{1}{7} + \frac{4}{7}II + \frac{8}{3}III \right) - \beta_4 \left(\frac{1}{5} - \frac{8}{15}II - \frac{14}{15}III \right) \right. \\
 &\quad \left. - \beta_6 \left(\frac{1}{35} - \frac{24}{105}III - \frac{4}{35}II + \frac{16}{15}IIIII + \frac{8}{35}II^2 \right) \right] \tag{6.19}
 \end{aligned}$$

$$\beta_2 = \frac{6}{7} \left[1 - \frac{1}{5}\beta_3(1 + 4II) + \frac{7}{5}\beta_4 \left(\frac{1}{6} - II \right) - \beta_6 \left(-\frac{1}{5} + \frac{2}{3}III + \frac{4}{5}II - \frac{8}{5}II^2 \right) \right], \tag{6.20}$$

$$\beta_5 = -\frac{4}{5}\beta_3 - \frac{7}{5}\beta_4 - \frac{6}{5}\beta_6 \left(1 - \frac{4}{3}II \right), \tag{6.21}$$

und für $i = 3, 4, 6$

$$\begin{aligned}
 \beta_i &= c(i, 1) + c(i, 2)II + c(i, 3)II^2 + c(i, 4)III + c(i, 5)III^2 + c(i, 6)IIIII \\
 &+ c(i, 7)II^2III + c(i, 8)IIIII^2 + c(i, 9)II^3 + c(i, 10)III^3 + c(i, 11)II^3III \\
 &+ c(i, 12)II^2III^2 + c(i, 13)IIIII^3 + c(i, 14)II^4 + c(i, 15)III^4 + c(i, 16)II^4III \\
 &+ c(i, 17)II^3III^2 + c(i, 18)II^2III^3 + c(i, 19)IIIII^4 + c(i, 20)II^5 + c(i, 21)III^5. \tag{6.22}
 \end{aligned}$$

Die verwendeten Invarianten sind:

$$II = \frac{1}{2}(1 - \mathbf{A} : \mathbf{A}), \quad (6.23)$$

$$III = \det(\mathbf{A}). \quad (6.24)$$

Die erste Invariante $I = \text{tr } \mathbf{A}$ hat keine physikalische Relevanz im Schließungsansatz, da diese aufgrund der konstanten Faserlänge ebenfalls unveränderlich ist und der Konfigurationstensor so normiert wurde, dass $\text{tr } \mathbf{A} = 1$ ist. Die Parameter $c(i, j)$ in Gleichung (6.22) wurden von CHUNG und KWON als Ergebnis der Anpassung des Schließungsmodells an Berechnungen mit einem offenen Faser-Modell bestimmt und können dem Anhang A.4 entnommen werden. Für die Anpassungen berechneten sie sechs verschiedene Strömungen, die einen Standardsatz für die Parameterbestimmung in angepassten Schließungsansätzen darstellen:

- einfache Scherung,
- Scherung in xy -Ebene und uniaxiale Dehnung in z -Richtung,
- uniaxiale Dehnung,
- biaxiale Dehnung,
- Scherung in der xz -Ebene und planare Dehnung in der xy -Ebene,
- Scherung in der xz -Ebene und biaxiale Dehnung.

Darüber hinaus wurde auch das instationäre Anlaufverhalten in Scher- und Dehnströmung für die Validierung des IBOF-5 Modells berechnet. Zusammenfassend kann aus der Arbeit von CHUNG und KWON festgehalten werden, dass der IBOF-5 Schließungsansatz eine sehr gute Annäherung an das offene Faser-Modell darstellt und einen deutlich geringeren Rechenaufwand erfordert als eigenwertbasierte Ansätze. Aus diesen Gründen wurde in dieser Arbeit der IBOF-5 Schließungsansatz für die Strömungsberechnung mit einem geschlossenen Fasermodell ausgewählt.

6.1.3 Faser-Faser-Wechselwirkungen

Für halbverdünnte und konzentrierte Fasersuspensionen ist die Bestimmung des Diffusionskoeffizienten in Gleichung (6.11) zur Modellierung der Faser-Faser-Wechselwirkungen von großer Bedeutung. FOLGAR und TUCKER [74] haben für den Diffusionskoeffizienten angenommen, dass dieser direkt proportional zu den Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung ist

$$D_r = C_1 \dot{\gamma}. \quad (6.25)$$

Mit zunehmenden Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung steigt qualitativ die strömungsinduzierte Orientierung der Fasern bzw. nimmt die Tendenz zur Konfigurationsänderung aus dem Gleichgewichtszustand zu. Bei gleicher Faserkonzentration ist eine zunehmende Faser-Faser-Wechselwirkung mit zunehmenden Geschwindigkeitsgradienten daher physikalisch motivierbar. Als skalares Maß der Geschwindigkeitsgradienten wird der Betrag des Deformationsgeschwindigkeitstensors wird [75]:

$$\dot{\gamma} = |\mathbf{D}| = \sqrt{\frac{1}{2}(\mathbf{D} : \mathbf{D}^T)}. \quad (6.26)$$

Weitere Einflussparameter auf die Faser-Faser-Wechselwirkungen werden im Interaktionskoeffizienten C_I berücksichtigt. Allgemein sind der Faserformfaktor, der Volumenanteil sowie der Orientierungszustand zu berücksichtigen [76]. KOCH et al. zeigen, dass der Diffusionskoeffizient auch in einfachen Strömungen eine anisotrope Größe ist, wobei die Modellierung der Anisotropie einen weiteren Schließungsansatz benötigt [62], so dass in dieser Arbeit der Diffusionskoeffizient und somit auch der Interaktionskoeffizient als skalare Größe betrachtet werden. Es existiert keine geschlossene Theorie, die einen Zusammenhang zwischen dem Interaktionskoeffizienten und Φ und r herstellt sondern lediglich phänomenologische Gleichungen. In experimentellen Untersuchungen wurde dafür die Faserorientierung in einer definierten Strömungsform mit optischen Methoden bestimmt. Aus den experimentellen Daten kann eine Verteilungsfunktion des Orientierungszustandes $\psi(\mathbf{q}, t)$ bestimmt werden. Zusätzlich wird die Verteilungsfunktion berechnet und C_I als Parameter variiert, bis die Abweichung zwischen experimenteller und berechneter Verteilungsfunktion minimiert ist. FOLGAR hat die Interaktionskoeffizienten für unterschiedliche Suspensionen durch die optische Auswertung der Faserorientierung für eine stationäre Scherströmung in einer Couette-Geometrie bestimmt [65]. Die Ergebnisse von FOLGAR liegen im halbverdünnten und konzentrierten Bereich. BAY [77] hat weitere Untersuchungen in einem hochkonzentrierten Bereich der Fasersuspensionen und für unterschiedliche Stoffpaarungen der dispersen und kontinuierlichen Phase vorgenommen (siehe Tabelle 6.1). Basierend auf den experimentellen Untersuchungen von BAY lässt sich eine Korrelation für $C_I(\Phi r)$ angeben mit [78]:

$$C_I = 0.0184 \exp(-0.7148\Phi r). \quad (6.27)$$

In dieser Gleichung nimmt C_I bzw. die Faser-Faser-Wechselwirkung mit zunehmendem Φr ab. PHAN-THIEN et al. haben aus experimentellen Untersuchungen folgende Gleichung bestimmt [79]:

$$C_I = 0.03(1 - \exp(-0.224\Phi r)). \quad (6.28)$$

Mit zunehmendem Φr nimmt der Interaktionskoeffizient C_I hier zu. Der Einfluss von Φr auf die Faser-Faser-Wechselwirkungen wird in der Literatur kontrovers diskutiert. Letzendlich ist für ein bestimmtes Stoffsystem immer eine experimentelle Validierung notwendig. Schließlich haben die Auswertungen experimenteller Untersuchungen gezeigt, dass die Abhängigkeit der Faser-Faser-Wechselwirkungen in den unterschiedlichen Konzentrationsbereichen unterschiedlich ist. Im halbverdünnten Bereich ist eine Zunahme von C_I aufgrund des mit Φr abnehmenden Inter-Faser-Abstandes physikalisch sinnvoll zu begründen. Im konzentrierten Bereich lassen sich hingegen Orientierungszustände/-phänomene beobachten, die denen von nematischen Flüssigkristallen ähnlich sind. D. h. bei hoher Konzentration orientieren sich die Fasern so, dass Änderungen des Orientierungszustandes durch eine Kollektivbewegung erfolgen. Die in Abbildung 6.2 dargestellten Ergebnisse zeigen abnehmende Faser-Faser-Wechselwirkungen im konzentrierten Bereich. In dieser Arbeit wird daher eine Abschnittsweise definierte Funktion für $C_I(\Phi r)$ verwendet mit:

$$\begin{aligned} C_I &= 0.03(1 - \exp(-0.224\Phi r)) && \text{für } \Phi r < 1.3, \\ C_I &= 0.0184 \exp(-0.7148\Phi r) && \text{für } \Phi r > 1.3. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Für die numerische Strömungsberechnung von Fasersuspensionen wird in der Cauchy-Gleichung der Anteil des Spannungstensors benötigt, der durch die Anwesenheit der Fasern hervorgerufen wird. Es wird also eine zusätzliche Gleichung benötigt, die einen Zusammenhang zwischen dem Konfigurationstensor \mathbf{A} und dem Faserspannungstensor \mathbf{S}_F herstellt.

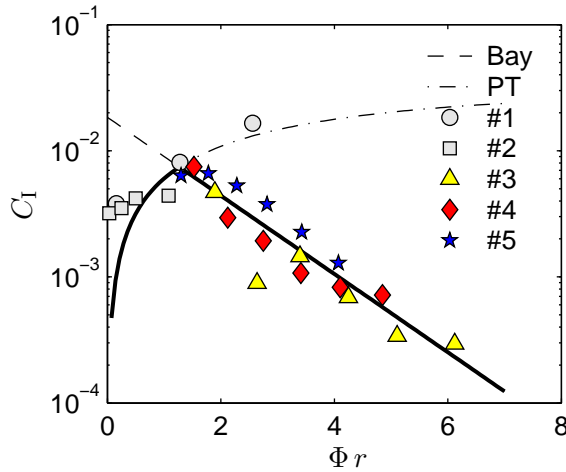


Abbildung 6.2: Interaktionskoeffizient C_I nach BAY, PHAN-THIEN (PT) und experimentell bestimmt (siehe Tabelle 6.1)

Tabelle 6.1: Stoffsystem und Quelle, experimentelle Daten in Abbildung 6.2

#1	Nylon in Silikonöl	[65]
#2	Polyester in Silikonöl	[65]
#3	Glasfasern in Nylon	[77]
#4	Glasfasern in PBT	[77]
#5	Glasfasern in Polycarbonat	[77]

6.1.4 Spannungstensor

Der Spannungstensor wurde allgemein in Kapitel 3 bereits in einen Anteil einer newtonschen Matrixflüssigkeit \mathbf{S}_s und einen Polymeranteil \mathbf{S}_p zerlegt. Für eine Fasersuspension wird eingeführt:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_s + \mathbf{S}_F. \quad (6.30)$$

Die Kopplung der dispersen und kontinuierlichen Phase aneinander erfolgt somit in der Impulserhaltungsgleichung über den Spannungstensor und in der Differentialgleichung des Konfigurationstensors über den Deformationsgeschwindigkeits- und Rotationsgeschwindigkeitstensor. Für den Faserspannungstensor wird der bekannte Ansatz von LIPSCOMB [80] verwendet mit:

$$\mathbf{S}_F = 2\eta_s \mathbf{D} + 2\eta_s \Phi(\mu_1 \mathbf{D} + \mu_2 \mathbf{D} : \mathbf{A}_{(4)}), \quad (6.31)$$

$$\mu_1 = 2,$$

$$\mu_2 = \frac{r^2}{2 \ln r}. \quad (6.32)$$

6.2 Numerische Methoden

Die zu lösenden partiellen Differentialgleichungen-/gleichungssysteme sind die drei Komponenten der Cauchy-Gleichung zur Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes, die Druckkorrekturgleichung inkompressibler Fluide als Ersatz für die Massenbilanz zur Berechnung

des Druckgradienten sowie das Differentialgleichungssystem für die sechs Komponenten des symmetrischen Konfigurationstensors. In dieser Arbeit wurden die Bestimmungsgleichungen des Konfigurationstensors in den Algorithmus für inkompressible newtonsche Fluide von OpenFOAM² implementiert. OpenFOAM ist ein quelloffener Code unter der *GNU General Public Licence* in der Programmiersprache C++, der die Finite-Volumen-Methode verwendet. Die Diskretisierung der Differentialgleichungen kann bei OpenFOAM mit unstrukturierten polyhedralen Netzen vorgenommen werden. Aufgrund der in dieser Arbeit berechneten Geometrien (Zylinderumströmung, Strömung durch einen 90° Krümmer) wurde ein blockstrukturiertes Hexaedernetz verwendet.

Der Druckgradient wurde mit dem bekannten PISO-Algorithmus berechnet. Eine ausführliche Darstellung ist u. a. bei [21] sowie in jedem Standardwerk zur numerischen Strömungsberechnung zu finden, so dass auf eine ausführliche Darstellung verzichtet wird. Für die Zeitdiskretisierung wurde in den zu lösenden Differentialgleichungen mit dem Crank-Nicholson Verfahren eine Diskretisierung zweiter Ordnung verwendet. Um eine möglichst hohe Stabilität der Lösungsmethoden zu erreichen, wird in der Chauchy-Gleichung der Newtonsche Anteil des diffusiven Impulstransports implizit behandelt, wie es auch für die Strömungsberechnung Newtonscher Fluide üblich ist. Der zusätzliche Spannungsanteil des nicht-Newtonschen Mediums wird explizit behandelt.

In der Finite-Volumen Methode werden integrale Formulierungen der jeweiligen Differentialgleichungen gelöst. Volumenintegrale werden mit dem Gaußschen-Satz in Oberflächenintegrale überführt. Die Ordnung und Genauigkeit der Diskretisierung wird dann von der Interpolationsmethode zur Berechnung der benötigten Werte auf den Oberflächenmittelpunkten aus den Werten im Mittelpunkt der diskreten Kontrollvolumen bestimmt. Werden die Werte der Bestimmungsgröße einer Differentialgleichung in den Oberflächenmittelpunkten durch lineare Interpolation aus den benachbarten Zellmittelpunkten berechnet, entspricht dies der Diskretisierung von Gradienten mit zentralen Differenzen in einer Finite-Differenzen-Methode. In der Regel wurden in dieser Arbeit alle Interpolationen mit einer linearen Interpolation aus den benachbarten Zellmittelpunktwerten durchgeführt (Benennung dieses Interpolationschemas in OpenFOAM: „Gauss linear“). Die Zylinderumströmung erforderte aufgrund der lokal hohen Gradienten des Geschwindigkeitsfeldes zur Erhöhung der numerischen Stabilität die diskretisierung der konvektiven Terme in der Cauchy-Gleichung und in der Differentialgleichung des Faserkonfigurationstensors mit einem gedämpften Verfahren höherer Ordnung. Dabei wurde mit dem SFCD-Verfahren (SFCD = „Self-filtered central differencing“) eine NVD-Methode verwendet (NVD = „Normalised Variable Diminishing“). NVD-Methoden gewährleisten, dass die jeweiligen Bestimmungsgrößen einer Differentialgleichung begrenzt bleiben. Diese Methode wurde aufgrund ihrer charakteristischen Eigenschaften bezüglich der Genauigkeit und Stabilität ausgewählt. Für eine Diskussion der zugrundeliegenden Gleichungen und die Diskussion dieser und anderer Diskretisierungsmethoden im Vergleich miteinander wird an dieser Stelle auf die Literatur verwiesen [21].

6.2.1 DGL-System des Faserkonfigurationstensors

Gleichung (6.11) ist ein gekoppeltes, quasilineares Differentialgleichungssystem erster Ordnung für den Konfigurationstensor. Um die numerische Stabilität der Lösungsmethoden zu erhöhen, wurden möglichst viele Terme der rechten Gleichungsseite bei Verwendung des

²www.openFOAM.org

IBOF-5 Schließungsansatzes als impliziter Quellterm behandelt. Es ergibt sich:

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{A} + \mathbf{Q}_{\text{imp}}^{\text{IBOF}} = -(\mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W}) + \lambda_F (\mathbf{D} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{D}) + 2 D_r (\boldsymbol{\delta} - 3 \mathbf{A}) + \mathbf{Q}_{\text{exp}}^{\text{IBOF}}. \quad (6.33)$$

$$\mathbf{Q}_{\text{imp}}^{\text{IBOF}} = 2 \lambda_F \left[\frac{\beta_2}{6} \mathbf{A} (\boldsymbol{\delta} : \mathbf{D}) + \frac{\beta_3}{3} \mathbf{A} \underbrace{(\mathbf{A} : \mathbf{D})}_{(1)} + \frac{\beta_5}{6} \mathbf{A} \underbrace{(\mathbf{B} : \mathbf{D})}_{(2)} \right], \quad (6.34)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\text{exp}}^{\text{IBOF}} = & -2 \lambda_F \left[\frac{\beta_1}{3} (\text{tr}(\mathbf{D}) \boldsymbol{\delta} + 2 \mathbf{D}) + \frac{\beta_2}{6} (\boldsymbol{\delta} (\mathbf{A} : \mathbf{D}) + 4 \mathbf{A} \cdot \mathbf{D}) \right. \\ & + \frac{2 \beta_3}{3} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{A}) + \frac{\beta_4}{6} (\boldsymbol{\delta} (\mathbf{B} : \mathbf{D}) + \mathbf{B} (\boldsymbol{\delta} : \mathbf{D}) + 2 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{D})^T + 2 \mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) \\ & \left. + \frac{\beta_5}{6} (\mathbf{B} (\mathbf{A} : \mathbf{D}) + 4 \mathbf{A} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{B})) + \frac{\beta_6}{3} (\mathbf{B} (\mathbf{B} : \mathbf{D}) + 2 \mathbf{B} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{B})) \right]. \quad (6.35) \end{aligned}$$

Die Linearisierung der Terme (1) und (2) in Gleichung (6.34) erfolgt im Lösungsalgorithmus mit den Werten der jeweils letzten Iterationsstufe von \mathbf{A} .

6.2.2 Randbedingungen

Als Randbedingung wird für alle Berechnungen angenommen, dass die Strömung am Austritt der Geometrie einen vollständig ausgebildeten Zustand erreicht hat, was durch eine ausreichend lange Strömungstrecke stromabwärts des Zylinders bzw. 90°-Krümmers gewährleistet wird. Die verwendeten Randbedingungen für den Druck sind in dieser Arbeit eine Neumann-Randbedingung im Strömungseintritt (Nullgradient), sowie eine Dirichlet-Randbedingung im Austritt ($p = 0$). Für das Geschwindigkeitsfeld wurde im Eintritt das Geschwindigkeitsprofil einer vollständig ausgebildeten laminaren Kanalströmung eines newtonschen Fluids vorgegeben. Im Austritt wird für das Geschwindigkeitsfeld ebenfalls eine Neumann-Randbedingung (Nullgradient) angenommen. An festen Wänden gilt die Haftbedingung ($\mathbf{v} = 0$) verwendet. Für den Konfigurationstensor wird im Strömungseintritt die Gleichgewichtskonfiguration (isotroper Orientierungszustand der Fasern in alle Raumrichtungen) gesetzt. Weiterhin wurde bei der Zylinderumströmung für eine vergleichende Diskussion auch ein zweidimensionaler Gleichgewichtszustand, sowie eine vollständige Ausrichtung der Fasern in Strömungsrichtung vorgegeben. Im Austritt sowie auf den festen Wänden gilt für den Konfigurationstensor eine Nullgradienten-Randbedingung.

6.2.3 Lösungsmethoden der linearen Gleichungssysteme

Die nach der Linearisierung und Diskretisierung erhaltenen linearen Gleichungssysteme werden in dieser Arbeit mit den in OpenFOAM implementierten Verfahren gelöst. Für das Gleichungssystem der Druckkorrekturgleichung wird mit dem ICCG-Löser („Incomplete-Cholesky conjugate gradient“) eine vorkonditionierte Methode für eine symmetrische Koeffizientenmatrix verwendet. Alle anderen Gleichungssysteme werden mit dem BICCG-Verfahren gelöst („Incomplete-Cholesky biconjugate gradient“), einem Gleichungslöser für unsymmetrische Koeffizientenmatrizen.

6.3 Zylinderumströmung

Als Anwendungsfall der numerischen Strömungsberechnung von Fasersuspensionen mit dem geschlossenen IBOF-5 Modell für konzentrierte Suspensionen und die Validerung der Modelle und Berechnungsmethoden wird die von YASUDA et al. experimentell untersuchte Zylinderumströmung verwendet [81]. Zunächst werden kurz die vorliegenden Geometrie- und Stoffdaten dargestellt.

6.3.1 Geometrie- und Stoffdaten

Im experimentellen Aufbau wird von YASUDA et al. ein Flachkanal von 2 mm Dicke verwendet. Die Strömung wird in der experimentellen Auswertung als zweidimensional betrachtet und in der numerischen Berechnung in der z -Richtung durch Nullgradienten-Randbedingungen in dieser Richtung für das Druck- und Geschwindigkeitsfeld als indifferent angenommen. In einem Abstand $L_1 = 160$ mm vom Kanaleintritt ist ein Zylinder positioniert. Die weiteren Geometriemaße sind in Abbildung 6.3 gegeben.

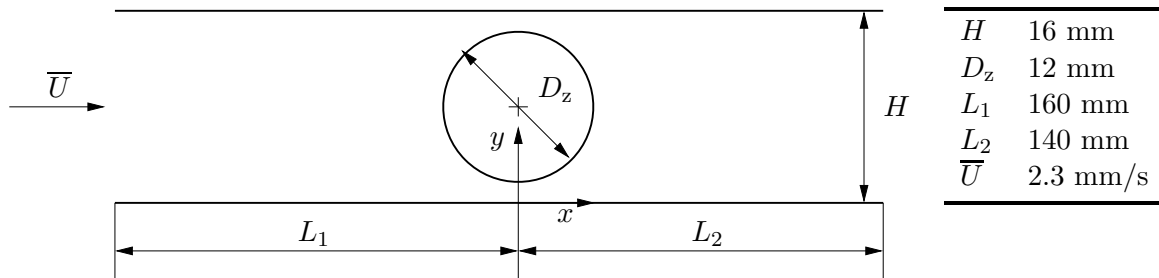


Abbildung 6.3: Geometrieabmessungen der Zylinderumströmung [81]

Die mittlere Eintrittsgeschwindigkeit beträgt $\bar{U} = 2.3$ mm/s. Als Matrix-Flüssigkeit wird Polybuten mit einer Viskosität von $\eta = 25$ Pa s (bei Raumtemperatur und $\dot{\gamma} = 0.1-10$ 1/s), so dass die Matrix in der vorliegenden Geometrie vollständig newtonsch ist. Die Dichte des Polybutens beträgt 0.89 g/cm³. Somit ergibt sich für die mit der Kanalhöhe H berechnete Reynoldszahl die Größenordnung $O(10^{-3})$. Für eine konzentrierte Suspension werden Glasfasern mit einem Faservolumenanteil $\Phi_{\text{Glas}} = 4\%$ suspendiert. Die Fasern besitzen eine mittlere Länge von $L = 0.8$ mm und einen Durchmesser $D = 12$ μm . Der zugehörige dimensionslose Formfaktor ist $r = 67$. Aufgrund der von YASUDA et al. ausgewerteten Längenverteilung der Glasfasern können diese in der numerischen Berechnung als monodispers betrachtet werden. Für die Visualisierung der Faserorientierung werden im Experiment Vinyl-Faser mit einem Volumenanteil von $\Phi_{\text{Vinyl}} = 0.016\%$, einer mittleren Länge $L = 1$ mm, und einem Formfaktor $r = 35$ verwendet. Aufgrund des geringen Volumenanteils der Vinyl-Fasern gegenüber den Glasfasern werden diese in der numerischen Berechnung nicht berücksichtigt, da kein signifikanter Einfluss auf die Orientierung der Glasfasern zu erwarten ist.

Mit den Gleichungen 6.27 und 6.32 ergibt sich für das Fasermodell der Glasfasersuspension der Parametersatz:

$$C_1 = 0.002709, \quad \mu_1 = 2, \quad \mu_2 = 533.$$

Im experimentellen Aufbau wird die Fasersuspension aus einem Vorratstank durch eine Rohrstrecke in den Kanal gepumpt und durchströmt im Übergang von der Rohrstrecke zum Kanal

eine unstetige Querschnittskontraktion. Aufgrund der hohen Dehngeschwindigkeiten in diesem Übergang werden die Fasern größtenteils in Strömungsrichtung ausgerichtet. Der Einfluss der Eintrittsbedingung auf die Zylinderumströmung wird später diskutiert. Aufgrund der Geometrie des Flachkanals und der Auswertemethoden zur Bestimmung der Faserorientierung betrachten YASUDA et al. die Strömung als zweidimensional. Die Faserorientierung kann experimentell nicht in einer zweidimensionalen Schicht bestimmt werden, sondern basiert auf der Auswertung von Bilddaten einer Draufsicht auf den Kanal. Ein möglicher Randeinfluss auf die Orientierung ist somit in der Bestimmung der Orientierungsparameter enthalten. Experimentell bestimmte physikalische Größen der Faserorientierung sind die Komponenten eines zweidimensionalen Konfigurationstensors, die dadurch aufgespannten Orientierungselipsen, der größte Eigenwert als skalares Orientierungsmaß sowie ein mittlerer Orientierungswinkel φ_x zwischen der Ellipsenhauptachse und der x -Achse. Anhand dieser Größen werden die Modellergebnisse des geschlossenen Faser-Modells validiert.

In der numerischen Berechnung wird die im Experiment als indifferente betrachtete Richtung durch periodische Randbedingungen realisiert, so dass die z -Richtung gradientenfrei ist. Aufgrund der geringen Kanalhöhe und der langsamen Strömungsgeschwindigkeit ist der benötigte Rechenaufwand bereits so groß, dass die Berücksichtigung der Wände in der xz -Ebene für die numerische Berechnung unpraktikabel ist. Das dreidimensionale Fasermodell wird also quasi zweidimensional verwendet, wobei sich die Gleichgewichtswerte des Konfigurationstensors im zweidimensionalen und dreidimensionalen Fall voneinander unterscheiden mit:

$$\mathbf{A}_{\text{GGW},3\text{D}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_{\text{GGW},2\text{D}} = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.36)$$

Bei Vorgabe eines planaren Gleichgewichtszustandes im Eintritt, bleibt der planare Orientierungszustand der Fasern bei periodischen Randbedingungen in z -Richtung erhalten. Wie später noch ausführlich diskutiert wird, ist die Eintrittsbedingung des Konfigurationstensors daher entscheidend für den weiteren Orientierungszustand stromabwärts.

Anisotroper Faservolumenanteil YASUDA et al. haben zudem den lokalen Faservolumenanteil im Bereich der ausgebildeten Kanalströmung vor und hinter dem Zylinder bestimmt und festgestellt, dass die Glasfaserkonzentration in Wandnähe geringer ist, als in der Kernströmung (Abbildung 6.4). Um den Einfluss des örtlich inhomogenen Faseranteils auf den Orientierungszustand zu untersuchen, wird in dem Modell eine Wandfunktion $\Phi_{\text{Wandf.}}(y)$ eingeführt. Mit dem jeweils kürzesten Abstand in Wandnormalenrichtung y^+ wird die von YASUDA et al. experimentell bestimmte Abnahme des Faseranteils in Wandnähe durch eine lineare Funktion angenähert mit:

$$\Phi(y^+) = \begin{cases} \frac{\Phi_{\text{B}} y^+}{y_{\text{w}}}, & y^+ < y_{\text{w}}, \\ \Phi_{\text{B}}, & y^+ \geq y_{\text{w}}. \end{cases} \quad (6.37)$$

Der Faseranteil Φ_{B} im wandfernen Bereich wird aus dem vorgegebenen örtlich gemittelten Gesamtfaseranteil berechnet. Bei Ergebnissen ohne den zusätzlichen Hinweis auf die Verwendung von $\Phi_{\text{Wandf.}}(y)$ wurde mit einem konstanten Faservolumenanteil gerechnet.

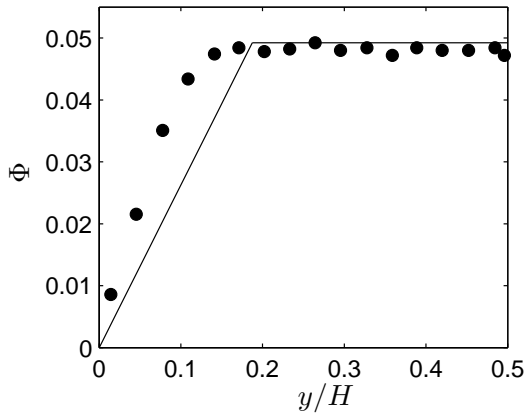


Abbildung 6.4: Faseranteil in ausgebildeter Kanalströmung, Glasfasersuspension, Experiment [81] und Profil mit linearer Wandfunktion, Gl. (6.37)

6.3.2 Ergebnisse

Die Ergebnisse des Fasermodells mit dem IBOF-5 Schließungsansatz stimmen im Bereich der ausgebildeten Kanalströmung stromaufwärts des Zylinders sehr gut mit den experimentellen Ergebnisse überein. In Abbildung 6.5 ist der maximale Eigenwert λ_{\max} in Abhängigkeit von y stromaufwärts bei $x/H = -1$ aufgetragen. Abbildung 6.6 (1) zeigt die aus dem Konfigurationstensor berechneten zugehörigen Orientierungsellipsen. YASUDA et al. charakterisieren die Faserorientierung im Kanaleintritt aufgrund der Kontraktionsströmung im Einlaufbereich der Kanalstrecke als vollständig ausgerichtet in Strömungsrichtung. Die veröffentlichten Ergebnisse der Orientierungsellipsen zeigen zwar, dass der eingeschlossene Winkel der Ellipsenhauptachse mit der x -Achse null wird, jedoch gibt es einen signifikanten Orientierungsanteil in die anderen Raumrichtungen und der Orientierungszustand kann lediglich als vorzugsweise in strömungsrichtung ausgerichtet charakterisiert werden. Die Ergebnisse in Abbildung 6.5 wurden mit einem dreidimensionalen Gleichgewichtszustand als Eintrittsbedingung erhalten. In Abbildung 6.7 (links) sind die Ergebnisse für die beiden anderen möglichen Grenzfälle der Faserkonfiguration im Eintritt dargestellt, nämlich die vollständige Ausrichtung in x -Richtung und der zweidimensionale Gleichgewichtszustand in der xy -Ebene. Es ist festzustellen, dass in der Kanalmitte im Bereich mit niedrigen Geschwindigkeitsgradienten die Eintrittskonfiguration konvektiv in den Kanal transportiert wird und erhalten bleibt. Für den Fall der zweidimensionalen Gleichgewichtsverteilung und insbesondere für die Eintrittsbedingung der vollständigen Ausrichtung der Fasern zeigen sich deutliche Abweichungen von dem experimentell gefundenen Orientierungszustand, so dass der dreidimensionale Gleichgewichtszustand als bestmögliche Konfiguration im Eintritt ausgewählt werden kann. Da der Zylinder einen sehr großen Anteil des Kanalquerschnitts versperrt bewirken die hohen Geschwindigkeitsgradienten in diesem Bereich eine deutliche Ausrichtung der Fasern in Strömungsrichtung und es ist im Bereich stromabwärts des Zylinders keine signifikanter Einfluss der Eintrittsbedingung auf die Faserorientierung zu erwarten.

Neben dem IBOF-5 Modell mit Faser-Faser-Wechselwirkungen und örtlich homogenem Faservolumenanteil wurde auch das Fasermodell mit hybridem Schließungsansatz, sowie das IBOF-5 Modell mit der Wandfunktion des Faseranteils sowie verschwindenden Faser-Faser-Wechselwirkungen verwendet. Die zugehörigen Orientierungsellipsen und Eigenwertprofile stromaufwärts des Zylinders sind in den Abbildungen 6.6 und 6.7 (rechts) dargestellt. Die Faser-Orientierung ist in Wandnähe aufgrund des abnehmenden Faservolumenanteils geringer. Mit abnehmendem Faseranteil wird der Interaktionskoeffizient entsprechend Gleichung (6.29) durch die PHAN-THIEN Gleichung berechnet, was mehr Faser-Faser-Wechselwirkungen

bewirkt. YASUDA et al. diskutieren die Faser-Wand-Wechselwirkungen und Auswirkungen auf den Orientierungszustand an Hand eines „flip over“-Effektes. Die numerischen Berechnungen mit abnehmendem Faservolumenanteil in Wandnähe zeigen, dass die Ansätze für den Interaktionskoeffizienten C_1 für die Faser-Faser-Wechselwirkungen die bei Faser-Wand-Wechselwirkungen auftretenden Effekte und Einflüsse auf die Orientierung der Fasern nicht abbilden können. Für Faser-Wand-Wechselwirkungen existieren bisher keine geschlossenen oder phänomenologischen Modelle, weshalb im Folgenden die lokale Inhomogenität des Faservolumenanteils in Wandnähe und Faser-Wand-Wechselwirkungen nicht berücksichtigt werden können.

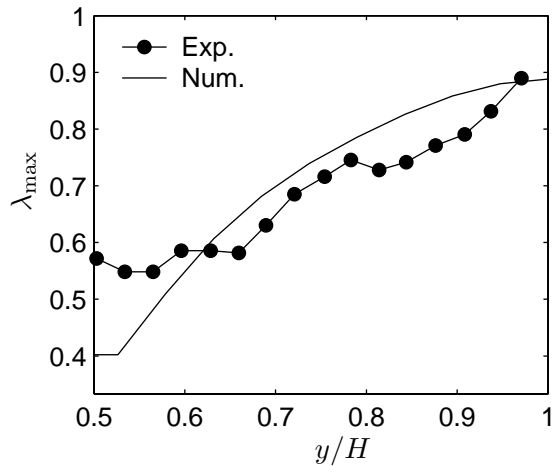
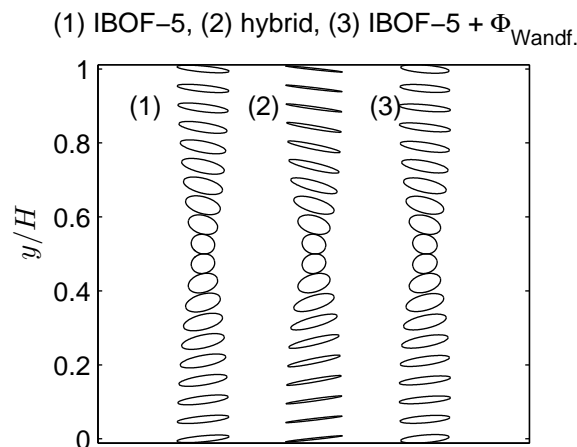


Abbildung 6.5: Glasfasersuspension, ausgebildete Kanalströmung, Vergleich Experiment mit IBOF-5-Modellergebnissen



(1)	IBOF-5,	Eintritt 3D GGW
(2)	hybrid,	Eintritt 3D GGW
(3)	IBOF-5,	Eintritt 3D GGW, $\Phi_{\text{Wandf.}}(y)$

Abbildung 6.6: Glasfasersuspension, Orientierungsellipsen in ausgebildeter Kanalströmung, Modellbezeichnung siehe Tabelle

Darüber hinaus zeigen die Untersuchungen in dieser Arbeit, dass das Fasermodell mit dem hybriden Schließungsansatz den Orientierungsgrad der Fasern überschätzt, so dass λ_{max} größer ist als beim IBOF-5 Modell und die kürzere Halbachse der Orientierungsellipsen kleiner ist (siehe Abbildung 6.7 und 6.6). Der Einfluss des Schließungsansatzes auf die Faserkonfiguration wird für die Durchströmung eines 90°-Krümmers ausführlich diskutiert.

Die Darstellung in Abbildung 6.8 zeigt die Orientierungsellipsen der konzentrierten Glasfasersuspension in der Nähe des Zylinders. Je „schmäler“ die Ellipsen sind, desto stärker die

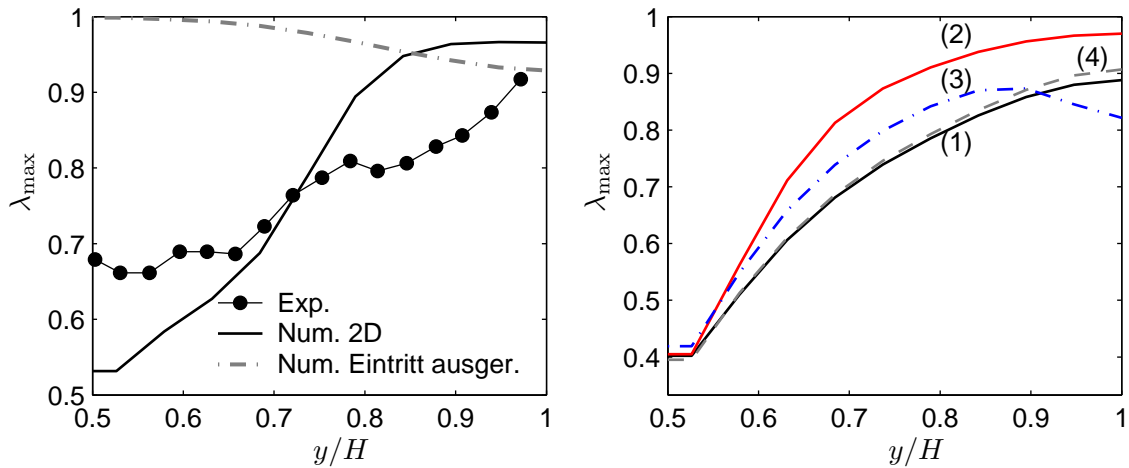


Abbildung 6.7: Glasfasersuspension, größter Eigenwert; links (2D), rechts unterschiedliche Modelle/Parameter entsprechend Tabelle 6.2

Tabelle 6.2: Benennung der Modell-Datensätze in Abbildung 6.7

Nr.	Modell	Faserorient. im Eintritt
(1)	IBOF-5	3D GGW
(2)	hybrid	3D GGW
(3)	IBOF-5	3D GGW, $\Phi_{\text{Wandf.}}(y)$
(4)	IBOF-5	3D GGW, $C_I = 0$

Ausrichtung der Fasern in eine Hauptrichtung. Beim Auftreffen auf den Zylinder werden die Fasern entlang der Zylinderkontur ausgerichtet. Im Bereich der Querschnittsverengung bewirken die hohen Geschwindigkeitsgradienten eine fast vollständige Ausrichtung der Fasern in Strömungsrichtung. Stromabwärts gibt es einen Bereich in der Kanalmitte mit hoher Faserorientierung in Strömungsrichtung und ebenfalls in Wandnähe. In dem Bereich dazwischen wechselt der Orientierungswinkel der Ellipsen das Vorzeichen und die Orientierungszustände sind breiter verteilt.

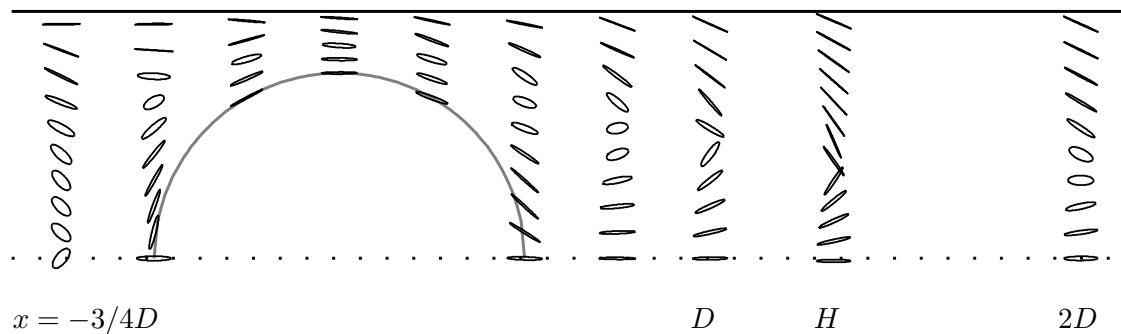


Abbildung 6.8: Glasfasersuspension, IBOF-5, Orientierungsebenen

Die Darstellung des Orientierungswinkels stromabwärts im Querschnitt $x/H = 1$ in Abbildung 6.9 (links) zeigt eine hohe Übereinstimmung zwischen numerischer Berechnung und den experimentellen Ergebnissen. Der Ausrichtungsgrad der Fasern wird mit λ_{\max} im rechten Teil der Abbildung bei $x/H = 1$ durch das Modell nicht gut vorhergesagt. Das Fasermodell liefert eine zu hohe Orientierung der Fasern in die durch φ_x charakterisierte Raumrichtung, d.h. die Breite der Orientierungsverteilungsfunktion ist zu gering. Das Profil für λ_{\max} an der Stelle $x/H = 0.5$ zeigt qualitativ den experimentell bestimmten Verlauf bei $x/H = 1$, d.h. im Vergleich zum Experiment ist in der numerischen Berechnung der Bereich im Nachlauf des Zylinders zwischen Kanalmitte und Wand mit einer breiteren Orientierungsverteilung der Fasern in der x -Richtung geringer ausgedehnt. Daraus ergibt sich die gefundene Abweichung des Modellergebnisses zum experimentellen Ergebnis.

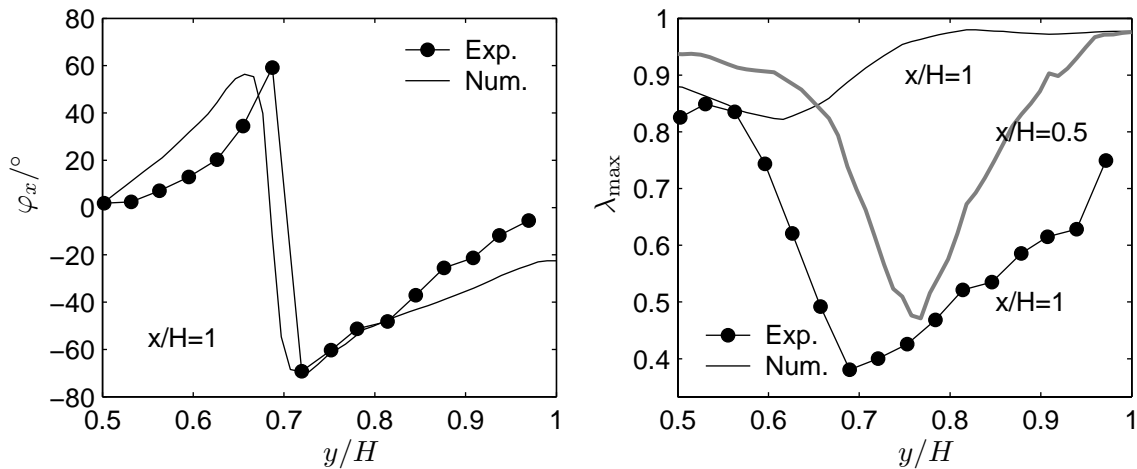


Abbildung 6.9: Glasfaser-Suspension, IBOF-5, links: eingeschl. Winkel der Ellipsenhauptachse mit der x -Achse, rechts: λ_{\max} , Experiment und numerisch $x/H = 1$, numerisch, $x/H = 0.5$

YASUDA et al. haben darüber hinaus den größten Eigenwert entlang der x -Achse an den Positionen $y = 0.5H$ (Kanalmitte), $y = 0.75H$ und $y = 0.94H$ bestimmt. Diese Profile sind in Abbildung 6.10 dargestellt. Die Abweichung des berechneten Eigenwertes von den experimentellen Ergebnissen in der Kanalmitte stromaufwärts des Zylinders (Abbildung für $y = 0.5H$) wurde bereits oben diskutiert und ist auf die Eintrittsbedingung der Faserkonfiguration im Kanaleintritt zurückzuführen.

Abbildung 6.11 zeigt die Komponenten des Geschwindigkeitsvektors u in x -Richtung und v in y -Richtung, jeweils normiert mit der mittleren Eintrittsgeschwindigkeit \bar{U} für die konzentrierte Glasfaser-Suspension und die newtonsche Matrix ohne Fasern. Der Geschwindigkeitsgradient $\frac{\partial u}{\partial y}$ liegt stromaufwärts im Bereich der ausgebildeten Kanalströmung zwischen $[-1, 1]$ 1/s und im Zylinderspalt (bei $x = 0$) zwischen $[-25, 25]$ 1/s, wodurch die Fasern fast vollständig in Strömungsrichtung orientiert werden. Insbesondere in Zylindernähe stromaufwärts (siehe Profile bei $x = -3/4D$, $x = -1/2D$ und $x = -1/4D$) wird das Geschwindigkeitsfeld durch die Fasern gegenüber der Strömung des newtonschen Fluids beeinflusst. In den Querschnitten bei $x = -3/4D$ und $x = -1/2D$ ist die Komponente in x -Richtung für $y/H > 0.8$ und in y -Richtung für $y/H > 0.9$ für die Fasersuspension größer als für die newtonsche Matrixflüssigkeit. Für kleinere Werte von y um den gleichen Betrag geringer. Im Bereich der Querschnittsverengung ($x = 0$) sind die Geschwindigkeitsprofile der beiden

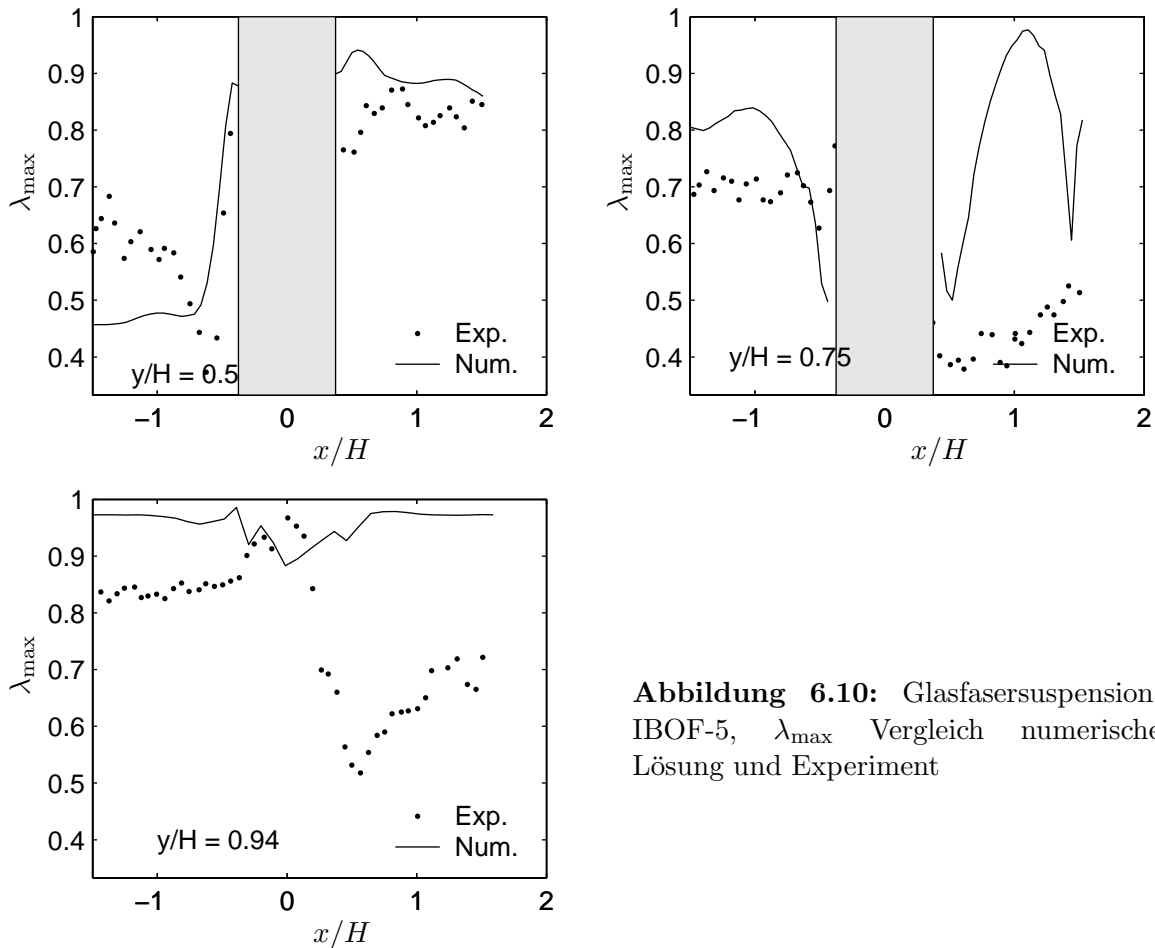


Abbildung 6.10: Glasfasersuspension, IBOF-5, λ_{\max} Vergleich numerische Lösung und Experiment

Fluide nahezu identisch. Stromabwärts des Zylinders sind die Geschwindigkeitskomponenten im Bereich $x < 3/4D$ für die Fasersuspension größer als für das newtonsche Fluid. Die Fasern beeinflussen das Geschwindigkeitsfeld besonders in den Bereichen, wo aufgrund der Strömungsumlenkung durch den Zylinder eine Umorientierung der Fasern aus dem Zustand der ausgebildeten Kanalströmung erfolgt. In diesen Bereichen sind die Komponenten des Faser-Spannungstensors um den Faktor zehn größer, als in der ausgebildeten Kanalströmung (Abbildung 6.12).

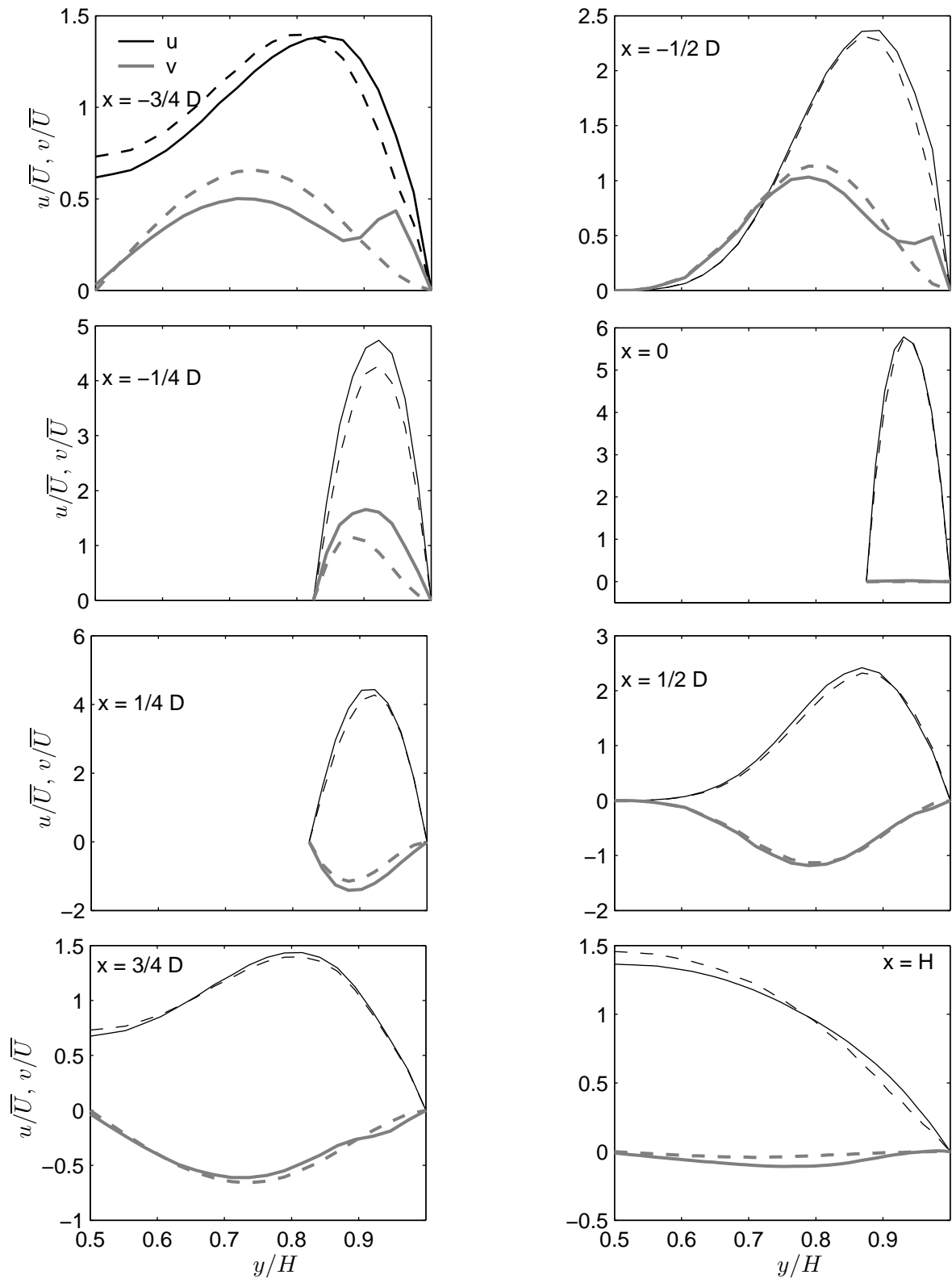


Abbildung 6.11: Zylinderumströmung, Geschwindigkeitskomponenten u in x - und v in y -Richtung, Glasfasersuspension mit IBOF-5 (—) und Newtonsches Fluid (---)

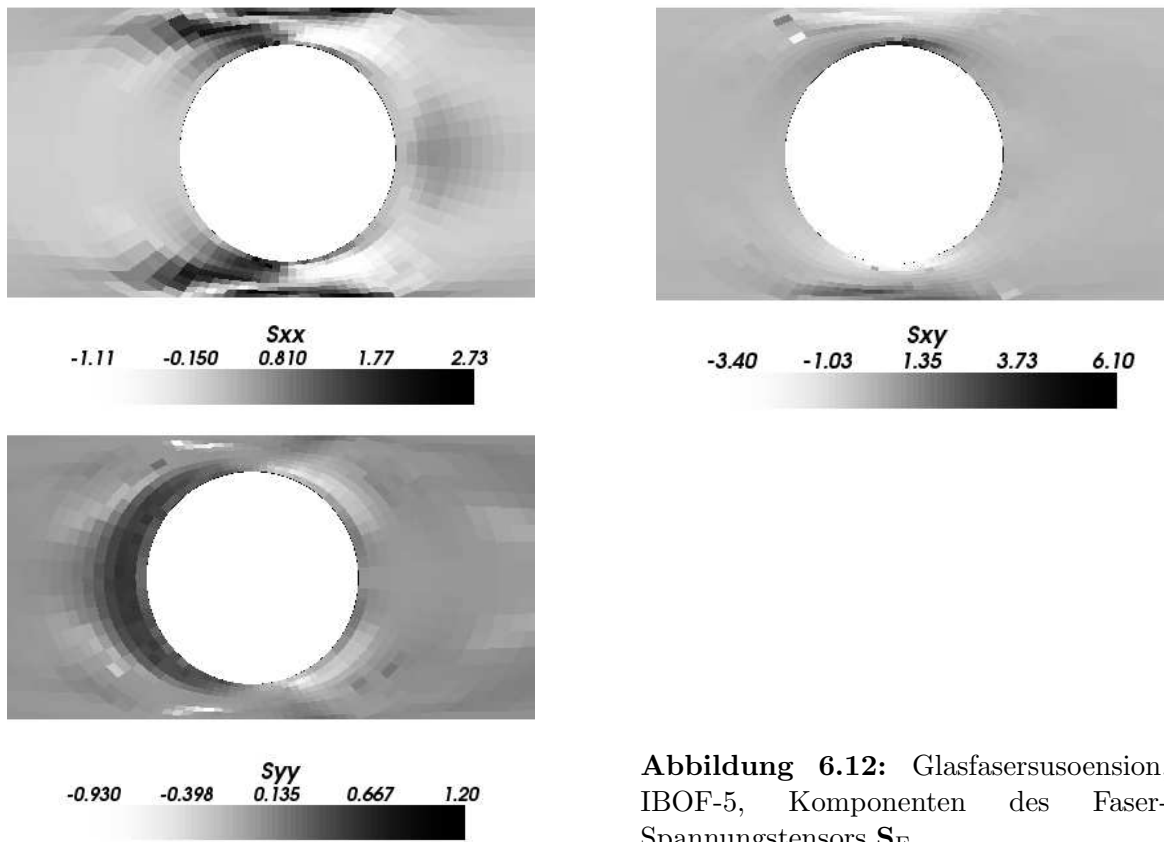


Abbildung 6.12: Glasfasersensoer, IBOF-5, Komponenten des Faser-Spannungstensors S_F

6.4 Durchströmung eines 90°-Krümmers

Die Diskussion der Ergebnisse für die Berechnung der Zylinderumströmung einer konzentrierten Glasfasersuspension mit dem geschlossenen Faser-Modell und IBOF-5 Schließungsansatz hat eine hohe Übereinstimmung zwischen den Berechnungsergebnissen und experimentellen Ergebnissen gezeigt. Da der hybride Schließungsansatz gegenüber der invariantenbasierten Schließung IBOF-5 von CHUNG und KWON bisher als weitaus populärer einzustufen ist, wird für die Strömung durch einen 90°-Krümmer der Einfluss des Schließungsansatzes auf die Faserkonfiguration untersucht. Sowohl die Faserkonzentration als auch der Formfaktor werden variiert.

6.4.1 Geometrie- und Stoffdaten

Die im Folgenden modellierte Fasersuspension besteht aus Glasfasern mit einer newtonschen Polybuten Matrix (Stanchem Indopol H100, $M = 920$ g/mol) [58, 59], wobei die Viskosität von SEPEHER et al. mit $\eta = 24$ Pa s angegeben wird. Die suspendierten Fasern haben eine mittlere Länge $\bar{L} = 260\mu\text{m}$ und einen mittleren Durchmesser $\bar{D} = 14\mu\text{m}$. Der zugehörige Formfaktor ist $r = 20$. SEPEHER et al. verwenden für experimentelle Untersuchungen Suspensionen im halbverdünnten und konzentrierten Bereich des Faseranteils (Tabelle 6.3). Anhand von „startup“ und „reverse-shearing“ Experimenten haben SEPEHER et al. für den Kopplungskoeffizienten $\mu_2 = 150$ bestimmt. Der Interaktionskoeffizient C_1 wird wie bereits im vorherigen Abschnitt aus der abschnittsweise definierten Funktion von BAY und PHANTHIEU berechnet (Gleichung (6.29)).

Tabelle 6.3: Glasfasersuspensionen bei SEPEHER et al., Konzentrationen in [59] und C_1

	Gew%	Φ Volumen %		Φr	C_1
PB05	5	1.58	halbverdünnt	0.316	0.0021
PB10	10	3.27	halbverdünnt	0.654	0.0041
PB20	20	7.06	konzentriert	1.412	0.0067

Abbildung 6.13 zeigt schematisch die Krümmergeometrie mit verwendeten Koordinatensystemen und Bezeichnungen. y_d bezeichnet das lokale Koordinatensystem für den Kanal stromabwärts des Krümmers in Strömungsrichtung. Die Ergebnisse werden u. a. als Profil über den Kanalquerschnitt dargestellt mit $\varphi_1 = 22.5^\circ$, $\varphi_2 = 45^\circ$ und $\varphi_3 = 67.5^\circ$. Der Krümmer wird als zweidimensionales Problem berechnet, so dass die Geometrie in z -Richtung als unendlich ausgedehnt betrachtet wird.

6.4.2 Ergebnisse

Als Randbedingung des Konfigurationstensors wurde die dreidimensionale Gleichgewichtskonfiguration vorgegeben. In den Abbildungen 6.14, 6.15, 6.16, 6.17 und 6.18 sind die Orientierungsellipsen im Krümmer und stromabwärts für $r = 20$ und die beiden Schließungsansätze dargestellt. Gegenüber dem IBOF 5-Schließungsansatz liefert der hybride

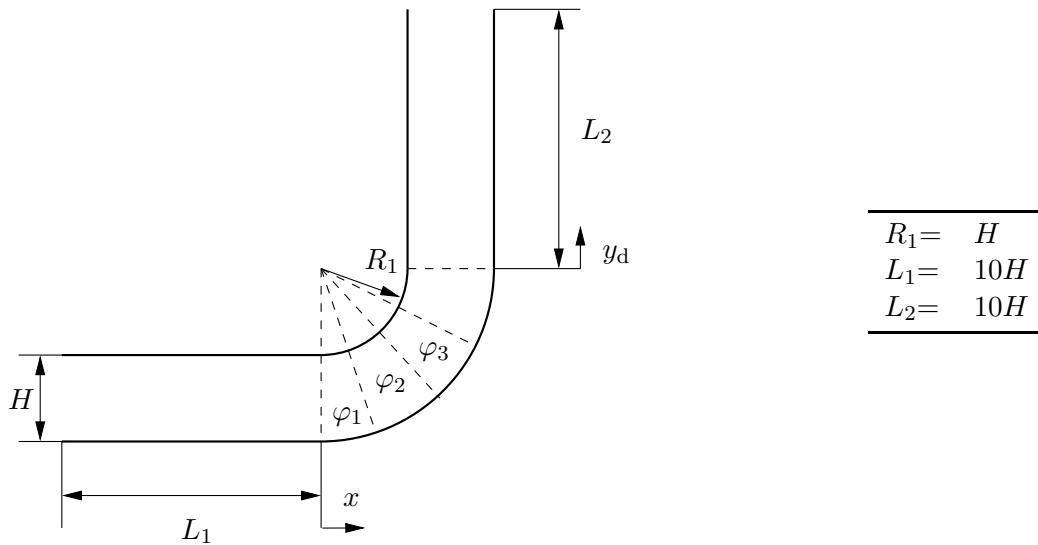
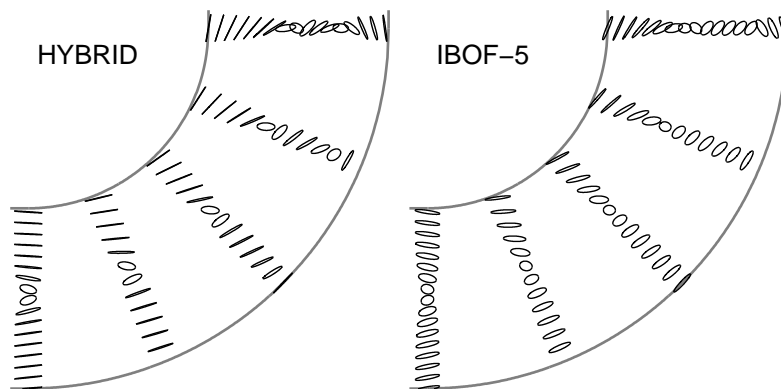


Abbildung 6.13: 90° Krümmer, Geometrie

Schließungsansatz insbesondere in Wandnähe eine engere Orientierungsverteilung bzw. eine stärkere Ausrichtung in Strömungsrichtung. In der Kanalmitte verbleibt aufgrund der Randbedingung im Eintritt und der niedrigen Geschwindigkeitsgradienten ein Bereich, in welchem die Faserorientierung breiter verteilt ist. Mit zunehmendem Faseranteil nimmt die Orientierbarkeit der Fasern bei der Durchströmung aufgrund der zunehmenden Faser-Faser-Wechselwirkungen ab und die Fasern werden weniger stark in Strömungsrichtung orientiert. Ein zunehmender Formfaktor r hat aufgrund der zugrunde gelegten Gleichungen für den Interaktionskoeffizienten den gleichen Einfluss auf die Faserorientierung wie der zunehmende Faseranteil bei konstantem r (Abbildung 6.19).

Abbildung 6.14: $r = 20, \Phi = 1.58 \%$

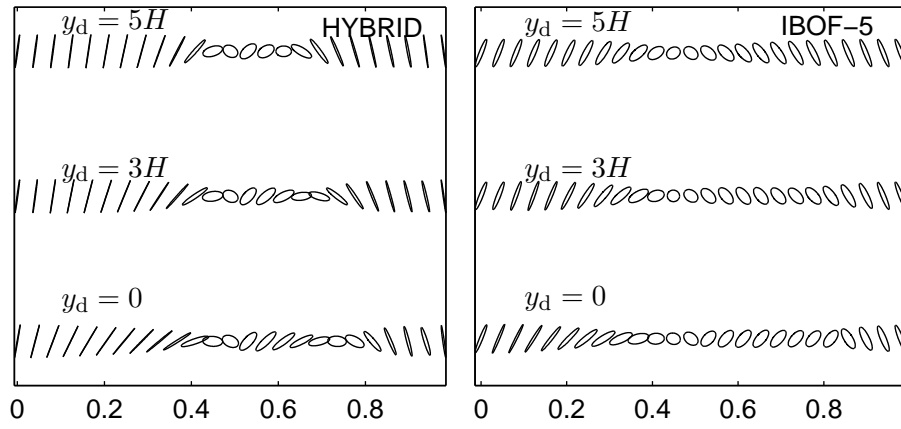


Abbildung 6.15: $r = 20, \Phi = 1.58 \%$

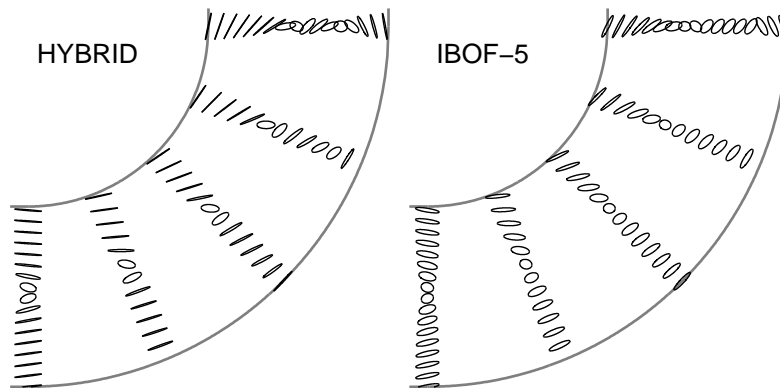


Abbildung 6.16: $r = 20, \Phi = 3.27 \%$

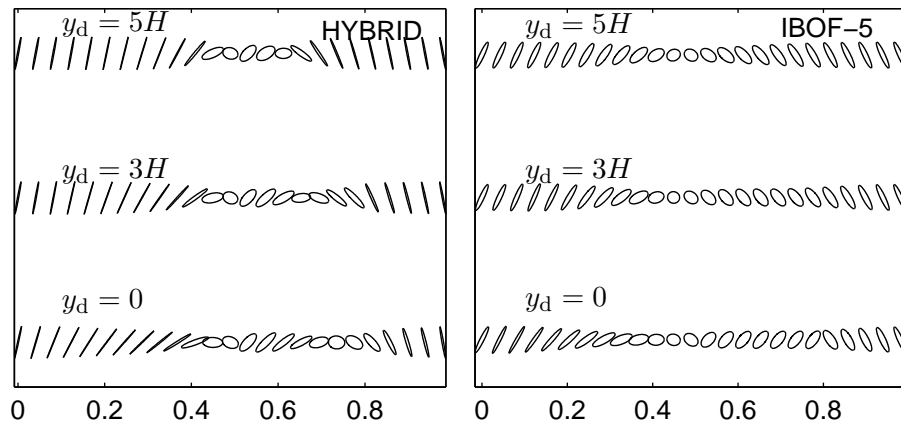
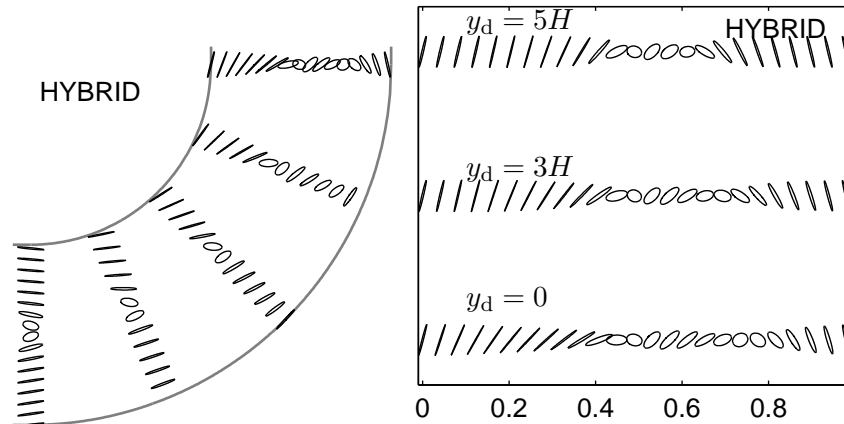
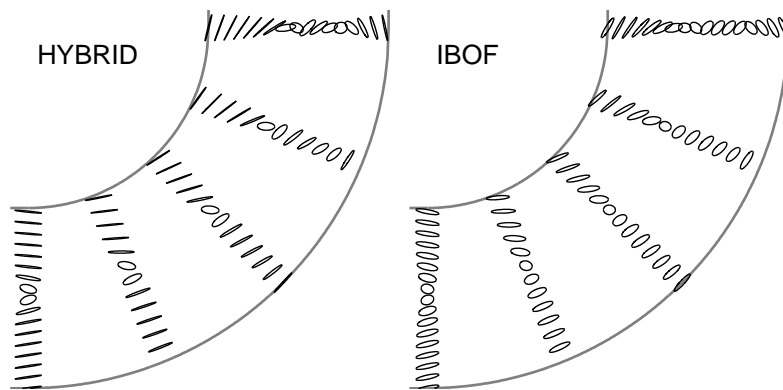


Abbildung 6.17: $r = 20, \Phi = 3.27 \%$

Abbildung 6.18: $r = 20, \Phi = 7.06 \%$ Abbildung 6.19: $r = 100, \Phi = 1.58 \%$

Um die Modellunterschiede durch den Schließungsansatz besser quantifizieren zu können, werden Profile des größten Eigenwertes in den gleichen Querschnitten dargestellt, wie die Orientierungsellipsen. (Abbildungen 6.20, 6.21 und 6.22). Der größte Eigenwert λ_{\max} wird durch den hybriden Schließungsansatz in Wandnähe um bis zu 10% gegenüber dem IBOF-5 Schließungsansatz überschätzt. So zeigt das Profil bei $\varphi_3 = 67.5^\circ$ mit dem hybriden Schließungsansatz im Gegensatz zum IBOF-Modell zwei lokale Orientierungsminima, d.h. zwei „Strähne“ mit einer breiteren Orientierungsverteilung. Die Fasern innerhalb dieser „Strähne“ werden stromabwärts des Krümmers erst allmählich wieder in den Orientierungszustand der ausgebildeten Kanalströmung umorientiert. Die mit dem IBOF-Modell berechnete Faserorientierung in der äußeren Hälfte des Krümmers ist stärker in Strömungsrichtung ausgerichtet. Die Ergebnisse des hybriden Modells weisen im Profil bei $y_d = 5H$ in der Kanalmitte immer noch einen Bereich mit einer engeren Orientierungsverteilung auf, als in der ausgebildeten Kanalströmung.

Der Einfluss des Formfaktors ist für das IBOF-5 Modell und einem Faseranteil von $\Phi = 1.58\%$ in den Abbildungen 6.23, 6.24, 6.25 dargestellt. Obwohl der Formfaktor um den Faktor fünf auf $r = 100$ erhöht wurde, sind die Orientierungsprofile (λ_{\max}) für den größeren Formfaktor

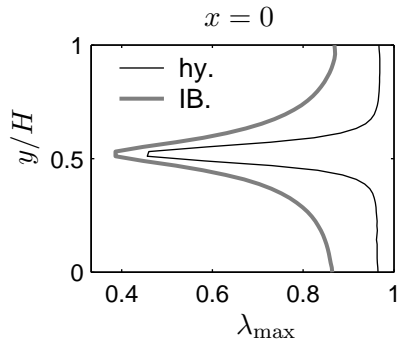


Abbildung 6.20: $r = 20$, $\Phi = 1.58\%$, größter Eigenwert λ_{\max} am Eintritt des Krümmers bei $x = 0$, Schließungsansatz habrid (hy.) und IBOF-5 (IB.)

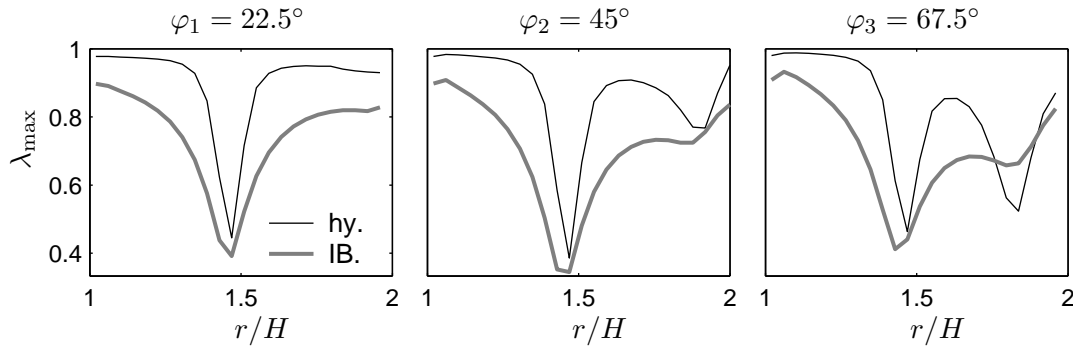


Abbildung 6.21: $r = 20$, $\Phi = 1.58\%$, größter Eigenwert λ_{\max} , radiale Profile bei φ_1 , φ_2 und φ_3 , Schließungsansatz habrid (hy.) und IBOF-5 (IB.)

in Wandnähe zu etwas geringeren Werten von λ_{\max} verschoben.

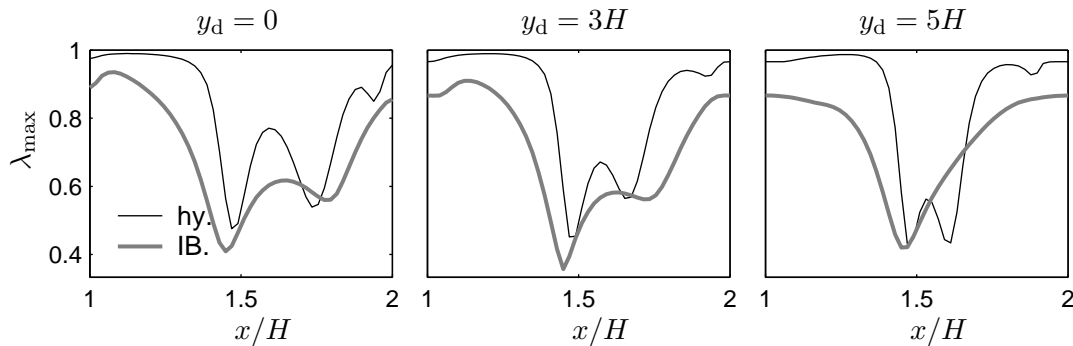


Abbildung 6.22: $r = 20$, $\Phi = 1.58\%$, IBOF-5, größter Eigenwert λ_{\max} , Profile stromabwärts des Krümmers, Schließungsansatz habrid (hy.) und IBOF-5 (IB.)

6.5 Zusammenfassung

Mit dem geschlossenen IBOF-5 Fasermodell wurde für eine konzentrierte Glasfasersuspension die Umströmung eines Zylinders quantitativ mit experimentellen Literaturergebnissen von YASUDA et al. validiert. Die Fasermodelle besitzen als freie Modellparameter die sogenannten Kopplungskoeffizienten, die den Faserspannungstensor vom Konfigurationszustand

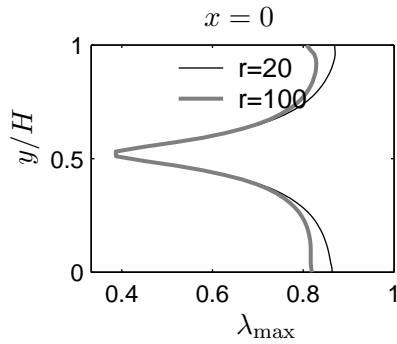


Abbildung 6.23: Vergleich $r = 20$ und $r = 100$, $\Phi = 1.58\%$, IBOF-5, größter Eigenwert λ_{\max} am Eintritt des Krümmers bei $x = 0$

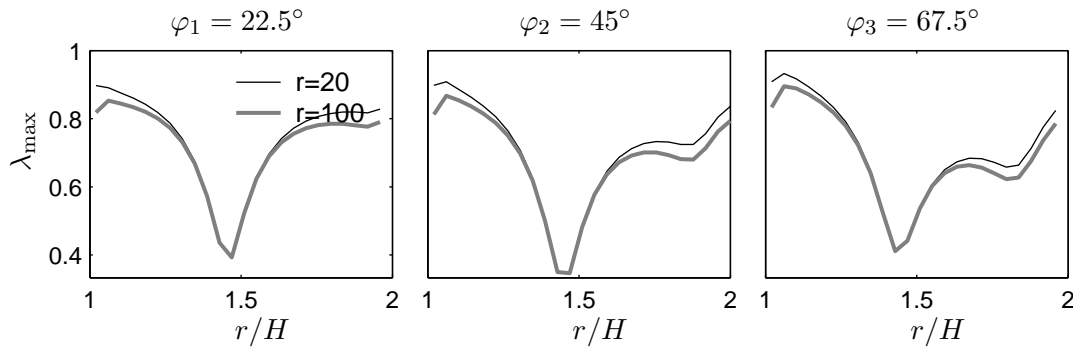


Abbildung 6.24: $r = 20$, $\Phi = 1.58\%$, IBOF-5, größter Eigenwert λ_{\max} , radiale Profile bei φ_1 , φ_2 und φ_3

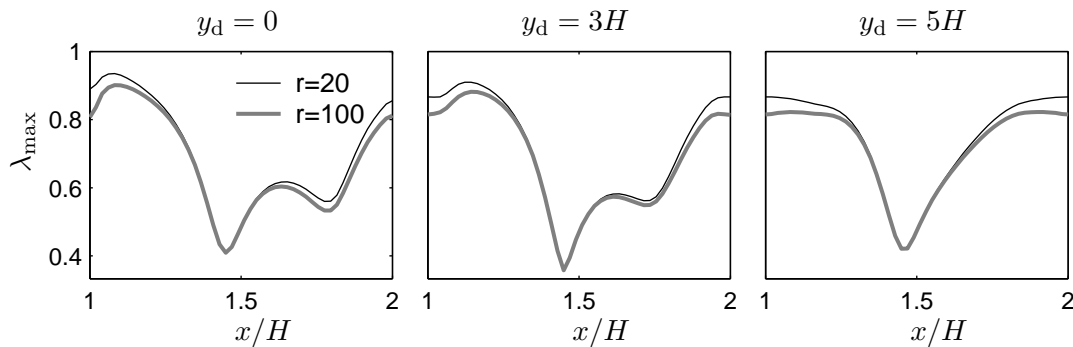


Abbildung 6.25: Vergleich $r = 20$ und $r = 100$, $\Phi = 1.58\%$, IBOF-5, größter Eigenwert λ_{\max} , Profile stromabwärts des Krümmers

der Fasern abhängig machen. Für halbverdünnte und konzentrierte Suspensionen ist mit dem Faser-Faser-Interaktionskoeffizienten ein weiterer Modellparameter vorhanden. Für diese Parameter wurde aus empirischen Gleichungen in Abhängigkeit des Faservolumenanteils und des Formfaktors ein Parametersatz für die numerische Berechnung ermittelt. Experimentell und numerisch bestimmt wurde der größte Eigenwert des Konfigurationstensors als skalares Orientierungsmaß sowie die durch den Konfigurationstensor aufgespannten Orientierungselipsen und Hauptorientierungswinkel. Sowohl im Bereich der ausgebildeten Kanalströmung als auch im Zylindernachlauf konnte gezeigt werden, dass die Faserorientierung durch das Modell eine hohe Übereinstimmung zu den experimentellen Ergebnissen liefert. Lediglich der

Grad der Ausrichtung wird im Zylindernachlauf überschätzt. Da zunächst nur Berechnungen mit empirischen Standardparametersätzen durchgeführt wurden, ist die Übereinstimmung zwischen den experimentellen und theoretischen Ergebnissen bereits sehr gut. Ergänzend könnten die freien Parameter an viskosimetrische Strömungen der betrachteten Suspension angepasst werden. Hierfür fehlte jedoch bisher für die betrachtete Suspension eine ausreichende Datenbasis. Darüber hinaus wurden verschiedene Modelle in der Strömung durch einen 90° -Krümmer miteinander verglichen. Mit dem hybriden Schließungsansatz wurde ein populärer Ansatz implementiert, der im Vergleich zu dem auf den Invarianten des Konfigurationstensors basierenden IBOF-5 Ansatz von CHUNG und KWON den Grad der Faserorientierung in Strömungsrichtung überschätzt. Abschließend wurde herausgestellt, dass die Fasern in Bereichen mit hohen Geschwindigkeitsgradienten (z. B. an den Kanalwänden) stärker in Strömungsrichtung orientiert werden. Im Bereich mit niedrigen Gradienten (Kanalmitte) wird die Faserkonfiguration, die im Eintritt der Geometrie vorgegeben wurde, konvektiv durch den Krümmer transportiert. Die Wahl der Faserkonfiguration im Strömungseintritt ist insbesondere für die Strömungsberechnung von Teilen komplexer Geometrien von großer Bedeutung und möglichst gut an reale Orientierungszustände anzupassen.

7 Zusammenfassung

Wie zahlreich sind die Dinge, derer ich nicht bedarf.
Sokrates

In der vorliegenden Arbeit wurden Strömungen von Polymerlösungen und Fasersuspensionen mit Mikro-Makro-Modellen numerisch berechnet und der Einfluss der Strömungsparameter auf den mikrostrukturellen Orientierungszustand charakterisiert. Ziel des ersten Teils der Arbeit war die Berechnung viskosimetrischer Strömungen von Polymerlösungen mit Modellen unterschiedlicher Modellierungstiefe. Im Mittelpunkt stand dabei die oszillierende 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 für Polymerlösungen nicht diskutiert. In der vorliegenden Arbeit wurde für ein offenes Feder-Hantel-Modell mit nichtlinearem Federkraftgesetz die Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion der Konfiguration durch eine deterministische Lösungsmethode der Fokker-Planck-Gleichung mit Finiten-Differenzen berechnet. Die Größe des zu diskretisierenden Konfigurationsraumes konnte durch ein federmittenzentriertes Koordinatensystem gegenüber dem bisher üblichen kugelformigen Koordinatensystem verkleinert werden und so der Rechenaufwand für die numerische Lösung der Differentialgleichung erheblich reduziert werden. Mit den geschlossenen Modellen FENE-L, -P und -CR wurden darüber hinaus drei Ansätze mit geringerer Modellierungstiefe implementiert, die anhand des Konfigurationstensors nur noch Aussagen über den mittleren Konfigurationszustand der Feder-Hanteln ermöglichen. Zusätzlich wurde für stationäre Scher- und Dehnströmungen der Strömungseinfluss auf die mittlere Federlänge herausgestellt. Darüber hinaus wurden anhand der Eigenvektoren und -werte des Konfigurationstensors Orientierungsellipsoiden berechnet und die Breite der Orientierungsverteilung in Abhängigkeit der Scher- und Dehngeschwindigkeit diskutiert. Insbesondere die Berechnung der Orientierungsellipsoiden lieferte dabei wichtige Informationen über den mikrostrukturellen Orientierungszustand, wie z. B. den Orientierungsgrad in Abhängigkeit der Strömungsparameter.

Das offene Feder-Hantel-Modell wurde mit den geschlossenen Modellen FENE-L und -P in oszillierender Scherströmung bei kleiner und großer Deformationsamplitude verglichen (SAOS- und LAOS-Strömung). Die Implementierung der deterministischen Methode zur Lösung der Fokker-Planck Gleichung ermöglichte aufgrund der hohen Genauigkeit die Bestimmung der Frequenzspektren auch bei nur geringen Intensitäten der höheren Frequenzanteile. Für das FENE-L Modell erreichte die Summe der Intensitäten der ersten drei höheren Frequenzanteile im diskutierten Parameterfeld ($\gamma_0 \in [0.2, 10]$, $De \in [0.2, 20]$) für die Spannungen bis zu 30% der Intensität der Grundfrequenz. Für die Spur des Konfigurationstensors betrug diese immerhin noch bis zu maximal 5% der Grundfrequenzintensität. Mit zunehmender Deformationsamplitude richteten sich die Feder-Hanteln in eine bevorzugte Raumrichtung aus und mit steigender Deborah-Zahl wurde die Schwingungsamplitude des Winkels zwischen der größeren Ellipsenhauptachse und der y -Achse geringer. Der numerische Algorithmus für

das offene FENE-Modell hat sich bis zu einer dimensionslosen Schergeschwindigkeitsamplitude (Weissenberg-Zahl) von $We=15$ als sehr stabil erwiesen. Die in der Verteilungsfunktion auftretenden hohen Gradienten führten erst bei noch größeren Weissenbergzahlen zu unphysikalischen Oszillationen. Das geschlossene FENE-L Modell hat sich in oszillierender Scherung als eine gute Näherung an das offene Feder-Hantel-Modell erwiesen, wobei die mittlere Federlänge durch das geschlossene Modell allerdings etwas überschätzt wird. Die Ausrichtung der Orientierungsellipsoiden stimmte für die unterschiedlichen Modelle auch bei großen Deformationsamplituden gut überein.

In einem zweiten Teil der Arbeit wurden geschlossene Mikro-Makro-Modelle für die numerische Berechnung von komplexen Strömungen eingesetzt und diskutiert. Für eine Zylinderumströmung wurde das Modell einer konzentrierten Glasfasersuspension mit Faser-Faser-Wechselwirkungen und dem auf den Invarianten des Konfigurationstensors basierendem Schließungsansatz IBOF-5 von CHUNG und KWON erfolgreich mit experimentellen Literaturergebnissen von YASUDA et al. validiert. Experimentell und numerisch bestimmt wurden u. a. der größte Eigenwert des Konfigurationstensors als skalares Orientierungsmaß sowie die durch den Konfigurationstensor aufgespannten Orientierungsellipsen und deren Orientierungswinkel. Sowohl im Bereich der ausgebildeten Kanalströmung als auch im Zylindernachlauf konnte gezeigt werden, dass die durch das Modell vorhergesagte Faserorientierung eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen liefert. Obwohl hier empirische Standardparametersätze des Fasermodells verwendet wurden, ist die Übereinstimmung zwischen der numerischen Strömungsberechnung und experimentellen Ergebnissen so gut, dass das geschlossene Faser-Modell mit dem IBOF-5-Schließungsansatz und Faser-Faser-Wechselwirkungen als praxistauglich für die makroskopische Strömungsberechnung von Fasersuspensionen eingestuft werden kann. Lediglich die Verteilungsbreite der Orientierung wurde im Zylindernachlauf teilweise unterschätzt. Darüber hinaus wurden am Beispiel der Strömung durch einen 90° -Krümmer die Schließungsansätze „IBOF-5“ und „hybrid“ miteinander verglichen. Mit dem hybriden Schließungsansatz wurde ein populärer Ansatz implementiert, der im Vergleich zum IBOF-5 Ansatz den Grad der Faserorientierung in Strömungsrichtung überschätzt. Abschließend wurde herausgestellt, dass die Fasern in Bereichen mit hohen Geschwindigkeitsgradienten (z. B. an den Kanalwänden) stärker in Strömungsrichtung orientiert werden. Im Bereich mit niedrigen Gradienten (Kanalmitte) wird die Faserkonfiguration, die im Eintritt der Geometrie vorgegeben wurde, konvektiv durch den Krümmer transportiert. Numerische Berechnungsergebnisse wurden mit experimentellen Untersuchungen für eine konzentrierte Suspension erfolgreich quantitativ validiert und es wurde gezeigt, dass die implementierten Modelle für die Vorhersage des Orientierungszustandes der betrachteten Fasersuspension geeignet sind. In der Literatur sind dazu bisher keine Beiträge vorhanden.

A Anhang

Diese ganze Schreibung. Bleistifte und was nicht alles. Überbewertet, wenn man mich fragt.

I-Ah aus „Pu der Bär“, A.A. Milne

A.1 Stationäre Scherströmung: analytische Lösung FENE-P

$$\begin{aligned}A_{22} &= \frac{b - A_{11}}{2 + b}, \quad A_{33} = \frac{b - A_{11} - A_{22}}{b + 1}, \quad A_{12} = \dot{\gamma}\lambda \frac{(b - A_{11})^2}{(b + 2)^2} \\A_{11} &= b + \frac{1}{6\dot{\gamma}\lambda} C_1 + \frac{1}{\dot{\gamma}\lambda} \frac{C_2}{C_1} \\C_1 &= (2 + b) \left[6 \left(-9\dot{\gamma}\lambda b + \sqrt{3} \sqrt{2b^3 + 9b^2(3\lambda^2 \dot{\gamma}^2 + 2) + 54b + 54} \right) \right]^{\frac{1}{3}} \\C_2 &= -(b + 3)(2 + b)^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_P &= \frac{1}{1 - \text{tr}(\mathbf{A})/b} \mathbf{A} - \boldsymbol{\delta} \\S_{11} &= \frac{A_{11}}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b} - 1 \\S_{22} &= \frac{A_{22}}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b} - 1 \\S_{33} &= \frac{A_{33}}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b} - 1 \\S_{12} &= \frac{A_{12}}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b}\end{aligned}$$

A.2 Stationäre Scherströmung: analytische Lösung FENE-CR

$$\begin{aligned}A_{22} &= 1, \quad A_{33} = 1, \quad A_{12} = \dot{\gamma}\lambda \left(\frac{b - A_{11} - 2}{b} \right) \\A_{11} &= -2 + b + \frac{b}{4\lambda^2 \dot{\gamma}^2} \left(b - [-24\dot{\gamma}^2 \lambda^2 + 8\dot{\gamma}^2 \lambda^2 b + b^2]^{\frac{1}{2}} \right) \\A_{11} &= -2 + b + \frac{b}{4\lambda^2 \dot{\gamma}^2} C_1 \\C_1 &= b - [-24\dot{\gamma}^2 \lambda^2 + 8\dot{\gamma}^2 \lambda^2 b + b^2]^{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_{\text{CR}} &= \frac{1}{1 - \text{tr}(\mathbf{A})/b} (\mathbf{A} - \delta) \\
 S_{11} &= \frac{A_{11} - 1}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b} \\
 S_{12} &= \frac{A_{12}}{1 - (A_{11} + A_{22} + A_{33})/b} \\
 S_{11} &= \frac{4\lambda^2\dot{\gamma}^2(3-b)}{C_1} - b, \quad S_{12} = \dot{\gamma}\lambda = S_{21}, \quad S_{22} = S_{33} = 0
 \end{aligned}$$

A.3 Diskretisierte Randbedingung der FP-Gleichung für $\vartheta = 0$

In diskretisierter Form mit zentralen Diffrenzen zweiter Ordnung erhält man aus Gl. (3.27) für $\vartheta_i = 0$ mit einem äquidistanten Gitter in ϑ -Richtung und dem Gitterabstand $\Delta\vartheta$:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \right) &= \frac{1}{\vartheta_{i+1} - \vartheta_{i-1}} \left(\sin(\vartheta_{i+1}) \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \Big|_{i+1} - \sin(\vartheta_{i-1}) \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \Big|_{i-1} \right), \\
 -\sin(\vartheta_{i-1}) &= \sin(\vartheta_{i+1}), \\
 \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \Big|_{i+1} &= \frac{\psi_{i+2} - \psi_i}{2\Delta\vartheta}, \quad \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} \Big|_{i-1} = \frac{\psi_{i-2} - \psi_i}{2\Delta\vartheta}.
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Die nicht mehr zum Rechengebiet gehörenden Punkte ϑ_{i-1} und ϑ_{i-2} können durch Drehung um π in φ -Richtung durch ϑ_{i+2} und ϑ_{i+1} ersetzt werden und es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \frac{\sin(\vartheta_{i+1})}{4\Delta\vartheta^2} (\psi_{i+2,\varphi=0} - \psi_{i,\varphi=0} + \psi_{i+2,\varphi=\pi} - \psi_{i,\varphi=\pi}) &= 0, \\
 \Rightarrow \psi(\vartheta = 0) &= \frac{1}{2}(\psi(2\Delta\vartheta, \varphi = 0) - \psi(2\Delta\vartheta, \varphi = \pi)).
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

A.4 Fasersuspension: IBOF-5 Schließungsansatz

Die Konstanten des Schließungsansatzes von CHUNG und KWON in Gleichung (6.22) lauten:

Tabelle A.1: IBOF-5 Parametersatz

$c(i, j)$	$i = 3$	$i = 4$	$i = 6$
$j = 1$	0.24940908165786e+02	-0.497217790110754e+00	0.234146291570999e+02
$j = 2$	-0.435101153160329e+03	0.23498797511405e+02	-0.412048043372534e+03
$j = 3$	0.372389335663877e+04	-0.391044251397838e+03	0.319553200392089e+04
$j = 4$	0.703443657916476e+04	0.153965820593506e+03	0.573259594331015e+04
$j = 5$	0.823995187366106e+06	0.152772950743819e+06	-0.485212803064813e+05
$j = 6$	-0.133931929894245e+06	-0.213755248785646e+04	-0.605006113515592e+05
$j = 7$	0.880683515327916e+06	-0.400138947092812e+04	-0.477173740017567e+05
$j = 8$	-0.991630690741981e+07	-0.185949305922308e+07	0.599066486689836e+07
$j = 9$	-0.159392396237307e+05	0.296004865275814e+04	-0.110656935176569e+05
$j = 10$	0.800970026849796e+07	0.247717810054366e+07	-0.460543580680696e+08
$j = 11$	-0.237010458689252e+07	0.101013983339062e+06	0.203042960322847e+07
$j = 12$	0.379010599355267e+08	0.732341494213578e+07	-0.556606156734835e+08
$j = 13$	-0.337010820273821e+08	-0.147919027644202e+08	0.567424911007837e+09
$j = 14$	0.322219416256417e+05	-0.104092072189767e+05	0.128967058686204e+05
$j = 15$	-0.257258805870567e+09	-0.635149929624336e+08	-0.152752854956514e+10
$j = 16$	0.214419090344474e+07	-0.247435106210237e+06	-0.499321746092534e+07
$j = 17$	-0.449275591851490e+08	-0.902980378929272e+07	0.132124828143333e+09
$j = 18$	-0.213133920223355e+08	0.7249697968073995e+07	-0.162359994620983e+10
$j = 19$	0.157076702372204e+10	0.487093452892595e+09	0.792526849882218e+10
$j = 20$	-0.232153488525298e+05	0.138088690964946e+05	0.466767581292985e+04
$j = 21$	-0.395769398304473e+10	-0.160162178614234e+10	-0.128050778279459e+11

Literaturverzeichnis

- [1] Fan, Z. und Advani, S. G., *Characterization of orientation state of carbon nanotubes in shear flow*, Polymer **46** (2005), 5232–5240.
- [2] Ashrafi, B. und Hubert, P., *Modeling the elastic properties of carbon nanotube array/polymer composites*, Composites Science and Technology **66** (2006), 387–396.
- [3] Vadasz, J. J., Govendor, S. und Vadasz, P., *Heat transfer enhancement in nano-fluids suspensions: Possible mechanisms and explanations*, Int. J. Heat and Mass Transfer **48** (2005), 2673–2683.
- [4] Choi, S., Zhang, Z., Yu, W., Lockwood, F. und Grulke, E., *Anomalous thermal conductivity enhancement in nanotube suspensions*, Applied Physics Letters **79** (2001), Nr. 14, 2252–2254.
- [5] Bird, R. und Öttinger, H., *Transport Properties of Polymeric Liquids*, Annu. Rev. Phys. Chem. **43** (1992), 371–406.
- [6] Wilhelm, M., *Fourier-Transform Rheology*, Macromolecular Materials and Engineering **287** (2002), 83–105.
- [7] Hyun, K., Kim, S., Ahn, K. und Lee, S., *Large amplitude oscillatory shear as a way to classify the complex fluids*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **107** (2002), 51–65.
- [8] Hyun, K., Nam, J., M., W., Ahn, K. H. und Lee, S., *Nonlinear response of complex fluids under LAOS (large amplitude oscillatory shear) flow*, Korea-Australia. Rheol. J. **15** (2003), Nr. 2, 97–105.
- [9] Hyun, K., Nam, J., M., W., Ahn, K. H. und Lee, S., *Large amplitude oscillatory shear behavior of PEO-PPO-PEO triblock copolymer solutions*, Rheologica Acta **45** (2006), 239–249.
- [10] Atalik, K. und Keunings, R., *On the occurrence of even harmonics in the shear stress response of viscoelastic fluids in large amplitude oscillatory shear*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **122** (2004), 107–116.
- [11] Phan-Thien, N., Newberry, M. und Tanner, R., *Non-linear oscillatory flow of a soft solid-like viscoelastic material*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **92** (2000), 67–80.
- [12] Lozinski, A., *Spectral methods for kinetic theory models of viscoelastic fluids*, 2003, Thesis, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
- [13] Chauviere, C., *Stabilized spectral element methods for the simulation of viscoelastic flows*, 2001, Thesis, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.

- [14] Chauvière, C. und Lozinski, A., *Simulation of complex viscoelastic flows using the Fokker-Planck equation: 3D FENE model*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **122** (2004), 201–214.
- [15] Kröger, M., *Simple models for complex nonequilibrium fluids*, Physics Reports **390** (2004), 453–551.
- [16] Walters, K. und Webster, M., *The distinctive CFD challenges of computational rheology*, Int. J. Num. Meth. Fluids **43** (2003), 577–596.
- [17] Keunings, R., *Advances in the Computer Modeling of the Flow of Polymeric Liquids*, Computational Fluid Dynamics Journal **9** (2001), 449–458.
- [18] Keunings, R., *Micro-Macro methods for the multiscale simulation of viscoelastic flow using molecular models of kinetic theory*, Rheology Reviews (2004), 67–98.
- [19] Giesekus, H., *Normblatt DIN 13342: Nicht-newtonsche Flüssigkeiten; Begriffe, Stoffgesetze - Anmerkungen und Erläuterungen*, Rheologica Acta **14** (1975), 1115–1119.
- [20] Ferziger, J. H. und Perić, M., *Computational methods for fluid dynamics*, Springer, Berlin, 1997.
- [21] Jasak, H., *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*, 1996, Ph.D. Thesis, University of London Imperial College.
- [22] Oldroyd, J., *Non-Newtonian effects in steady motion of some idealized elastico-viscous liquids*, Proceedings of the Royal Society of London A **275** (1958), 278–297.
- [23] Oldroyd, J., *On the formulation of rheological equations of state*, Proc. Roy. Soc. London A **200** (1950), 523–541.
- [24] Giesekus, H., *On configuration-dependent generalized Oldroyd derivatives*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **14** (1984), 47–65.
- [25] Öttinger, H., *Stochastic Processes in Polymeric Fluids: Tools and Examples for Developing Simulation Algorithms*, Springer, Berlin, 1996.
- [26] Chauvière, C., Fang, J., Lozinski, A. und Owens, G., *On the numerical simulation of flows of polymer solutions using high-order methods based on the Fokker-Planck equation*, International Journal of Modern Physics B **17** (2003), Nr. 1, 9–14.
- [27] Chauvière, C. und Lozinski, A., *Simulation of dilute polymer solutions using a Fokker-Planck equation*, Computers and Fluids **33** (2004), 687–696.
- [28] Lozinski, A. und Chauvière, C., *A fast solver for Fokker-Planck equation applied to viscoelastic flows calculations: 2D FENE model*, J. Computational Physics **114** (2003), 33–63.
- [29] Chinesta, F., Chaidron, G. und Poitou, *On the solution of Fokker-Planck equations in steady recirculating flows involving short fiber suspensions*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **113** (2003), 97–125.
- [30] Chiba, K., Ammar, A. und Chinesta, F., *On the fiber orientation in steady recirculating flows involving short fibers suspensions*, Rheol. Acta **44** (2005), 406–417.

- [31] Bird, R., Hassager, O., Armstrong, R. und Curtiss, C., *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 2: Kinetic Theory*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [32] Bird, R., Stewart, W. und Lightfoot, E., *Transport Phenomena*, 2. Aufl., John Wiley & Sons, New York, 2002.
- [33] Franke, H., *Lexikon der Physik*, 3. Aufl., Franckh'sche Verlagshandlung, Stuttgart, 1969.
- [34] Tolman, R., *The Principles of Statistical Mechanics*, Oxford University Press, London, 1938.
- [35] Warner, H. J., *Kinetic theory and rheology of dilute suspensions of finitely extendible dumbbells*, Industrial and Engineering Chemistry/ Fundamentals **11** (1972), Nr. 3, 379–387.
- [36] Fan, X., *Viscosity, first normal-stress coefficient, and molecular stretching in dilute polymer solutions*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **17** (1985), 125–144.
- [37] Herrchen, M. und Öttinger, H., *A detailed comparison of various FENE dumbbell models*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **68** (1997), 17–42.
- [38] Bird, R., Hassager, O., Armstrong, R. und Curtiss, C., *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 2: Kinetic Theory*, 2 Aufl., John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [39] Quinzani, L., McKinley, G., Brown, R. und Armstrong, R., *Modeling the rheology of polyisobutylene solutions*, Journal of Rheology **34** (1990), Nr. 5, 705–748.
- [40] Ilg, P., Karlin, I. und Öttinger, H., *Canonical distribution functions in polymer dynamics. (I). Dilute solutions of flexible polymers*, Physica A **315** (2002), 367–385.
- [41] Lielens, G., Halin, P., Jaumain, I., Keunings, R. und Legat, V., *New closure approximations for the kinetic theory of finitely extensible dumbbells*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **76** (1998), 249–279.
- [42] Peterlin, A., *Einfluß der endlichen Moleküllänge auf die Gradientenabhängigkeit des Staudinger-Index*, Die Makromolekulare Chemie **44** (1961), 338–346.
- [43] Keunings, R., *On the Peterlin approximation for finitely extensible dumbbells*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **68** (1997), 85–100.
- [44] Boger, D., *A highly elastic constant-viscosity fluid*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **3** (1977/78), 87–91.
- [45] Mackay, M. E. und Boger, D. V., *An explanation of the rheological properties of Boger fluids*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **22** (1987), 235–243.
- [46] Chilcott, M. und Rallison, J., *Creeping flow of dilute polymer solutions past cylinders and spheres*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **29** (1988), 381–432.
- [47] Lielens, G., Keunings, R. und Legat, V., *The FENE-L and FENE-LS closure approximations to the kinetic theory of finitely extensible dumbbells*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **87** (1999), 179–196.

- [48] Kriebitzsch, S., *Viskoelastische Flüssigkeiten in Scher- und Dehnströmungen: Numerische Berechnung mit geschlossenen Feder-Hantel-Modellen*, 2005, Studienarbeit, Universität Dortmund.
- [49] van Heel, A., Hulsen, M. und van den Brule, B., *On the selection of parameters in the FENE-P model*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **75** (1998), 253–271.
- [50] Kröger, M., *Lecture Notes in physics: Models for Polymeric and Anisotropic Liquids*, Springer, Berlin, 2005.
- [51] Smyth, S., Liang, C. und Mackay, M. E., *The stress jump of a semirigid macromolecule after shear: Comparison of the elastic stress to the birefringence*, Journal of Rheology **39** (1995), Nr. 4, 659–672.
- [52] Collyer, A. A. und Clegg, D., *Rheological Measurement*, 2 Aufl., Chapman and Hall, 1998.
- [53] Atalik, K. und Keunings, R., *On the occurrence of even harmonics in the shear stress response of viscoelastic fluids in large amplitude oscillatory shear*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **122** (2004), 107–116.
- [54] Ramirez, R. W., *The FFT Fundamentals and Concepts*, Prentice-Hall, Inc., 1985.
- [55] Butz, T., *Fouriertransformation für Fußgänger*, B.G.Teubner Stuttgart, Leipzig, 1998.
- [56] Xie, X.-L. und Mai, Y.-W., *Dispersion and alignment of carbon nanotubes in polymer matrix: A review*, Mat. Sci. and Eng. Reports **49** (2005), 89–112.
- [57] Yasuda, K., Henmi, S. und Mori, N., *Effects of Abrupt Expansion Geometries on Flow-Induced Fiber Orientation and Concentration Distributions in Slit Channel Flows of Fiber Suspensions*, Polymer Composites **26** (2005), Nr. 5, 660–670.
- [58] Sepéhr, M., Ausias, G. und Carreau, P., *Rheological properties of short fiber filled polypropylene in transient shear flow*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **123** (2004), 19–32.
- [59] Sepéhr, M., Carreau, P., Moan, M. und Ausias, G., *Rheological properties of short fiber model suspensions*, Journal of Rheology **48** (2004), Nr. 5, 1023–1048.
- [60] Petrie, C. J., *The rheology of fibre suspensions*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **87** (1999), 369–402.
- [61] Jeffery, G., *The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid*, Proc. Roy. Soc. London A **102** (1922), 161.
- [62] Koch, D., *A model for orientation diffusion in fiber suspensions*, Phys. Fluids **7** (1995), Nr. 8, 2086–2088.
- [63] Zhou, K. und Lin, J.-Z., *Research on the behaviour of fiber orientation probability distribution function in the planar flows*, J. Zhejiang University Science **6A** (2005), Nr. 4, 257–264.
- [64] Stover, C., Koch, D. und Cohen, C., *Observations of fiber orientation in simple shear flow of a semi-dilute suspension*, J. Fluid Mech. **238** (1999), 277–296.

-
- [65] Folgar Portillo, F., *Fiber orientation in concentrated suspensions: A predictive model*, Phd. thesis, University of Illinois, Urbana-Campaign, 1983.
- [66] Advani, S. G. und Tucker III, C. L., *The Use of Tensors to Describe and Predict fiber Orientation in Short Fiber Composites*, Journal of Rheology **31** (1987), Nr. 8, 751–784.
- [67] Advani, S. G. und Tucker III, C. L., *Closure approximation for three-dimensional structure tensors*, Journal of Rheology **34** (1990), Nr. 3, 367–386.
- [68] Jack, D. und Smith, D., *An invariant based fitted closure of the sixth-order orientation tensor for modeling short-fiber suspensions*, Journal of Rheology **49** (2005), Nr. 5, 1091–1115.
- [69] Cintra, J. S. J. und Tucker III, C. L., *Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation*, Journal of Rheology **39** (1995), Nr. 6, 1095–1122.
- [70] Chung, D. und Kwon, T., *Applications of recently proposed closure approximations to injection molding filling simulation of short-fiber reinforced plastics*, Korea-Australia. Rheol. J. **12** (2000), Nr. 2, 125–133.
- [71] Chung, D. und Kwon, T., *Invariant-based optimal fitting closure approximation for the numerical prediction of flow-induced fiber orientation*, Journal of Rheology **46** (2002), Nr. 1, 169–194.
- [72] Hinch, E. und Leal, L., *Constitutive equations in suspension mechanics. Part 2. Approximate forms for a suspension of rigid particles affected by Brownian rotations*, J. Fluid Mech. **76** (1976), 187–208.
- [73] Chung, D. und Kwon, T., *Fiber orientation in the processing of polymer composites*, Korea-Australia. Rheol. J. **14** (2002), Nr. 4, 175–188.
- [74] Folgar, F. und Tucker, C. I., *Orientation behaviour of fibers in concentrated suspensions*, J. Reinf. Plast. Comp. **3** (1984), 98–119.
- [75] Bird, R., Armstrong, R. und Hassager, O., *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 1: Fluid Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [76] Ranganathan, S. und Advani, S. G., *Fiber-fiber interactions in homogeneous flows of nondilute suspensions*, Journal of Rheology **35** (1991), Nr. 8, 1499–1522.
- [77] Bay, R., *Fiber Orientation in Injection Molded Composites: A Comparison of Theory and Experiment*, Phd. thesis, University of Illinois, Urbana-Campaign, 1991.
- [78] Advani, S. G., *Composite Materials Series: Flow and Rheology in Polymer Composites Manufacturing*, Bd. 10, Elsevier, Amsterdam, 1994.
- [79] Phan-Thien, N., Fan, X.-J., Tanner, R. und Zheng, R., *Folgar–Tucker constant for a fibre suspension in a Newtonian fluid*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **103** (2001), Nr. 2-3, 251–260.
- [80] Lipscomb, G., Denn, M., Hur, D. und Boger, D., *The flow of fiber suspensions in complex geometries*, J. Non-Newt. Fluid Mech. **26** (1988), 297–325.

- [81] Yasuda, K., Kyuto, T. und Mori, N., *An experimental study of flow-induced fiber orientation and concentration distributions in a concentrated suspension flow through a slit channel containing a cylinder*, Rheol. Acta **43** (2004), 137–145.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Kerstin Heinen
Karl-Marx-Strasse 18
67227 Frankenthal (Pfalz)

E-Mail: thesis@kerstinheinen.de

Geb. am 04.08.1978 in Dortmund

Staatsangehörigkeit: Deutsch

Schulausbildung

08/1985–06/1989 Landgrafengrundschule, Dortmund
08/1989–06/1998 Stadtgymnasium, Dortmund
06/1998 Allgemeine Hochschulreife

Studium

10/1998–09/2003 Chemietechnik an der Universität Dortmund
09/2003 Abschluss des Studiums als Diplom-Ingenieurin

Berufliche Tätigkeiten

11/2003–11/2006 Wissenschaftliche Angestellte am Lehrstuhl Energieprozesstechnik und Strömungsmechanik, Prof. Dr.-Ing. K. Strauß
seit 04/2006 Strömungsmechanik, Prof. Dr.-Ing. P. Ehrhard

seit 12/2006 BASF AG, Ludwigshafen

Dortmund, 31. Mai 2007