

Entwicklung einer Methodik zur
Parameteridentifikation für
Orientierungsmodelle in
Spritzgießsimulationen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur

(Dr.-Ing.)

von Dipl.-Ing. Sebastian Mönlich

geb. am 24.08.1978 in Darmstadt

genehmigt durch die Fakultät Maschinenbau
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h. c. mult. Holm Altenbach

Prof. Dr.-Ing. Markus Stommel

Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Kolling

Promotionskolloquium am 16.12.2015

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Personen danken, die einen Teil zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Prof. Holm Altenbach danke ich für die Übernahme der Betreuung der Arbeit und dass er mir während der gesamten Bearbeitungszeit immer mit Rat und Motivation zur Seite gestanden hat.

Prof. Stefan Kolling und Prof. Markus Stommel möchte ich für die Übernahme der weiteren Gutachten, für die vielen inhaltlichen Diskussionen, kritischen Anregungen und gemeinsame Arbeit danken. Insbesondere in der „Projektgruppe Anisotropes Schadenskriterium“, bei deren anderen Mitgliedern ich mich ebenfalls herzlich bedanken möchte, wurden prägende Diskussionen geführt.

Des Weiteren gilt mein Dank meinen Kollegen der Abteilung Technologie des ehemaligen DKI, den studentischen Mitarbeitern und Hilfskräften die durch Ihren Einsatz das Gelingen der Arbeit möglich gemacht haben.

Bei meinen Eltern Gunter und Roswitha und meiner Freundin Anita möchte ich mich für ihre Geduld und ihr Verständnis bedanken, die Sie mir während dieser Zeit entgegengebracht haben.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird eine Methode zur Identifikation der Parameter von Faserorientierungsmodellen für Spritzgießsimulationen vorgestellt. Zuerst werden die Grundlagen, der sogenannten „integrativen Simulation“ und der Orientierungsberechnung an sich, umfassend dargelegt. Durch computertomographische Untersuchungen an Kunststoffen mit verschiedenen Fasergehalten werden experimentelle Analysen von Faserorientierungen und Faserlängenverteilungen durchgeführt und ausgewertet. Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen dienen als Basis für die Parameteridentifikation. Die entwickelte Methode basiert auf der externen, d.h. von der Spritzgießsimulation weitestgehend unabhängigen, iterativen Identifikation der Modellparameter. Durch einmaliges Berechnen einer Füllphase in der Spritzgießsimulation, werden der implementierten Software alle nötigen Informationen zur Verfügung gestellt. Integriert in den Ablauf der „integrativen Simulation“ und unter minimalem zeitlichen Aufwand, führen die so optimierten Parameter zu einer Verbesserung der Orientierungsvorhersage.

Abstract

In this work a method for identifying the parameters of fiber orientation models for injection molding simulations is presented. First, the basics, of the so called „integrative simulation “ and the orientation calculation itself, are considered. By computer-tomographic investigations of plastics with various fiber contents, experimental analysis of fiber orientations and fiber length distributions are realised and evaluated. The results of the experimental studies provide the basis for the parameter identification. The developed method is based on the external, i.e. for the most part independent of the injection molding simulation, iterative identification of the model parameters. The sole calculation of a filling stage in the injection molding simulation, provides all necessary information for the implemented software. Integrated into the process of the „integrative simulation “ and with minimal expenditure of time, the optimized parameters induce an improvement in the orientation prediction.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Einführung	1
1.2	Faserverstärkte Kunststoffe in strukturellen Bauteilen	3
1.3	Faserorientierung und Längenverteilung als Basis der Struktursimulation	5
1.4	Methodik und Gliederung der Arbeit	7
2	Berücksichtigung lokaler Faserorientierungen in Struktursimulationen	10
2.1	Spritzgießsimulation	12
2.1.1	Preprocessing in der Spritzgießsimulation	13
2.1.2	Berechnungsphase Spritzgießsimulation	20
2.1.3	Postprocessing in der Spritzgießsimulation	23
2.2	Mapping	24
2.3	Struktursimulation	26
3	Mathematische Ansätze zur Berechnung von Faserorientierungen	30

3.1	Diskussion der JEFFERY Gleichung	30
3.1.1	Annahmen und Herleitung	31
3.1.2	Ergebnisse im einfachen Scherfeld und Extremwertbe- trachtung	37
3.2	Diskussion der FOLGAR-TUCKER Gleichung	41
3.3	Tensorielle Beschreibung von Faserorientierungen	45
3.4	Neuere Modelle zur Berechnung von Faserorientierungen	49
3.4.1	Reduced-strain closure Modell	50
3.4.2	Anisotropic rotary diffusion Modell	52
4	Experimentelle Bestimmung von Faserorientierungen und Längenverteilungen	53
4.1	Versuchsprogramm	55
4.2	Computertomographische Analyse	57
4.3	Bildanalytische Auswertung mit der Monte-Carlo-Methode	63
4.4	Auswertung der Rohdaten	65
4.5	Diskussion der Ergebnisse	67
4.5.1	Faserlängen	67
4.5.2	Faserorientierung und Längenverteilung	69
5	Methodik zur Identifikation der Modellparameter	80
5.1	Ablauf von FOptimizer und Einbinden der Versuchsergebnisse	81
5.2	Zusammenführen von Geschwindigkeitskomponenten, Koordinaten und Zeit	85

5.3	Berechnung des Geschwindigkeitsgradienten mit isoparametrischem Ansatz	86
5.4	Integration der FOLGAR-TUCKER - Gleichung	91
5.5	Iteration und Abgleich mit experimentellen Ergebnissen	92
6 Parameteridentifikation für das		
FOLGAR-TUCKER Modell am Beispiel Stab		94
6.1	Berechnung der Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$	94
6.2	Referenzergebnisse der Faserorientierung	97
6.3	Auswertung der experimentellen Ergebnisse mit angepasster Schichtanzahl	98
6.4	Parameteridentifikation mit FOptimizer	101
6.5	Parameteridentifikation mit schichtbezogener Faserlänge $\frac{l_V}{d_m}$. . .	105
7 Zusammenfassung und Ausblick		
		107
A Anhang		
		110

Abbildungsverzeichnis

1.1	Kunststoffe im Auto (Bild: BMW)	2
1.2	Spritzgießmaschine von Arburg	4
1.3	Vergleich experimentell ermittelter und berechneter Elastizitätsmoduln	6
2.1	Ablauf der integrativen Simulation	11
2.2	Module der Spritzgießsimulation	12
2.3	Verfügbare Elementtypen	14
2.4	Vollständiges Simulationsmodell des Stabs	16
2.5	Viskosität, Grilon BG30S	18
2.6	pvT , Grilon BG30S	18
2.7	Spezifische Wärmekapazität, Grilon BG30S	19
2.8	Informationsverlust durch Übertragen der Orientierungsinformation	25
2.9	Ablauf der integrativen Simulation und benötigte Materialkennwerte	29
3.1	Elliptischer Partikel als Modell einer Faser	31

3.2	Einheitskugel	32
3.3	JEFFERY Orbit	33
3.4	Partikel in Stokes Strömung	34
3.5	JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = -1, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$. . .	38
3.6	JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 0, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$. . .	39
3.7	JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 1, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$. . .	39
3.8	JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 1, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = [0, 0, 1]^T$	40
3.9	JEFFERY Gleichung (3.20), $r_e = 25, \xi = 0,9968, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$	41
3.10	JEFFERY Gleichung (3.20), $r_e = 5, \xi = 0,9230, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$	41
3.11	Transversal isotropes Materialverhalten	48
3.12	Orthotropes Materialverhalten	48
3.13	Orthotropes oder quasiisotropes Materialverhalten	49
3.14	Unidirektionale Faserorientierung außerhalb des Hauptachsen- systems	49
3.15	Variation von C_i im FOLGAR-TUCKER Modell	51
3.16	Variation von κ RSC Modell	51
4.1	Verschiedene Stadien von Schliﬀproben	54
4.2	Schliﬀbild PA6GF30	54
4.3	Halbzeuggeometrie Platte	55
4.4	Halbzeuggeometrie Stab	56
4.5	Probenpositionen Halbzeuggeometrie Stab	57

4.6	Probenpostionen Halbzeuggeometrie Platte	57
4.7	Funktionsschema μ -CT	58
4.8	Schema der μ -CT Probenmarkierung	59
4.9	Schnittbild PA6GF30 mit Orientierungsmarkierung	60
4.10	Präparierte Probe auf Probenhalter	61
4.11	Durchlichtbild PA6GF30	62
4.12	Schnittbild PA6GF30	62
4.13	Problemgebiet für Ansätze ohne Modellannahmen	63
4.14	Flussdiagramm der Einzelfasererkennung	64
4.15	Standardabweichung von A_{22} aus 3 Messungen an 3 Proben . . .	65
4.16	PA6GF15, Platte, Position 5, Faserorientierung	70
4.17	PA6GF15, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V . .	70
4.18	PA6GF30, Platte, Position 5, Faserorientierung	71
4.19	PA6GF30, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V . .	71
4.20	PA6GF50, Platte, Position 5, Faserorientierung	72
4.21	PA6GF50, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V . .	72
4.22	PA6GF15, Stab, Position 3, Faserorientierung	73
4.23	PA6GF15, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	73
4.24	PA6GF15, Stab, Position 6, Faserorientierung	74
4.25	PA6GF15, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	74
4.26	PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung	75
4.27	PA6GF30, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	75

4.28	PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung	76
4.29	PA6GF30, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	76
4.30	PA6GF50, Stab, Position 3, Faserorientierung	77
4.31	PA6GF50, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	77
4.32	PA6GF50, Stab, Position 6, Faserorientierung	78
4.33	PA6GF50, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V . . .	78
4.34	PA6GF30, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V und Orientierung in Schicht	79
5.1	Einbinden der Modellparameteridentifikation für Orientierungs- modelle in den Ablauf der integrativen Simulation	82
5.2	Struktogramm FOptimizer	83
5.3	Isoparametrisches Einheitselement	87
6.1	Strukturiertes Oberflächennetz	95
6.2	PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung, Simulation, 9 Schichten	97
6.3	PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung, Simulation, 9 Schichten	98
6.4	PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung, 9 Schichten . . .	99
6.5	PA6GF30, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V , 9 Schichten	99
6.6	PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung, 9 Schichten . . .	100
6.7	PA6GF30, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V , 9 Schichten	100

6.8	Vergleich der Ergebnisse für C_i an Positionen 3 und 6	102
6.9	Vergleich der Ergebnisse für C_i an Positionen 3 und 6 und Einfluss der Faserlänge	102
6.10	Vergleich der Ergebnisse für C_i an Position 3 und Einfluss der Schließungsformulierung	103
6.11	Position 3, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,082$, $l_V = 24,66$.	104
6.12	Position 6, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,031$, $l_V = 27,25$.	104
6.13	Position 3, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,082$, $l_V =$ Schichtweise aus Tabelle 6.5	106
A.1	PA6GF15, Platte, Position 1	111
A.2	PA6GF15, Platte, Position 2	112
A.3	PA6GF15, Platte, Position 3	113
A.4	PA6GF15, Platte, Position 4	114
A.5	PA6GF15, Platte, Position 5	115
A.6	PA6GF15, Platte, Position 6	116
A.7	PA6GF15, Platte, Position 7	117
A.8	PA6GF15, Platte, Position 8	118
A.9	PA6GF15, Platte, Position 9	119
A.10	PA6GF15, Platte, Sonderposition 1	120
A.11	PA6GF15, Platte, Sonderposition 2	121
A.12	PA6GF15, Platte, Sonderposition 3	122
A.13	PA6GF15, Stab, Position 1	123
A.14	PA6GF15, Stab, Position 2	124

A.15 PA6GF15, Stab, Position 3 125

A.16 PA6GF15, Stab, Position 4 126

A.17 PA6GF15, Stab, Position 5 127

A.18 PA6GF15, Stab, Position 6 128

A.19 PA6GF15, Stab, Position 7 129

A.20 PA6GF30, Platte, Position 1 130

A.21 PA6GF30, Platte, Position 2 131

A.22 PA6GF30, Platte, Position 3 132

A.23 PA6GF30, Platte, Position 4 133

A.24 PA6GF30, Platte, Position 5 134

A.25 PA6GF30, Platte 4, Position 5 135

A.26 PA6GF30, Platte 5, Position 5 136

A.27 PA6GF30, Platte, Position 7 137

A.28 PA6GF30, Platte, Position 8 138

A.29 PA6GF30, Platte, Position 9 139

A.30 PA6GF30, Platte, Sonderposition 1 140

A.31 PA6GF30, Platte, Sonderposition 2 141

A.32 PA6GF30, Platte, Sonderposition 3 142

A.33 PA6GF30, Stab, Position 1 143

A.34 PA6GF30, Stab, Position 2 144

A.35 PA6GF30, Stab, Position 3 145

A.36 PA6GF30, Stab 2, Position 3 146

A.37 PA6GF30, Stab 3, Position 3 147

A.38 PA6GF30, Stab, Position 4 148

A.39 PA6GF30, Stab, Position 5 149

A.40 PA6GF30, Stab, Position 6 150

A.41 PA6GF30, Stab 2, Position 6 151

A.42 PA6GF30, Stab 3, Position 6 152

A.43 PA6GF30, Stab, Position 7 153

A.44 PA6GF50, Platte, Position 5 154

A.45 PA6GF50, Platte, Position 6 155

A.46 PA6GF50, Stab, Position 3 156

A.47 PA6GF50, Stab, Position 6 157

Tabellenverzeichnis

1.1	Einteilung der faserverstärkten Kunststoffe	3
4.1	Versuchsprogramm μ -CT Analyse	56
4.2	Technische Eigenschaften SkyScan 1072-100	58
4.3	Parameter der μ -CT Analyse	61
4.4	Standardabweichung, Anzahl- und Volumengewichtete mittlere Faserlänge über der Wandstärke	67
4.5	Volumengewichtete mittlere Faserlänge über der Wandstärke	68
4.6	Änderung der mittleren Faserlänge über den Fließweg	69
6.1	Prozessparameter Stab und Platte	96
6.2	Randbedingungen für FOptimizer	101
6.3	Ermittelte C_i mit konstantem r_e aus Tabelle 6.2	102
6.4	Summe der Fehlerquadrate mit für C_i aus Tabelle 6.3	103
6.5	l_V/d_m für Einzelschichten	105
6.6	Vergleich C_i und Summe der Fehlerquadrate an Position 3 mit qdr	105

Symbolverzeichnis

\mathbf{v}	Geschwindigkeit, Tensor 1. Stufe <i>S. 8</i>
u, v, w	Komponenten des Geschwindigkeitsvektors <i>S. 8</i>
c_p	spez. Wärmekapazität <i>S. 17</i>
C_i	Faserinteraktionskoeffizient <i>S. 19</i>
E_F	E-Modul der Verstärkungsfaser <i>S. 19</i>
E_M	E-Modul der thermoplastischen Matrix <i>S. 19</i>
α_{\parallel}	therm. Ausdehnungskoeffizient parallel zur Faserrichtung <i>S. 19</i>
α_{\perp}	therm. Ausdehnungskoeffizient senkrecht zur Faserrichtung <i>S. 19</i>
ν_F	Querkontraktionszahl der Verstärkungsfaser <i>S. 19</i>
ν_M	Querkontraktionszahl der thermoplastischen Matrix <i>S. 19</i>
T	Temperatur, Tensor 0. Stufe <i>S. 20</i>
Λ	Wärmeleitfähigkeit, Tensor 2. Stufe <i>S. 20</i>
Σ	mech. Spannung, Tensor 2. Stufe <i>S. 20</i>
\mathbf{g}	Gravitation, Tensor 1. Stufe <i>S. 20</i>
$\dot{\gamma}$	Scherrate, Tensor 0. Stufe <i>S. 20</i>
η	Viskosität, Tensor 0. Stufe <i>S. 20</i>
ρ	Dichte, Tensor 0. Stufe <i>S. 20</i>

p	Druck, Tensor 0. Stufe <i>S. 20</i>
x, y, z	Koordinaten des kartesischen Koordinatensystems <i>S. 21</i>
\mathbf{E}	GREEN-LAGRANGE-Verzerrungstensor, Tensor 2. Stufe <i>S. 22</i>
\mathbf{F}	Deformationsgradient, Tensor 2. Stufe <i>S. 22</i>
\mathbf{I}	Einheitstensor, Tensor 2. Stufe <i>S. 22</i>
\mathbf{f}	Kraft, Tensor 1. Stufe <i>S. 22</i>
\mathbf{A}	Faserorientierungstensor, Tensor 2. Stufe <i>S. 24</i>
$r_e, \frac{l}{d}$	Aspektverhältnis der Faser <i>S. 31</i>
\mathbf{K}	Geschwindigkeitsgradient, Tensor 2. Stufe <i>S. 32</i>
\mathbf{x}	Ortsvektor, Tensor 1. Stufe <i>S. 32</i>
t	Zeit <i>S. 32</i>
S	Einheitskugeloberfläche <i>S. 32</i>
\mathbf{p}	Richtungseinheitsvektor einer Faser, Tensor 1. Stufe <i>S. 32</i>
\mathbf{D}	symmetrischer Teil von \mathbf{K} , Tensor 2. Stufe <i>S. 36</i>
\mathbf{W}	antisymmetrischer Teil von \mathbf{K} , Tensor 2. Stufe <i>S. 36</i>
l	Faserlänge, Tensor 0. Stufe <i>S. 66</i>
l_V	volumengewichtete mittlere Faserlänge, Tensor 0. Stufe <i>S. 66</i>
l_{nr}	ungewichtete mittlere Faserlänge <i>S. 67</i>
r	Faserradius, Tensor 0. Stufe <i>S. 66</i>
σ_X	Standardabweichung, Tensor 0. Stufe <i>S. 67</i>
d_m	durchschnittlicher Faserdurchmesser, Tensor 0. Stufe <i>S. 67</i>
\mathbf{A}_0	Startwert von \mathbf{A} , Tensor 2. Stufe <i>S. 92</i>

1 Einleitung

1.1 Einführung

Die Entwicklungen in der Industrie zeigen seit Jahren einen stetigen Zuwachs an strukturellen Bauteilen aus kurzfaserverstärkten Kunststoffen. Die Gründe für diese Tendenz sind verschiedener Natur. Zuerst sind die konstruktiven Möglichkeiten zu nennen. Mit dem am häufigsten eingesetzten Herstellungsverfahren, dem Spritzgießen, sind Bauteile mit großer konstruktiver Freiheit, angepassten Eigenschaften und integrierten Funktionen in einem Massenproduktionsprozess verfügbar. Die Herstellung von hoch komplexen Bauteilen in vollautomatisierten Prozessen resultiert in sehr geringen Stückkosten während der Produktion. Der größte Anteil der Kosten entsteht vor Produktionsstart, während der Konstruktionsphase und dem Werkzeugbau. Ein zweiter Grund für die stetige Zunahme von kurzfaserverstärkten Bauteilen sind die Entwicklungen in der chemischen Industrie. Durch die Verwendung von Additiven können, auf den jeweiligen Einsatzzweck, maßgeschneiderte Eigenschaften in den Polymerwerkstoffen eingestellt werden. Langzeitstabilisatoren, Widerstandsfähigkeit gegen Medieneinflüsse und Modifizierung des mechanischen Verhaltens machen Kunststoffe mit und ohne Verstärkungsfasern zu immer attraktiveren Werkstoffen.

Die Einsatzgebiete kurzfaserverstärkter Kunststoffe sind nicht auf einen Marktbereich beschränkt. Vielmehr finden sie sich in allen Bereichen des täglichen Gebrauchs wieder. Exemplarisch seien die Industriezweige mit dem größten Anteil aufgeführt:

- Automobilindustrie,
- Automobilzulieferer,
- Elektronikindustrie,
- Haushaltswarenindustrie,
- Luft- und Raumfahrt.

In Abbildung 1.1 sind einige Anwendungen für Kunststoffbauteile im Automobil dargestellt.

Getrieben vom Gedanken des „Materialleichtbaus“ werden in oben genannten Branchen klassische Konstruktionswerkstoffe, wie Stahl und Aluminium, substituiert. Gepaart mit der Kostenverteilung für spritzgegossene Bauteile ergeben sich neue Herausforderungen für Ingenieure und Entwickler.



Abbildung 1.1: Kunststoffe im Auto (Bild: BMW)

Um die Entwicklungskosten für spritzgegossene Bauteile möglichst gering zu halten, werden aussagekräftige Vorhersagemethoden benötigt. Es ist mittlerweile üblich, den Herstellungsprozess in einer sogenannten Prozesssimulation und dann das fertige Bauteil der FEM zu beschreiben bzw. Bauteileigenschaften vorherzusagen. Durch den, im Vergleich mit klassischen Konstruktionsmaterialien, wesentlich komplexeren Aufbau des Herstellungsverfahrens und der

mechanischen Eigenschaften der Polymere sind die Ergebnisse solcher Analysen aber nicht immer belastbar.

Im Rahmen dieser Dissertation soll ein Beitrag zur Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit von Prozesssimulationen geleistet werden.

1.2 Faserverstärkte Kunststoffe in strukturellen Bauteilen

Die Materialien, die unter dem Begriff „faserverstärkte Kunststoffe“ zusammengefasst sind, umfassen umfangreiche Permutationen von Faser-Matrix Kombinationen. Eine Möglichkeit der Unterteilung stellen die Eigenschaften der Komponenten Matrix und Fasern dar. Die Unterteilung in Tabelle 1.1 gibt einen Überblick über die am meisten eingesetzten Varianten [1].

Tabelle 1.1: Einteilung der faserverstärkten Kunststoffe

	Faserlänge < 1 mm	Faserlänge > 1 mm < 30 mm	Faserlänge > 30 mm
Thermoplastische Matrix	Spritzgusstypen	Spritzgusstypen	Organobleche
Duroplastische Matrix	-	SMC/BMC	Laminate

In dieser Arbeit werden ausschließlich kurzfaserverstärkte Thermoplaste behandelt, die im Spritzgießverfahren verarbeitet werden. Das Spritzgießverfahren stellt, neben dem Extrusionsverfahren, das häufigste Verarbeitungskonzept für diese Werkstoffe dar.

Der Spritzgießprozess ist ein diskontinuierliches Verfahren, das sich in die drei Phasen

- Füllphase,

- Nachdruckphase
- und Kühlphase

unterteilt. Eine typische Spritzgießmaschine der Firma Arburg ist in Abbildung 1.2 dargestellt.



Abbildung 1.2: Spritzgießmaschine von Arburg

Vor Beginn der Füllphase wird in der Plastifiziereinheit Kunststoffgranulat eingezogen, aufgeschmolzen und weitestgehend homogenisiert. Dies geschieht durch eine rotatorische Bewegung der Schnecke, die den wesentlichen Teil der Plastifiziereinheit darstellt. Durch die Drehbewegung der Schnecke wird Kunststoffgranulat durch verschiedene Bereiche der Plastifiziereinheit gefördert und sammelt sich in Form eines flüssigen Massepolsters im umschließenden Zylinder zwischen Schnecke und Düse. Während der Füllphase wird die flüssige Kunststoffschmelze in die Kavität des Werkzeuges eingespritzt. Dies geschieht durch eine axiale Bewegung der Schnecke. Durch ein Rückschlagventil wird verhindert, dass die Kunststoffschmelze über die Schneckengänge zurück in die Plastifiziereinheit fließt. Die anschließende Nachdruckphase, in der kaum noch Schmelze in das Werkzeug gefördert wird, dient zum Ausgleich des Volumenschwundes, den thermoplastische Polymere aufweisen. In der Kühlphase wird das Formteil soweit heruntergekühlt, dass es sich ohne Deformation entformen lässt. Zeitgleich wird erneut Kunststoffschmelze aufdosiert, um die Zykluszeiten kurz zu halten [2].

Der entscheidende Vorgang für das mechanische Verhalten eines kurzfaserverstärkten Bauteils ist die Füllphase. Wenn die Kunststoffschmelze in die Kavität einströmt, richten sich die in ihr enthaltenen Fasern aus. Wie aus der klassischen Laminattheorie bekannt ist, hängen die mechanischen Eigenschaften eines Composites von der Belastungsrichtung ab [1]. Dies ist auch bei kurzfaserverstärkten Thermoplasten der Fall [3]. Mit dem entscheidenden Unterschied, im Vergleich zu Laminaten, dass die Faserorientierung (FO) nicht bekannt ist. Hinzu kommt, dass beim Aufschmelzen des Kunststoffgranulats in der Plastifiziereinheit die Fasern stark mechanisch belastet werden und es zu Faserbruch kommt. Kurzfaserverstärkte Spritzgussbauteile weisen daher immer eine Faserlängenverteilung auf. Eine lastgerechte Auslegung von strukturellen Bauteilen aus kurzfaserverstärkten Kunststoffen erfordert zusätzliche Informationen um das Materialverhalten beschreiben zu können. Wie bei der klassischen Laminattheorie werden die mechanischen Eigenschaften der Faser- und Matrixwerkstoffe benötigt. Zusätzlich muss noch die Faserorientierung und Faserlängenverteilung ermittelt werden. Darüber hinaus werden mathematische Berechnungsmodelle benötigt, die es erlauben, die mechanischen Eigenschaften bei bekannter Faserorientierung vorherzusagen.

1.3 Faserorientierung und Längenverteilung als Basis der Struktursimulation

Mathematische Berechnungsmodelle für kurzfaserverstärkte Thermoplaste sind kommerziell verfügbar und bilden das mechanische Verhalten im linear elastischen Bereich bei bekannter Faserorientierung gut ab. Die Berechnung und Vorhersage von Faserorientierungen kann heute zudem über Prozesssimulationen abgebildet werden. Hier ist die Vorhersagegenauigkeit der Faserorientierung mit Vorsicht zu genießen. Eine detaillierte Darstellung des Berechnungsablaufs wird in Kapitel 2 dargelegt. An dieser Stelle soll nur festgestellt werden, dass die Grundlage aller anschließenden Berechnungen die Faserorientierung im Bauteil ist.

Um den Einfluss der Faserorientierung auf das mechanische Verhalten kurz-

faserverstärkter Thermoplaste darzustellen, wird im Folgenden der Elastizitätsmodul herangezogen. Der Elastizitätsmodul wurde als Referenz an einem unverstärkten Polypropylen (PP) sowie an Compounds des gleichen PP mit jeweils 10, 20 und 30 Gew.% Kurzglasfasern ermittelt. Um den Einfluss der Faserorientierung auf den Elastizitätsmodul darzustellen, wird ein Vergleich zwischen einer hypothetischen unidirektionalen Faserorientierung und den experimentellen Werten angestellt. Um die tatsächliche Leistungsfähigkeit der Berechnungsverfahren darzustellen, folgt schlussendlich ein Vergleich zwischen den experimentellen Daten und berechneten Elastizitätsmoduln, denen die tatsächliche Faserorientierung zu Grunde liegt. Berechnet wurden die Elastizitätsmoduln mit der MORI-TANAKA Homogenisierung (MT) [4–6]. Für die Berechnungen wurden Elastizitätsmodul und Querkontraktionszahl des unvestärkten PP aus den Versuchen, sowie Elastizitätsmodul und Querkontraktionszahl von E-Glasfasern aus der Literatur angenommen.

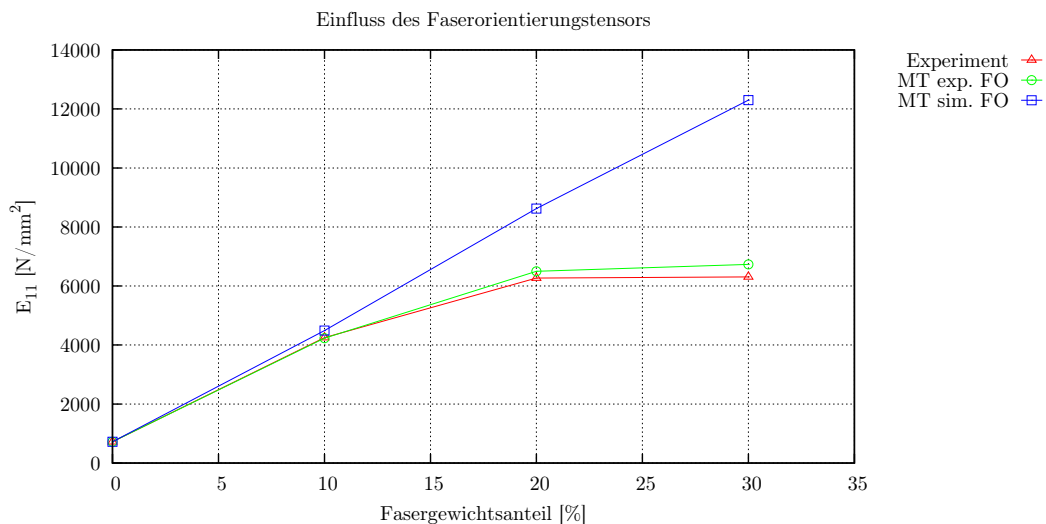


Abbildung 1.3: Vergleich experimentell ermittelter und berechneter Elastizitätsmoduln [7]

Die rote Kurve in Abbildung 1.3 zeigt den experimentell ermittelten Elastizitätsmodul E_{11} der oben genannten Materialien. Die verwendeten Probekörper [7, 8] wurden aus 80x80x2,5 [mm] Platten in Fließrichtung der Schmelze entnommen. Es zeigt sich ein starker Anstieg des Elastizitätsmoduls für das PP mit einem Glasfasergewichtsanteil von 10% (PPGF10), sowie ein weiterer leichter Anstieg von E_{11} für das PPGF20. Das PPGF30 zeigt hingegen nur

einen sehr kleinen Anstieg gegenüber dem PPGF20. Dies lässt sich auf eine zunehmende Interaktion der Fasern während des Füllvorgangs zurückführen, die eine Orientierung in Fließrichtung zunehmend erschwert. Für die Berechnung der blauen Kurve mit der MORI-TANAKA Homogenisierung wurde eine unidirektionale Faserorientierung im Probekörper angenommen. Für die unidirektionale Faserorientierung zeigt sich eine annähernd lineare Zunahme des Elastizitätsmoduls bei steigendem Fasergehalt.

Für die Berechnung der grünen Kurve mit der MORI-TANAKA Homogenisierung wurde an allen drei Compounds eine experimentelle Bestimmung der Faserorientierung (vgl. Kapitel 4) in den verwendeten Probekörpern durchgeführt. Die ermittelte Faserorientierung ist dann anstelle der unidirektionalen Annahme aus der blauen Kurve für die Homogenisierung verwendet worden.

Abbildung 1.3 zeigt eindeutig, dass bei bekannter Faserorientierung der Elastizitätsmodul mit aktuellen Berechnungsmethoden gut abgebildet werden kann. Ebenfalls konnte aufgezeigt werden, dass Abweichungen in der Orientierungsbeschreibung einen signifikanten Einfluss auf den Elastizitätsmodul haben. Daraus folgt, dass die in einer Spritzgießsimulation (SGS) berechnete Faserorientierung die Realität so genau wie möglich wieder geben muss. Alle Struktursimulationen (mechanische, thermomechanische oder dynamische) können nur so gute Ergebnisse liefern, wie es die vorher berechnete Faserorientierung zulässt.

1.4 Methodik und Gliederung der Arbeit

Die entwickelte Methodik zur Identifikation der Parameter von Faserorientierungsmodellen basiert auf der experimentellen Ermittlung von Faserorientierungen mit μ -Computertomographie (μ -CT) Analysen und der darauf aufbauenden Identifikation der Modellparameter mit dem, in der Programmiersprache **python** implementierten, FOLGAR-TUCKER Modell. Der gesuchte Parameter des FOLGAR-TUCKER Modells ist der sogenannte Interaktionskoeffizient C_i (vgl. Kapitel 3).

Die einzige Variable der Faserorientierungsmodelle ist die Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$, mit ihren Komponenten u, v und w , der Schmelze. Da es sich bei der Berechnung von Faserorientierungen bei allen kommerziellen Spritzgießsimulationen um ein reines Postprocessing handelt, gibt es keine Rückkopplung von Faserorientierungen auf andere Materialparameter, wie z.B. die Viskosität oder die Wärmeleitfähigkeit. Das heißt im Umkehrschluss, dass die Geschwindigkeit der Schmelze nicht von der Faserorientierung abhängig ist.

Eine Identifikation der Modellparameter innerhalb kommerzieller Codes erfordert immer das Lösen der Erhaltungsgleichungen (2.1), (2.2) und (2.3) für das komplette Modell, obwohl sich die Ergebnisse für $\mathbf{v}(t)$ bei den Iterationen der Parameter nicht ändern. Die Methodik die entwickelt wurde umgeht diesen Nachteil. Zuerst werden die Ergebnisse für $\mathbf{v}(t)$ während einer Füllphase berechnet und zu entsprechend vielen Zeitschritten abgespeichert. Danach werden diese Ergebnisse verwendet, um die Orientierungsgleichung zu lösen. Eine weitere Reduktion der Rechenzeit wird dadurch erreicht, dass nicht das komplette Modell berechnet wird. Nur die Positionen im Modell, zu denen auch experimentelle Ergebnisse vorliegen, werden berechnet. Das bedeutet, dass pro Position mit vorliegenden experimentellen Ergebnissen nur die Anzahl an Elementen integriert werden muss, mit der das Modell über die Bauteildicke diskretisiert wurde. Nimmt man eine moderate Diskretisierung von zehn Elementen über die Bauteildicke an und verfügt über experimentelle Ergebnisse an zwei Positionen im Bauteil, reicht es die Orientierungsgleichungen für 20 Elemente zu lösen. Das ist eine immense Verbesserung, wenn man sich vorstellt, dass die Anzahl von Elementen bei üblichen Spritzgießsimulationen einige Millionen umfasst.

Die Komplexität des Themas erfordert eine umfangreiche Einführung. Deshalb wird in Kapitel 2 der Stand der Technik und das generelle Vorgehen bei Struktursimulationen kurzfaserverstärkter Bauteile dargestellt und erläutert. In Kapitel 3 wird dann die grundlegende Gleichung der Orientierungsberechnung hergeleitet und diskutiert. Anschließend folgt eine kurze Einführung neuerer Modelle. In Kapitel 4 werden Versuchsprogramm, Auswertung und Ergebnisse der experimentellen Analysen diskutiert.

In Kapitel 5 wird die entwickelte Methodik und ihre Umsetzung vorgestellt. Es wird gezeigt, wie die Methode in den Entwicklungsprozess eingebunden werden kann, welche Versuche durchzuführen sind und wie die in der Spritzgießsimulation berechneten Eingangsdaten verarbeitet werden.

In Kapitel 6 wird die Methodik dann an einem Beispiel angewendet und die Ergebnisse diskutiert.

Abschließend wird die Arbeit in Kapitel 7 zusammengefasst und ein Ausblick für weitere Forschungsarbeiten gegeben.

2 Berücksichtigung lokaler Faserorientierungen in Struktursimulationen

In diesem Kapitel wird der Stand der Technik, das generelle Vorgehen bei der Simulation kurzfaserverstärkter Thermoplaste sowie die nötigen Materialbeschreibungen erörtert. Es werden die gängigen Begriffe eingeführt und Problemstellen des Prozesses herausgearbeitet.

Die Simulationskette kurzfaserverstärkter Thermoplaste wird als „integrative Simulation“ bezeichnet. Dieser Begriff soll die Einbeziehung des Herstellungsprozesses verdeutlichen. Dabei spielt es zuerst keine Rolle, welche Art von Struktursimulation letztendlich durchgeführt wird. Alle Ansätze, die auch bei isotropen Materialien angewendet werden, sind denkbar. So können auch für kurzfaserverstärkte Materialien quasistatische, dynamische und thermomechanische Strukturanalysen oder Modalanalysen durchgeführt werden. Wird nur das elastische Verhalten betrachtet, liegen die Unterschiede zu z.B. unverstärkten Thermoplasten einzig bei der Steifigkeitsmatrix. Diese ist bei kurzfaserverstärkten Materialien voll besetzt, da diese Materialien anisotropes Verhalten aufzeigen [9]. Außerdem ist durch den Herstellungsprozess und die sich dadurch einstellende Faserorientierung das Materialverhalten an allen Punkten im Bauteil unterschiedlich. Das bedeutet, dass die Kenntnis über das Materialverhalten in einem speziellen Zustand, d.h. bei einer Faserorientierung wie sie z.B. im Probekörper vorliegt, nicht ausreicht, um das Bauteilverhalten zu beschreiben. Diese zusätzliche Information der Faserorientierung wird in der

Spritzgießsimulation gewonnen.

Das prinzipielle Vorgehen bei der integrativen Simulation ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

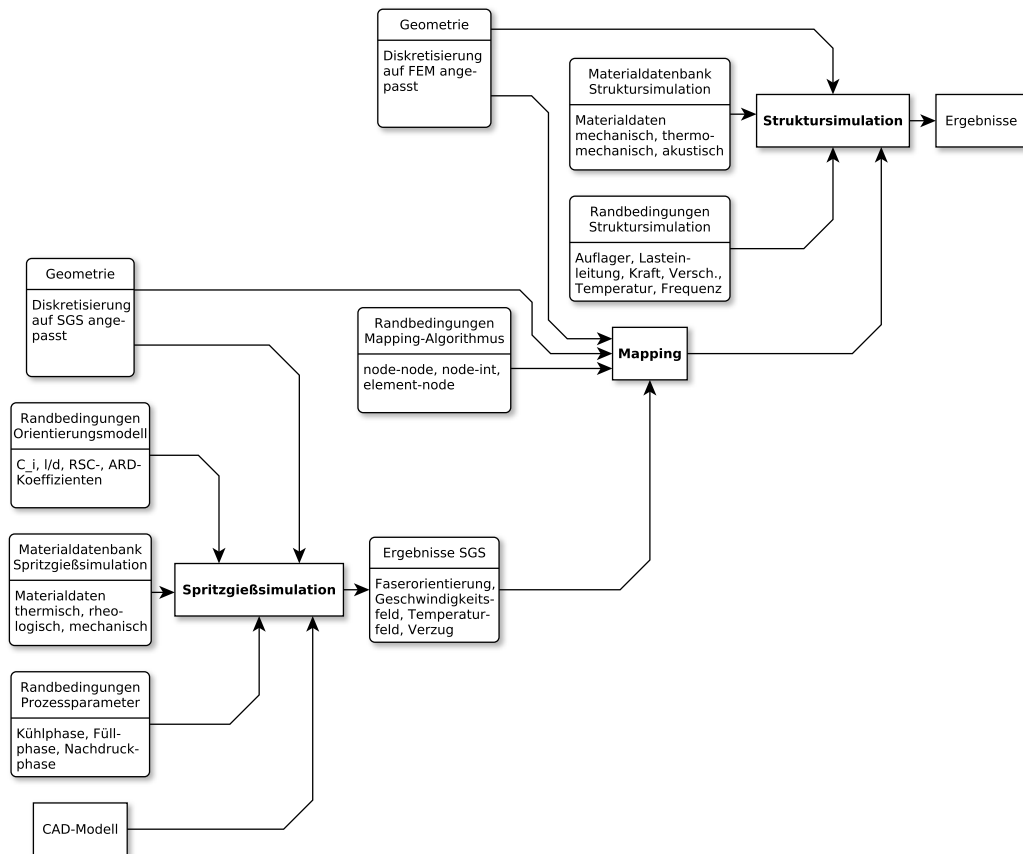


Abbildung 2.1: Ablauf der integrativen Simulation

Die integrative Simulation teilt sich in die drei signifikanten Schritte

- Spritzgießsimulation,
- Mapping
- und Struktursimulation

auf, die im Folgenden näher erläutert werden. In der Spritzgießsimulation wird die Faserorientierung im Bauteil berechnet. Durch Übertragen der Orientierungsinformation, dem Mapping, wird die berechnete Faserorientierung in der

Struktursimulation zur Verfügung gestellt. Die Faserorientierung wird in der Struktursimulation dazu verwendet, lokal anisotropes Materialverhalten zu berechnen.

2.1 Spritzgießsimulation

Kommerzielle Spritzgießsoftware bietet dem Anwender Zugang zu Werkzeugen mit denen viele Formen des Spritzgießens virtuell abbildbar sind. Der klassische Spritzgießprozess mit Füll-, Kühl- und Nachdruckphase sowie Schwindungs- und Verzugsberechnung wird am häufigsten eingesetzt [10]. Es stehen aber auch Möglichkeiten zur Simulation von Sonderprozessen, wie dem Gas- oder Wasserinjektionsverfahren oder dem Hinter- bzw. Umspritzen von Geweben bzw. Einlegern, zur Verfügung [11]. Die einzelnen Phasen einer Spritzgießsimulation sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Heutige Spritzgießsimulationsprogramme sind modular aufgebaut, so dass auch nur Teilaspekte des Prozesses betrachtet werden können.

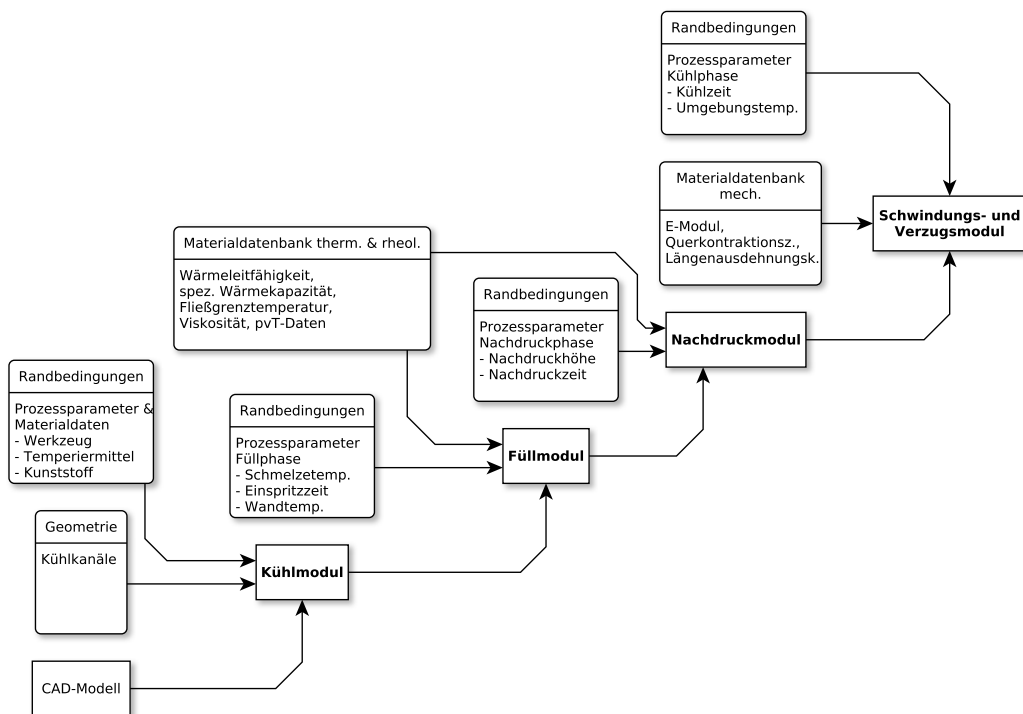


Abbildung 2.2: Module der Spritzgießsimulation

Die Module werden anhand ihrer Eingangsparameter, konstitutiven Gleichungen und Ergebnisse im Folgenden näher beschrieben. Unterteilt wird die Erläuterung der einzelnen Module aus Abbildung 2.2 in Preprocessing, Berechnungsphase und Postprocessing.

2.1.1 Preprocessing in der Spritzgießsimulation

Die Phase „Preprocessing“ beschreibt die Vorarbeiten die nötig sind, um die Simulation durchführen zu können. Es handelt sich insbesondere um das Erstellen des Modells, die Definition der Randbedingungen und die Bereitstellung von Materialbeschreibungen. Die Arbeitsschritte sowie der Umfang der Materialbeschreibung und der Randbedingungen sind, in Abhängigkeit von der Wahl der zu berechnenden Module, unterschiedlich umfangreich (siehe Randbedingungen und Materialdaten in Abbildung 2.2).

Für alle Module muss jedoch das eigentliche Formteil (bzw. die Kavität des Werkzeuges) als diskretisiertes Modell zur Verfügung stehen. Dazu wird ein CAD-Modell des Bauteils in einem entsprechenden Austauschformat (.igs, .stp) in die Spritzgießsoftware importiert. Es besteht auch die Möglichkeit eine bereits diskretisierte Geometrie aus einem externen Vernetzungstool zu importieren. Das CAD-Modell wird dann, abhängig von seiner Geometrie und den Anforderungen an die Simulation, mit unterschiedlichen Methoden diskretisiert. Großflächige dünne Bauteile können mit Schalenelementen zweidimensional vernetzt werden. Sobald größere Sprünge in der Bauteildicke oder komplexe Geometrien (Rippen, Schraubdome, Ausbrüche, etc.) vorliegen, werden dreidimensionale Elemente verwendet. Die Art der Elemente ist vom Anwendungsfall und der geforderten Diskretisierungsgüte abhängig.

Der Detaillierungsgrad bei Spritzgießsimulationen ist aber immer wesentlich höher als in Struktursimulationen. Dies ist darin begründet, dass ein wesentliches Berechnungsergebnis der Spritzgießsimulation die Wärmeleitung aus der Schmelze in das Werkzeug ist. Unterschreiten einzelne Elemente die Fließgrenztemperatur, so strömt in diesen Elementen keine Schmelze mehr. Das geschieht zuerst bei den Elementen, deren Randbedingungen durch die „kalte“

Werkzeugwand vorgegeben sind. Daraus lässt sich sofort ableiten, dass bei zu grober Vernetzung über die Wandstärke, der Strömungskanal schnell einfriert und das Werkzeug in der Simulation nicht voll gefüllt werden kann. Aus diesem Grund werden Bauteile für Spritzgießsimulationen in der Regel mit mehr als neun Elementen über die Bauteildicke diskretisiert.

Alle kommerziellen Softwarepakete verfügen über interne Preprozessoren, die das Diskretisieren der CAD-Geometrie direkt unterstützen. Jedes Softwarepaket verfolgt dabei eigene Vernetzungsstrategien und Methoden [11, 12]. Im Weiteren werden nur dreidimensionale Elemente betrachtet, da sich eine Diskretisierung mit dreidimensionalen Elementen in der Industrie größtenteils durchsetzt.

Es stehen unterschiedliche Elementformen zur Verfügung, um dem Anwendungsfall entsprechend handeln zu können. Die üblichen Elementformulierungen [11, 12] beinhalten

- Tetraeder,
- Pyramiden,
- Hexaeder
- und Prismen.

Sie sind in Abbildung 2.3 von links nach rechts dargestellt.

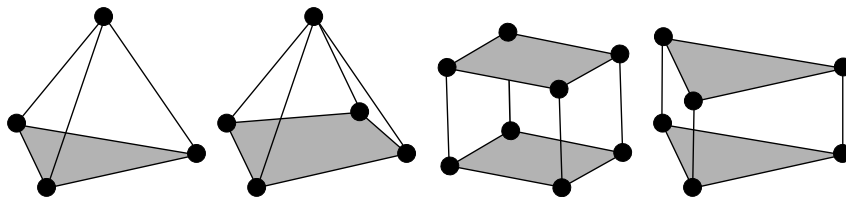


Abbildung 2.3: Verfügbare Elementtypen

Die Wahl der Elemente ist vom Anwendungsfall und der geforderten Abbildungsgüte abhängig. Automatisches Vernetzen der Geometrie wird mit Tetraedern, Prismen und Pyramiden von der Software selbstständig durchgeführt

und bedarf nur noch einer Kontrolle durch den Anwender. Detailliertere und strukturierte Diskretisierungen können manuell mit Hexaedern erzielt werden. Mit Hexaedern werden numerisch die besten Ergebnisse erzielt [13]. Zur Untersuchung der Netzgüte stehen dem Anwender verschiedene Kriterien zur Netzbeurteilung zur Verfügung. Beispielhaft seien bei Hexaedern die Verhältnisse der Kantenlängen und bei Tetraedern die Verhältnisse von In- und Umkreis der Seitenflächen genannt.

Ist das Modell des Formteils erstellt, können die Füll-, Nachdruck- und Schwindungs- und Verzugmodule der Software genutzt werden. Das Kühlmodul kann unter der sehr vereinfachten Annahme einer konstanten Werkzeugwandtemperatur ebenfalls eingesetzt werden. Für eine vollständige Simulation aller aus Abbildung 2.2 bekannten Module, unter Berücksichtigung der Werkzeugwandtemperatur, müssen für das Kühlmodul zusätzlich zum Formteil (Kavität) ebenfalls

- Kühlkanäle,
- Einleger,
- Schieber,
- Angussysteme
- und das Werkzeug

modelliert werden. Insbesondere für die Kühlkanalgeometrie und Angussysteme stehen geeignete Modellierungshilfen zur Verfügung. Den diskretisierten Geometrien werden im Anschluss ihre besonderen Eigenschaften zugewiesen (Kühlkanal, Angussystem). In Abbildung 2.4 ist ein vollständiges Simulationsmodell des in dieser Arbeit verwendeten Stabes zu sehen. Man erkennt das eigentliche Formteil, die Kühlkanäle und die mit Tetraedern vernetzte Werkzeugform.

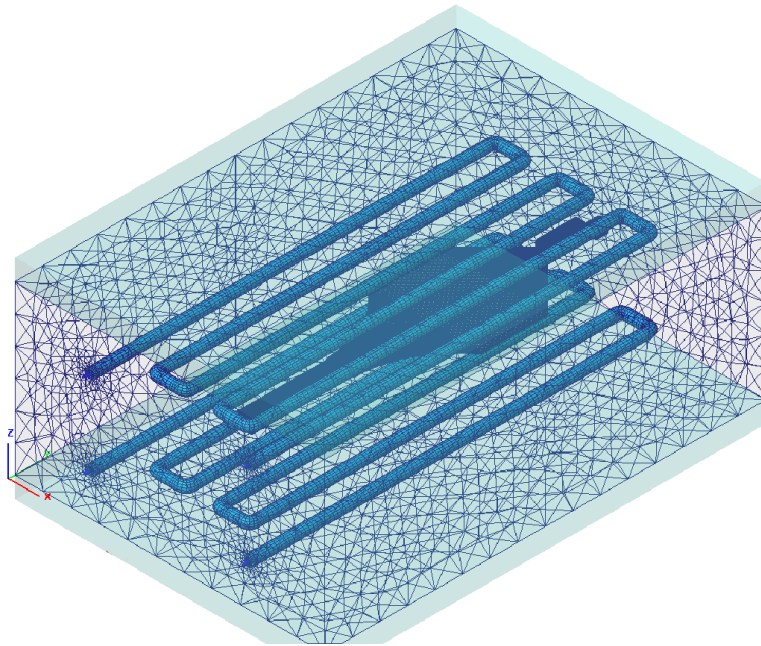


Abbildung 2.4: Vollständiges Simulationsmodell des Stabs

Ist das Simulationsmodell erstellt, müssen weitere Eingangsgrößen für die Simulation angegeben werden. Dies sind die Prozessparameter

- Schmelztemperatur,
- Werkzeug- oder Kühlmitteltemperatur,
- Einspritzzeit oder Volumenstrom,
- Umschaltpunkt,
- Nachdruckhöhe
- und Prozesszeiten,

die als Randbedingungen der Simulation zu sehen sind.

Wie im realen Spritzgießprozess können die Prozessparameter in Abhängigkeit von Volumen und Zeit angegeben werden. So können konstante Werte oder abhängige Profile simuliert werden.

Der nächste und oft unterschätzte Schritt ist die Bereitstellung von Materialdaten. Von den Materialherstellern werden Materialdaten in Form von „Materialkarten“ für ihre eigenen Produkte in Datenbanken zur Verfügung gestellt. Materialdaten in Spritzgießsimulationen können von ihrer Qualität stark unterschiedlich sein. Die Einflüsse der Materialdaten auf berechnete Ergebnisse werden hier nicht untersucht, es ist jedoch festzustellen, dass die Qualität von Materialdaten einen gewissen Einfluss auf die in Kapitel 1.4 eingeführte Geschwindigkeit $\mathbf{v}(t)$ der Schmelze hat [14].

Für die Verwendung des Füll- Kühl- und Nachdruckmoduls müssen der Software alle Daten zur rheologischen Beschreibung des Materials bereitgestellt werden. Diese sind

- die Viskosität in Abhängigkeit der Scherrate und der Temperatur,
- das spezifische Volumen in Abhängigkeit von Temperatur und Druck,
- die spezifische Wärmekapazität in Abhängigkeit der Temperatur,
- sowie die Fließgrenztemperatur.

Die Fließgrenztemperatur kann aus den p v T - und c_p -Daten berechnet werden und wird in der Simulation als Grenzwert verwendet, ab dem die Kunststoffschmelze einfriert [10, 15].

Die Materialdaten der untersuchten Materialien wurden aus der Datenbank der Software Moldex3D[®] entnommen und sind für das Material Grilon BG 30S (Polyamid 6 mit 30% Faseranteil) in den Abbildungen 2.5, 2.6 und 2.7 dargestellt. In Abbildung 2.7 ist zu sehen, dass die spezifische Wärmekapazität für dieses Materialmodell nicht temperaturabhängig ermittelt wurde, da nur ein skalarer Wert für den relevanten Temperaturbereich vorliegt. Experimentell ermittelte Daten zeigen, dass die spezifische Wärmekapazität c_p von der Temperatur abhängig ist [15].

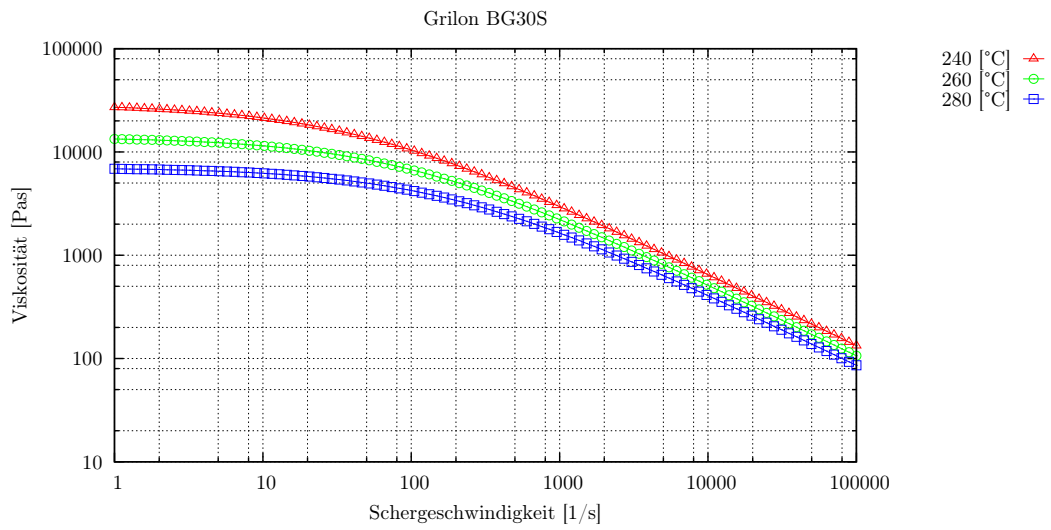


Abbildung 2.5: Viskosität, Grilon BG30S [16]

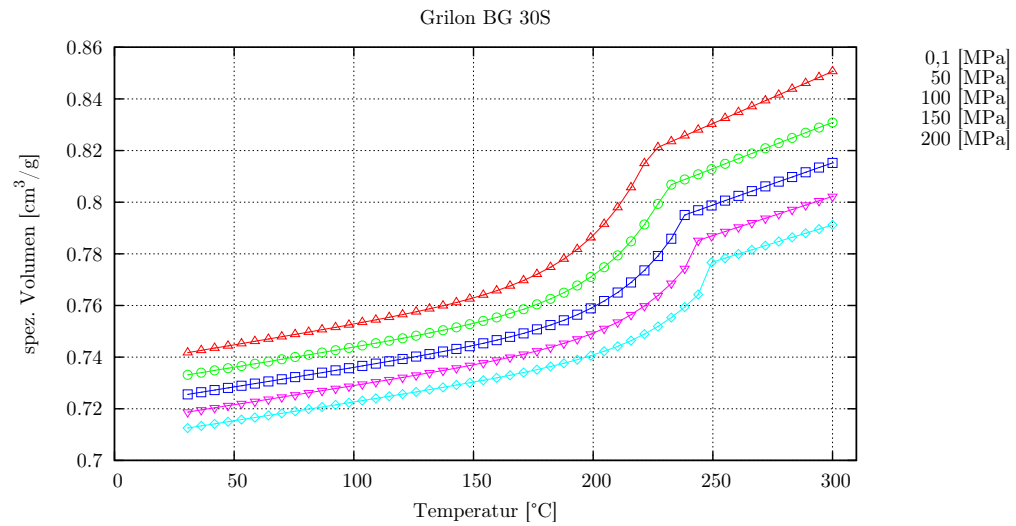


Abbildung 2.6: pvT , Grilon BG30S [16]

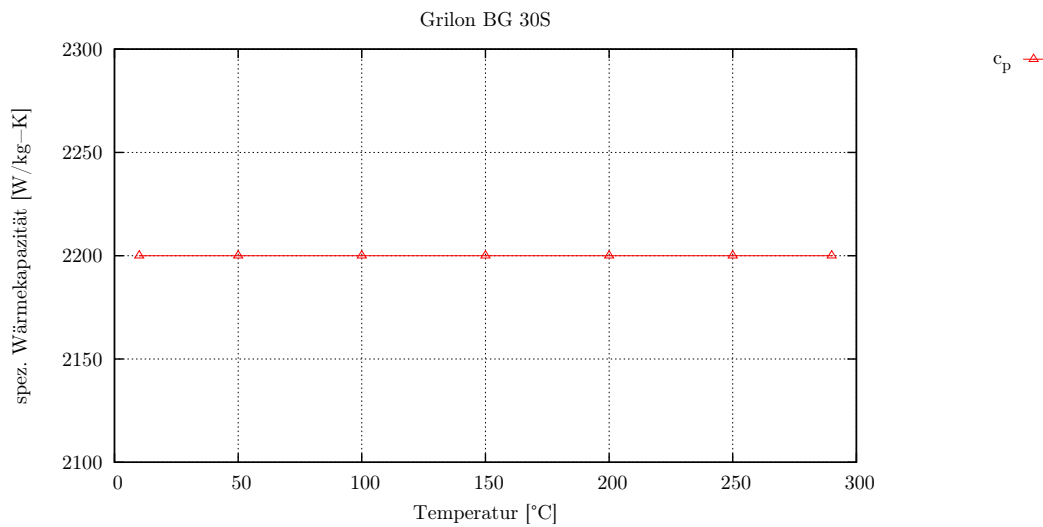


Abbildung 2.7: Spezifische Wärmekapazität, Grilon BG30S [16]

Für die Verwendung des Schwindungs- und Verzugmoduls werden zusätzlich zu den bereits genannten Daten Informationen über

- die richtungs- und temperaturabhängigen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α_{\perp} und α_{\parallel} ,
- Elastizitätsmodul E_M und Querkontraktionszahl ν_M der Polymermatrix
- und Elastizitätsmodul E_F und Querkontraktionszahl ν_F der Fasern

benötigt.

Eine Sonderstellung nehmen die benötigten Parameter für die Faserorientierungsberechnung ein. Das sind für das später verwendete FOLGAR-TUCKER Modell der Faserinteraktionskoeffizient C_i und das Aspektverhältnis der Fasern r_e siehe Gl. (3.1). Diese Parameter werden zwar in den Materialkarten hinterlegt, gehen aber nur in die Berechnung der Faserorientierung ein. Es gibt keine Rückkopplung von sich verändernder Faserorientierung auf andere Variablen oder Materialkennwerte.

2.1.2 Berechnungsphase Spritzgießsimulation

In dieser Phase werden alle Einstellungen, die mit der numerischen Integration der Bilanzgleichungen und gegebenenfalls der Orientierungsmodelle zu tun haben, vorgenommen. Insbesondere sind dies

- die Anzahl der Zwischenergebnisse,
- die Wahl der Integrationsmethode
- und Auswahl der in die Berechnung einzubeziehenden Module.

Unabhängig von der Wahl der zu berechnenden Module muss immer die Füllphase simuliert werden. Der Fortschritt der Schmelze, die in die Kavität einströmt, wird in Spritzgießsimulationen durch das Lösen der Bilanzgleichungen (NAVIER-STOKES Gleichungen [17]) für Masse (2.1), Energie (2.2) und Impuls (2.3) mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} , der Dichte ρ , der Temperatur T , dem Druck p , der Viskosität η , der anisotropen Wärmeleitfähigkeit $\mathbf{\Lambda}$, der spezifischen Wärmekapazität c_p , der Scherrate $\dot{\gamma}$ und dem mechanischen Spannungstensor $\mathbf{\Sigma}$ berechnet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0, \quad (2.1)$$

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\mathbf{\Lambda} \nabla T) + \eta \dot{\gamma}^2, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \mathbf{\Sigma}) = \rho \mathbf{g}, \quad (2.3)$$

mit $\mathbf{\Sigma} = -p \mathbf{I} + \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$.

Es werden die Annahmen getroffen, dass das Fluid inkompressibel ist und sich rein viskos verhält. Viskoelastische Effekte werden vernachlässigt. Außerdem wird das Fluid als eine generalisierte Newton'sche Flüssigkeit behandelt, die von Druck, Temperatur und Scherrate abhängig ist [11, 12]. Wie in Gleichungen

(2.2) und (2.3) zu erkennen ist, hängt \mathbf{v} von der Viskosität η ab. Da die Viskosität bei Kunststoffschmelzen aber nicht konstant ist, sondern von Scherrate, Temperatur und Druck abhängt, wird die Viskosität über einen Modellansatz beschrieben [10, 15]. Weiterhin sind das spezifische Volumen, der Druck und die Temperatur voneinander abhängig und gehen ebenfalls über ein Modell in die Berechnung ein.

Im Kühlmodul wird zusätzlich die stationäre Laplace-Gleichung

$$k_m \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (2.4)$$

gelöst, um die durchschnittliche Werkzeugtemperaturverteilung zu berechnen. Hier sind \bar{T} die über einen Zyklus durchschnittliche Werkzeugtemperatur, k_m die isotrope Wärmeleitfähigkeit des Werkzeugmaterials und x, y und z die kartesischen Koordinaten.

Die Wärmeleitung zwischen flüssiger Schmelze und Werkzeugwand wird über die Poissongleichung

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (2.5)$$

beschrieben.

Das Modul zur Schwindungs- und Verzugsberechnung verwendet die p v T -Daten zur Berechnung der Schwindung, sowie die mechanischen Kennwerte (siehe Kapitel 2.1.1) des Materials zur Berechnung des sich einstellenden Verzugs. Dabei ist V_W das Volumen der Kavität, V das Volumen des Formteils und S_V die Volumenschwindung. Die auftretende Volumenkontraktion wird prozentual angegeben und berechnet sich nach

$$S_V = \frac{V_W - V}{V_W}. \quad (2.6)$$

Für die Verzugsberechnung wird angenommen, dass

- das Material linear elastisch ist,
- sich nur kleine Verzerrungen einstellen
- und keine viskoelastischen Effekte auftreten.

Unter der Annahme einer elastischen Deformation kann das Verzugproblem durch aufstellen des statischen Kräftegleichgewichts

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{f} = 0 \quad (2.7)$$

gelöst werden. Dabei sind $\boldsymbol{\Sigma}$ die Spannungen und \mathbf{f} die Volumenkraft und thermische Belastung [12].

Der Zusammenhang zwischen Spannung und Verzerrung wird über

$$\Sigma_{ij} = \mathbb{C}_{ijkl} (E_{kl} - E_{kl}^0 - A_{kl} \cdot \Delta T) + \Sigma_{ij}^F \quad (2.8)$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \quad (2.9)$$

beschrieben. Dabei sind Σ_{ij} die Komponenten des CAUCHY Spannungstensors, \mathbb{C}_{ijkl} die Komponenten des Elastizitätstensors, E_{kl} die Komponenten des GREEN-LAGRANGE Verzerrungstensors (2.9), E_{kl}^0 die initialen Komponenten von (2.9) hervorgerufen durch die Schwindung, A_{kl} die Komponenten des thermischen Ausdehnungskoeffizienten, ΔT die Temperaturdifferenz und Σ_{ij}^F die durch die Füllphase induzierten Spannungskomponenten.

Die Berechnung der Faserorientierung findet im Füllmodul statt. Nach jedem Zeitschritt werden die aktuellen Geschwindigkeitskomponenten u, v und w an den Elementknoten verwendet, um die FOLGAR-TUCKER Gleichung (siehe Kapitel 3.2) zu lösen. Das bedeutet, dass für eine Variation bzw. Optimierung der

Parameter des FOLGAR-TUCKER Modells in kommerzieller Spritzgießsoftware immer die Berechnung der Füllphase notwendig ist, obwohl sich an den Ergebnissen für \mathbf{v} , und damit den Variablen des FOLGAR-TUCKER Modells, nichts ändert. Dies stellt einen immensen Zeitverlust bei einer numerischen Optimierung der Parameter C_i und $\frac{l}{d}$ dar, den es zu minimieren gilt.

2.1.3 Postprocessing in der Spritzgießsimulation

Die als „Postprocessing“ bezeichnete Phase beinhaltet hauptsächlich die Auswertung der erzielten Analyseergebnisse. Dazu stehen graphische Hilfsmittel in Form von Falschfarbendarstellungen zur Verfügung. Es ist aber auch möglich, konkrete Daten in zweidimensionalen Graphen gegeneinander aufzutragen und zu bewerten.

Die Ergebnisse des Füllmoduls umfassen

- Schmelzefortschritt,
- Druck,
- Temperatur,
- Schubspannung,
- Scherrate,
- u, v und w Geschwindigkeitskomponenten,
- Volumetrische Schwindung,
- Dichte
- und daraus abgeleitete Ergebnisse.

Diese Ergebnisse liegen, in Abhängigkeit von der Füllzeit, bis zum Umschalten in die Nachdruckphase vor. Über die gemeinsame Variable „Füllzeit“ können die Ergebnisse gegenübergestellt werden. Wie bereits beschrieben, wird im

Füllmodul ebenfalls die Faserorientierung berechnet. Ist dies geschehen, liegt für jedes Element \mathbf{A} , der Orientierungstensor 2. Stufe, vor. Dieser beschreibt die Faserorientierung im Element. Der Orientierungstensor wird in Kapitel 3.2 ausführlich eingeführt und diskutiert.

Die Ergebnisse des Kühlmoduls umfassen

- Temperaturverteilung (Werkzeug),
- Kühlzeit,
- Wärmestrom,
- Wärmelast
- und daraus abgeleitete Ergebnisse.

Die Ergebnisse des Nachdruckmoduls entsprechen denen des Füllmoduls mit dem Unterschied, dass sie vom Zeitpunkt des Umschaltens auf Nachdruck bis zum Entformen des Formteils vorliegen.

Die Ergebnisse des Schwindungs- und Verzugsmoduls beinhalten

- Verschiebungen,
- Dehnungen
- und thermisch induzierte Eigenspannungen.

2.2 Mapping

Der Arbeitsschritt des „Mapping“ ist notwendig, da an die Diskretisierung der CAD-Geometrie für die Spritzgießsimulation völlig andere Anforderungen gestellt werden, als an die der Struktursimulation. In der Spritzgießsimulation muss die CAD-Geometrie mit einer wesentlich höheren Anzahl von Elementen über die Wandstärke diskretisiert werden als bei der Struktursimulation

(vgl. Kapitel 2.1.1). Durch die wesentlich höhere Anzahl an Elementen, liegen auch wesentlich mehr Ergebnisse der Orientierungsberechnung vor, die auf die Elemente der Struktursimulation übertragen werden müssen.

Die üblichen Vernetzungen von CAD-Geometrien für strukturmechanische Simulationen überschreiten in den seltensten Fällen drei Elemente bzw. Integrationspunkte über die Bauteildicke, wenn mit Volumenelementen gearbeitet wird. Das „Mapping“ beschreibt nun den Arbeitsschritt, bei dem die Ergebnisse der Orientierungsberechnung auf die Elemente der Struktursimulation übertragen werden. Wie Abbildung 2.1 zeigt, wird die CAD-Geometrie des Bauteils zweimal vernetzt. Diese beiden Netze werden zusammen mit den Ergebnissen der Orientierungsberechnung in einem Mappingtool verarbeitet. Die beiden Netze werden manuell zueinander ausgerichtet, so dass eine optimale Deckung zustande kommt. Die dem Netz der Spritzgießsimulation zugewiesenen Ergebnisse der Orientierungsberechnung werden dann über Interpolations- bzw. Extrapolationsmethoden auf das Netz der Struktursimulation übertragen. Je nach verwendeter Software stehen dem Anwender verschiedenste Algorithmen zum Übertragen der Daten zur Verfügung. Die Ergebnislösung kann anschließend überprüft und gegebenenfalls korrigiert werden.

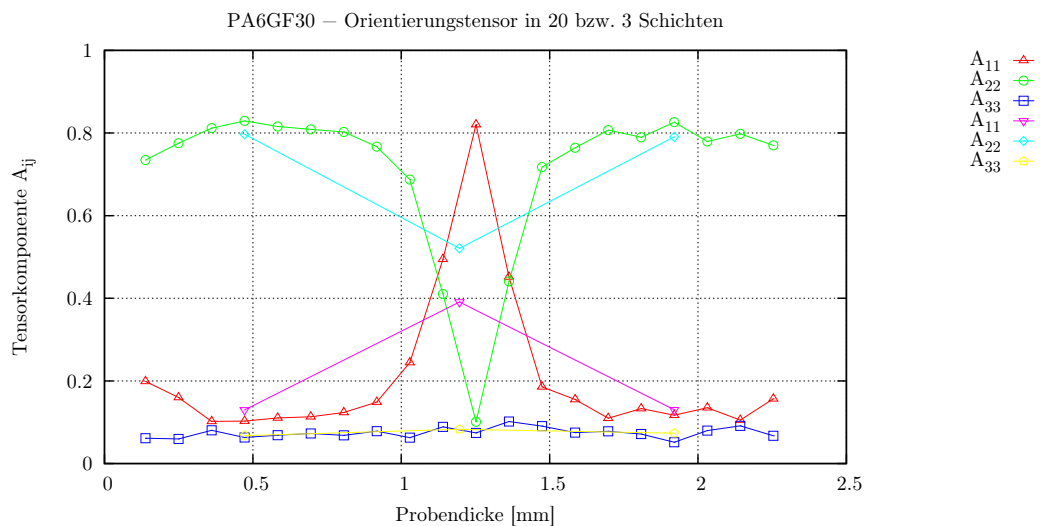


Abbildung 2.8: Informationsverlust durch Übertragen der Orientierungsinformation

Unabhängig von der verwendeten Software und der erzielten Abbildungsgüte ist immer mit einem massiven Informationsverlust zu rechnen, wenn die Orientierungsergebnisse von beispielsweise zwanzig auf drei Elemente über die Bauteildicke reduziert werden. Diese Situation ist in Abbildung 2.8 dargestellt. Man erkennt hier, dass Umorientierung der Faserrichtung in der Mitte der Probe nur unzureichend wiedergegeben wird.

2.3 Struktursimulation

Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, können im Rahmen einer integrativen Simulation verschiedene Arten von Struktursimulationen durchgeführt werden. Die implizite Berechnung quasistatischer Deformationen stellt sicherlich diejenige mit dem größten Anteil dar. Explizite Simulationen für z.B. Crashberechnungen oder Deformationsanalysen aufgrund thermomechanischer Lasten sind ebenfalls von großem Interesse. Modalanalysen und Betriebsfestigkeitsanalysen stellen im Vergleich zu den anderen nur einen geringen Teil dar.

Da die Beschreibung der Durchführung jedes einzelnen Typs nicht zielführend ist, beschränkt sich dieser Abschnitt auf den wesentlichen Teil, der bei allen Typen gleich zu handhaben ist. Dies ist die Berechnung der lokalen anisotropen Elastizitätstensoren und die praktische Umsetzung der Materialmodellierung.

Um die lokalen anisotropen Elastizitätstensoren zu berechnen, können verschiedene Verfahren angewendet werden, die in [4, 5, 18–22] umfangreich beschrieben sind. In kommerziellen Tools hat sich die Homogenisierung aus [4] durchgesetzt. Anpassungen und Anwendung der Methode, insbesondere im Bereich der Festigkeitsberechnung sind Gegenstand aktueller Forschung [3, 23–29]. Die Abbildungsgüte der Methode im elastischen Bereich des Spannungs-Dehnungs-Diagramms ist in Abbildung 1.3 dargestellt.

Zur Berechnung der anisotropen Steifigkeitsmatrizen müssen die Parameter

- E_M, ν_M
- E_F, ν_F

- \mathbf{A} und $\frac{l}{d}$

bekannt sein.

Die Moduln und Querkontraktionszahlen können im einfachen Zugversuch bestimmt bzw. aus der Literatur entnommen werden. Der Orientierungstensor 2. Stufe wird, wie in Kapitel 2.1 beschrieben, in der Spritzgießsimulation berechnet. Das Aspektverhältnis der Fasern kann durch Veraschen (siehe Kapitel 4) ermittelt werden.

Die hier beschriebenen theoretischen Voraussetzungen zur Berechnung der anisotropen Steifigkeitsmatrizen scheitern in der Praxis an dem Umstand, dass es oft nicht möglich ist, von einem kurzfaserverstärkten Polymer das reine Matrixmaterial zu erwerben. Die unverstärkten Polymere sind zwar erhältlich, werden aber bei der Verwendung mit Kurzfasern zusätzlich mit Additiven beaufschlagt. Diese Additive reduzieren die Viskosität und erleichtern somit das Fließverhalten der verstärkten Materialien. Unglücklicherweise werden so auch die mechanischen Eigenschaften beeinflusst. Man kann also fast immer davon ausgehen, dass ein unverstärktes Polymer nicht mit dem in einer faserverstärkten Type identisch ist. Diesem Umstand geschuldet, ist die Materialmodellierung kurzfaserverstärkter Materialien in der Praxis nur durch „reverse Engineering“ zu bewerkstelligen.

Für die Materialmodellierung werden die mechanischen Kennwerte der Verstärkungsfasern aus der Literatur entnommen. Um die mechanischen Eigenschaften der Matrix zu bestimmen, werden Zugversuche am kurzfaserverstärkten Material durchgeführt. Im idealen Fall kann man Platten mit hoher Faserorientierung in Spritzrichtung herstellen, die keine Mittelschicht (vgl. Kapitel 4) aufweisen, und zur Herstellung von Probekörpern verwenden. Dann können Zugversuche unter verschiedenen Entnahmewinkeln zur Spritzrichtung durchgeführt werden und man erhält die nötige Datenbasis zur Ermittlung der Matrixkennwerte. Üblicherweise werden Zugversuche unter 0° , 30° und 90° zur Spritzrichtung durchgeführt. Außerdem muss die Faserorientierung im Probekörper bekannt sein, um die mechanischen Kennwerte einem Orientierungszustand zuordnen zu können. Stehen dem Anwender nur spritzgegossene Normprüfkörper (DIN EN ISO 527) zur Verfügung, können keine Zugversuche ab-

weichend zur Spritzrichtung durchgeführt werden und die Kennwerte reichen nicht aus, um ein zufriedenstellendes „reverse Engineering“ durchzuführen.

Liegt die Datenbasis vor, bieten kommerziellen Tools integrierte Optimierungsroutinen für das nötige „reverse Engineering“ zur Berechnung der Matrixeigenschaften, die anschließend durch Simulation des Zugversuches validiert werden.

Die hier aufgezeigten Arbeitsschritte für die Materialmodellierung zeigen noch einmal, wie wichtig sowohl die Kenntnis über die tatsächlich vorliegende Faserorientierung als auch deren korrekte Berechnung ist. Ist die Faserorientierung im Prüfkörper unbekannt, kann kein vernünftiges „reverse Engineering“ zur Ermittlung der Matrixeigenschaften durchgeführt werden. Bei nicht hinreichend gut berechneter Faserorientierung in der Spritzgießsimulation, wird die Validierung der Materialmodellierung für die Struktursimulation unzureichende Ergebnisse liefern. Zur strukturmechanischen Simulation des Zugversuchs muss der im Prüfkörper vorliegende Faserorientierungszustand, bei dem die mechanischen Versuche durchgeführt wurden, in einer Spritzgießsimulation berechnet werden (vgl. Abbildung 2.1).

Die aufgezeigten Punkte in den Kapiteln 2.1, 2.2 und 2.3 machen deutlich, dass es sich bei der integrativen Simulation kurzfaserverstärkter Thermoplaste um eine hoch komplexe und aufwändige Methode handelt. Gerade der zeitliche und experimentelle Aufwand im Vorfeld der strukturmechanischen Simulation, deren Ergebnisse das Ziel des gesamten Aufwandes sind, schreckt oft ab und wird deshalb auf ein absolutes Minimum reduziert. Daraus resultieren häufig unbefriedigende Ergebnisse der strukturmechanischen Analyse, die dann auf Unzulänglichkeiten der Methode oder der Software geschoben werden. Insbesondere der exakten Berechnung der Faserorientierung, obwohl Grundlage der gesamten Kette, wird nicht die nötige Aufmerksamkeit gewidmet. Der für eine prognosefähige Simulation erforderliche experimentelle Aufwand ist in Abbildung 2.9 zusammengefasst.

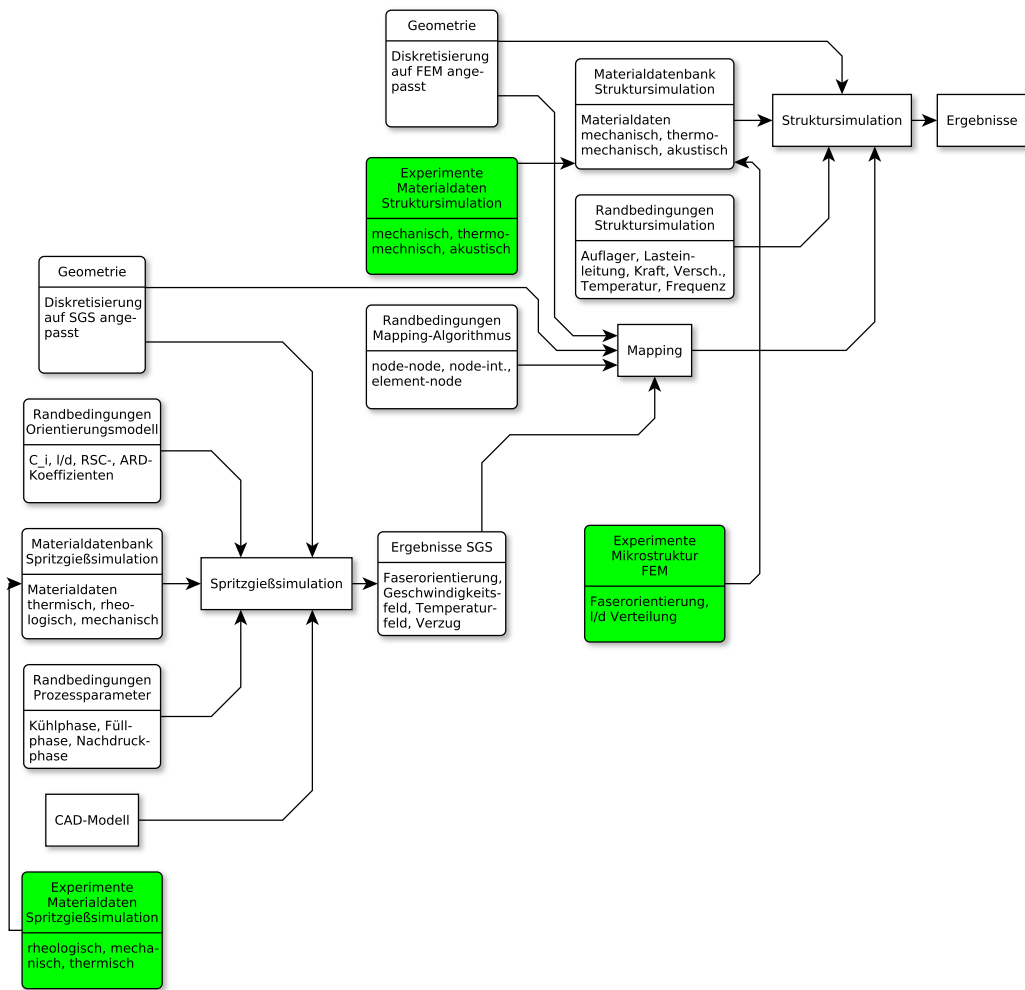


Abbildung 2.9: Ablauf der integrativen Simulation und benötigte Materialkennwerte

3 Mathematische Ansätze zur Berechnung von Faserorientierungen

In diesem Kapitel werden die in der Literatur und kommerziellen Spritzgießtools zur Verfügung stehenden Orientierungsmodelle vorgestellt und diskutiert. Beginnend mit der Herleitung der JEFFERY Gleichung, welche die Grundlage aller heutigen Orientierungsmodelle bildet, wird die sukzessive Weiterentwicklung bis zum heutigen Stand der Technik dargestellt. Ebenfalls werden notwendige Vereinfachungen für die numerischen Beschreibung erläutert und die Abbildbarkeit experimenteller Ergebnissen diskutiert.

3.1 Diskussion der JEFFERY Gleichung

Die grundlegende Arbeit zum Verhalten ellipsoider Partikel in viskosen Strömungen stammt von G. B. JEFFERY aus dem Jahre 1922 [30]. In seinem Artikel beschreibt JEFFERY die Bewegung eines ellipsoiden Partikels in einem viskos dominierten Fluid, siehe Abbildung 3.1.

Der Ellipsoid wird über seine Halbachsen a, b, c eindeutig beschrieben. Zwei der Halbachsen sind identisch, während die dritte größer ist. Wenn die beiden kurzen Halbachsen als der Durchmesser d , und die lange Halbachse als die Länge l betrachtet werden, lässt sich das Aspektverhältnis

$$r_e = \frac{l}{d} \tag{3.1}$$

aufstellen. Als Kurzfasern werden Fasern mit $r_e \gg 1$ definiert. Sie werden im Weiteren als „Faser“ bezeichnet.

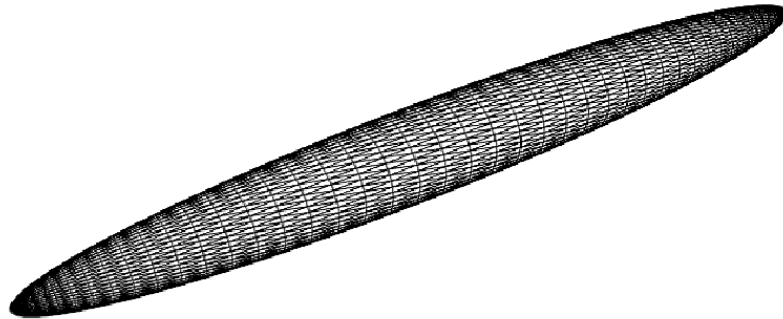


Abbildung 3.1: Elliptischer Partikel als Modell einer Faser

3.1.1 Annahmen und Herleitung

Die JEFFERY Gleichung beinhaltet drei grundlegende Annahmen bezüglich der Eigenschaften der Faser:

- 1) Die Faser ist ideal gerade.
- 2) Die Faser ist starr.
- 3) $\frac{l}{d} \gg 1$, weshalb Momente um l vernachlässigt werden können.

Bezüglich des Fluids wird die Annahme gemacht, dass es sich vollständig viskos verhält und Trägheitskräfte deshalb vernachlässigt werden können. Das Geschwindigkeitsfeld der Strömung wird als homogen in der Größenordnung der Fasern angenommen und ändert sich nicht im Raum, weshalb $\nabla \mathbf{v} = \mathbf{0}$ gilt. Daraus ergibt sich

$$\mathbf{v} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{c}, \quad (3.2)$$

als Beschreibung für das Geschwindigkeitsfeld, wobei $\mathbf{K} = (\nabla \mathbf{v})^T$ konstant im Raum \mathbf{x} , aber nicht über der Zeit t ist. Unter der Annahme, dass sich das Fluid inkompressibel verhält, gilt weiterhin $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$.

Um die Orientierung einer einzelnen Faser zu beschreiben, wird die Richtung der großen Halbachse betrachtet. Als Einheitsvektor \mathbf{p} mit einer kartesischen Basis beschreibt \mathbf{p} die Oberfläche

$$S = \{\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3 : \|\mathbf{p}\|_2 = 1\} \quad (3.3)$$

der Einheitskugel, wie in Abbildung 3.2 zu sehen ist.

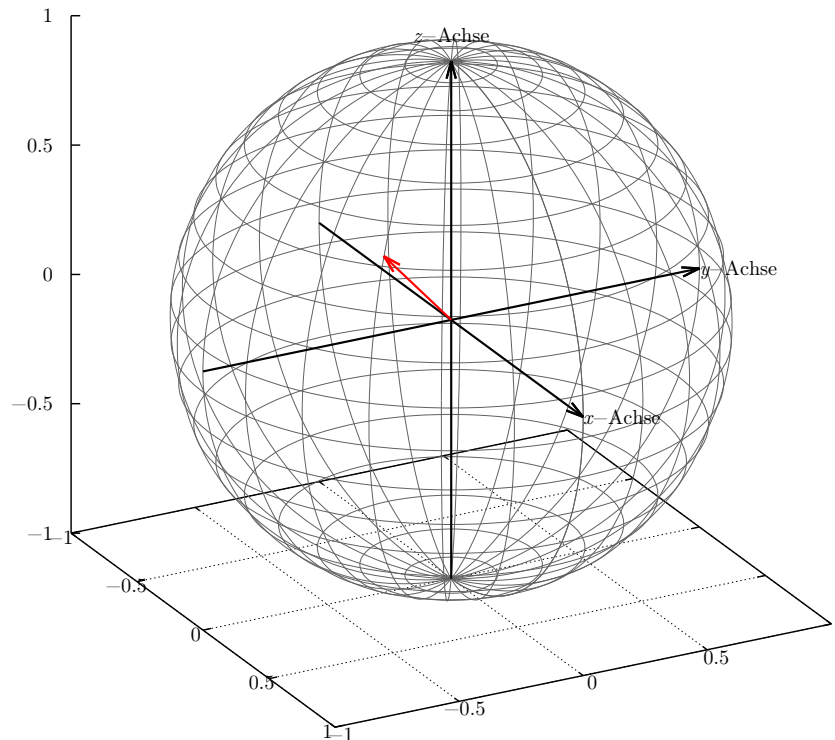


Abbildung 3.2: Einheitskugel

Da \mathbf{p} ein Einheitsvektor ist, wird er als dimensionslos betrachtet und kann parametrisiert werden. Durch Einführen der generalisierten Koordinaten Θ, Φ

mit einer kartesischen Basis ergibt sich

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} \sin(\Theta) \cos(\Phi) \\ \sin(\Theta) \sin(\Phi) \\ \cos(\Theta) \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

Die generalisierten Koordinaten berechnen sich nach $\Theta = \arctan \frac{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}{p_3}$ und $\Phi = \arctan \frac{p_2}{p_1}$. Sie werden im Folgenden verwendet um die Bewegung der Faser zu beschreiben. $\Theta \in [0; \pi]$ ist der Polarwinkel und $\Phi \in [-\pi; \pi]$ der Azimut [31]. Den Pfad, der von \mathbf{p} auf S beschrieben wird, bezeichnet man als JEFFERY Orbit. Ein solcher JEFFERY Orbit ist in Abbildung 3.3 exemplarisch dargestellt.

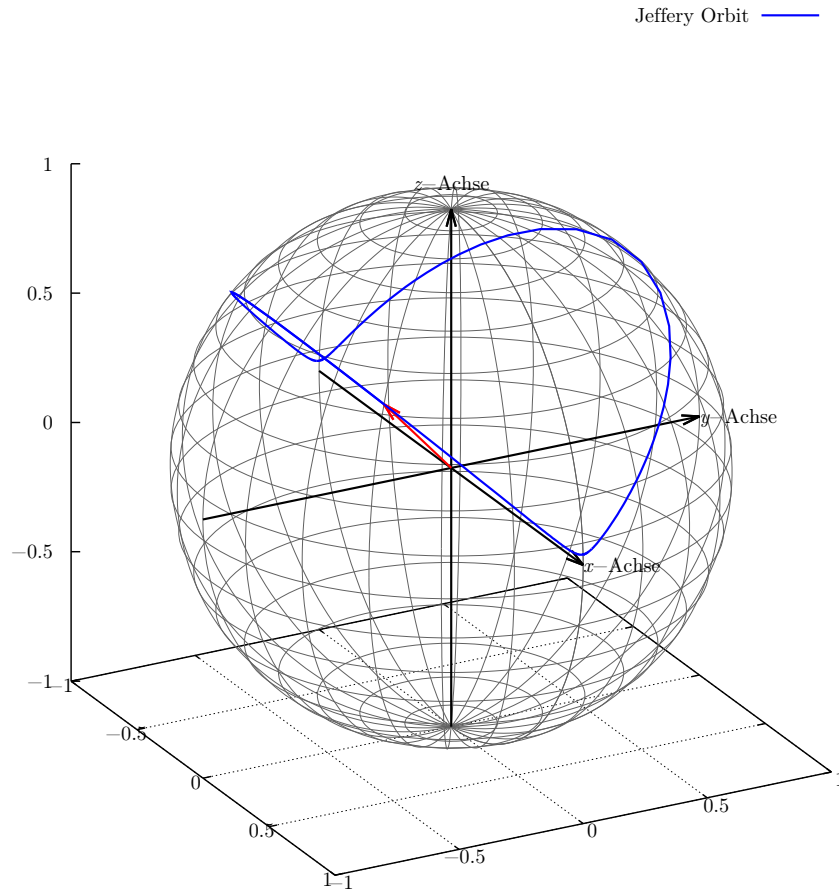


Abbildung 3.3: JEFFERY Orbit

Basierend auf den oben stehenden Annahmen wird im Folgenden die JEFFERY Gleichung für einen Spezialfall hergeleitet, um die Gleichung zu veranschaulichen [32].

Die Basis der Überlegungen stellt eine masselose Faser mit den Ortsvektoren \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 bezogen auf den Ursprung O in einem vollständig viskosen Fluid dar. Dieser Zustand ist in Abbildung 3.4 dargestellt.

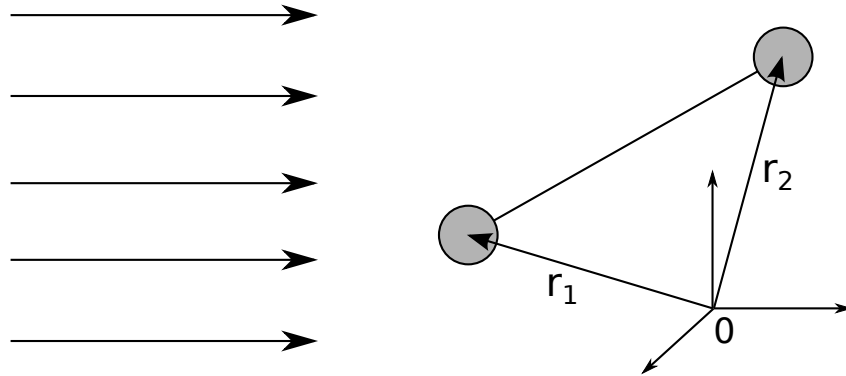


Abbildung 3.4: Partikel in Stokes Strömung [32]

Nimmt man an, dass das Fluid zwischen den Endpunkten frei fließen kann, heißt das, dass zwischen den Endpunkten im Fluid keine durch die Faser hervorgerufenen Spannungen entstehen. Die Endpunkte werden als Partikel betrachtet. Es sei $\mathbf{q} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ und die Länge $\|\mathbf{q}\|_2$ konstant, da die Faser als starr angenommen wird. Da nur eine homogene Strömungen betrachtet wird, gilt $\mathbf{v} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{x}$ mit \mathbf{K} in $[\frac{1}{s}]$ und $\mathbf{v} = ue_1 + ve_2 + we_3$. Die viskose Kraft auf die Partikel (Index 1 und 2) wird durch

$$\mathbf{f}_i = -\zeta(\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v}_i) = -\zeta(\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i), i = 1, 2 \quad (3.5)$$

beschrieben, wobei $\zeta = 6\pi\eta a [\frac{kg}{s}]$ die Reibung einer Sphäre mit dem Radius a [m] und der Viskosität $\eta [\frac{kg}{ms}]$ in einer Stokes Strömung unter der Bedingung vollständiger Haftung ist. Durch die Bedingung $\|\mathbf{q}\|_2 = \text{konstant}$, muss auch die innere Kraft der Faser \mathbf{f}_c konstant sein. Es muss also gelten

$$\mathbf{f}_1 + \mathbf{f}_c = \mathbf{0} \quad (3.6)$$

$$\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_c = \mathbf{0}. \quad (3.7)$$

Subtraktion der ersten Gleichung von der zweiten liefert

$$\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1 - 2\mathbf{f}_c = \mathbf{0} \quad (3.8)$$

$$\Rightarrow -\zeta((\dot{\mathbf{r}}_2 - \dot{\mathbf{r}}_1) - \mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)) - 2\mathbf{f}_c = \mathbf{0} \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow -\zeta(\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}) - 2\mathbf{f}_c = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

Da \mathbf{q} und \mathbf{f}_c die gleiche Richtung \mathbf{p} haben, kann man

$$\mathbf{q} = l\mathbf{p}, \quad \mathbf{f}_c = f_c\mathbf{p} \quad (3.11)$$

schreiben und es ergibt sich

$$-\zeta(l\dot{\mathbf{p}} - l\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}) - 2f_c\mathbf{p} = \mathbf{0}. \quad (3.12)$$

Bilden des inneren Produkts mit \mathbf{p} ergibt

$$-\zeta l\mathbf{p} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} - 2f_c = 0 \quad (3.13)$$

$$\Leftrightarrow f_c = \frac{\zeta l}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{p}. \quad (3.14)$$

In die ursprüngliche Subtraktion eingesetzt erhält man

$$-\zeta(l\dot{\mathbf{p}} - l\mathbf{K} \cdot \mathbf{p}) - 2 \left(\frac{\zeta l}{2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} \right) \mathbf{p} = \mathbf{0} \quad (3.15)$$

$$\Leftrightarrow \dot{\mathbf{p}} - \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} \mathbf{p} = \mathbf{0} \quad (3.16)$$

$$\Leftrightarrow \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{p} \mathbf{p}. \quad (3.17)$$

Aufteilen des Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{K} in den symmetrischen und antisymmetrischen Teil ergibt

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{K} + \mathbf{K}^T), \quad \mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{K} - \mathbf{K}^T), \quad (3.18)$$

so dass $\mathbf{K} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$ gilt. Daraus erhält man die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= (\mathbf{D} + \mathbf{W}) \cdot \mathbf{p} - \mathbf{p} \cdot (\mathbf{D} + \mathbf{W}) \cdot \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{D} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{D} : \mathbf{p}\mathbf{p}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

wobei die Eigenschaft $\mathbf{x} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{x} = 0 \forall \mathbf{x}$ für antisymmetrische Tensoren verwendet wurde. Die ersten beiden Terme beschreiben den Unterschied in der Geschwindigkeit der Endpunkte der Faser. Daraus resultiert eine Rotation, die durch $\mathbf{W} \cdot \mathbf{p}$ hervorgerufen wird, und eine Dehnung, die ihre Ursache in $\mathbf{D} \cdot \mathbf{p}$ hat.

Eine vollständige Herleitung der JEFFERY Gleichung, unter Berücksichtigung der Geometrie der Faser, führt zu

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \xi(\mathbf{D} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{D} : \mathbf{p}\mathbf{p}), \quad (3.20)$$

mit

$$\xi = \frac{r_e^2 - 1}{r_e^2 + 1}, \quad r_e = \sqrt{\frac{\xi + 1}{\xi - 1}}, \quad r_e = \frac{l}{d} \quad (3.21)$$

für die Repräsentation der Geometrie der Faser mit der Länge l der großen Halbachse und dem Durchmesser d der kleinen Halbachsen.

3.1.2 Ergebnisse im einfachen Scherfeld und Extremwertbetrachtung

Die JEFFERY Gleichung (3.20) wurde implementiert um Grenzwertbetrachtungen durchzuführen und weil sie die Grundlage der in Kapitel 5 implementierten FOLGAR-TUCKER Gleichung bildet. Für die folgenden Beispiele wird ein einfaches Scherfeld für die Geschwindigkeit \mathbf{v} angenommen, das sich als

$$\mathbf{v} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{x} \quad (3.22)$$

beschreiben lässt. Aus Gleichung (3.22) geht direkt hervor, dass nur die Geschwindigkeitskomponente u größer null ist. Außerdem ist u direkt proportional zur Größe der y -Koordinate und der Scherrate $\dot{\gamma}$. Daraus folgt, dass das in verschiedenen Schnitten der x - y -Ebene das Geschwindigkeitsfeld identisch ist und die Strömung eine Rotation im Uhrzeigersinn um die z -Achse hervorruft. In den Abbildungen 3.5 bis 3.10 ist \mathbf{p}_S der Startpunkt und \mathbf{p}_E der Endpunkt des von \mathbf{p} (3.4) beschriebenen JEFFERY Orbits.

Nach Gleichung (3.21) ist das Intervall in dem sich ξ üblicherweise befindet sehr klein. Das Aspektverhältnis (3.1) von Kurzfasern liegt in der Regel zwischen 10 und 40. Daraus ergibt sich ein technisch relevantes Intervall $\xi \in [0, 98; 0, 998]$. Hier werden zusätzlich zu zwei technisch relevanten Fällen auch Grenzwerte betrachtet. Dies sind die Sonderfälle wenn (3.1) entweder 0, 1 oder ∞ ist. Respektive ist $\xi = -1, 0$ oder 1.

Die Fälle für $\xi < 0$ beschreiben Fasern deren lange Halbachse kurz gegenüber der kurzen Halbachse ist. Im Grenzfall $\lim_{\xi \rightarrow -1} r_e = 0$ kann die Faser als rundes „Plättchen“ mit der Dicke $l = 0$ interpretiert werden. Der Sonderfall $\xi = 0$ beschreibt eine Faser deren lange und kurze Halbachse die gleiche Länge hat. Es handelt sich um eine Kugel mit dem Durchmesser l . Die technisch relevanten Fälle befinden sich im Bereich $0 < \xi \leq 1$. Der Grenzfall $\lim_{\xi \rightarrow 1} r_e = \infty$ beschreibt eine unendlich lange Faser mit der Dicke $d = 0$.

In der JEFFERY Gleichung (3.20) wird keine Faserinteraktion berücksichtigt. Die Orientierung der Faser ist alleine von der Geschwindigkeit des Fluides abhängig. Für das betrachtete einfache Scherfeld folgt daraus, dass der Rotations- und Dehnungsanteil des Fluids am größten ist, wenn die Faser mit der y -Achse zusammenfällt. Der Hebelarm der Faser und die Geschwindigkeitszunahme in x -Richtung ist dann am größten.

In Abbildung 3.5 ist der erste Sonderfall für $\xi = -1$ über der dimensionslosen Zeit $m \cdot t [-]$ aufgetragen. Es wird deutlich, dass \mathbf{p} einen stationären Zustand bei $(\Theta, \Phi) \in [\frac{\pi}{2}; -\frac{\pi}{2}]$ erreicht. Der durch $\xi = -1$ beschriebene Körper richtet sich so im Scherfeld aus, dass sein Hebelarm (l) zur Fluidströmung null wird und eine weitere Rotation ausbleibt.

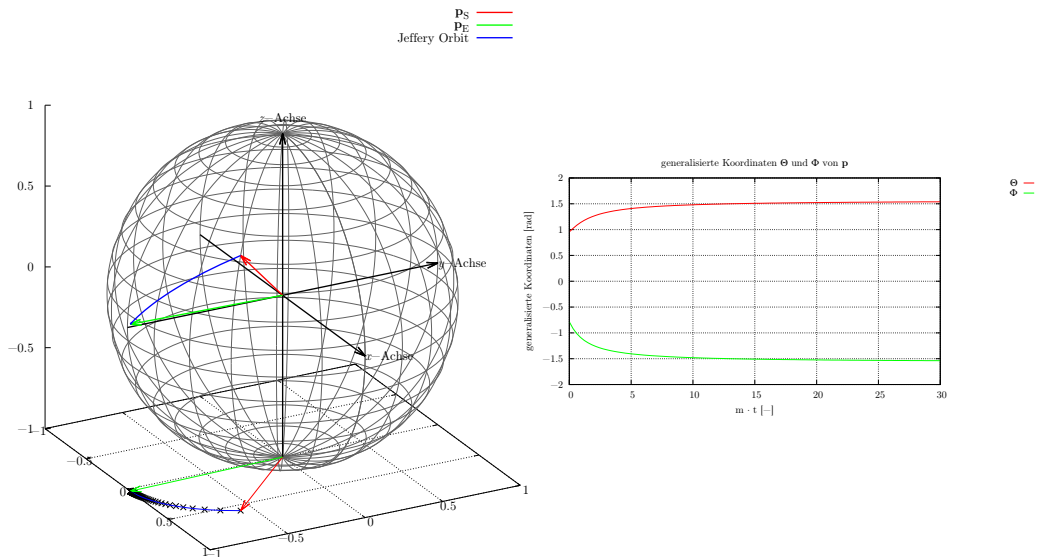


Abbildung 3.5: JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = -1$, $\dot{\gamma} = 1$, $\mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$

Für den zweiten Sonderfall $\xi = 0$ in Abbildung 3.6 der eine Kugel mit dem Durchmesser l lässt sich das Verhalten über Gleichung (3.23)

$$\underbrace{\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} - \xi \mathbf{D} \cdot \mathbf{p}}_{\text{Differenz } \mathbf{v}_{Fluid} \text{ und } \mathbf{v}_{Faser}} = \underbrace{-\xi \mathbf{D} : \mathbf{p}\mathbf{p}\mathbf{p}}_{\text{Spannung in der Faser}} \quad (3.23)$$

erklären. Nur der Term $\dot{\mathbf{p}} - \mathbf{W} \cdot \mathbf{p}$ ist ungleich null und es kommt somit zu einer Rotation des Körpers, die proportional zur Scherrate ist.

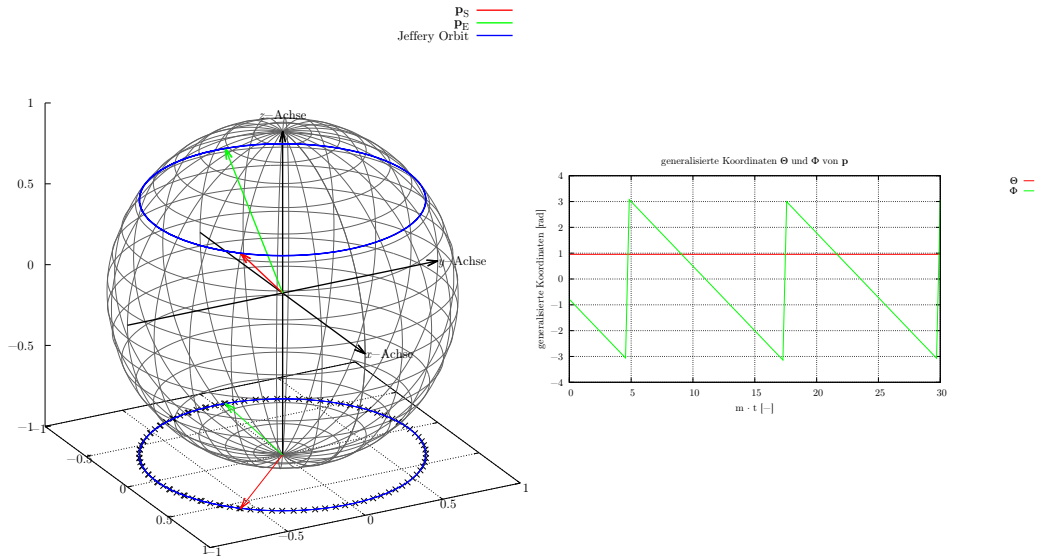


Abbildung 3.6: JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 0, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$

Der dritte Sonderfall $\xi = 1$ in Abbildung 3.7 erreicht einen stationären Zustand bei $(\Theta, \Phi) \in [\frac{\pi}{2}; -\pi]$. Der durch $\xi = 1$ beschriebene Körper richtet sich so im Scherfeld aus, dass sein Hebelarm (d) zur Fluidströmung null wird und, wie beim ersten Sonderfall, eine weitere Rotation ausbleibt. Wie zu erwarten ist das Verhalten um $\frac{\pi}{2}$ gegenüber dem ersten Sonderfall verschoben, da auch die durch den Grenzwert dimensionlose Richtung um $\frac{\pi}{2}$ verschoben ist.

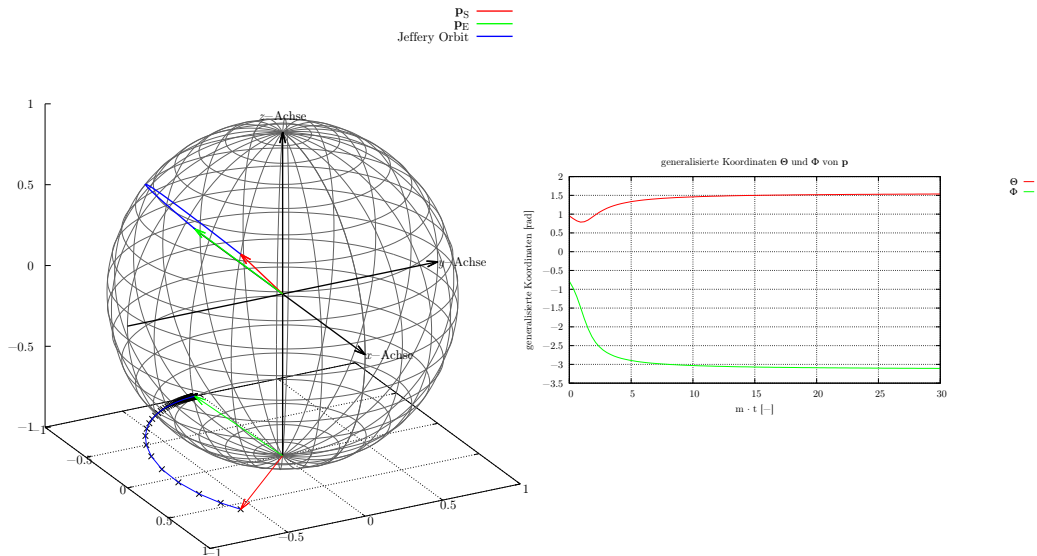


Abbildung 3.7: JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 1, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$

Wird der Startpunkt \mathbf{p}_S der Faser aus Abbildung 3.7 mit der z -Achse zusammen gelegt tritt, wie in Abbildung 3.8 zu sehen ist, keine Positionsänderung auf. Der stationäre Zustand ist mit dem Startpunkt identisch, da die Faser zu keinem Zeitpunkt eine Angriffsfläche für die Strömung bietet.

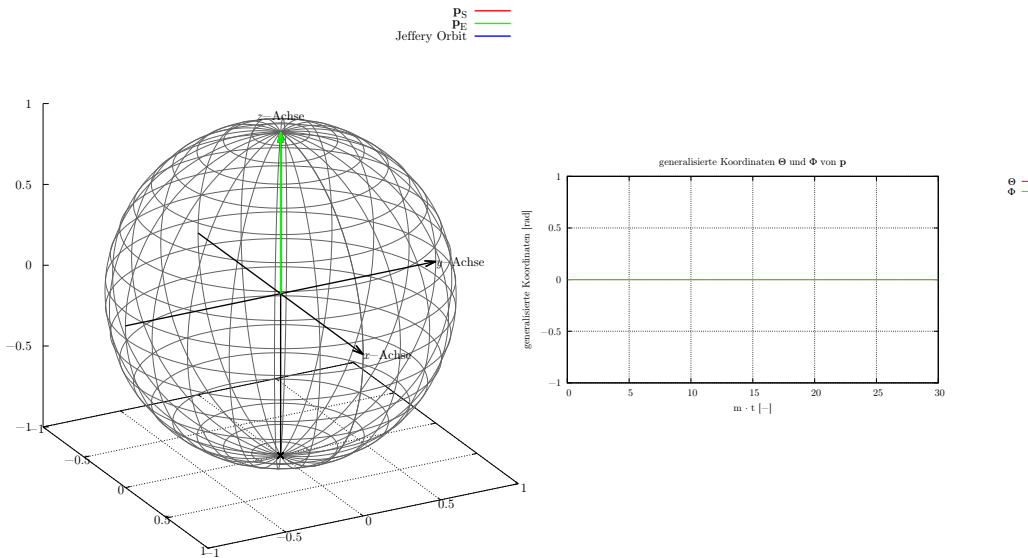


Abbildung 3.8: JEFFERY Gleichung (3.20), $\xi = 1, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = [0, 0, 1]^T$

Die in Abbildungen 3.9 und 3.10 gezeigten technisch relevanten Fälle zeigen im Gegensatz zu den Sonderfällen keine stationären Zustände auf. Für alle Fälle in denen $|\xi| < 1$ hat die Faser immer eine kurze Achse ungleich null und ist somit immer einer Rotation ausgesetzt. Die Bewegung der Faser ist periodisch. Je weiter ξ von $\xi = -1$ oder $\xi = 1$ entfernt ist, desto weiter ist der Wendepunkt des JEFFERY Orbit von der y - bzw. x -Achse entfernt. Eine Ausnahme bildet der Fall in dem $p_{S3} = 0$ ist. Dann liegt der Startpunkt der Faser in der x - y -Ebene und die Faser schneidet in ihrer Rotation um die z -Achse die x - und y -Achse.

In Abbildungen 3.9 und 3.10 ist ξ nahe dem Grenzfall $\xi = 1$ und deshalb ist der Wendepunkt auch über der x -Achse. Außerdem lässt sich beobachten, dass je kleiner ξ wird und sich dem Grenzfall $\xi = 0$ nähert, desto kürzer die Periode. Dadurch wird der Einfluss der Rotation, die in Abbildung 3.6 schon deutlich wurde, hervorgehoben.

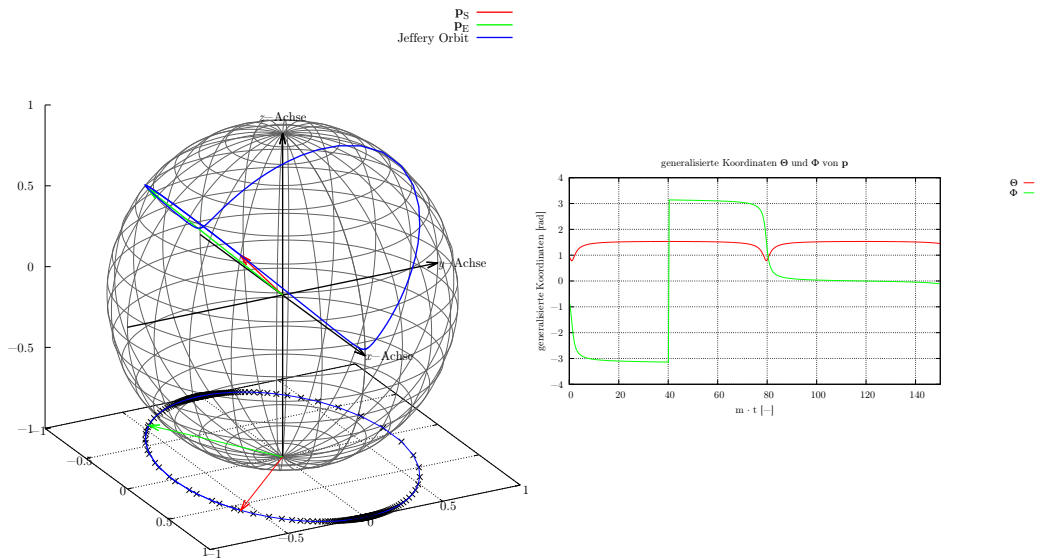


Abbildung 3.9: JEFFERY Gleichung (3.20), $r_e = 25, \xi = 0,9968, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$

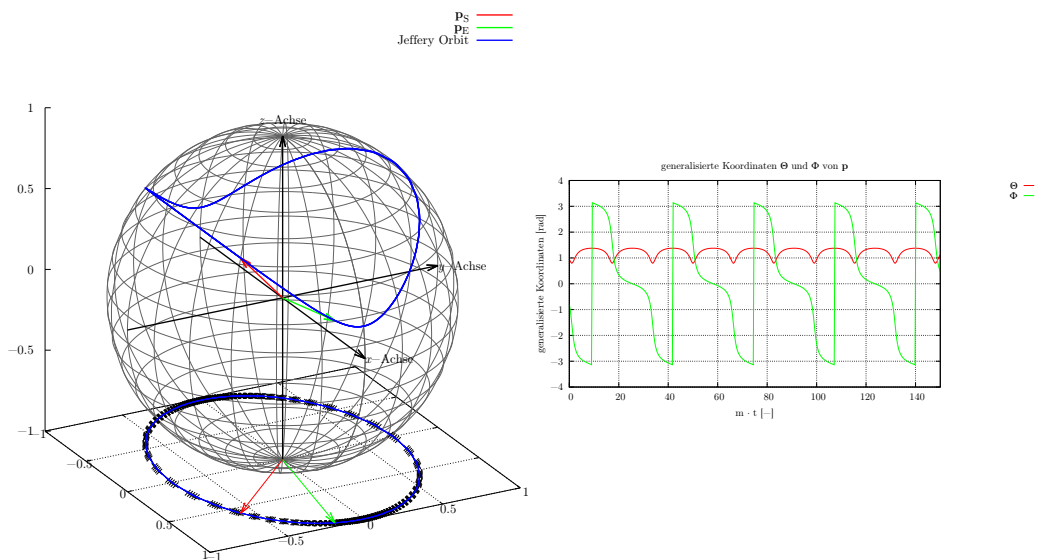


Abbildung 3.10: JEFFERY Gleichung (3.20), $r_e = 5, \xi = 0,9230, \dot{\gamma} = 1, \mathbf{p}_S = \frac{1}{\sqrt{3}}[1, -1, 1]^T$

3.2 Diskussion der FOLGAR-TUCKER Gleichung

F. FOLGAR und C. L. TUCKER III veröffentlichen 1984 eine Erweiterung der JEFFERY Gleichung, die bis heute Anwendung in kommerzieller Spritzgießsoftware findet [33]. FOLGAR und TUCKER unterteilen Fasersuspensionen in drei

Ordnungen verdünnt, halb und hoch konzentriert. Unter den gleichen Annahmen die JEFFERY getroffen hat, lässt sich die Unterteilung an der Konzentration c der Fasern festmachen. Wenn $c < \left(\frac{d}{l}\right)^2$ dann ist der Abstand zwischen zwei Fasern größer als l [34]. Dieses Kriterium definiert die verdünnte Suspension, für die auch die JEFFERY Gleichung gültig ist und experimentell überprüfte Ergebnisse liefert [35–37]. Für $\frac{l}{d} = 25$ müsste die Konzentration der Fasern in der Suspension unter 0,16% liegen, damit diese Bedingung erfüllt ist. Das ist in keinem technisch relevanten Material der Fall. Fällt die Konzentration in den Bereich $\left(\frac{d}{l}\right)^2 < c < \left(\frac{d}{l}\right)$ liegt, der Abstand zwischen Fasern zwischen l und d und die Suspension wird als halb konzentriert beschrieben. In dieser Art von Suspensionen kommt es zu regelmäßigen Kontakten und Interaktion zwischen einzelnen Fasern. Die hoch konzentrierte Suspension liegt vor, wenn $c > \left(\frac{d}{l}\right)$. Sowohl die halb- als auch hoch konzentrierte Suspension sind für technische Anwendungen relevant. In den hier betrachteten kurzfaserverstärkten Thermoplasten kommt es immer zu Faserinteraktion, die einen Richtungswechsel in den beteiligten Fasern hervorruft [35, 38]. Andere Autoren [39–42] haben ebenfalls das Verhalten von Fasern in spritzgießtypischen Strömungen untersucht. Alle haben beobachtet, dass sich die Fasern qualitativ mit dem Ansatz von JEFFERY beschreiben lassen. In Dehnströmungen orientieren sich die Fasern in Dehnrichtung, in konvergierenden Strömungen richten sie sich an den Stromlinien aus, in divergierenden Strömungen senkrecht zu den Stromlinien und im einfachen Scherfeld tendieren die Fasern zu einer Ausrichtung in Strömungsrichtung. Die vom Modell vorhergesagte perfekte Ausrichtung konnte jedoch nicht beobachtet werden. Dies ist ein entscheidender Punkt, wenn die mechanischen Eigenschaften vorhersagt werden sollen, da diese maßgeblich von der Breite der Orientierung und dem Winkel der höchsten Orientierung abhängig sind.

Da Interaktion von Fasern untereinander die Orientierung sogar in verdünnten Flüssigkeiten maßgeblich beeinflusst, erscheint eine deterministische Beschreibung nicht zielführend. FOLGAR und TUCKER entwickeln eine stochastische Beschreibung auf Basis der JEFFERY Gleichung und führen eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (WDF) $\psi(\mathbf{p}, t)$ als Funktion des Orientierungsvektors \mathbf{p} nach Gleichung (3.4) und der Zeit t ein. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass eine Faser eine bestimmte Orientierung auf der Einheits-

kugeloberfläche S (3.3) hat. Über ψ lässt sich demnach die Faserinteraktion beschreiben.

Für das Modell gelten die folgenden Annahmen:

- 1) Die Fasern sind starre Zylinder und einheitlich in Länge und Durchmesser.
- 2) Die Fasern sind ausreichend lang, um Brownsche Bewegung vernachlässigen zu können.
- 3) Die Suspension ist inkompressibel.
- 4) Das Fluid ist ausreichend viskos, so dass Massenträgheit und Auftrieb der Fasern vernachlässigt werden können.
- 5) Die Massenschwerpunkte der Fasern sind zufällig verteilt.
- 6) Es wirken keine äußeren Kräfte oder Momente auf die Suspension.

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zur Modellierung der Faserinteraktion muss ebenfalls bestimmte Eigenschaften besitzen. Zuerst muss ψ periodisch mit π sein, da eine Faser unter dem Winkel Φ nicht von einer unter dem Winkel $\Phi + \pi$ unterschieden werden kann. D.h. es gilt

$$\psi(\mathbf{p}, t) = \psi(-\mathbf{p}, t) \quad \forall \mathbf{p}, t \quad (3.24)$$

Des Weiteren müssen alle Fasern eine Richtung haben, so dass eine Normalisierungsbedingung gelten muss.

$$\oint \psi(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = 1 \quad \forall t \quad (3.25)$$

Die dritte Bedingung steht in Beziehung zu Veränderungen von ψ über der Zeit t wenn die Fasern rotieren. Diese Gleichgewichtsbedingung beschreibt das

Verlassen eines bestimmten Bereichs auf der Einheitskugel und das Eintreten in den daran anschließenden Bereich:

$$\dot{\psi} = -\tilde{\nabla} \cdot (\psi \dot{\mathbf{p}}) \text{ mit } \tilde{\nabla} = (\mathbf{I} - \mathbf{p}\mathbf{p}) \cdot \nabla. \quad (3.26)$$

Der Term, der die Faserinteraktion phenomenologisch beschreibt ergibt sich zu:

$$-C_i \underline{\dot{\gamma}} \tilde{\nabla} \ln \psi = -\frac{C_i \underline{\dot{\gamma}} \tilde{\nabla} \psi}{\psi}. \quad (3.27)$$

Hier ist C_i der in Kapitel 2.1.1 erläuterte Interaktionskoeffizient. In dieser Gleichung beschreibt $\underline{\dot{\gamma}} = \sqrt{2\mathbf{D} : \mathbf{D}}$ die sogenannte generalisierte Scherrate. Sie wird benötigt um eine Proportionalität zwischen Faserinteraktion und Deformationsrate herzustellen.

Die Erweiterung der ursprünglichen JEFFERY Gleichung um den Interaktionsterm (3.27) führt zur sogenannten FOLGAR-TUCKER Gleichung

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{p} + \xi(\mathbf{D} \cdot \mathbf{p} - \mathbf{D} : \mathbf{p}\mathbf{p}\mathbf{p}) - C_i \underline{\dot{\gamma}} \tilde{\nabla} \ln \psi. \quad (3.28)$$

Zur Berechnung von $\mathbf{p}(t)$ mit Gleichung (3.20), die auch den ersten Teil von Gleichung (3.28) bildet, muss $\mathbf{v}(t)$ bekannt sein. Zusätzlich wird für Gleichung (3.28) noch vorausgesetzt, dass $\psi(\mathbf{p}(t), t)$ bekannt ist. Da dies nicht der Fall ist, muss ψ durch lösen von Gleichung (3.26) bestimmt werden. Dies führt in praktischen Anwendungen zu erheblichem numerischen Aufwand. Aus diesem Grund wird in der numerischen Beschreibung von Faserorientierungen eine tensorielle Beschreibung verwendet.

3.3 Tensorielle Beschreibung von Faserorientierungen

Um den numerischen Aufwand in der Berechnung von Faserorientierungen für den dreidimensionalen Fall gering zu halten, wurden in der Literatur verschiedene Ansätze diskutiert. Diese Ansätze basieren entweder auf Annahmen bezüglich der prinzipiellen Orientierung oder auf Symmetrien der Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion [43–46]. Schon in diesen Arbeiten tauchen Tensoren zur Beschreibung von Orientierungszuständen auf. Sie werden jedoch meist nur als Zwischenergebnisse betrachtet. Erst durch weitere Arbeiten bezüglich der Orientierungsbeschreibung und der sich ergebenden Möglichkeit, die mechanischen Eigenschaften über die gleichen Tensoren zu beschreiben, hat sich die Beschreibung über Tensoren durchgesetzt [47–50].

Die richtungweisende Arbeit von ADVANI und TUCKER führt zu den bis dato verwendeten Berechnungsansätzen und prägt den Term „Orientierungstensor“ [51].

In [32, 52] wird gezeigt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in Form einer Reihe

$$\psi(\mathbf{p}, t) = f_0 V_0 + \sum_{i,j} [f_{ij}(\mathbf{p}) V_{ij}(t)] + \sum_{i,j,k,l} [f_{ijkl}(\mathbf{p}) V_{ijkl}(t)] + \dots \quad (3.29)$$

erweitert werden kann.

Dabei sind

$$\begin{aligned}
 f_0 &= 1 \\
 f_{ij} &= p_i p_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \\
 f_{ijkl} &= p_i p_j p_k p_l \\
 &\quad - \frac{1}{7} (p_i p_j \delta_{kl} + p_i p_k \delta_{jl} + p_i p_l \delta_{jk} + p_j p_l \delta_{ik} + p_j p_k \delta_{il}) \\
 &\quad + \frac{1}{35} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \\
 &\quad \vdots
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

die spurfreien Basisfunktionen und

$$V_{ij\dots}(t) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{N!} \prod_{x=0}^N (2x+1) \oint_S \psi(\mathbf{p}, t) f_{ij\dots} d^2 \mathbf{p} \tag{3.31}$$

die korrespondierenden Koeffizienten. Daraus folgt, dass durch die Berechnung von \mathbf{A} und \mathbb{A} die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ψ approximiert werden kann.

ADVANI und TUCKER definieren in [51] die Orientierungstensoren als dyadisches Produkt von \mathbf{p} das zusammen mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ψ über alle möglichen Richtungen integriert wird als

$$\mathbf{A}(t) = \oint \psi(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \mathbf{p} d\mathbf{p} \tag{3.32}$$

und

$$\mathbb{A}(t) = \oint \psi(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \mathbf{p} \mathbf{p} \mathbf{p} d\mathbf{p}. \tag{3.33}$$

Gleichungen (3.32) und (3.33) führen mit (3.28) und (3.26) auf die Ratengleichung des Orientierungstensors 2. Stufe:

$$\dot{\mathbf{A}} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} + \xi(\mathbf{D} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} - 2\mathbb{A} : \mathbf{D}) + 2C_i \dot{\underline{\gamma}}(\mathbf{I} - 3\mathbf{A}) \quad (3.34)$$

die heute als FOLGAR-TUCKER Gleichung bekannt ist. Die vollständige Herleitung kann [32, 51] entnommen werden.

Wie in Gleichung (3.34) zu sehen ist, erscheint die Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion ψ nicht mehr. Dafür ist aber der Orientierungstensor 4. Stufe \mathbb{A} in der Gleichung enthalten. Dieser Umstand macht es nötig, eine Schließungsformulierung für das Gleichungssystem zu finden. Dieses Problem wird ebenfalls in [51] und später in [53–56] behandelt. ADVANI und TUCKER stellen in ihrer ursprünglichen Arbeit verschiedene Schließungsformulierungen vor. Es zeigt sich, dass die Wahl der Schließungsformulierung einen erheblichen Einfluss auf das Ergebnis von \mathbf{A} hat. Vorgestellt werden die lineare, quadratische und hybride Schließungsformulierung, die mit dem exakten Ergebnis der Verteilungsfunktion verglichen werden. Die verschiedenen Schließungsformulierungen produzieren bei unterschiedlichen Randbedingungen (Strömung und C_i) stark abweichende Ergebnisse. Die hybride Schließungsformulierung schneidet bei Orientierungszuständen von vollständig orientiert zu völliger Regellosigkeit am besten ab. Die wesentlich einfachere quadratische Schließungsformulierung liefert ebenfalls gute Ergebnisse, wenn die Fasern höher orientiert sind. Festzuhalten ist, dass die Schließungsformulierung einen signifikanten Einfluss auf die Ergebnisse hat. In kommerziellen Softwaretools hat der Anwender keinerlei Einfluss auf die Schließungsformulierung. Für die Umsetzung der Parameteridentifikation wurden die lineare, quadratische und hybride Schließungsformulierung implementiert (vgl. Kapitel 6).

Bei der Interpretation von Orientierungstensoren ist es hilfreich zunächst die mathematischen Eigenschaften zu betrachten. Untersucht man \mathbf{A} hinsichtlich seiner Eigenvektoren oder Hauptachsen ist \mathbf{A} eine diagonal Matrix mit Eigenwerten auf der Diagonalen. Aufgrund von (3.25) gilt $A_{ii} = 1$. Die Diagonalelemente von \mathbf{A} geben also einen Hinweis auf den „Grad“ der Orientierung. Mögli-

che Szenarien von Faserorientierungen sind in den Abbildungen 3.11, 3.12, 3.13 und 3.14 dargestellt. Aus jeder der angegebenen Faserorientierungen resultiert ein Richtungsabhängigkeit des Verbundwerkstoffes. Diese wird zur Weiteren Verdeutlichung zusätzlich angegeben.

In Abbildung 3.11 sind alle Fasern in x -Richtung orientiert. Die unidirektionale Faserorientierung resultiert in transversal isotropen Materialverhalten.

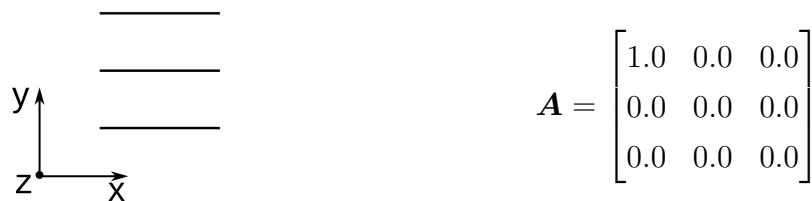


Abbildung 3.11: Transversal isotropes Materialverhalten

In Abbildung 3.12 sind $2/3$ der Fasern in x - und $1/3$ der Fasern in y -Richtung orientiert. Es ergibt sich ein orthotropes Materialverhalten.



Abbildung 3.12: Orthotropes Materialverhalten

In Abbildung 3.13 sind je $1/3$ der Fasern in x , y und z -Richtung orientiert. Den gleichen Tensor erhält man auch bei einer völlig regellosen Verteilung der Fasern. Das Materialverhalten kann also bei identischem Orientierungstensor entweder orthotrop oder quasiisotrop sein.

Abbildung 3.14 macht die Bedeutung der Bezugsachsen deutlich. Obwohl eine unidirektionale Faserorientierung vorliegt, ist \mathbf{A} nicht wie in Abbildung 3.11 besetzt. Dies ist für die experimentelle Bestimmung von Faserorientierungen von großer Bedeutung (vgl. Kapitel 4).

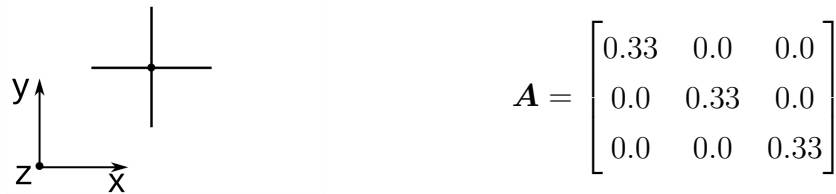


Abbildung 3.13: Orthotropes oder quasiisotropes Materialverhalten



Abbildung 3.14: Unidirektionale Faserorientierung außerhalb des Hauptachsensystems

Insbesondere Abbildung 3.13 macht deutlich, dass die Beschreibung der Faserorientierung über Tensoren 2. Stufe nicht eindeutig ist. Fasern, die im Mittel regellos orientiert sind, haben den gleichen Orientierungstensor wie eine anteilig identische Orientierung entlang der Achsen.

3.4 Neuere Modelle zur Berechnung von Faserorientierungen

Die Thematik der Orientierungsberechnung ist seit der Einführung von Gleichung (3.34) im Jahre 1987 aktueller denn je. Die Implementierung in kommerzielle Software hat die Orientierungsberechnung für Ingenieure zugänglich gemacht und wird heute in allen Bereichen (vgl. Kapitel 1.2) eingesetzt. Viele Autoren haben sich mit dem Thema beschäftigt und sowohl an den Grundlagen, der Beschreibung einer Faser im Strömungsfeld, der Tensor Ratengleichung und der Anwendung vorhandener Modelle gearbeitet [57–79]. Aufbauend auf diesen Arbeiten und der Zunahme an experimentellen Ergebnissen zur Validierung vorhandener Modelle [27, 77, 80–84] sind zwei weitere Modelle

entstanden, die heute ebenfalls in kommerziellen Softwaretools implementiert sind. Diese werden in den folgenden zwei Abschnitten kurz vorgestellt.

3.4.1 Reduced-strain closure Modell

J. WANG, J. F. O’GARA und C. L. TUCKER III [85] erweitern 2008 Gleichung (3.34) um der Tatsache Rechnung zu tragen, dass die ursprüngliche Gleichung stationäre Zustände zu schnell erreicht. In konzentrierten Suspensionen richten sich die Fasern langsamer aus, als von Gleichung (3.34) vorhergesagt, was in der Regel zu einer zu hoch vorhergesagten Orientierung führt. Dazu zerlegen sie Gleichung (3.34) in Ratengleichungen der Eigenwerte und Eigenvektoren von \mathbf{A} , modifizieren die Gleichung der Eigenwerte und setzen die Gleichung dann wieder zu einer Ratengleichung für \mathbf{A} zusammen:

$$\dot{\mathbf{A}}_{RSC} = \mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W} + \xi \{ \mathbf{D} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} - 2[\mathbb{A} + (1 - \kappa)(\mathbb{L} - \mathbb{M} : \mathbb{A})] : \mathbf{D} \} + 2\kappa C_i \dot{\underline{\gamma}}(\mathbf{I} - 3\mathbf{A}). \quad (3.35)$$

Die vollständige Herleitung kann [85] entnommen werden.

Es zeigt sich, dass Gleichungen (3.35) und (3.34) bis auf zwei Unterschiede identisch sind. Der erste Unterschied ist, dass der Diffusionsterm $2C_i \dot{\underline{\gamma}}(\mathbf{I} - 3\mathbf{A})$ mit einem empirischen skalaren Faktor κ multipliziert wird. Der zweite Unterschied ist das Ersetzen des Schließungsterms \mathbb{A} durch $[\mathbb{A} + (1 - \kappa)(\mathbb{L} - \mathbb{M} : \mathbb{A})]$. Das ist gleichbedeutend mit der Implementation einer neuen Schließungsformulierung die von κ abhängig ist und die den Effekt von Dehnungen auf die Orientierung reduziert. Daher auch der Name „reduced-strain closure“ (RSC). Die Umsetzung kann mit jeder Schließungsformulierung verwendet werden, da \mathbb{A} immer aus \mathbf{A} berechnet wird.

Der Effekt des RSC Modells auf berechnete Faserorientierungen im Vergleich zur klassischen FOLGAR-TUCKER Gleichung kann in Abbildungen 3.16 und 3.15 qualitativ nachvollzogen werden.

In Abbildung 3.15 sind Simulationsergebnisse für A_{11} einer Platte. Es zeigt

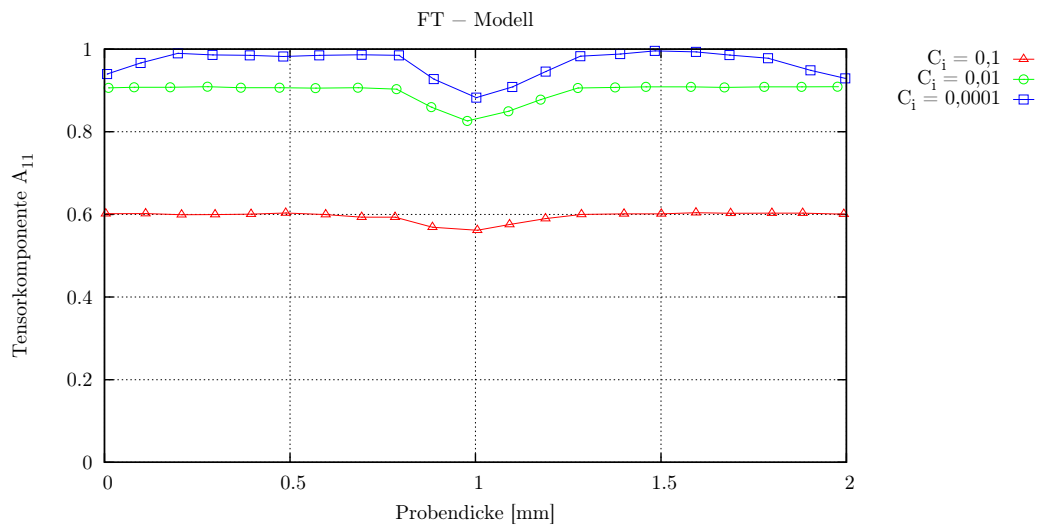


Abbildung 3.15: Variation von C_i im FOLGAR-TUCKER Modell

sich im Vergleich zu Abbildung 3.16 eine wesentlich höhere Orientierung in den Werkzeugseitigen Randbereichen der Platte. Außerdem kann vom RSC Modell in Abbildung 3.16 die Umorientierung in der Mittelschicht deutlicher abgebildet werden.

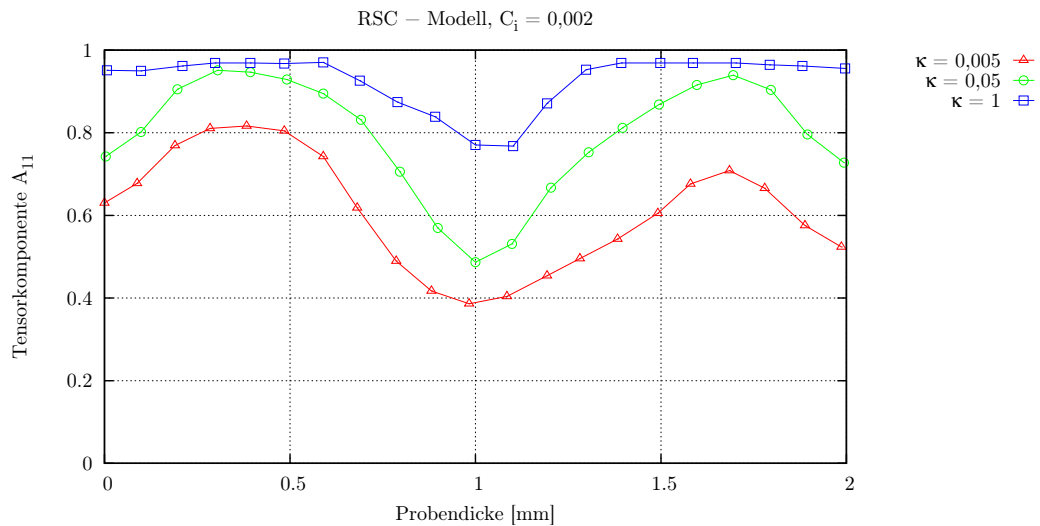


Abbildung 3.16: Variation von κ RSC Modell

Da dies nur eine qualitative Untersuchung ist, kann nicht gesagt werden welche Simulationsergebnisse die Realität besser abbilden.

3.4.2 Anisotropic rotary diffusion Modell

Der Vollständigkeit halber wird das von J. H. PHELPS und C. L. TUCKER III [86] entwickelte „anisotropic rotary diffusion“ Modell (ARD) ebenfalls kurz erläutert. Dieses Modell ist ebenfalls in kommerziellen Spritzgießtools implementiert, aber im Gegensatz zu den in Kapitel 3.2 und 3.4.1 beschriebenen Modellen für die Berechnung von Langfasern (Vgl. Tabelle 1.1) gedacht. Der Hauptunterschied in der Orientierung von Kurz- und Langfasern liegt in der quantitativ niedrigeren Orientierung der Langfasern. Um diesen Unterschied zu modellieren, haben PHELPS und TUCKER den skalaren Interaktionskoeffizienten C_i des Diffusionsterms $2C_i\dot{\underline{\gamma}}(\mathbf{I} - 3\mathbf{A})$ aus Gleichung (3.34) durch einen Tensor 2. Stufe \mathbf{C} ersetzt. Dadurch erhält das Modell zusätzlich zu ξ aus Gleichung (3.34) anstelle von C_i fünf freie Parameter, die bestimmt werden müssen. Die Ratengleichung

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{A}}_{ARD} = & (\mathbf{W} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{W}) + \xi(\mathbf{D} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{D} - 2\mathbb{A} : \mathbf{D}) \\ & + \dot{\underline{\gamma}}[2\mathbf{C} - 2(\text{tr}\mathbf{C})\mathbf{A} - 5(\mathbf{C} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) + 10\mathbb{A} : \mathbf{C}] \end{aligned} \quad (3.36)$$

wird in [86] vollständig hergeleitet. Auch die Möglichkeit der Parameteridentifikation wird kurz angesprochen. Es lässt sich zusammenfassen, dass für Kurzfasern das FOLGAR-TUCKER oder RSC Modell dem ARD Modell vorgezogen werden sollte, da diese Modelle explizit für die Orientierungsberechnung von Kurzfasern entwickelt wurden.

4 Experimentelle Bestimmung von Faserorientierungen und Längenverteilungen

Die klassische Methode zur Analyse von Faserorientierungen in thermoplastischen Formteilen ist die lichtmikroskopische Analyse von Schlibfbildern [87]. Dazu wird ein repräsentatives Volumen des Formteils entnommen und für die lichtmikroskopische Analyse vorbereitet. Das zu untersuchende Volumen wird in eine duroplastische Matrix eingebettet und so lange geschliffen und poliert, bis sich eine der Analysemethode genügende Oberflächengüte einstellt. Die vorbereitenden Arbeiten und ein fertiges Schlibfbild sind in den Abbildungen 4.1 und 4.2 dargestellt. In Abbildung 4.1 ist links die frisch eingebettete Probe, in der Mitte die Probe in der ausgehärteten Matrix und rechts die geschliffene und polierte Probe zu sehen. Die in Abbildung 4.2 zu sehenden Ellipsen werden dann mit einem Lichtmikroskop untersucht und vermessen. Aus dem Verhältnis der großen zur kleinen Halbachse der Schlibfellipsen und dem Winkel zwischen der großen Halbachse und einem Bezugskoordinatensystem kann die Orientierung der Faser berechnet werden [80, 88, 89]. Wie in [89] beschrieben, hat dieses Verfahren den Nachteil, dass der Austrittswinkel β einer Faser nicht eindeutig einer Orientierung zugeordnet werden kann, da eine Faser mit dem Austrittswinkel $\beta + \frac{\pi}{2}$ eine identische Schlibfellipse erzeugt. Dieses Problem lässt sich nur durch die zusätzliche Analyse einer tiefer liegenden Schlibfebene beheben. Die Positionsänderung der Schlibfellipsen vom ersten zum zweiten Schlibfbild erlaubt eine eindeutige Identifikation der Orientierung.



Abbildung 4.1: Verschiedene Stadien von Schliifproben



Abbildung 4.2: Schliifbild PA6GF30 [90]

Zur Bestimmung der Faserlängenverteilung muss eine zweite Probe durch Veraschen von der thermoplastischen Matrix befreit werden. Nachdem die Matrix vollständig entfernt ist, werden die zurückbleibenden Fasern unter einem Lichtmikroskop analysiert und vermessen. Diese Methode hat die zwei entscheidenden Nachteile, dass die Faserlängenverteilung nicht aus der gleichen Probe wie die Orientierung gewonnen werden kann und dass die Faserlängenverteilung nicht über die Bauteildicke aufgelöst ist.

Aus diesem Grund werden in der vorliegenden Arbeit die Orientierungsanalysen und Faserlängenverteilungen des Versuchsprogramms (siehe Kapitel 4.1)

mit einem Mikro-Computertomographen (μ -CT) durchgeführt (SkyScan 1072-100). Die so gewonnenen Rohdaten werden mit einer am Deutschen Kunststoff-Institut (DKI) entwickelten Software ausgewertet und dann weiter analysiert.

4.1 Versuchsprogramm

Das Versuchsprogramm zur Analyse von Faserorientierungen und Faserlängenverteilungen beinhaltet drei verschiedene Fasergehalte und zwei verschiedene Halbzeuggeometrien (vgl. Tabelle 4.1). Die unterschiedlichen Fasergehalte von 15%, 30% und 50% (Gewicht) wurden aufgrund ihrer technischen Relevanz ausgewählt. Da die Geometrie des Bauteils ausschlaggebenden Einfluss auf die in Kapitel 1.4 eingeführten Geschwindigkeit $v(t)$ hat, werden ebenfalls zwei verschiedene Varianten untersucht. Die erste Halbzeuggeometrie stellt eine Platte mit den Abmessungen 80x80x2,5 [mm] dar, siehe Abbildung 4.3. Diese Platte hat eine spezielle Verteilergeometrie, die eine parallel zum Staubalken fließende Schmelzefront ermöglicht. Das Strömungsverhalten ist daher mit großflächigen Bauteilen vergleichbar.

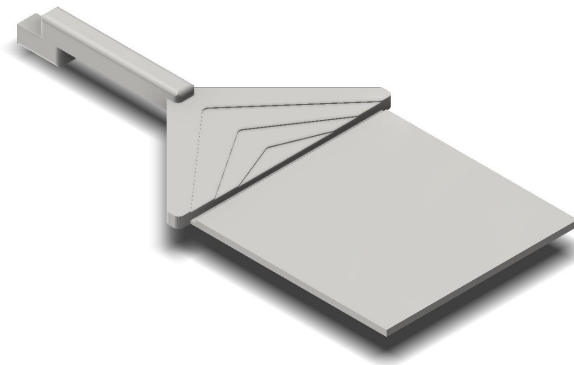


Abbildung 4.3: Halbzeuggeometrie Platte [10]

Die zweite Halbzeuggeometrie wird im Weiteren als Stab bezeichnet und weist im unteren Bereich signifikant andere Strömungsverhältnisse als die Platte auf, siehe Abbildung 4.4.

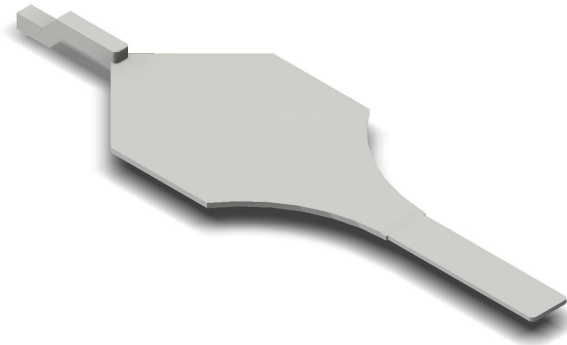


Abbildung 4.4: Halbzeuggeometrie Stab [10]

Durch den konvergenten Einlauf wird, bei gleichbleibendem Volumenstrom, die Schmelze massiv beschleunigt. Die so auftretenden Strömungsverhältnisse sind ähnlich denen in Verjüngungen komplexer Bauteile.

Tabelle 4.1: Versuchsprogramm μ -CT Analyse

	Stab konvergenter Einlauf	Platte 80x80x2,5 [mm]
PA6GF15	Positionen 1-7	Positionen 1-9
PA6GF15	-	Sonderpositionen 1-3
PA6GF30	Positionen 1-7	Positionen 1-9
PA6GF30	-	Sonderpositionen 1-3
PA6GF50	Positionen 3,6	Position 5,6

Die Positionen und Sonderpositionen der untersuchten Proben aus den jeweiligen Halbzeuggeometrien sind in Abbildungen 4.5 und 4.6 dargestellt. Im Folgenden werden untersuchte oder simulierte Faserorientierungen und Längenverteilungen immer zusammen mit der Halbzeuggeometrie und den in Abbildungen 4.5 und 4.6 eingezeichneten Positionen angegeben.

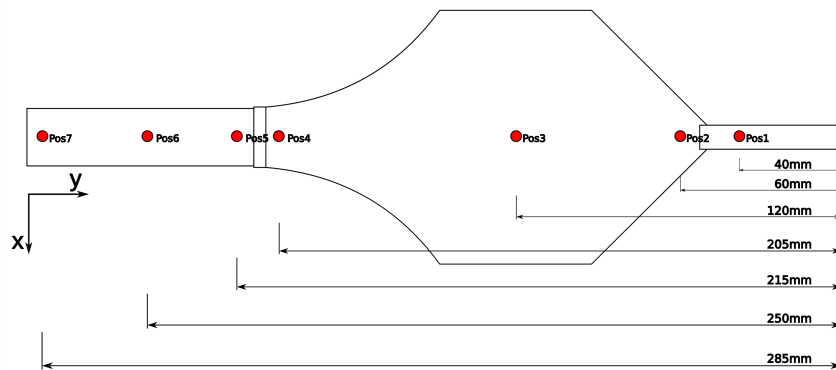


Abbildung 4.5: Probenpositionen Halbzeuggeometrie Stab

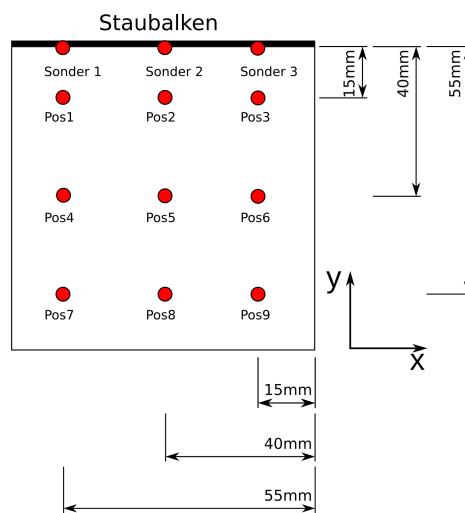


Abbildung 4.6: Probenpositionen Halbzeuggeometrie Platte

4.2 Computertomographische Analyse

Die Funktionsweise des verwendeten μ -CT ist schematisch in Abbildung 4.7 dargestellt. Die technischen Eigenschaften sind in Tabelle 4.2 aufgeführt. Wie in Abbildung 4.7 zu erkennen ist, hängt die maximale Auflösung von der Position der Probe zur Röntgenquelle ab (Strahlensatz). Die Auflösung wird durch Verfahren der Probe zwischen Röntgenquelle und Detektor eingestellt. Bedingt durch die Bauart des SkyScan 1072-100 und der nötigen Auflösung von $1,8 \mu\text{m}$, darf der Durchmesser der Probe maximal 4 mm betragen. Die Höhe der Probe (Bauteildicke) ist unproblematisch, da der Probenhalter in der Höhe verfahren werden kann. Ist die Höhe der Probe größer als die belichtbare Fläche, wird

die Probe in mehreren Stufen gescannt und nachträglich zusammengesetzt. Das Ergebnis der μ -CT Analyse ist eine zylindrische, dreidimensionale Dichteverteilung des Messvolumens. Das Messvolumen ist kleiner (\varnothing 2,5 mm) als der Probendurchmesser. So wird erreicht, dass das Messvolumen vollständig von der Probe ausgefüllt wird, was eine spätere Analyse erleichtert.

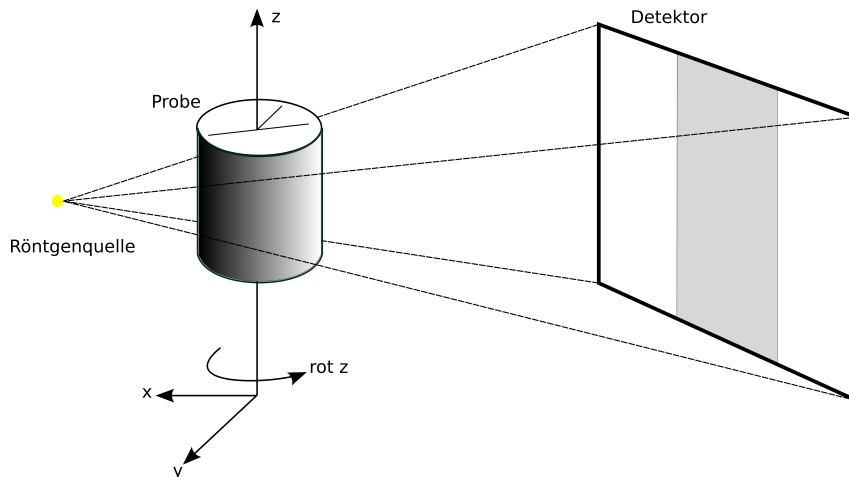


Abbildung 4.7: Funktionsschema μ -CT

Tabelle 4.2: Technische Eigenschaften SkyScan 1072-100

Röntgenquelle	20 kV - 100 kV, 0-100 μ A
Detektor	1024 x 1024 x 12 Bit CCD (gekühlt)
Vergrößerung	12x bis 163x
max. Auflösung	1,8 μ m
Probenaufnahme	180°/360° drehbar, var. Höhe
max. Probengröße	40 mm x 40 mm
Scanzeit	ca. 1,2 h
Rekonstruktionszeit	ca. 10 min

Zur Analyse der Faserorientierung und Faserlängenverteilung mit dem μ -CT werden folgende Schritte durchgeführt:

- Probenpräparation,
- Erstellen von Durchlichtbildern,

- Rekonstruktion der dreidimensionalen Dichteverteilung aus Durchlichtbildern
- und Auswertung der μ -CT Rohdaten (Kapitel 4.3, 4.4).

Vor dem Herausarbeiten der Probe aus dem Halbzeug oder Bauteil, muss die Probe auf ihrer Oberfläche markiert werden. Die zylindrische Probe kann sonst nach der Präparation nicht mehr mit dem Bauteilkoordinatensystem zusammengebracht werden. Das verwendete Schema zur Reorientierung der Probe ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Die Markierung bezeichnet mit dem durchgängigen Strich die y -Richtung, der nicht durchgehende Strich zeigt in den 4. Quadranten des kartesischen Koordinatensystems.

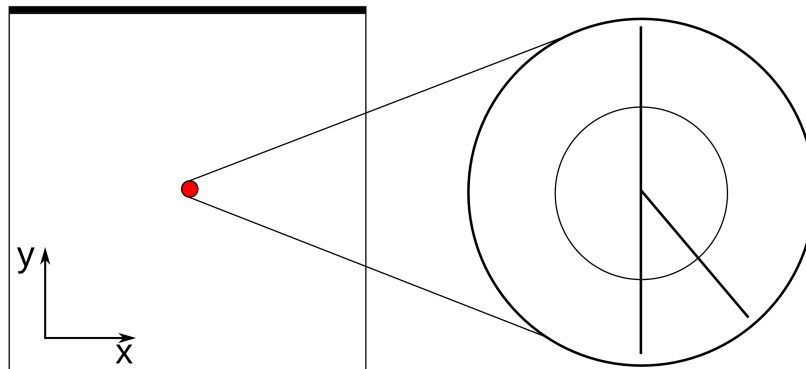


Abbildung 4.8: Schema der μ -CT Probenmarkierung

Die zweite Aufgabe der Markierung ist, das Messvolumen nach der Messung wieder in das ursprüngliche Bauteilkoordinatensystem zu drehen. Das heißt, dass die Markierung auf der Probenoberfläche auch in der dreidimensionalen Dichteverteilung zu sehen sein muss. Hierbei hat sich die Methode des Anritzens der Probenoberfläche mit einem Skalpell bewährt. Die Markierung der Probe ist in Abbildung 4.9 in der μ -CT Aufnahme zu sehen.

Nach der Markierung der Probe, wird diese mit einer Fräse aus der Halbzeuggeometrie ausgefräst, entgratet und im nächsten Schritt auf den Probenhalter aufgebracht. Um eine festgelegte Positionierung zu gewährleisten, wurde eine Positionierungshilfe konstruiert. Die Positionierungshilfe erlaubt schnelle Probenwechsel, immer gleiche Position in der x - y -Ebene und gleichbleibende



Abbildung 4.9: Schnittbild PA6GF30 mit Orientierungsmarkierung

z -Position. Zur eigentlichen Befestigung der Probe auf dem Probenhalter wird Sekundenkleber verwendet. Eine fertig präparierte Probe ist in Abbildung 4.10 zu sehen.

Im nächsten Schritt wird die fertig präparierte Probe mit dem Probenhalter im μ -CT eingesetzt um Durchlichtbilder zu erstellen. Die Position in der x - y -Ebene ist durch die Positionierhilfe festgelegt. Der Drehwinkel um die z -Achse muss zunächst nicht beachtet werden, da die Reorientierung der Dichteverteilung später anhand der aufbrachten Markierung erfolgt. Für die Aufnahme der Durchlichtbilder wird die Probe so nah wie möglich an die Röntgenquelle verfahren, um eine Auflösung von $1,8 \mu\text{m}$ einzustellen. Das entspricht ca. $\frac{1}{5}$ des durchschnittlichen Faserdurchmessers. So ist eine ausreichende Genauigkeit für die bildanalytische Auswertung mit der Monte-Carlo-Methode gegeben (vgl. Kapitel 4.3). Die Parameter, die zur Analyse der Proben verwendet wurden, sind in Tabelle 4.3 zusammengefasst.

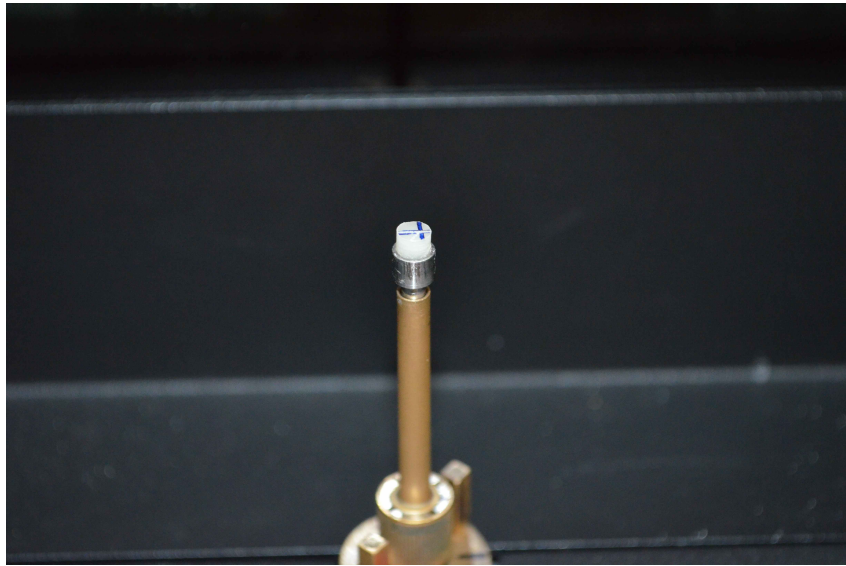


Abbildung 4.10: Präparierte Probe auf Probenhalter

Tabelle 4.3: Parameter der μ -CT Analyse

Beschleunigungsspannung	100 kV
Elektronenstrom	90 μ A
Belichtungszeit	2,5 s
Auflösung	1,8 μ m

Zur Aufnahme der Durchlichtbilder wird die Probe von der Röntgenstrahlung durchleuchtet und das Durchlichtbild vom Detektor aufgezeichnet. Danach wird die Probe $0,45^\circ$ um die z -Achse gedreht und das nächste Durchlichtbild aufgenommen. Dieser Vorgang wird so oft wiederholt, bis die Probe sich um 180° gedreht hat. Die nun vorliegenden Durchlichtbilder erlauben noch keine Identifikation von Fasern. Die Bilder sind als integrale Dichteverteilung des Probendurchmessers zu interpretieren. Ein typisches Durchlichtbild ist in Abbildung 4.11 zu sehen.

Erst durch die Rekonstruktion der Durchlichtbilder zu Schnittbildern werden die Einzelfasern erkennbar. Die Rekonstruktion der Schnittbilder wird mit der Software CT-Recon des μ -CT Herstellers durchgeführt. Hierbei werden die 400 Durchlichtbilder ($180^\circ/0,45^\circ$) zusammengesetzt und anschließend in Ebenen, die normal auf der z -Achse stehen, ausgewertet. So ergeben sich Schnittbil-

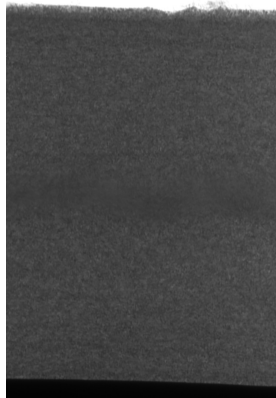


Abbildung 4.11: Durchlichtbild PA6GF30

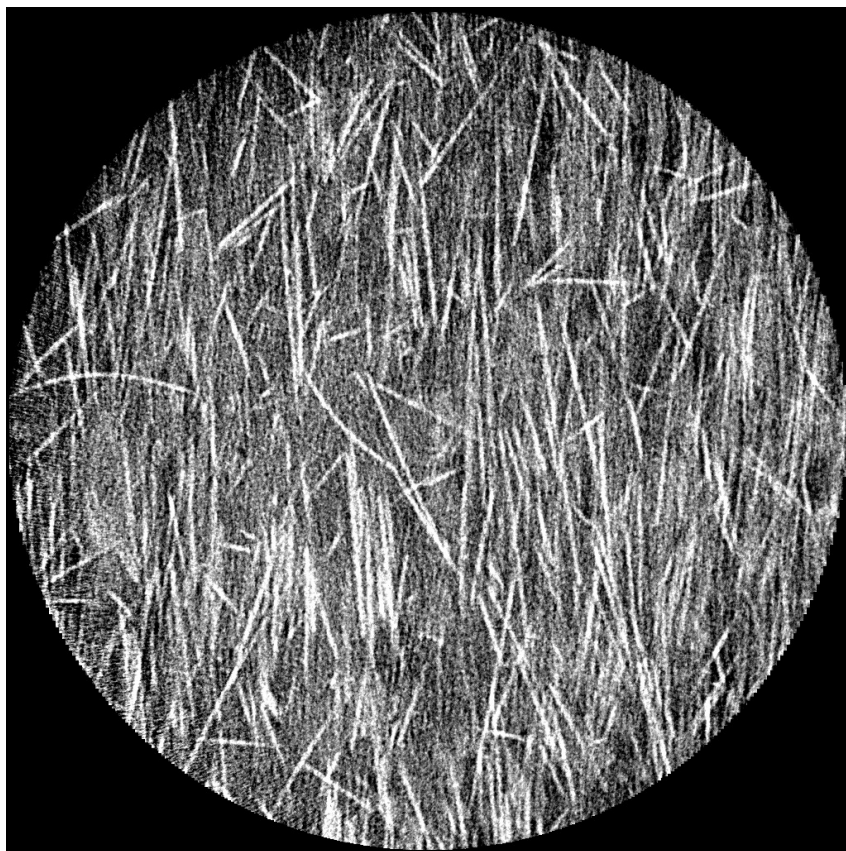


Abbildung 4.12: Schnittbild PA6GF30

der die einzelne Fasern erkennen lassen. Ein Schnittbild des PA6GF30 ist in Abbildung 4.12 zu sehen.

Die Auflösung der Schnittbilder ist jedoch nicht hoch genug, um mit der klassischen Ellipsenmethode die Orientierung der Fasern zu bestimmen. Der hierfür

eingesetzte spezielle Algorithmus wird in Kapitel 4.3 näher erläutert.

4.3 Bildanalytische Auswertung mit der Monte-Carlo-Methode

Bei der am DKI entwickelten bildanalytischen Fasererkennung handelt es sich um einen modellgestützten Algorithmus [91]. Das Ziel der Fasererkennung aus einer dreidimensionalen Dichteverteilung ist die Charakterisierung der Einzelfasern einer Probe in Hinblick auf Startposition, Richtungsvektor, Länge und Durchmesser. Die Annahmen der modellgestützten Fasererkennung postulieren, dass die Fasern einen konstanten Durchmesser haben, nur eine geringe Biegung aufweisen und keine Wendepunkte vorliegen [92]. Die Qualität von μ -CT basierten dreidimensionalen Dichteverteilungen hängt unmittelbar von der verwendeten Voxelgröße, dem Faservolumenanteil und dem Dichteunterschied von Matrix und Faser ab. In Abbildung 4.13 ist ein Gebiet hervorgehoben, in dem eine Zuordnung von Voxeln zu einzelnen Fasern ohne Modellannahme unmöglich wäre.

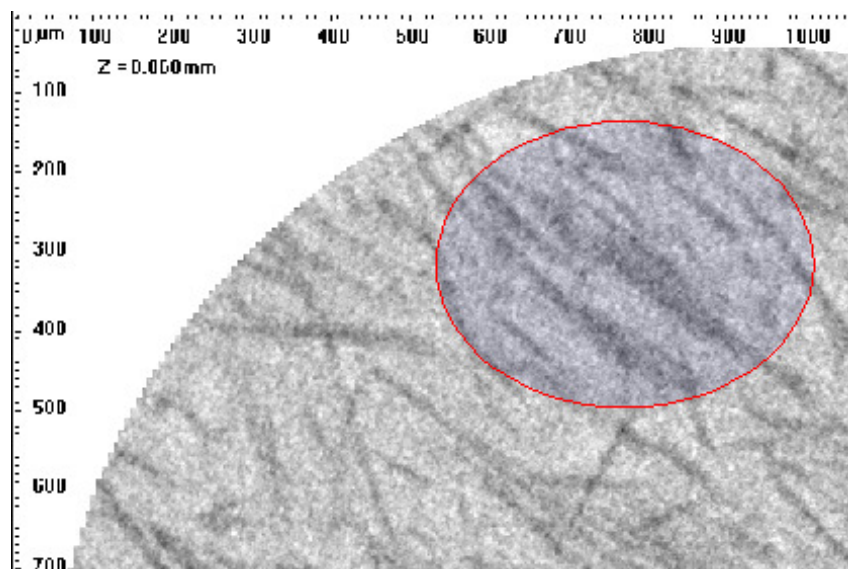


Abbildung 4.13: Problemgebiet für Ansätze ohne Modellannahmen [92]

Der am DKI entwickelte Ansatz beinhaltet vier funktionale Einheiten, die in Abbildung 4.14 dargestellt sind. In der Initialisierungsphase werden die Rohdaten des μ -CT gefiltert, binarisiert und Zufallszahlen für die Monte-Carlo-Methode akkumuliert. Danach startet eine Iteration paralleler Monte-Carlo-Mustererkennungsprozesse. Ein Kontrollprozess führt die Ergebnisse zusammen und beendet die Iterationen, wenn die Erkennungsqualität unter einen festgelegten Schwellenwert fällt.

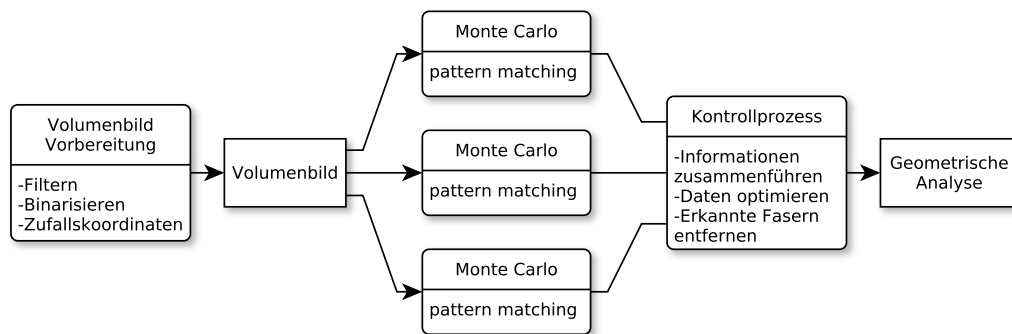


Abbildung 4.14: Flussdiagramm der Einzelfasererkennung

Es werden so viele Iterationen durchgeführt, bis entweder ein zeitliches Limit oder ein Mindestvolumen an gefundenen Fasern erreicht wird. Vor dem Start der nächsten Iteration werden alle erkannten Fasern aus dem Messvolumen gelöscht, so dass Fasern nicht doppelt gefunden werden. Die vorliegenden Ergebnisse repräsentieren immer mindestens 60% der im Messvolumen vorhandenen Fasern. Untersuchungen zur Stabilität und Reproduzierbarkeit der Einzelfaseranalyse haben gezeigt, dass sich die Ergebnisse für Orientierung und Faserlängenverteilung bei höheren Erkennungsraten nicht verändern.

In Abbildung 4.15 ist die Komponente A_{22} des Orientierungstensors \mathbf{A} (4.1) aus drei verschiedenen Messungen an drei Proben mit Fehlerbalken dargestellt. Die Abweichungen sind minimal und können auch von tatsächlich vorliegenden Unterschieden in den Proben rühren.

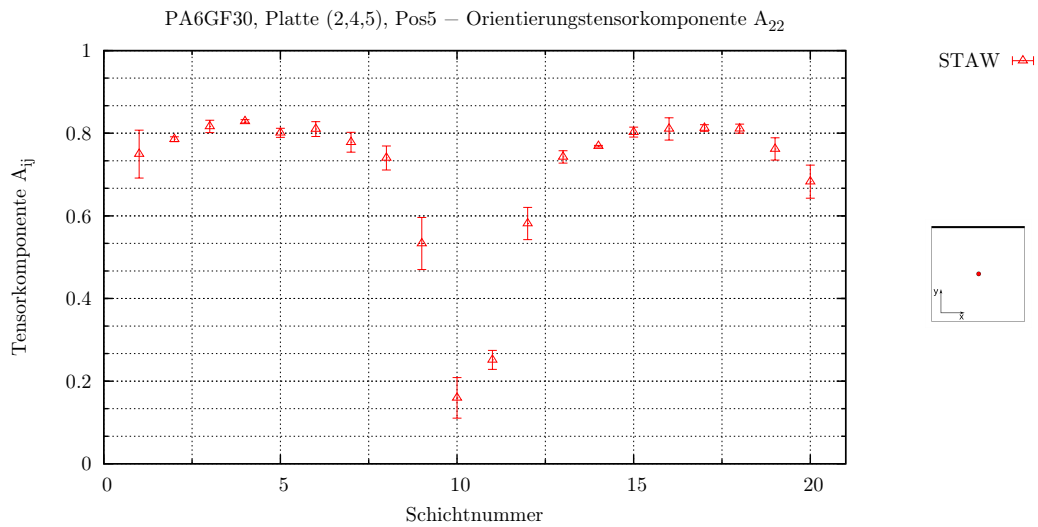


Abbildung 4.15: Standardabweichung von A_{22} aus 3 Messungen an 3 Proben

4.4 Auswertung der Rohdaten

Die, nach der bildanalytischen Auswertung der dreidimensionalen Dichteverteilung, gewonnenen Geometriedaten der Einzelfasern

- Startposition,
- Richtungsvektor,
- Länge und
- Durchmesser

liegen als ASCII Daten vor. Diese werden nun weiter ausgewertet. Der erste Schritt ist die Bereinigung der Rohdaten. Dazu werden Fasern, welche den Rand des Messvolumens durchstoßen oder berühren, aus dem Rohdatensatz entfernt. Diese, meist kurzen Fasern, könnten nur aufgrund des begrenzten Messvolumens abgeschnitten worden sein. Sie würden in der weiteren Auswertung die Faserlängenverteilung beeinflussen und werden deshalb als nicht repräsentativ entfernt. Die Auswahl der zu entfernenden Fasern erfolgt über die Berechnung der Endpunkte der Fasern und deren Abgleich mit der bekannten Mantelfläche des zylindrischen Messvolumens. Alle jetzt noch vorliegenden Fasern werden in die weitere Auswertung einbezogen.

Wie in Kapitel 3.2 beschrieben, werden Faserorientierungen in Spritzgießsimulationen über den Orientierungstensor 2. Stufe beschrieben. Die Berechnung des Orientierungstensors 2. Stufe für die vorliegenden Rohdaten erfolgt nach

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sum_{k=1}^N l(k)r(k)^2} \sum_{k=1}^N l(k)r(k)^2 (\mathbf{p}\mathbf{p}). \quad (4.1)$$

In Gleichung (4.1) beschreibt $l(k)$ die Länge, $r(k)$ den Radius und \mathbf{p} der Richtungseinheitsvektor jeder Einzelfaser k . Die in Gleichungen (4.1) vorgenommene Volumengewichtung führt dazu, dass längere Fasern einen größeren Anteil am aufsummierten Orientierungstensor \mathbf{A} haben und damit einen größeren Anteil an der Anisotropie des Materials. Zur graphischen Darstellung der drei Hauptkomponenten von \mathbf{A} wie in Abbildung 4.16 wird \mathbf{A} für 20 äquidistante Schichten über der Probenhöhe (z -Koordinate) ausgewertet. Um eine Faser, die über die Grenzen zweier Schichten hinausgeht, einer Schicht zuordnen zu können, wird der Mittelpunkt der Faser berechnet. Die Faser wird dann über ihren Mittelpunkt einer Schicht zugeordnet. Erstmals wird in dieser Arbeit auch eine lokale, d.h. schichtenbezogene Auswertung der Faserlängenverteilung durchgeführt. Die gleichen äquidistanten Schichten aus der Orientierungsauswertung werden verwendet um eine mittlere Faserlänge für die jeweilige Schicht zu ermitteln. Eine Ermittlung der Faserlängenverteilung für die Einzelschichten liefert keine neuen Erkenntnisse. Die Faserlängenverteilung wird nur integral über die komplette Probenhöhe berechnet und in allen Diagrammen sowohl als Histogramm der Faseranzahl sowie als volumengewichtete Funktion angegeben. Die volumengewichtete mittlere Faserlänge l_V berechnet sich nach

$$l_V = \frac{\sum_{k=1}^N \Delta z(k) (\pi r(k)^2 \Delta z(k))}{\sum_{k=1}^N (\pi r(k)^2 \Delta z(k))}. \quad (4.2)$$

4.5 Diskussion der Ergebnisse

4.5.1 Faserlängen

In Tabelle 4.4 wird die Standardabweichung σ_X für die gemessene volumengewichtete mittlere Faserlänge l_V sowie die ungewichtete mittlere Faserlänge l_{nr} berechnet. Es zeigt sich, dass die Standardabweichung bei allen untersuchten Proben bei maximal 3,5% liegt. Dieser Maximalwert wird bei allen Bewertungen zugrunde gelegt.

Tabelle 4.4: Standardabweichung, Anzahl- und Volumengewichtete mittlere Faserlänge über der Wandstärke

Material	Probe	Position	l_V [mm]	$\sigma_X(l_V)$	l_{nr} [mm]	$\sigma_X(l_{nr})$
PA6GF30	Platte2	Pos5	0,332	-	0,187	-
PA6GF30	Platte4	Pos5	0,333	-	0,189	-
PA6GF30	Platte5	Pos5	0,328	-	0,190	-
PA6GF30	Platte	Pos5	-	0,003	-	0,002
PA6GF30	Stab1	Pos3	0,291	-	0,165	-
PA6GF30	Stab2	Pos3	0,301	-	0,176	-
PA6GF30	Stab3	Pos3	0,296	-	0,176	-
PA6GF30	Stab	Pos3	-	0,005	-	0,006
PA6GF30	Stab1	Pos6	0,326	-	0,183	-
PA6GF30	Stab2	Pos6	0,327	-	0,186	-
PA6GF30	Stab3	Pos6	0,329	-	0,191	-
PA6GF30	Stab	Pos6	-	0,002	-	0,004

In Tabelle 4.5 wird die volumengewichtete mittlere Faserlänge verschiedener Probekörper und Positionen gegenübergestellt. Es werden Material, Probekörper, Position, die volumengewichtete mittlere Faserlänge (4.2) und ein gemittelttes Aspektverhältnis (vgl. (3.1)) angegeben. Das gemittelte Aspektverhältnis wird nach $\frac{l_V}{d_m}$ berechnet, wobei ein durchschnittlicher Faserdurchmesser d_m von 12 μm zugrunde gelegt wird. Die Auswertungen aller durchgeführten Versuche

befindet sich im Anhang A.

Tabelle 4.5: Volumengewichtete mittlere Faserlänge über der Wandstärke

Material	Probe	Position	l_V [mm]	$\frac{l_V}{d_m}$
PA6GF15	Platte1	Pos5	0,293	24,41
PA6GF30	Platte2	Pos5	0,332	27,66
PA6GF50	Platte1	Pos5	0,486	40,50
PA6GF15	Stab1	Pos3	0,330	27,50
PA6GF15	Stab1	Pos6	0,327	27,25
PA6GF30	Stab1	Pos3	0,291	24,25
PA6GF30	Stab1	Pos6	0,326	27,16
PA6GF50	Stab1	Pos3	0,495	41,25
PA6GF50	Stab1	Pos6	0,523	43,58

Es zeigt sich ein Zusammenhang zwischen Material, d.h. Faseranteil, und Probekörper bzw. Position im Probekörper. Die Faserlänge nimmt im Probekörper Platte an Position 5 mit zunehmendem Fasergehalt zu. Unter Berücksichtigung der Standardabweichung ist die Zunahme von l_V signifikant. Die Faserlänge des PA6GF15 ist in der Platte deutlich kürzer als im Stab, wohingegen die Faserlängen des PA6GF30 und des PA6GF50 diesen deutlichen Unterschied nicht zeigen. Die Faserlängen des PA6GF30 und des PA6GF50 sind in Platte und Stab unter Berücksichtigung der Standardabweichung nicht signifikant unterschiedlich. Die Faserlänge des PA6GF15 ist im Stab an Position 3 und Position 5 identisch. Die Materialien PA6GF30 und PA6GF50 zeigen jedoch eine Zunahme von l_V mit zunehmender Fließweglänge. Die kürzeren Fasern des PA6GF15 in der Platte lassen sich dadurch erklären, dass Position 5 des Probekörpers Platte hinter dem Bandanschnitt (vgl. Abbildung 4.3) liegt. Der Bandanschnitt ist mit einer Höhe von nur 1,25 mm eine Dünnstelle, die von der gesamten Schmelze passiert werden muss. D.h. hier ist mit Faserbruch zu rechnen. Dieser Effekt macht sich nur beim PA6GF15, geschuldet dem niedrigen Faseranteil, bemerkbar.

In Tabelle 4.6 ist l_V des PA6GF30 im Stab über die Fließweglänge ausgewertet. Es zeigt sich an Position 1 die längste Faserlänge, da diese Position noch im Verteiler des Formteils liegt und die Schmelze keine Dünnstelle passiert hat.

Es ist davon auszugehen, dass es sich hier um die Faserlänge der Schmelze nach Verlassen der Düse handelt. In Position 2 findet sich eine wesentlich kürzere Faserlänge, die durch Faserbruch beim Eintreten in den Plattenbereich erklärt werden kann. Wie sich schon in Tabelle 4.5 angedeutet hat, nimmt die Faserlänge mit zunehmendem Fließweg zu.

Tabelle 4.6: Änderung der mittleren Faserlänge über den Fließweg

Material	Probe	Position	l_V [mm]	$\frac{l_V}{d_m}$
PA6GF30	Stab1	Pos1	0,301	25,08
PA6GF30	Stab1	Pos2	0,255	21,25
PA6GF30	Stab1	Pos3	0,291	24,25
PA6GF30	Stab1	Pos4	0,319	26,58
PA6GF30	Stab1	Pos5	0,325	27,08
PA6GF30	Stab1	Pos6	0,326	27,16
PA6GF30	Stab1	Pos7	0,301	25,08

4.5.2 Faserorientierung und Längenverteilung

Zur einfacheren Zuordnung der Ergebnisse sind Halbzeug und Position in den folgenden Abbildungen als Bild rechts neben den eigentlichen Ergebnissen dargestellt.

In Abbildung 4.16 ist zu sehen, dass die maximale Orientierung in Fließrichtung bei 0,7 liegt und sich im Intervall $[0,45; 0,6]$ eine quer zur Fließrichtung orientierte Mittelschicht ausbildet. Die Mittelschicht ist mit 15% der Probendicke sehr schmal und ebenfalls scharf gegenüber den Randschichten abgegrenzt. Direkt an der Ober- und Unterseite der Probe ist eine geringere Orientierung in Fließrichtung zu erkennen. Die mit der kalten Werkzeugwand in Berührung kommende Schmelze erstarrt hier sofort, und die Fasern können sich nicht vollständig orientieren [81]. Die Komponente A_{33} des Orientierungstensors ist über die komplette Probendicke nahezu null.

In Abbildung 4.17 ist eine Zurordnung der durchschnittlichen Faserlängen l_V in jeder ausgewerteten Schicht dargestellt. Es zeigt sich keine homogene Ver-

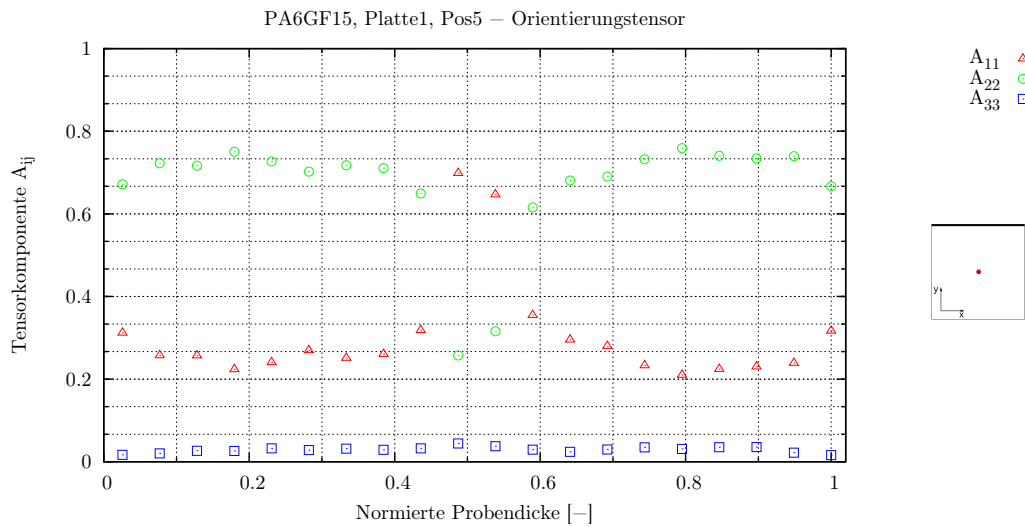


Abbildung 4.16: PA6GF15, Platte, Position 5, Faserorientierung

teilung der durchschnittlichen Faserlänge l_V über die Probendicke. Der Trend von l_V zeigt eine Korrelation mit der Orientierung der Fasern. Die obere und untere Grenze der Probe enthält eher längere Fasern. Zur Mitte hin nimmt die Faserlänge ab, um dann im Bereich der Umorientierung wieder zuzunehmen.

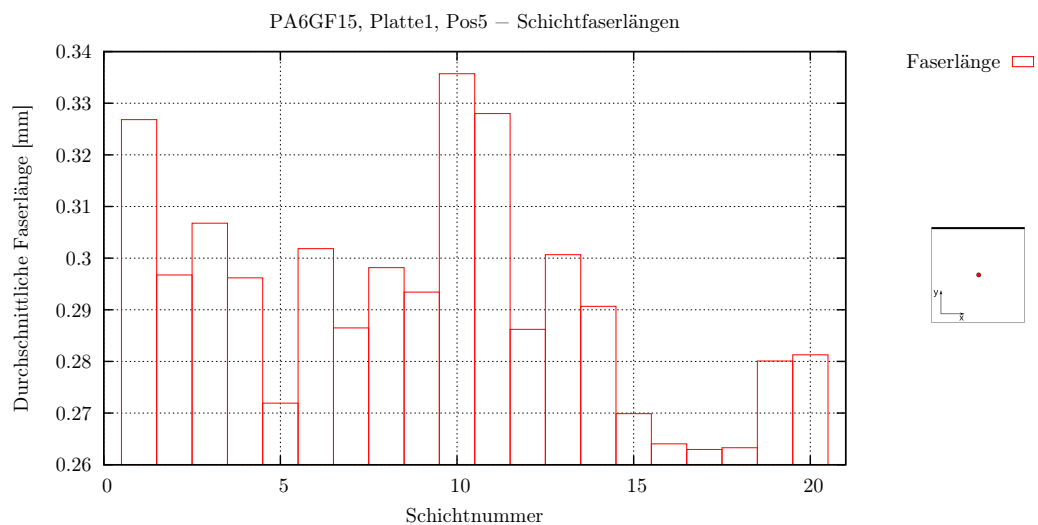


Abbildung 4.17: PA6GF15, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V

Abbildung 4.18 zeigt, dass die maximale Orientierung in Fließrichtung bei 0,8 und damit beim PA6GF30 etwas höher liegt als beim PA6GF15. Die quer zur Fließrichtung orientierte Mittelschicht liegt im Intervall $[0, 4; 0, 65]$ und ist damit im Vergleich zum PA6GF15 etwas breiter und hat nicht so scharfe Grenzen. Die Komponente A_{33} des Orientierungstensors liegt über die komplette Pro-

bendicke bei ca. 0,075 und somit etwas höher als beim PA6GF15. Dies deutet auf eine größere Interaktion der Fasern untereinander hin. Die Fasern kommen während des Orientierungsprozesses aufeinander zu liegen und erhalten dadurch eine Richtungskomponente in Dickenrichtung.

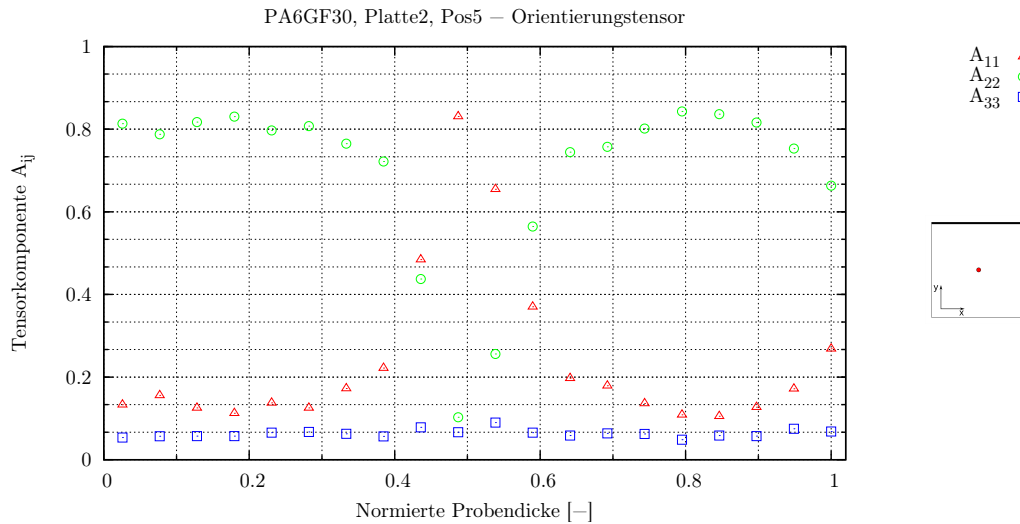


Abbildung 4.18: PA6GF30, Platte, Position 5, Faserorientierung

Deutlich längere Fasern in der Mitte der Probenhöhe, jedoch eine wesentlich homogenere Verteilung der Faserlängen in den in Fließrichtung orientierten Randbereichen der Probe ist aus Abbildung 4.19 ersichtlich.

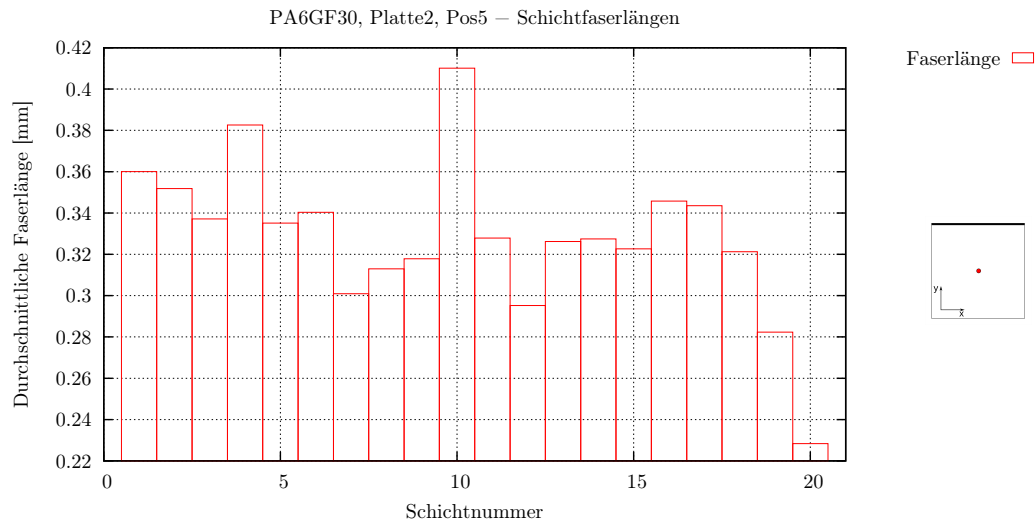


Abbildung 4.19: PA6GF30, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V

Abbildung 4.20 zeigt die maximale Orientierung beim PA6GF50 in Fließrichtung bei 0,8, die damit identisch zum PA6GF30 ist. Jedoch ist eine weitere

und sehr deutliche Verbreiterung der Mittelschicht im Intervall $[0, 26; 0, 75]$ zu beobachten. Die Komponente A_{33} ist ebenfalls weiter gestiegen und erreicht gegenüber dem PA6GF15 und PA6GF30 ihr Maximum bei 0,2.

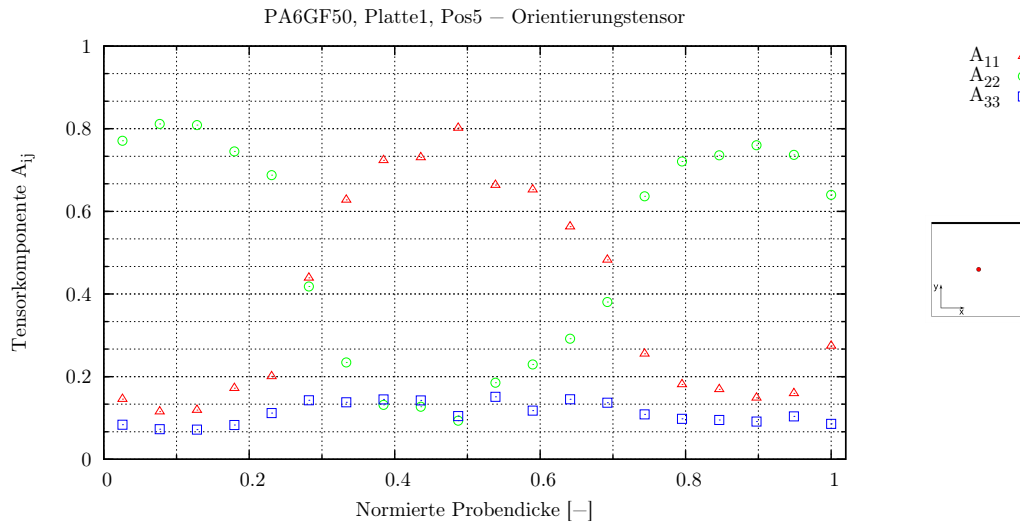


Abbildung 4.20: PA6GF50, Platte, Position 5, Faserorientierung

Die durchschnittliche Faserlänge l_V zeigt beim PA6GF50 in Abbildung 4.21 die bereits angedeutete Struktur, die schon in Abbildung 4.17 aufgefallen ist. Hier ist die Korrelation von \mathbf{A} und l_V deutlich zu erkennen.

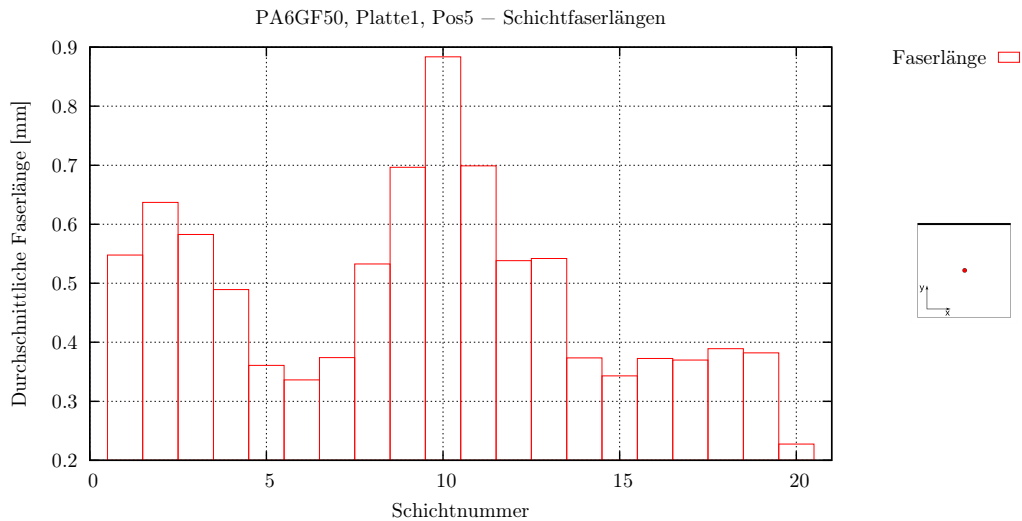


Abbildung 4.21: PA6GF50, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V

Im Gegensatz zur Platte, bei der sich die Schmelzefront aufgrund des Angussystems parallel zum Staubalken ausbreitet, ist die Schmelzeausbreitung im Stab

wie bei einem Punktanguss eher kreisförmig. Dennoch lässt sich in Abbildung 4.22 die für eine Plattengeometrie typische Faserorientierung erkennen.

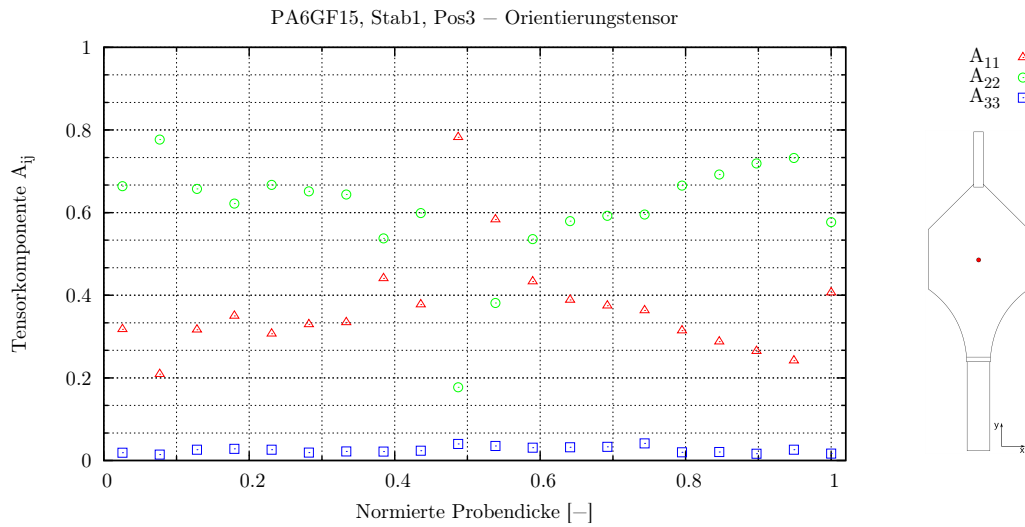


Abbildung 4.22: PA6GF15, Stab, Position 3, Faserorientierung

Die Randbereiche der Probe sind zwar weniger stark orientiert als bei gleichem Material in der Platte, dennoch ist auch hier eine Umorientierung der Fasern quer zur Fließrichtung zu erkennen. Die Verteilung der mittleren Faserlängen l_V über die Probendicke, lässt in Abbildung 4.23 ebenfalls Parallelen zur Plattengeometrie erkennen.

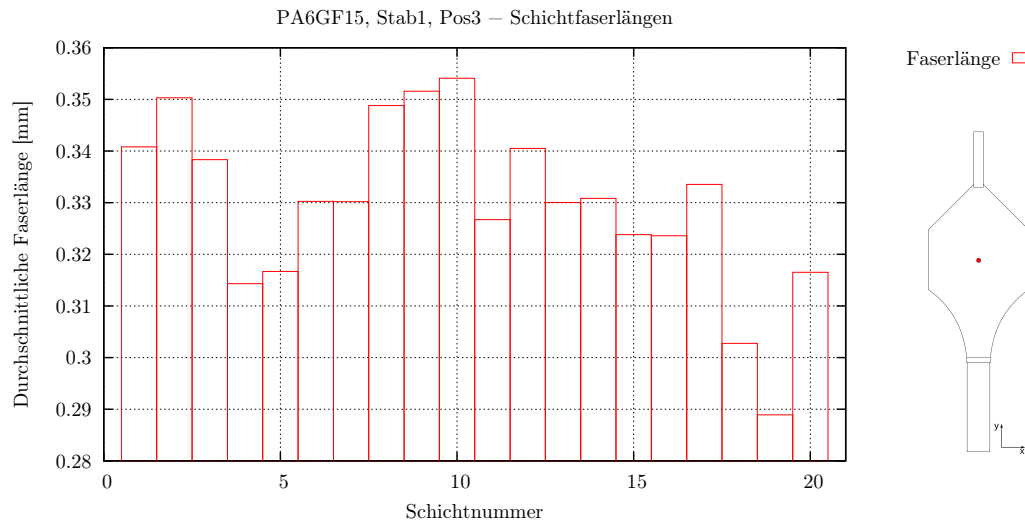


Abbildung 4.23: PA6GF15, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V

Im Gegensatz zu Position 3 (Abbildung 4.22) zeigt der Stab an Position 6 in Abbildung 4.24 eindeutig keine Mittelschicht. Durch den konvergenten Einlauf

kurz vor Position 4 (vgl. Abbildung 4.5) wird die Kunststoffschmelze derart beschleunigt, dass der Geschwindigkeitsgradient bis zur Mitte des Strömungskanals sehr groß und so eine Umorientierung verhindert wird. Die maximale Orientierung in Fließrichtung liegt bei 0,875 und ist über die gesamte Proben- dicke annähernd konstant. Die Komponente A_{33} des Orientierungstensors ist bei 15% Glasfasergehalt wieder nahezu null.

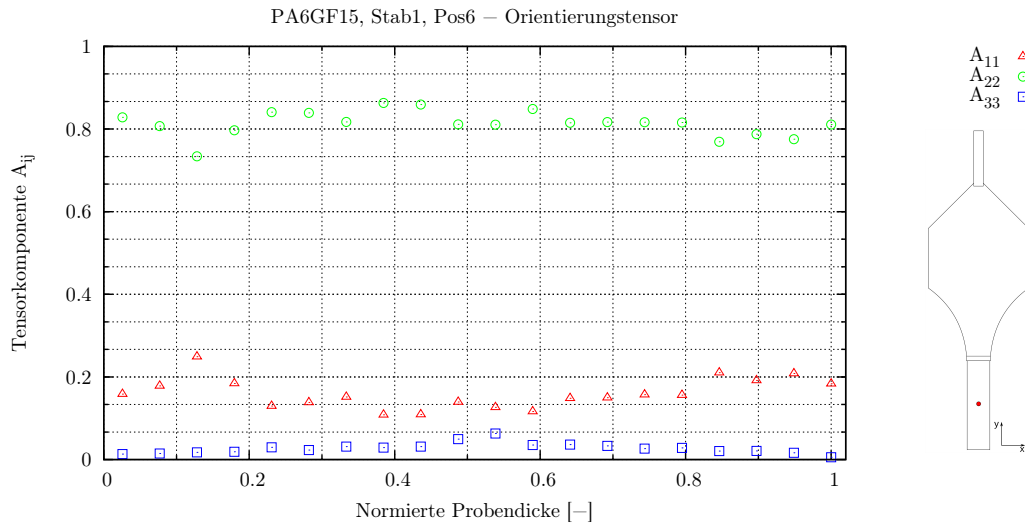


Abbildung 4.24: PA6GF15, Stab, Position 6, Faserorientierung

Die mittlere Faserlänge l_V zeigt in Abbildung 4.25 über die Probendicke eine homogene Verteilung. Dies korreliert mit der homogenen Faserorientierung.

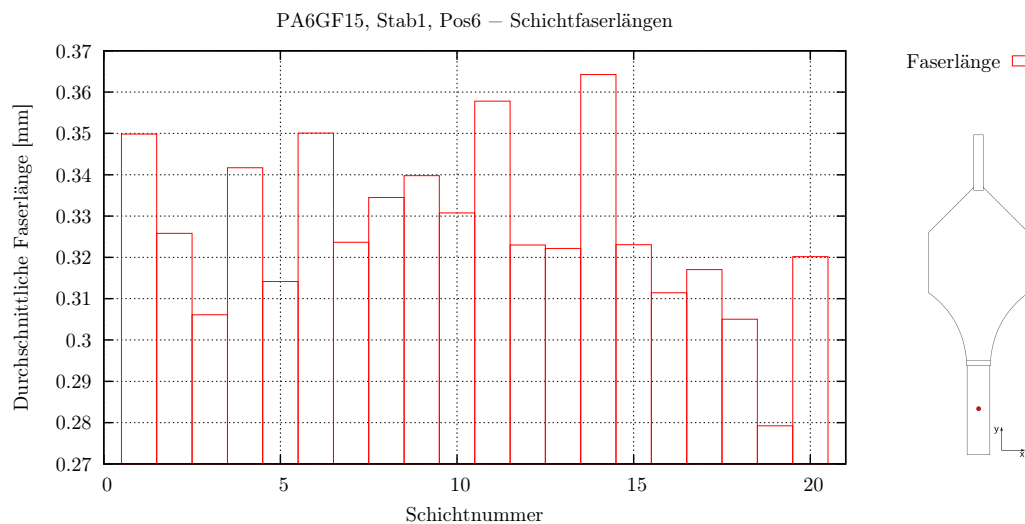


Abbildung 4.25: PA6GF15, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V

Wie bei der Platte zeigt auch der Stab an Position 3 die plattentypische Faserorientierung. Und wie bei der Platte ist auch bei höherem Füllgrad die Mittelschicht ausgeprägter. Dies ist in Abbildung 4.26 im Vergleich zu Abbildung 4.22 sehr gut zu erkennen.

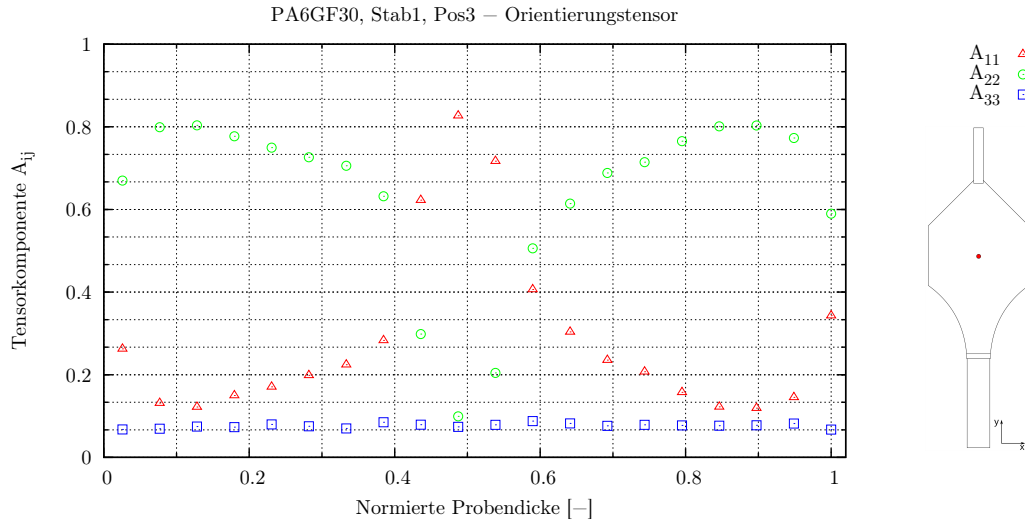


Abbildung 4.26: PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung

Ebenfalls ist die Verteilung der mittlere Faserlänge l_V in Abbildung 4.27 gut mit der der Platte korrelierbar (vgl. Abbildungen 4.19 und 4.27).

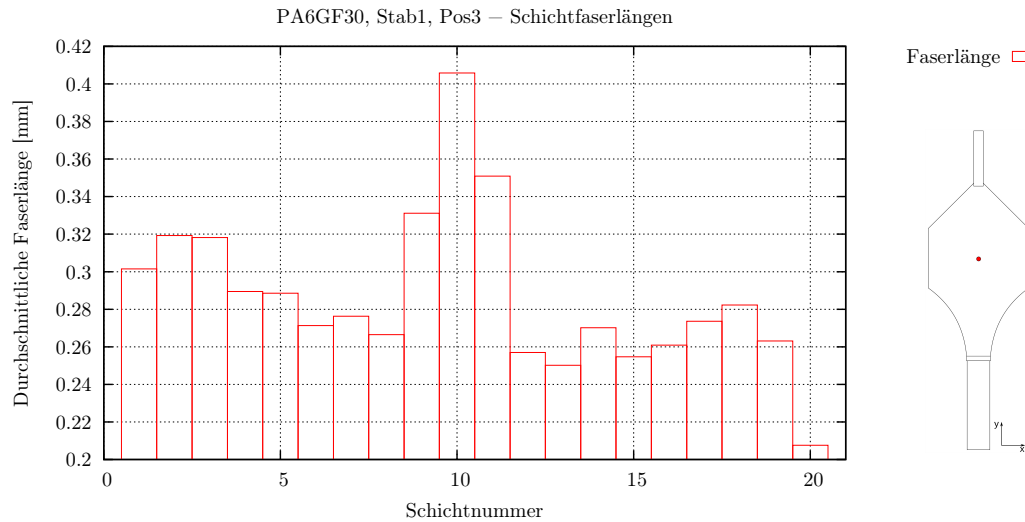


Abbildung 4.27: PA6GF30, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V

In Abbildung 4.28 ist, wie beim PA6GF15, eine hohe Orientierung in Fließrichtung festzustellen. Allerdings nimmt die Tensorkomponente A_{33} mit zunehmendem Fasergehalt weiter zu. Dieser Trend war auch schon an der Platte festzustellen.

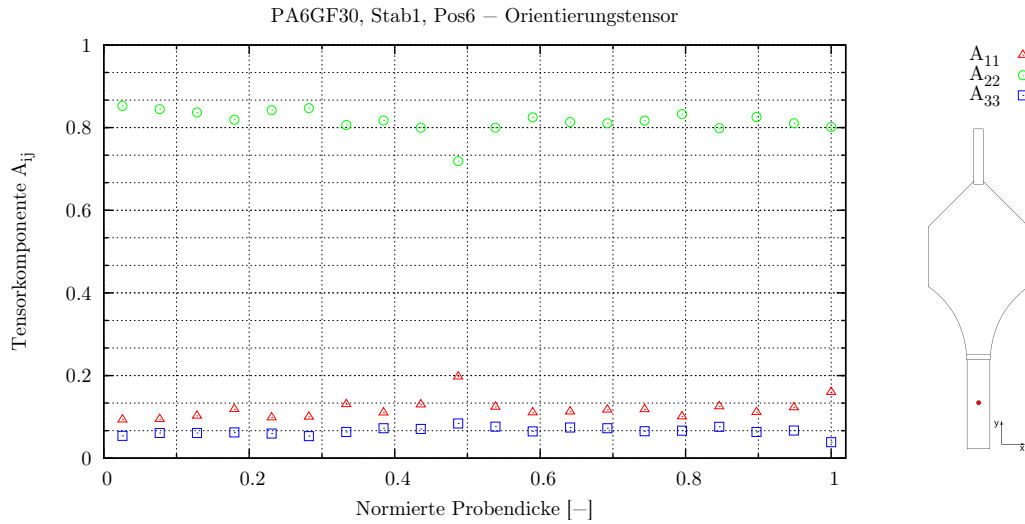


Abbildung 4.28: PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung

Die durchschnittliche Faserlänge l_V zeigt in Abbildung 4.29 diesmal keine Korrelation zur Faserorientierung.

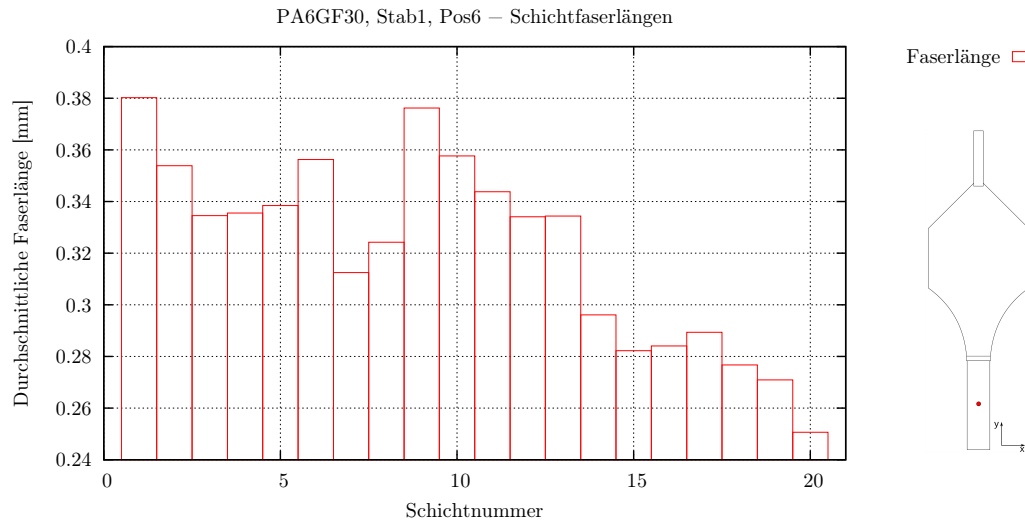


Abbildung 4.29: PA6GF30, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V

Der Trend zur Verbreiterung der Mittelschicht bei zunehmendem Fasergehalt ist beim PA6GF50 an Position 3 in Abbildung 4.30 weiter bestätigt.

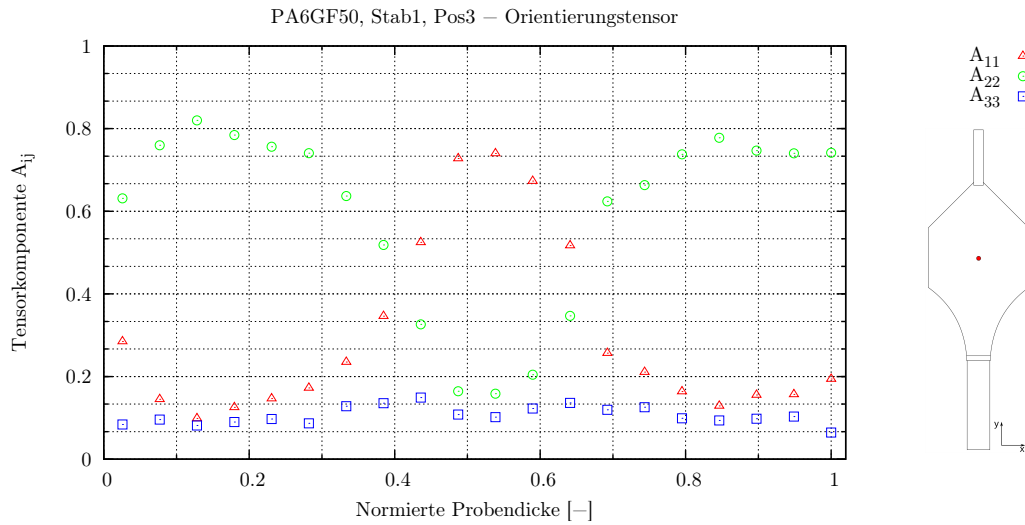


Abbildung 4.30: PA6GF50, Stab, Position 3, Faserorientierung

Die typische Längenverteilung bei ausgeprägter Mittelschicht ist auch in Abbildung 4.31 wieder zu erkennen.

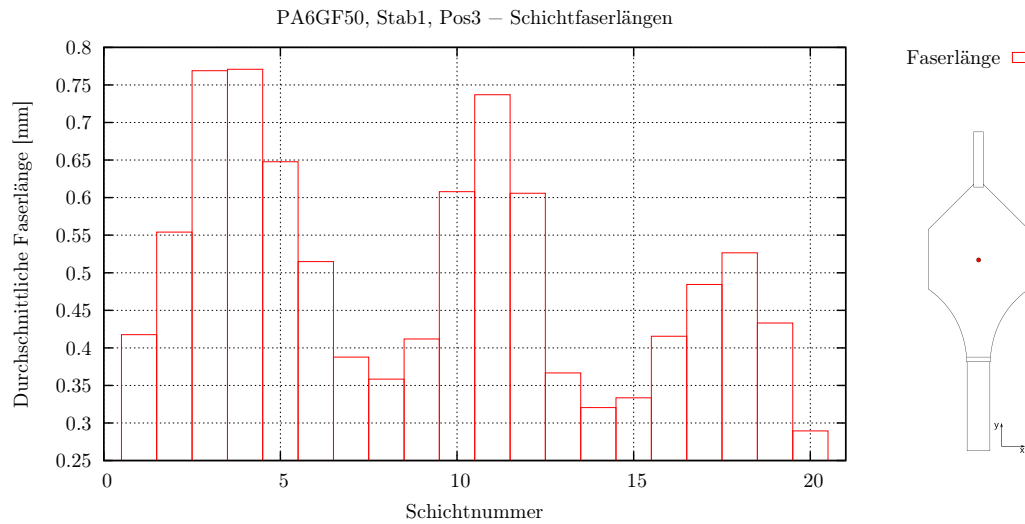


Abbildung 4.31: PA6GF50, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V

In Abbildung 4.32 ist die für Position 6 typische Orientierung ohne Mittelschicht quer zur Fließrichtung erkennbar. Trotz des zunehmenden Fasergehaltes ist an Position 6 des Stabes die Ausbildung einer Mittelschicht durch die Strömungsverhältnisse unterbunden. Lediglich die Komponente A_{33} des Orientierungstensors hat wieder zugenommen.

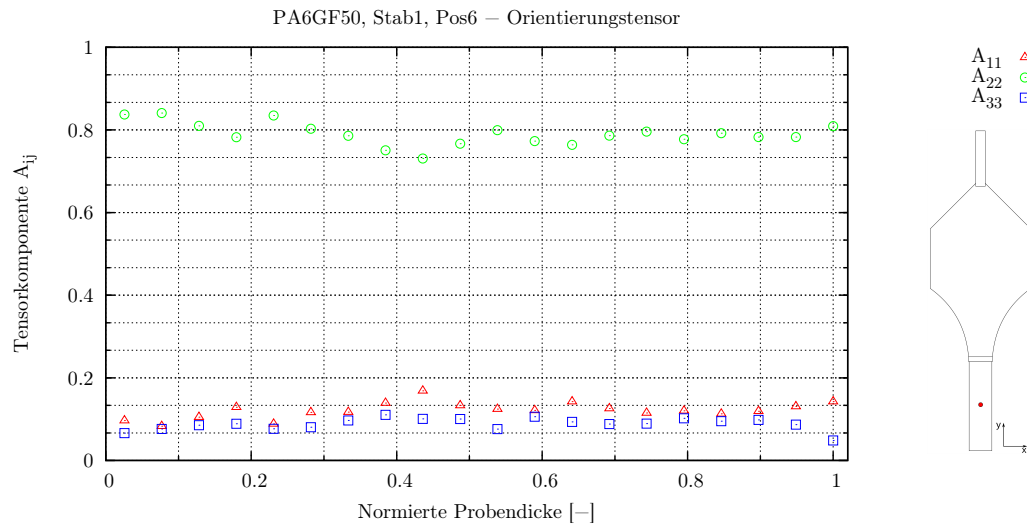


Abbildung 4.32: PA6GF50, Stab, Position 6, Faserorientierung

Die Verteilung von l_V zeigt bei 50% Fasergehalt in Abbildung 4.33 jedoch erstmalig eine Struktur, die der im Plattenbereich ähnelt. In der Mitte der Probenhöhe sammeln sich längere Fasern als im Randbereich.

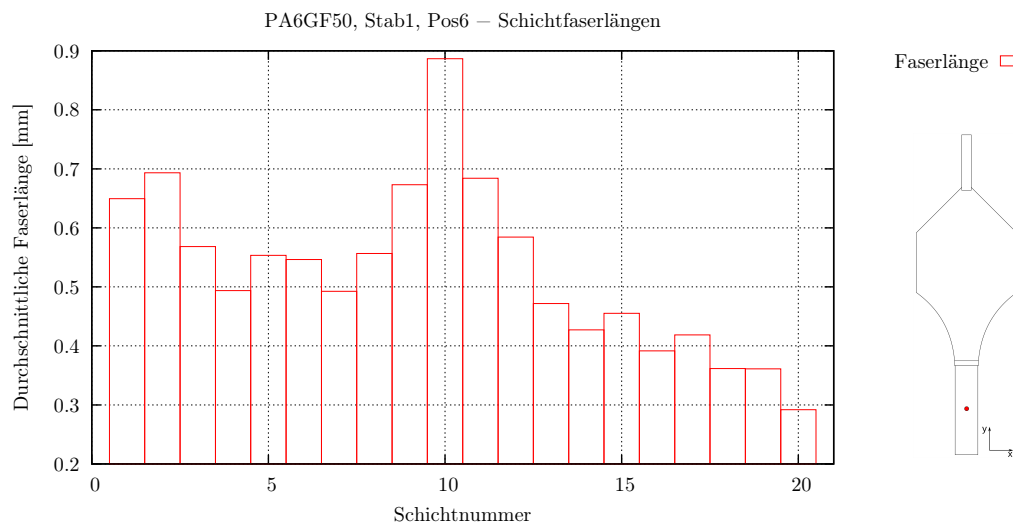


Abbildung 4.33: PA6GF50, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V

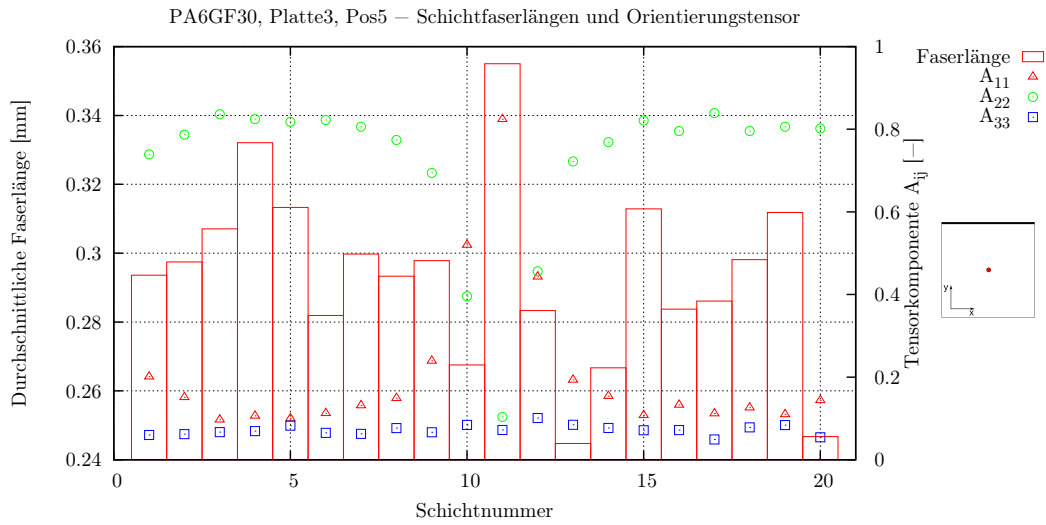


Abbildung 4.34: PA6GF30, Platte, Position 5, durchschnittliche Faserlänge l_V und Orientierung in Schicht

Abschließend lässt sich feststellen, dass ein Zusammenhang zwischen der Verteilung der mittleren Faserlänge und der Faserorientierung besteht. Dies ist in Abbildung 4.34 verdeutlicht. Die Ausbildung von quer zur Strömungsrichtung orientierten Mittelschichten wird durch einen höheren Faseranteil begünstigt. Die maximale Orientierung wird durch einen höheren Faseranteil hingegen reduziert. Dies lässt sich durch die Zunahme der Tensorkomponente A_{33} und der damit verbundenen Reduktion der andern beiden Hauptkomponenten aufgrund der Beziehung $A_{ii} = 1$ belegen.

5 Methodik zur Identifikation der Modellparameter

Prinzipiell ist es möglich, die Modellparameter eines Orientierungsmodells zu bestimmen, indem man die Spritzgießsoftware in eine Optimierungsschleife einbindet. So kann mit kommerziell verfügbaren Mitteln eine Optimierung der Modellparameter erfolgen [93]. Bei diesem Ansatz wird nach jeder Iteration der Modellparameter zumindest die Füllphase der Spritzgießsimulation neu berechnet, um die Auswirkungen der Parametervariation zu beurteilen. Da es sich, wie in Kapitel 2 beschrieben, bei der Berechnung von Faserorientierungen in kommerzieller Spritzgießsoftware um ein reines Postprocessing handelt, haben die veränderten Parameter des Orientierungsmodells jedoch keinen Einfluss auf die Eingangsvariable $\mathbf{v}(t)$. Das bedeutet, dass bei diesem Ansatz ein immenser Zeitverlust durch das wiederholte Lösen der Erhaltungsgleichungen in Kauf genommen werden muss, deren Ergebnisse sich jedoch nicht verändern. Hinzu kommt, dass bei jeder Iteration die Faserorientierung im gesamten Modell berechnet wird, obwohl nur punktuell experimentelle Ergebnisse zum Abgleich vorliegen.

Diese zwei Punkte, das wiederholte Lösen der Erhaltungsgleichungen ohne Änderungen von $\mathbf{v}(t)$ und die nur punktuell vorliegenden experimentell ermittelten Faserorientierungen, machen die Entwicklung eines effizienteren Ansatzes für die Parameteridentifikation erforderlich.

Die Grundidee ist, die lokalen experimentellen Ergebnissen der Faserorientierungsanalyse als Referenz zu verwenden. Das Ziel ist es nur für diese Positionen die FOLGAR-TUCKER Gleichung zu lösen und die Parameter zu bestimmen um

so Rechenzeiten zu minimieren.

Zur Lösung der FOLGAR-TUCKER Gleichung wurde deshalb ein Programm entwickelt, das die kommerzielle Spritzgießsimulation und die experimentellen Ergebnisse zur Parameteridentifikation verwendet.

Wie in Kapitel 3.2 erläutert, werden für das FOLGAR-TUCKER Modell das Aspektverhältnis (3.1) und der Interaktionskoeffizient C_i benötigt. Das Aspektverhältnis der Fasern wird direkt im Experiment ermittelt und kann wie in Tabelle 4.5 angegeben verwendet werden. Der Interaktionskoeffizient muss iterativ, durch Lösen der FOLGAR-TUCKER Gleichung, ermittelt werden. Dafür müssen Position und $\mathbf{v}(t)$ bekannt sein. Die Position wird in Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen festgelegt. Die Geschwindigkeitskomponenten werden über das einmalige Durchführen einer Spritzgießsimulation ermittelt.

5.1 Ablauf von FOptimizer und Einbinden der Versuchsergebnisse

Das entwickelte Programm zur Optimierung von berechneten Faserorientierungen, durch iterative Bestimmung der Modellparameter, wird im Weiteren als **FOptimizer** bezeichnet. Der ursprüngliche Arbeitstitel aus „Fiber Orientation Optimizer“ hat sich etabliert.

Eingebunden werden kann **FOptimizer** in den Ablauf der integrativen Simulation zu einem sehr frühen Stadium. Nach experimenteller Ermittlung der Faserorientierung und der ersten Füllsimulation liegen alle Daten vor um die Modellparameter zu ermitteln (Vgl. Abbildung 5.1).

Der interne Programmablauf ist in Abbildung 5.2 dargestellt und wird nun zusammenfassend erläutert. Die kritischen Punkte werden nachfolgend diskutiert.

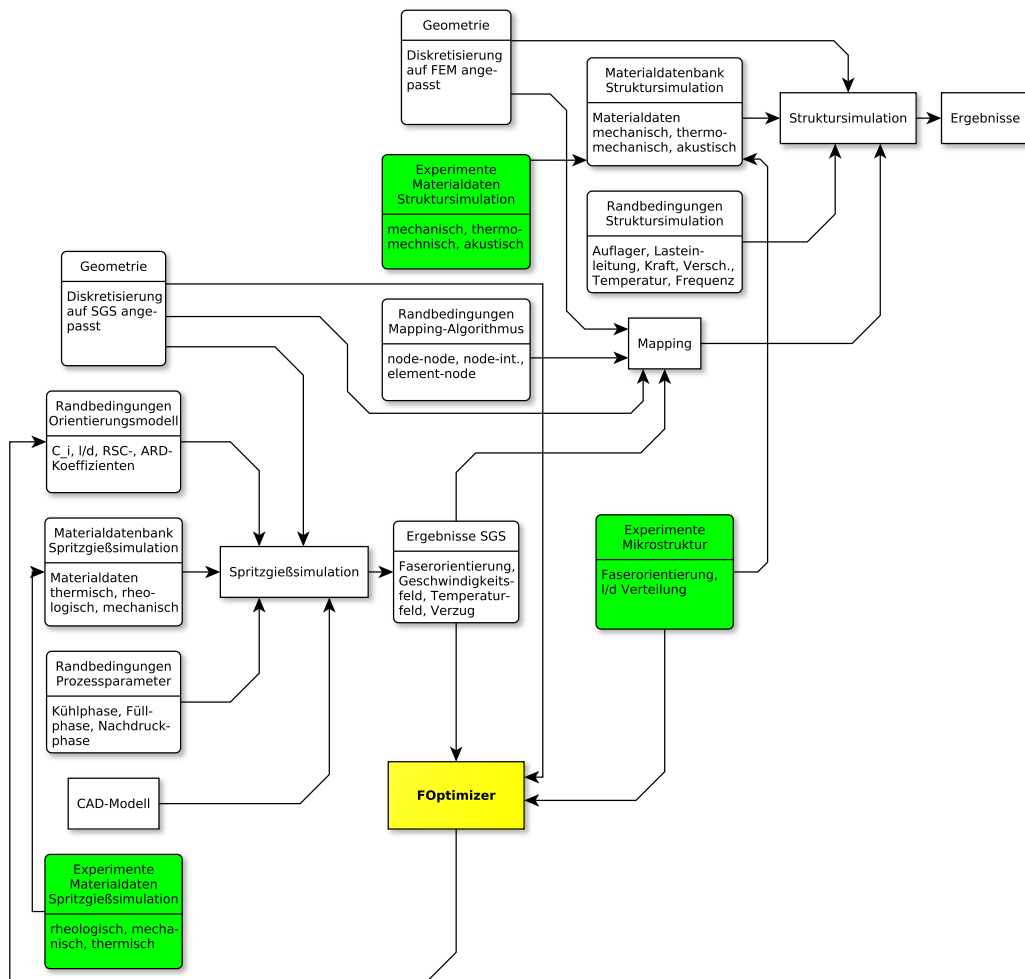


Abbildung 5.1: Einbinden der Modellparameteridentifikation für Orientierungsmodelle in den Ablauf der integrativen Simulation

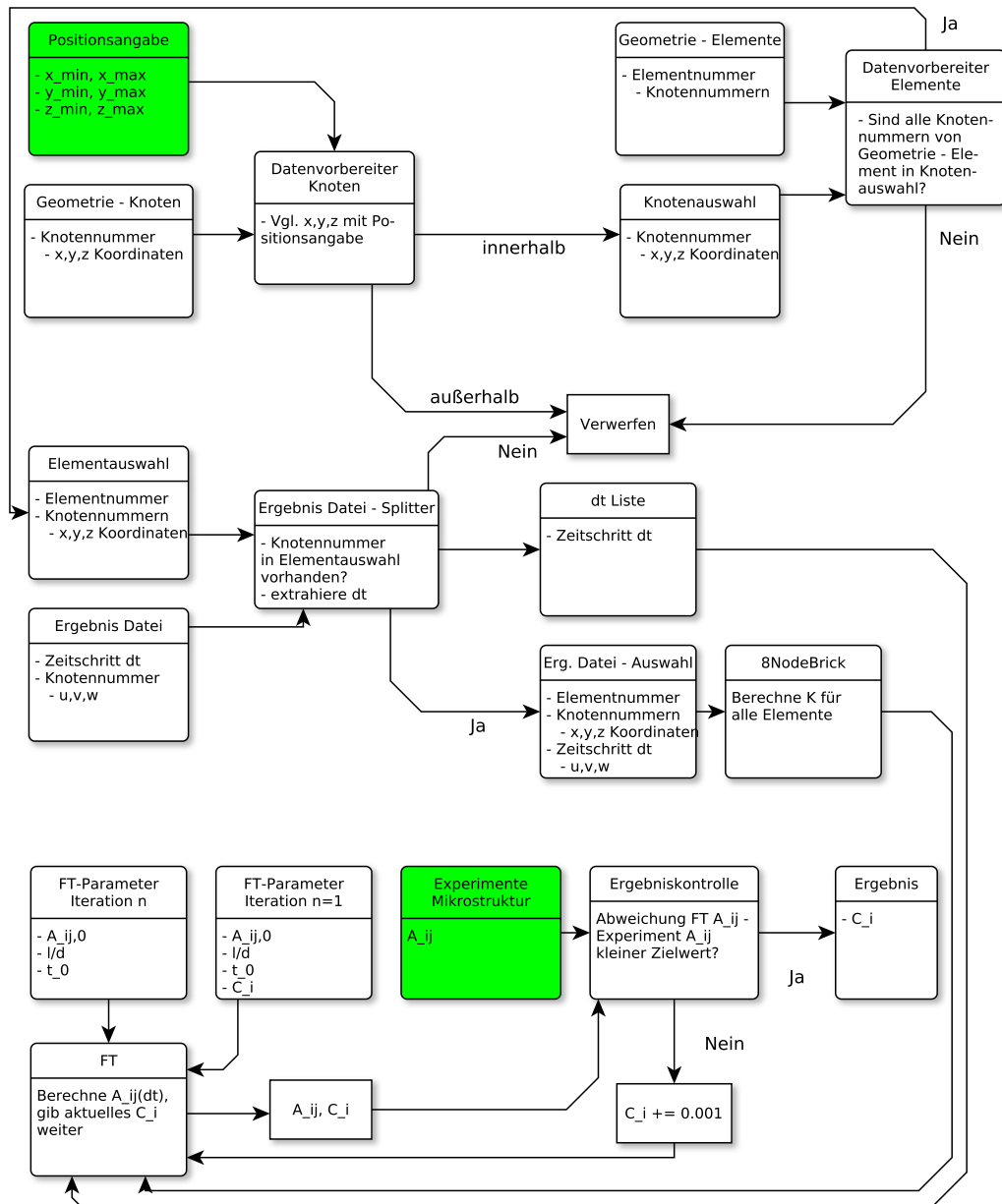


Abbildung 5.2: Struktogramm **FOptimizer**

Als Grundlage für alle Berechnungen mit **FOptimizer** wird eine Füllphase des zu untersuchenden Formteils mit einer Spritzgießsimulation gerechnet. Als Ergebnis dieser Berechnung liegen folgende Daten im ASCII Format vor, die als Eingangsgrößen für **FOptimizer** dienen:

- Geometrie - Knoten: Knotennummern der Hexaederelemente mit zugehörigen x -, y -, und z -Koordinaten
- Geometrie - Elemente: Elementnummer der Hexaederelemente mit zugehörigen Knotennummern
- Ergebnisse: Datei pro Zeitschritt mit \mathbf{v} für jeden Knoten und Zeitinformation

Durch Angabe der zu untersuchenden Position im Formteil werden in einem ersten Schritt die Daten zusammengeführt. Über die Koordinaten der Knoten werden die zugehörigen Elemente gefunden die sich innerhalb der gewählten Position befinden. Dann werden jedem Knoten pro Zeitschritt die zugehörigen Geschwindigkeitskomponenten von \mathbf{v} zugeordnet. Nun liegen alle Informationen vor, um die FOLGAR-TUCKER Gleichung über alle Zeitschritte zu integrieren. Im Anschluss wird das Ergebnis mit den experimentell ermittelten Daten verglichen, indem die berechneten Ergebnisse den Schichten der experimentellen Analyse zugeordnet und die Summe der Fehlerquadrate gebildet wird. Dann wird C_i verändert und die FOLGAR-TUCKER Gleichung erneut über alle Zeitschritte integriert. Alle vorangegangenen Berechnungen in der Spritzgießsimulation und das Zusammenführen der Daten muss nur vor der ersten Iteration durchgeführt werden. Der Faserinteraktionskoeffizient C_i bei dem die Summe der Fehlerquadrate am kleinsten ist, wird schlussendlich als Optimum ausgegeben (vgl. Kapitel 6.4).

5.2 Zusammenführen von Geschwindigkeitskomponenten, Koordinaten und Zeit

Zuerst werden alle relevanten Daten für die Berechnung zusammengeführt und aufbereitet. Dies geschieht aus zwei Datenquellen. Zum einen die ASCII Datei, die Informationen über die geometrischen Eigenschaften des Modells beinhaltet und zum anderen die ASCII Dateien, die Ergebnisse von \mathbf{v} an den Knoten der Elemente in Abhängigkeit von der Zeit enthalten.

Der sogenannte Auswahlbereich wird über die Angabe der Position in der Form $x_{min}, x_{max}, y_{min}, \dots, z_{max}$ festgelegt. Dieser Bereich entspricht einer Position zu der experimentelle Ergebnisse vorliegen. Der Vergleich der zylindrischen μ -CT Ergebnisse mit Hexaederelementen ist unproblematisch. Die Höhe der Elemente entspricht den Schichten des Messvolumens. Die Dimensionen in x - und y -Richtung der Elemente ist kleiner als das Messvolumen.

Die Informationen über die Geometrie liegen in der ASCII Datei folgendermaßen vor:

- Knotennummer; x -Koordinate, y -Koordinate, z -Koordinate
- Elementnummer; Knotennummer 1, \dots , Knotennummer 8

Daraus werden zuerst die Knoten extrahiert, die sich innerhalb des Auswahlbereichs befinden und als Knotenauswahl abgelegt. In einem zweiten Schritt werden dann die Elemente identifiziert, deren Knoten sich alle in der Knotenauswahl befinden. So sind alle Elemente im Auswahlbereich definiert. Vom Auswahlbereich geschnittene Elemente werden ausgeschlossen, da nicht alle ihre Knoten im Auswahlbereich sind. In einem letzten Schritt werden die Daten nun in die Form

- (Elementnummer, Knotennummer 1 (x -Koordinate, y -Koordinate, z -Koordinate), \dots , Knotennummer 8 (x -Koordinate, y -Koordinate, z -Koordinate))

gebracht.

Die Ergebnisse aus der Spritzgießsimulation liegen in folgender Form vor:

- Knotennummer, Schmelzefront, Druck, Temperatur, Schubspannung, Scher-
rate, u , v , w , Volumenschumpf, Kühlzeit, Dichte, Scorch Index, Schmel-
zefronttemperatur, Viskosität

Zu jedem Zeitschritt wird von der Spritzgießsimulation eine Datei mit den Ergebnissen der Füllphase erzeugt. Die Zeit ist ebenfalls in den Ergebnisdateien vermerkt. So können für alle Knoten die oben angegebenen Zustandsgrößen von der Zeit abhängig dargestellt werden. Da hier nur die Geschwindigkeitskomponenten u , v , w von Interesse sind, werden diese zusammen mit der zugehörigen Zeit aus den Dateien extrahiert. Die Zeiten (in [s]) werden mit **FOptimizer** in einer separaten Liste abgelegt, da sie bei der Integration der FOLGAR-TUCKER Gleichung direkt zum Einsatz kommen. Die Geschwindigkeiten werden so gespeichert, dass sie durch Angabe der Zeitschritt- und Knotennummer abgerufen werden können. Dies hat den Vorteil, dass die Aufbereitung der Daten nur einmal erfolgen muss und dass der Zugriff auf die Geschwindigkeitskomponenten sehr schnell ist. Da für die Lösung der FOLGAR-TUCKER Gleichung der symmetrische und anti-symmetrische Anteil (3.18) des Geschwindigkeitsgradienten benötigt wird, muss dieser für alle Elemente berechnet werden.

5.3 Berechnung des Geschwindigkeitsgradienten mit isoparametrischem Ansatz

Für die Berechnung der FOLGAR-TUCKER Gleichung wird der Geschwindigkeitsgradient \mathbf{K} (5.15) an den Integrationspunkten der Hexaeder Elemente benötigt. Da die Geschwindigkeitskomponenten u , v , w an den Knoten N_{1-8} aus der Füllphase bekannt sind wurde eine `8NodeBrick`-Klasse implementiert um den Geschwindigkeitsgradienten aus den Geschwindigkeitskomponenten und der Geometrie des Hexaederelementes zu berechnen. Hierbei handelt es sich um ein isoparametrisches Hexaederelement mit linearen Ansatzfunktionen.

Die `8NodeBrick`-Klasse wird verwendet um den Geschwindigkeitsgradient zu jedem Zeitschritt am Ursprung des Einheitselements $(g, h, r) = (0, 0, 0)$ zu berechnen. Die Umgesetzte Implementierung wird im Folgenden näher vorgestellt und ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

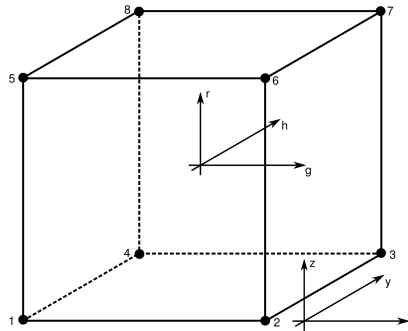


Abbildung 5.3: Isoparametrisches Einheitselement

Die Formfunktion (5.1) mit g_I, h_I, r_I als den Koordinaten der Knoten des Einheitselements und g, h, r als der gesuchten Koordinate im Einheits Element wird für den Integrationspunkt $(g, h, r) = (0, 0, 0)$ gelöst.

$$N_I = \frac{(gg_I + 1) (hh_I + 1) (rr_I + 1)}{8} \quad (5.1)$$

Mit einer Nummerierung der Knoten identisch zu der in Abaqus [94] $I = 1 \dots 8$ und den Knotenkoordinaten des Einheitselements (5.2)

$$\begin{aligned} (g, h, r)_1 &= (-1, -1, -1) \\ (g, h, r)_2 &= (+1, -1, -1) \\ (g, h, r)_3 &= (+1, +1, -1) \\ (g, h, r)_4 &= (-1, +1, -1) \\ (g, h, r)_5 &= (-1, -1, +1) \\ (g, h, r)_6 &= (+1, -1, +1) \\ (g, h, r)_7 &= (+1, +1, +1) \\ (g, h, r)_8 &= (-1, +1, +1) \end{aligned} \quad (5.2)$$

ergibt sich für (5.1):

$$\begin{aligned}
 N_1(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 - g) (1 - h) (1 - r) = \frac{1}{8} \\
 N_2(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 + g) (1 - h) (1 - r) = \frac{1}{8} \\
 N_3(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 + g) (1 + h) (1 - r) = \frac{1}{8} \\
 N_4(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 - g) (1 + h) (1 - r) = \frac{1}{8} \\
 N_5(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 - g) (1 - h) (1 + r) = \frac{1}{8} \\
 N_6(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 + g) (1 - h) (1 + r) = \frac{1}{8} \\
 N_7(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 + g) (1 + h) (1 + r) = \frac{1}{8} \\
 N_8(g, h, r) &= \frac{1}{8} (1 - g) (1 + h) (1 + r) = \frac{1}{8}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Die Formfunktionen für andere Koordinaten (g, h, r) , z.B. Knotenkoordinaten, können identisch berechnet werden.

Da es sich beim verwendeten Einheitselement um einen regelmäßigen Hexaeder handelt, die Finiten Elemente aber nicht zwingender weise gleich lange Kantenlängen haben, wird zunächst die Geometrie der Finiten Elemente interpoliert. D.h., es werden die x -, y - und z -Koordinaten des Finiten Elements berechnet, die zu $(g, h, r) = (0, 0, 0)$ gehören. Dabei sind x_I, y_I, z_I die Koordinaten der Knoten des Finiten Elements mit $I = 1 \dots 8$.

$$x = \sum_{I=1}^8 N_I x_I, \quad y = \sum_{I=1}^8 N_I y_I, \quad z = \sum_{I=1}^8 N_I z_I \tag{5.4}$$

Für die Koordinate x an der Stelle $(g, h, r) = (0, 0, 0)$ des Einheits Elements ergibt sich

$$x = \frac{1}{8} x_1 + \frac{1}{8} x_2 + \frac{1}{8} x_3 + \frac{1}{8} x_4 + \frac{1}{8} x_5 + \frac{1}{8} x_6 + \frac{1}{8} x_7 + \frac{1}{8} x_8. \tag{5.5}$$

Die Koordinaten von y und z werden analog berechnet. Für die Interpolation der Funktionswerte u, v, w werden bei dem verwendeten isoparametrischen

Ansatz, die gleichen Formfunktionen wie für die Interpolation der Geometrie verwendet.

$$u = \sum_{I=1}^8 N_I u_I, \quad v = \sum_{I=1}^8 N_I v_I, \quad w = \sum_{I=1}^8 N_I w_I \quad (5.6)$$

So ergibt sich für den interpolierten Funktionswert u an der vorher berechneten Koordinate x, y, z bei $(g, h, r) = (0, 0, 0)$:

$$u = \frac{1}{8}u_1 + \frac{1}{8}u_2 + \frac{1}{8}u_3 + \frac{1}{8}u_4 + \frac{1}{8}u_5 + \frac{1}{8}u_6 + \frac{1}{8}u_7 + \frac{1}{8}u_8. \quad (5.7)$$

Im nächsten Schritt werden die partiellen Ableitungen (5.8) der Formfunktionen (5.1) gebildet und für die Koordinate $(g, h, r) = (0, 0, 0)$ berechnet.

$$\frac{\partial N_I}{\partial g}, \quad \frac{\partial N_I}{\partial h}, \quad \frac{\partial N_I}{\partial r} \quad (5.8)$$

Die partielle Ableitung $\frac{\partial N_1}{\partial g}$ mit $(h, r) = (0, 0)$ ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_1}{\partial g} &= \frac{\partial \frac{1}{8} (1-g)(1-h)(1-r)}{\partial g} \\ \frac{\partial N_1}{\partial g} &= \frac{\partial \frac{1}{8} (-1+r+h-hr)}{\partial g} \\ \frac{\partial N_1}{\partial g} &= -\frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Die weiteren partiellen Ableitungen aus (5.8) ergeben sich analog zu (5.9).

Um den Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{K} zu berechnen, müssen die partiellen Ableitungen der Formfunktionen bezüglich der Koordinaten x, y und z bekannt sein. Da die Formfunktionen aber von g, h, r abhängig sind, muss die

Kettenregel angewendet werden.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial N_I}{\partial g} &= \frac{\partial N_I}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial g} + \frac{\partial N_I}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial g} + \frac{\partial N_I}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial g} \\
 \frac{\partial N_I}{\partial h} &= \frac{\partial N_I}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial h} + \frac{\partial N_I}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial h} + \frac{\partial N_I}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial h} \\
 \frac{\partial N_I}{\partial r} &= \frac{\partial N_I}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} + \frac{\partial N_I}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + \frac{\partial N_I}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r}
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Oder unter Verwendung der Jacobi Matrix \mathbf{J} (5.11) in Matrixschreibweise (5.12)

$$[\mathbf{J}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial g} & \frac{\partial y}{\partial g} & \frac{\partial z}{\partial g} \\ \frac{\partial x}{\partial h} & \frac{\partial y}{\partial h} & \frac{\partial z}{\partial h} \\ \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N_I}{\partial g} \\ \frac{\partial N_I}{\partial h} \\ \frac{\partial N_I}{\partial r} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial g} & \frac{\partial y}{\partial g} & \frac{\partial z}{\partial g} \\ \frac{\partial x}{\partial h} & \frac{\partial y}{\partial h} & \frac{\partial z}{\partial h} \\ \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial N_I}{\partial x} \\ \frac{\partial N_I}{\partial y} \\ \frac{\partial N_I}{\partial z} \end{pmatrix} \tag{5.12}$$

wird mit

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial x}{\partial g} &= \sum_{I=1}^{I=8} \frac{\partial N_I}{\partial g} x_I \\
 &\vdots \\
 \frac{\partial z}{\partial r} &= \sum_{I=1}^{I=8} \frac{\partial N_I}{\partial r} z_I
 \end{aligned}$$

die Berechnung der partiellen Ableitungen der Formfunktionen nach den Koordinaten x, y und z durch invertieren von (5.11) ermöglicht.

Mit

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N_I}{\partial x} \\ \frac{\partial N_I}{\partial y} \\ \frac{\partial N_I}{\partial z} \end{pmatrix} = [\mathbf{J}]^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial N_I}{\partial g} \\ \frac{\partial N_I}{\partial h} \\ \frac{\partial N_I}{\partial r} \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \sum_{I=1}^{I=8} \frac{\partial N_I}{\partial x} u_I \\ &\vdots \\ \frac{\partial w}{\partial z} &= \sum_{I=1}^{I=8} \frac{\partial N_I}{\partial z} w_I \end{aligned} \quad (5.14)$$

wird der gesuchte Geschwindigkeitsgradient (5.15)

$$[\mathbf{K}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

berechnet.

5.4 Integration der FOLGAR-TUCKER - Gleichung

Die aus den Ergebnis Dateien gewonnenen Zeitschritte werden nun mit den an den Integrationspunkten der Elemente berechneten Geschwindigkeitsgradienten verwendet, um die FOLGAR-TUCKER Gleichung über die komplette Füllphase zu berechnen (Vgl. Abbildung 5.2).

Zur Integration wird das **python** Package SciPy mit dem Modul „odeint“ verwendet. Damit ist es möglich, ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen

in der Form

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f(y, t_0, \dots) \quad (5.16)$$

zu lösen, wie sie Gleichung (3.34) darstellt.

Zusätzlich zum Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{K} in jedem Zeitschritt, müssen weitere Randbedingungen angegeben werden. Bei den Anfangsbedingungen der Differentialgleichung zum Zeitpunkt $t = 0$ handelt es sich um einen Startwert für den Orientierungstensor \mathbf{A}_0 , das Aspektverhältnis $\frac{l}{d}$, die Startzeit ($t = 0$) und den Interaktionskoeffizienten C_i . Die Randbedingungen sind, mit der Ausnahme des Interaktionskoeffizienten, immer gleich.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird davon ausgegangen, dass der Orientierungstensor \mathbf{A}_0 wie folgt besetzt ist:

$$\mathbf{A}_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}. \quad (5.17)$$

Das Aspektverhältnis wird zu $\frac{l_V}{d_m}$ gesetzt, welches aus dem Versuch bekannt ist.

5.5 Iteration und Abgleich mit experimentellen Ergebnissen

Der gesuchte Parameter C_i wird iterativ durch wiederholtes Lösen der FOLGAR-TUCKER Gleichung ermittelt. Die Referenz ist das experimentelle Ergebnis für \mathbf{A} aus der μ -CT Analyse.

Für die erste Iteration wird der Faserinteraktionskoeffizient zu $C_{i,n=1} = 0,0001$ gesetzt. Nach der Berechnung der Differentialgleichung wird das Ergebnis für \mathbf{A} mit dem Experiment verglichen. Dafür werden die Ergebnisse für \mathbf{A} nach

der z -Koordinate der Elemente sortiert, um sie mit den Schichten der experimentellen Analyse vergleichen zu können.

Für die nächsten Iterationen wird $C_{i,n}$ dann verändert. Dies geschieht nicht durch Optimierungsalgorithmen, da diese zu lokalen Minima konvergieren und so nicht sichergestellt ist, dass man das globale Optimum für C_i ermittelt [93]. Da bei einer einzelnen Iteration nur eine sehr begrenzte Anzahl von Elementen berechnet werden müssen, wird C_i so lange erhöht, bis $C_i = 0,8$ ist. Selbst bei 8000 Iterationen, liegt die Gesamtrechendauer unter acht Stunden. Bei jeder Iteration wird zu C_i der ursprüngliche Startwert ($C_{i,n=1}$) der ersten Iteration nach Gleichung (5.18) addiert, d.h. im N -ten Schritt gilt

$$C_{i,N} = \sum_{n=1}^{n=N} C_{i,n=1}. \quad (5.18)$$

Nach jeder Iteration wird zwischen dem Ergebnis \mathbf{A} des aktuellen C_i und der experimentellen Referenz die Summe der Fehlerquadrate bestimmt und mit C_i abgespeichert. Nach Ende aller Iterationen wird das C_i mit der geringsten Abweichung als Ergebnis ausgegeben.

6 Parameteridentifikation für das FOLGAR-TUCKER Modell am Beispiel Stab

Für die Parameteridentifikation des FOLGAR-TUCKER Modells wird zuerst die in Kapitel 2.1 prinzipiell beschriebene Spritzgießsimulation für das Bauteil Stab durchgeführt. Zusammen mit den experimentellen Ergebnissen aus Kapitel 4.5.2 liegen alle benötigten Eingangsgrößen für **FOptimizer** und die in Kapitel 5 beschriebene Methodik vor.

6.1 Berechnung der Geschwindigkeit $v(t)$

Für die Berechnung der Geschwindigkeit $v(t)$ an den Knoten der Elemente wird ein vollständiges Modell des Stabes und des Werkzeugs mit Kühlkanälen und Anguss modelliert (vgl. Abbildung 2.4). Die Diskretisierung gliedert sich in die Schritte

- Diskretisierung der Oberfläche,
- Überprüfung der Elementqualität,
- Erstellen des 3-D-Spritzgussnetzes und
- modellieren des Angusses, der Kühlkanäle und des Werkzeugs.

Begonnen wird bei der Diskretisierung des CAD-Modells mit der Oberfläche. Es wird eine durchschnittliche Elementkantenlänge von 0,25 mm gewählt. Dies führt bei der Diskretisierung des Stabes in z -Richtung zu einer Elementanzahl von 9 Elementen über der Bauteildicke und einem annähernden Seitenverhältnis der Elemente von eins. Damit eine Oberfläche mit Quadraten bzw. Rechtecken vernetzt werden kann, muss diese eines von zwei Kriterien erfüllen. Die Fläche muss entweder durch vier Kanten oder durch eine geschlossene Kante (loop) begrenzt sein. Nur dann kann eine strukturierte Vernetzung mit rechteckigen Elementen durchgeführt werden. Das Modell des Stabes lässt eine Unterteilung der Flächen zu, so dass durch die Generierung von Unterteilungen der Geometrie die Bedingungen für die Vernetzung mit Rechteckelementen erfüllt werden. Die erste Unterteilung wurde im parallelen Bereich (Position 6) durchgeführt. In Abbildung 6.1 ist das Oberflächennetz zu sehen, aus dem das in Abbildung 2.4 dargestellte, dreidimensionale Netz des Stabes erstellt wurde.

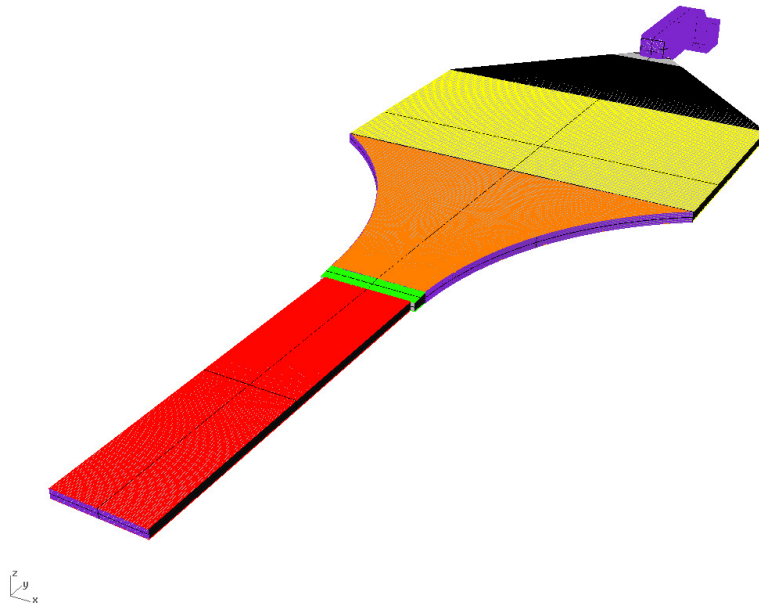


Abbildung 6.1: Strukturiertes Oberflächennetz

Ist die Oberfläche fertig vernetzt, folgt im zweiten Arbeitsschritt eine Überprüfung der Elementqualität. Stark verzerrte Elemente, die durch den a priori Fehlerschätzer ausfindig gemacht werden, können nachträglich bearbeitet werden. Danach können die Oberflächennetze in z -Richtung miteinander verbunden werden, wobei die Anzahl von 9 Elementen über der Bauteildicke verwendet

wurde. Aufgrund der einfachen Topologie des Stabes und der Möglichkeit ein strukturiertes Netz zu erstellen, zeigt der a priori Fehlerschätzer für die dreidimensionalen Elemente eine sehr gute Qualität von durchschnittlich 91%. Für den unstrukturiert vernetzten Verteiler wurde die „Boundary Layer Mesh“-Methode verwendet. Diese Funktion versieht das erstellte Oberflächennetz mit einem Offset in das Formteil hinein. In einem zweiten Schritt werden die beiden identischen Netze verbunden und so dreidimensionale Prismen-Elemente erstellt. Der entstehende Zwischenraum wird dann von der Software mit Tetraedern ausgefüllt und so mindestens eine dritte Schicht Elemente hinzugefügt.

Der nächste Schritt der Diskretisierung besteht in der Modellierung des Angusses. Die Netzgenerierung erfolgt weitestgehend automatisch. Der Verlauf des Angusses wird mit einer Linie in das Modell eingezeichnet und dann automatisch vernetzt. Zu beachten ist hier, dass die Linie auf einem Knoten des Spritzgussnetzes endet. Die Knoten des Netzes können in der Phase der Oberflächenvernetzung mit diversen Werkzeugen bearbeitet werden.

Tabelle 6.1: Prozessparameter Stab und Platte

Material	Probe- körper	Einspritz- zeit [s]	Masse- temp. [°C]	Wkzg.- temp. [°C]	Nachdr.- höhe [MPa]	Nachdr.- zeit [s]
PA6GF15	Stab	2,03	290	90	50	25
PA6GF30	Stab	2,03	290	90	50	25
PA6GF50	Stab	2,05	290	90	50	25
PA6GF15	Platte	1,68	280	80	40	25
PA6GF30	Platte	1,69	280	80	40	25
PA6GF50	Platte	1,70	290	80	40	25

Die Randbedingungen des Modells ergeben sich aus den Prozessparametern, die zur Herstellung des Stabes verwendet wurden. Sie sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Der Umschaltpunkt auf Nachdruck, liegt bei allen Formteilen bei 98% Füllvolumen. Die Materialbeschreibung wurde aus der Datenbank von Moldex[®] entnommen (vgl. Kapitel 2.1). Obwohl eine Berechnung der Faserorientierung für die Ermittlung der Modellparameter mit **FOptimizer** nicht nötig ist, wurde sie dennoch berechnet um eine Referenz zu erhalten. Für die

Simulation der Faserorientierung wurde der Standardwert des Interaktionskoeffizient $C_i = 0,01$ verwendet.

6.2 Referenzergebnisse der Faserorientierung

Die experimentellen Ergebnisse des PA6GF30 im Stab in Kapitel 4.5 zeigen Unterschiede zu den mit der Spritzgießsimulation berechneten Ergebnissen in Abbildungen 6.2 und 6.3.

Während Position 3 im Experiment eine ausgeprägte Mittelschicht aufweist, ist diese an der gleichen Position in der Simulation wesentlich weniger ausgeprägt. Außerdem ist die Komponente A_{33} in der Simulation im Vergleich zum Experiment überbewertet.

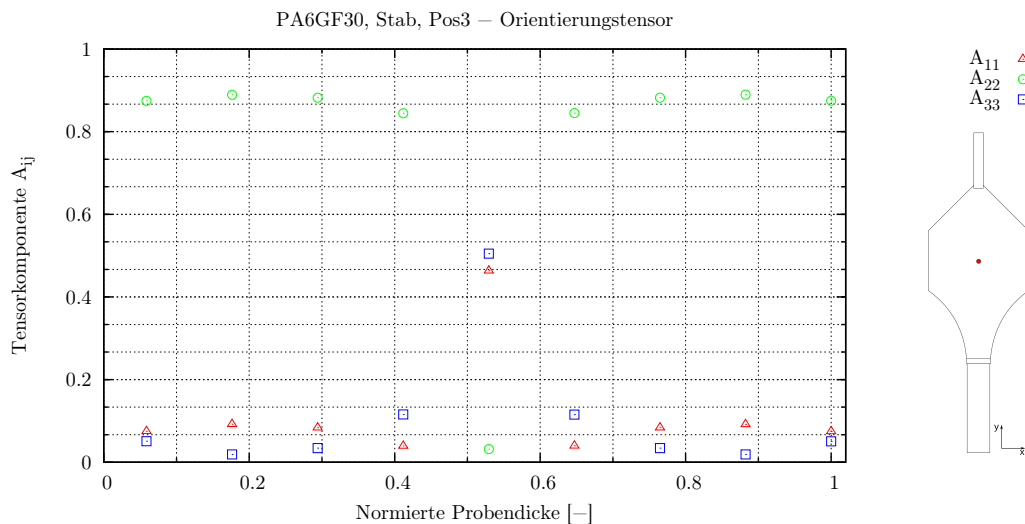


Abbildung 6.2: PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung, Simulation, 9 Schichten

An Position 6 ist im Experiment keine Mittelschicht erkennbar. Diese wird jedoch von der Simulation angedeutet. Auch hier wird die Komponente A_{33} überbewertet. Zudem wird die maximale Orientierung in der Simulation höher eingeschätzt als im Experiment.

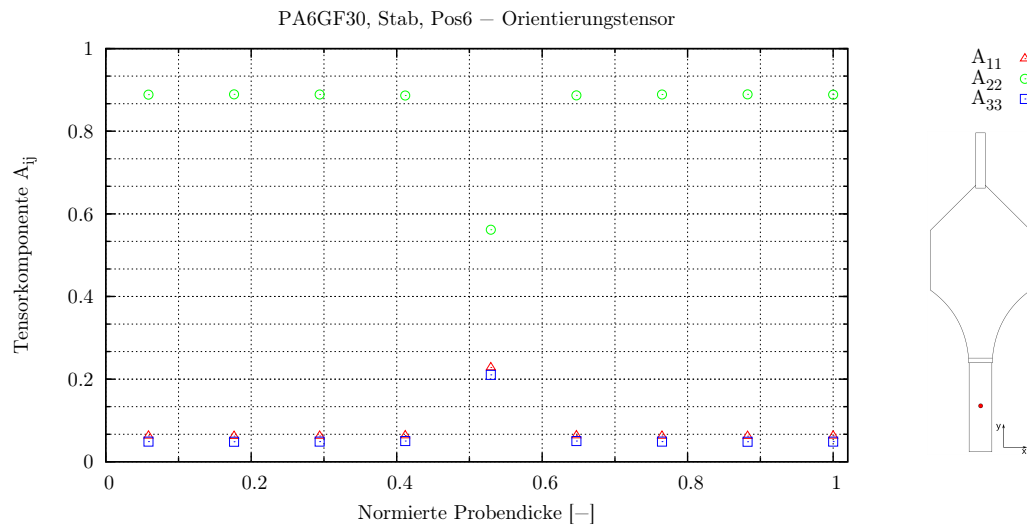


Abbildung 6.3: PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung, Simulation, 9 Schichten

6.3 Auswertung der experimentellen Ergebnisse mit angepasster Schichtanzahl

Da die Simulationen des Stabes mit einer Diskretisierung von neun Elementen über der Bauteildicke durchgeführt wurden, werden auch die experimentellen Ergebnisse mit dieser Schichtanzahl erneut ausgewertet. Es zeigt sich, trotz der niedrigeren Auflösung, dass die Auswertung mit neun Schichten die Trends und Absolutwerte im Vergleich zu Abbildungen 4.26, 4.27, 4.28 und 4.29 gut wiedergeben.

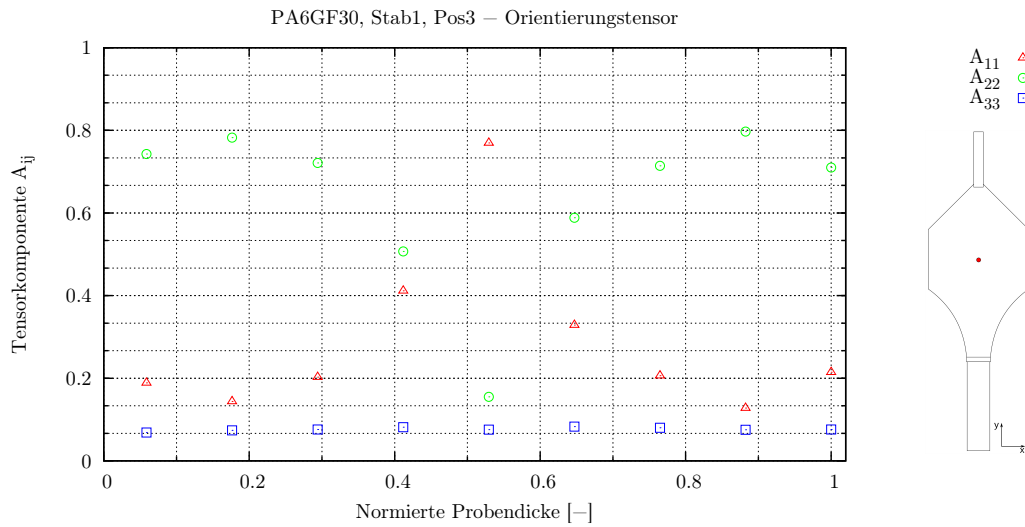


Abbildung 6.4: PA6GF30, Stab, Position 3, Faserorientierung, 9 Schichten

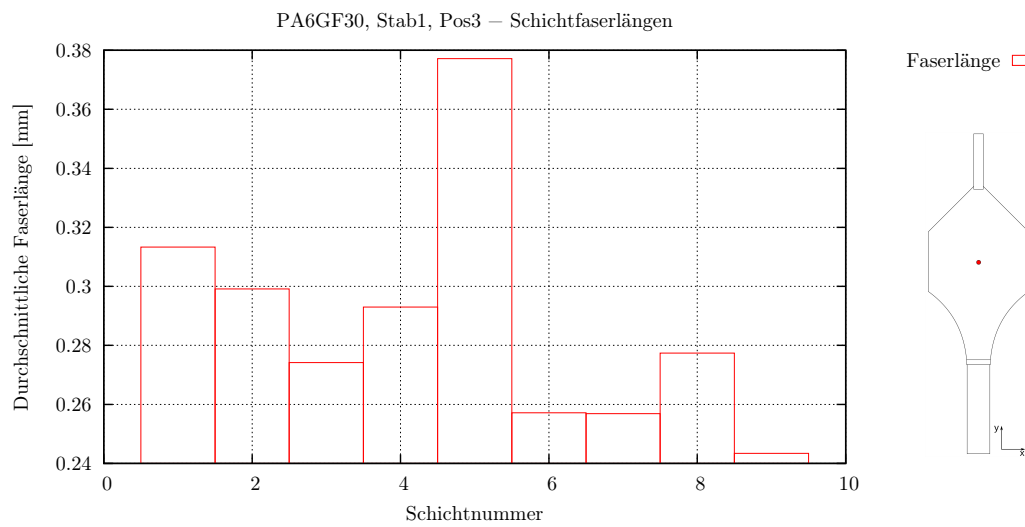


Abbildung 6.5: PA6GF30, Stab, Position 3, durchschnittliche Faserlänge l_V , 9 Schichten

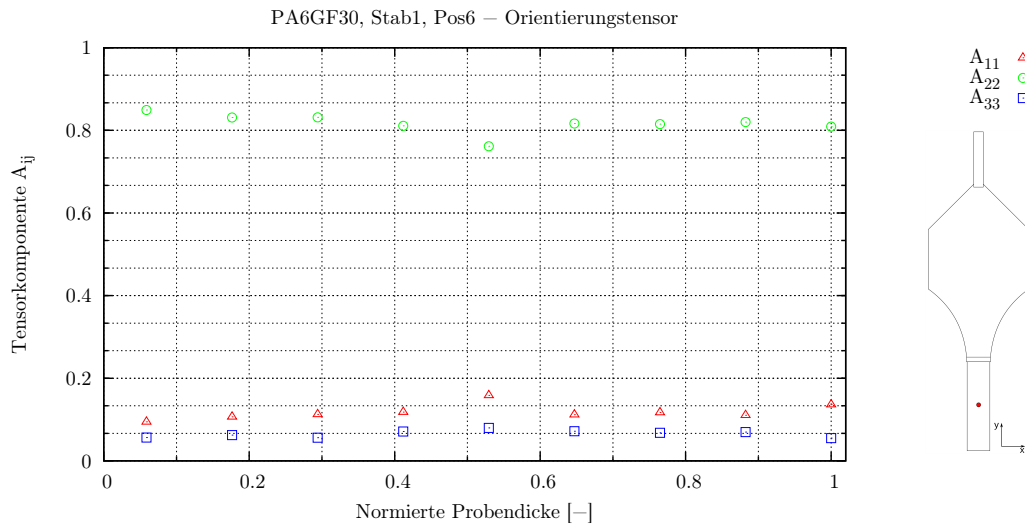


Abbildung 6.6: PA6GF30, Stab, Position 6, Faserorientierung, 9 Schichten

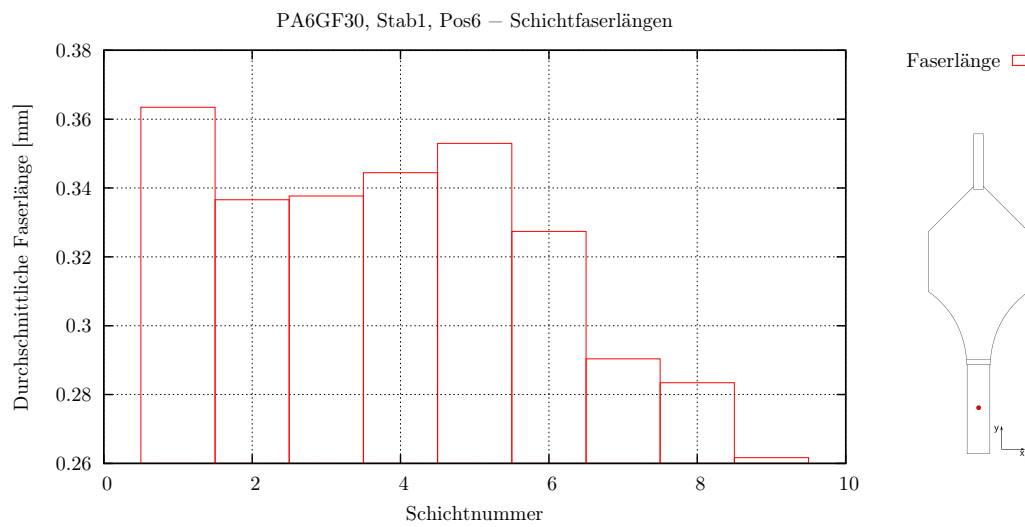


Abbildung 6.7: PA6GF30, Stab, Position 6, durchschnittliche Faserlänge l_V , 9 Schichten

6.4 Parameteridentifikation mit **F**Optimizer

Die in Kapitel 5 beschriebene Identifikation des Modellparameters C_i wird nun für die beiden Position 3 und 6 (vgl. Abbildung 4.5) umgesetzt. Dafür werden vier verschiedene Randbedingungen bezüglich des Aspektverhältnisses r_e aus Tabellen 4.4 und 4.5 verwendet. Die sich ergebenden Randbedingungen sind in Tabelle 6.2 aufgelistet.

Tabelle 6.2: Randbedingungen für **F**Optimizer

	l_V/d_m	l_{nr}/d_m
Position 3	24,66	14,36
Position 6	27,25	15,55

Wie in Kapitel 3.3 beschrieben hat die Schließungsformulierung einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse der Orientierungsberechnung. Die quadratische (qdr) und hybride (hyb) Schließungsformulierung aus [51] wurden, mit den in Tabelle 6.2 aufgelisteten Randbedingungen, verwendet um C_i zu ermitteln.

In Abbildungen 6.8, 6.9 und 6.10 sind die nach $\sum(y_{Experiment} - y_{\mathbf{F}Optimizer})^2$ aufsummierten Fehlerquadrate über C_i aufgetragen. Es zeigt sich in Abbildung 6.8 das ein Optimum für C_i von der Position und damit von der Bauteilgeometrie, respektive den Strömungsverhältnissen abhängig ist.

In Abbildung 6.9 und Tabelle 6.3 lässt sich erkennen, dass die Faserlänge nur einen geringen Einfluss auf das berechnete Optimum von C_i hat.

Wesentlich deutlicher fallen die Unterschiede für ein optimiertes C_i bei der Wahl unterschiedlicher Schließungsformulierungen aus, wie in Abbildung 6.10 zu sehen ist.

Die in Tabelle 6.3 aufgelisteten Werte für C_i sind am Minimum der Kurven ermittelt. In Tabelle 6.4 sind die zu den jeweiligen optimalen C_i zugehörigen Fehler zum Experiment dargestellt.

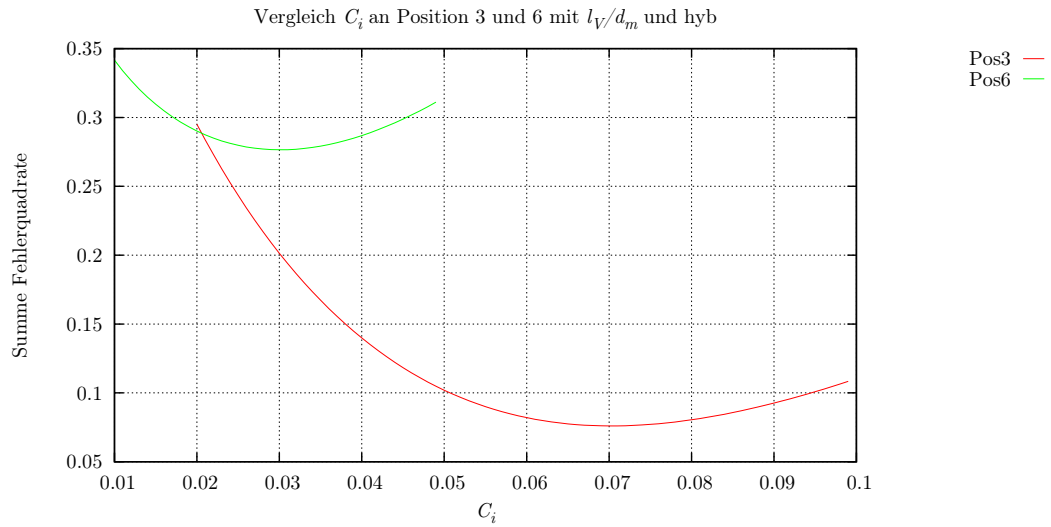


Abbildung 6.8: Vergleich der Ergebnisse für C_i an Positionen 3 und 6

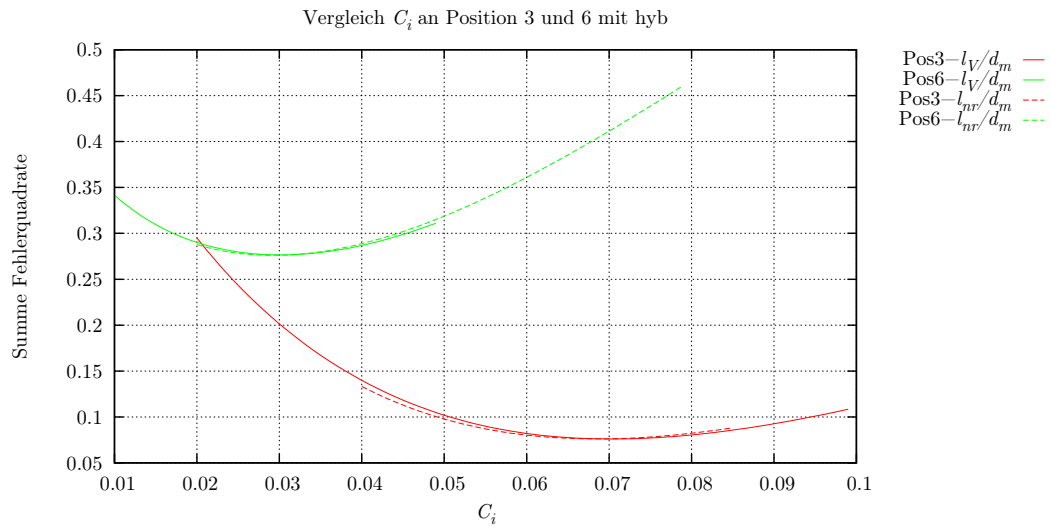


Abbildung 6.9: Vergleich der Ergebnisse für C_i an Positionen 3 und 6 und Einfluss der Faserlänge

Tabelle 6.3: Ermittelte C_i mit konstantem r_e aus Tabelle 6.2

	l_V/d_m (qdr)	l_V/d_m (hyb)	l_{nr}/d_m (qdr)	l_{nr}/d_m (hyb)
Position 3	0,082	0,07	0,081	0,068
Position 6	0,031	0,029	0,031	0,029

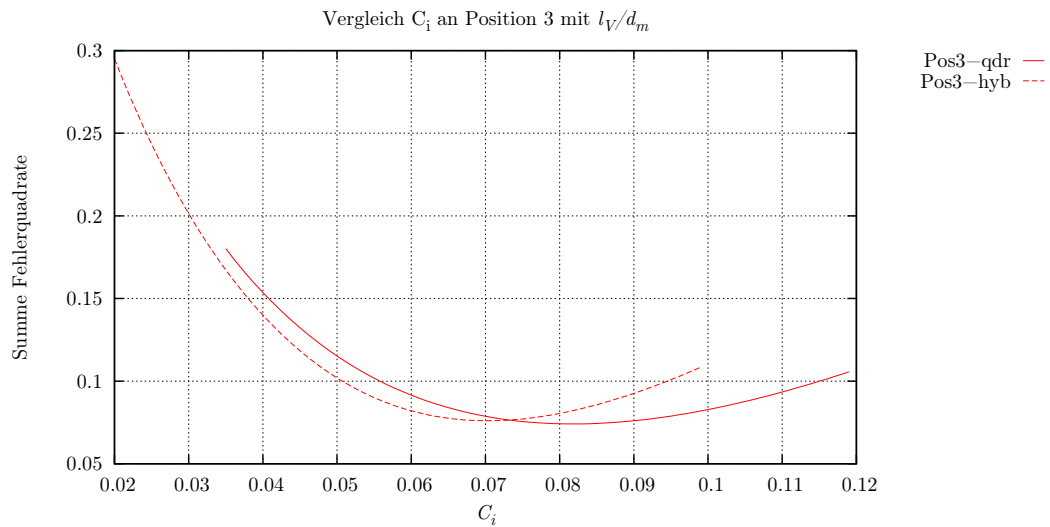


Abbildung 6.10: Vergleich der Ergebnisse für C_i an Position 3 und Einfluss der Schließungsformulierung

Tabelle 6.4: Summe der Fehlerquadrate mit für C_i aus Tabelle 6.3

	l_V/d_m (qdr)	l_V/d_m (hyb)	l_{nr}/d_m (qdr)	l_{nr}/d_m (hyb)
Position 3	0,074	0,076	0,074	0,076
Position 6	0,327	0,276	0,326	0,276

Abschließend sind die Ergebnisse der Optimierung mit **FOptimizer** in Abbildung 6.11 für Position 3 und Abbildung 6.12 für Position 6 zusammengefasst. Hier zeigt sich, mit den jeweils besten Parametern für C_i und der quadratischen Schließungsformulierung, eine deutliche Verbesserung im Vergleich zu den Referenzergebnissen der Simulation aus Kapitel 6.2.

An Position 3 lässt sich erkennen, dass der Grad der Orientierung nach der Optimierung von C_i mit **FOptimizer** wesentlich niedriger ist, als bei der Referenzsimulation. Die maximale Ausprägung der Mittelschicht wird nach der Optimierung ebenfalls besser wiedergegeben.

An Position 6 wird der Grad der Orientierung in den Randbereichen der Probe nach der Optimierung sehr gut abgebildet. Dies ist eine deutliche Verbesserung zur Referenzsimulation. Jedoch wird die Mittelschicht auch nach der Optimierung weiterhin überbewertet.

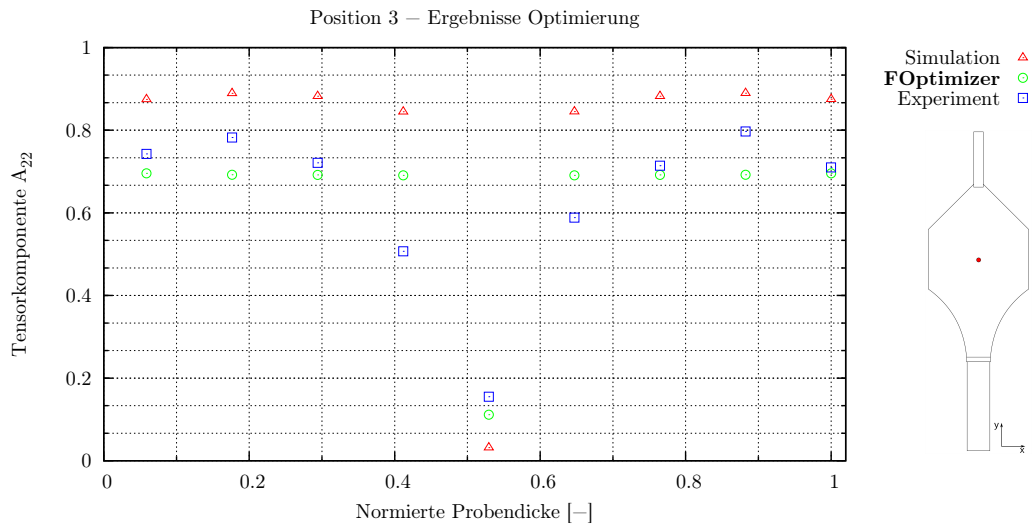


Abbildung 6.11: Position 3, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,082$, $l_V = 24,66$

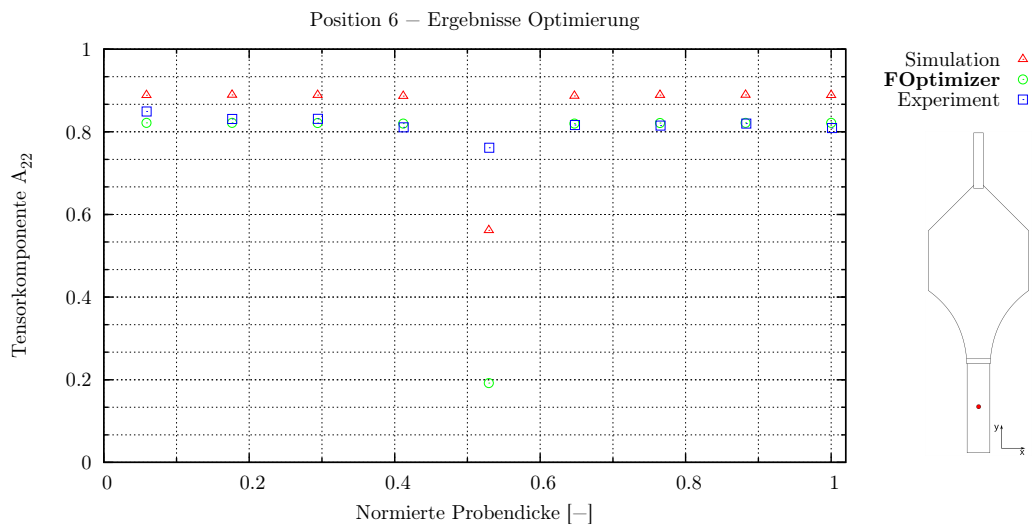


Abbildung 6.12: Position 6, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,031$, $l_V = 27,25$

6.5 Parameteridentifikation mit schichtbezogener Faserlänge $\frac{l_V}{d_m}$

Für die erzielten Ergebnisse aus Kapitel 6.4 für Position 3 wurde eine weitere Rechnung durchgeführt. In dieser ist jedem Element die in Abbildung 6.5 dargestellte, durchschnittliche Faserlänge l_V zugeordnet. Die mit $d_m = 0,012$ mm berechneten Aspektverhältnisse r_e für die einzelnen Schichten sind in Tabelle 6.5 aufgeführt. Es wurde die quadratische Schließungsformulierung verwendet, da hier die Summe der Fehlerquadrate in Position 3 am kleinsten ist (vgl. Tabelle 6.4).

Tabelle 6.5: l_V/d_m für Einzelschichten

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Pos3	26,08	24,91	22,83	24,33	31,41	21,41	21,33	23,08	20,25

Wie aus Kapitel 3.1.2 bekannt, hat die Faserlänge direkten Einfluss auf die Rotationsgeschwindigkeit. Durch zuweisen der experimentell ermittelten schichtbezogenen durchschnittlichen Faserlänge können noch einmal Spritzgießtools nicht umgesetzt werden. Im vorliegenden Fall ist der angepasste Ergebnisse erzielt werden. Dieser Punkt kann in kommerziellen Unterschied der Faserlängen für die Berechnung der Faserorientierung jedoch insignifikant. Die Unterschiede in \mathbf{A} mit konstantem r_e und schichtweise zugeordnetem r_e bei konstanten C_i sind in Abbildung 6.13 dargestellt.

Tabelle 6.6: Vergleich C_i und Summe der Fehlerquadrate an Position 3 mit qdr

	$l_V = \text{konst.}$	$l_V = l_{V_{Schicht}}$
C_i	0,082	0,082
Summe Fehlerquadrate	0,074	0,074

Es zeigt sich, dass für technische Thermoplasten die Faserlängenverteilung beim untersuchten FOLGAR-TUCKER Modell und den angewendeten Schließungsformulierungen zu vernachlässigen ist. Die Unterschiede in der Faserlänge über der Bauteilhöhe, obwohl signifikant für die Ermittlung mechanischer

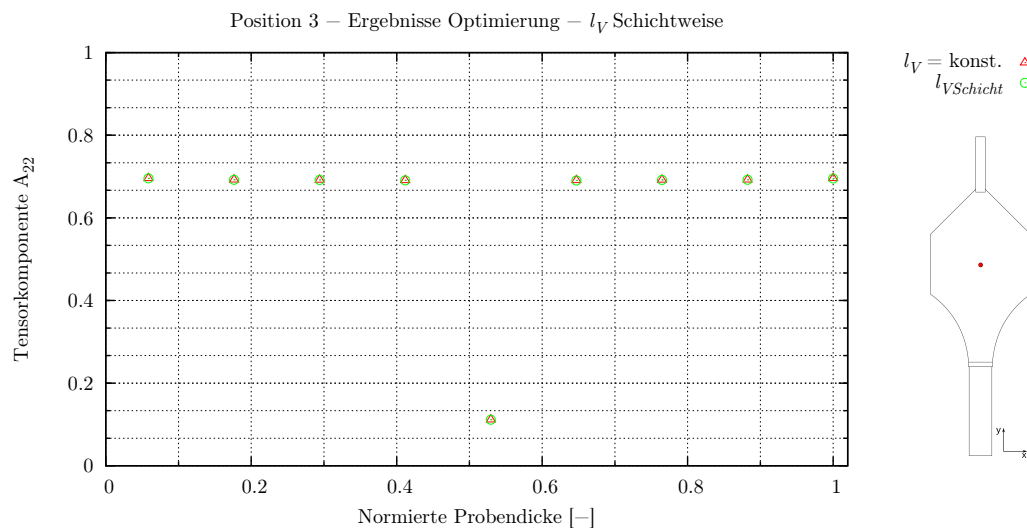


Abbildung 6.13: Position 3, Ergebnisse der Optimierung, $C_i = 0,082$, $l_V =$ Schichtweise aus Tabelle 6.5

Kennwerte, sind zu klein um bei der Orientierungsberechnung Einfluss auf das Ergebnis zu nehmen. Bei recycelten Kunststoffen, kann die Faserlängenverteilung deutlich breiter werden, so dass auch eine schichtweise Betrachtung der Faserlängen wieder eine Verbesserung in der Orientierungsberechnung bringen kann.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die sogenannte „integrative Simulation“ kurzfaserverstärkter Thermoplasten beschreibt strukturmechanische Simulationen unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses. Die zumeist im Spritzgießverfahren verarbeiteten Materialien zeichnen sich durch stark anisotrope mechanische und thermomechanische Eigenschaften aus, die im Verarbeitungsprozess und damit einhergehender Orientierung der Verstärkungsfasern entstehen. Für die numerische Auslegung kurzfaserverstärkter Spritzgießbauteile wird die entstehende Faserorientierung in Prozesssimulationen berechnet. Sie ist ein wichtiger Teil der Homogenisierung von Faser- und Matrixeigenschaften in der FEM um mechanische und thermomechanische Eigenschaften vorherzusagen. Obwohl Grundlage der gesamten Simulationskette, wird der Orientierungsberechnung meist ungenügend Rechnung getragen. Dies liegt an der Komplexität der zur Verfügung stehenden Modelle und an der schwierigen experimentellen Validierung.

Das wesentliche Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methode zur Identifikation von Orientierungsmodellparametern, die, integriert in die Simulationskette und unter minimalem zeitlichen Aufwand, zu einer Verbesserung der Orientierungsvorhersage führt.

Zuerst wird die integrative Simulationskette in ihrem vollen Umfang vorgestellt um eine Übersicht des umfangreichen Feldes zu geben und kritische Punkte explizit zu benennen. An einem Beispiel wird deutlich gemacht, dass mit exakten Kenntnissen über die vorliegende Faserorientierung die strukturmechanischen Vorhersagen im elastischen Bereich sehr genau sind. In diesem Zusammenhang wird aufgezeigt, wie stark die mechanischen Eigenschaften eines Materials von der Faserorientierung abhängig sind und das sich daraus direkt ableiten lässt,

dass die Faserorientierung ein wesentlicher Aspekt der strukturmechanischen Vorhersagegenauigkeit ist.

Die grundlegende Gleichung heutiger Orientierungsmodelle wird hergeleitet und sowohl für Grenzfälle als auch technisch relevante Beispiele gelöst. Dadurch entsteht ein fundiertes Verständnis des Verhaltens von Fasern in einem viskos dominierten Strömungsfeld. Die Weiterentwicklungen von Orientierungsmodellen werden schrittweise auf der gelegten Basis aufgebaut und diskutiert. Die kritischen Punkte der Modelle werden herausgearbeitet, um Entscheidungshilfen bei der Anwendung zu geben. Die Interpretation von Ergebnissen wird an einfachen Beispielen erläutert, die außerdem die Mehrdeutigkeit der tensoriellen Beschreibung von Faserorientierungen, im Vergleich zur Beschreibung über eine Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion, deutlich machen.

Im experimentellen Teil der Arbeit werden Faserorientierungen und Faserlängenverteilungen in zwei verschiedenen Formteilen untersucht. Beide Formteile wurden aus Polyamid mit 15%, 30% und 50% Kurzglasfaseranteil hergestellt. Zur Analyse der Proben wird ein μ -Computertomograph eingesetzt. Die Ergebnisse der so genannten Einzelfaseranalyse sind der Startpunkt, Richtungsvektor, Länge und Durchmesser der gefundenen Fasern. Die mathematisch beschriebenen Einzelfasern werden bezüglich ihrer Orientierung und Länge sowohl integral über die Bauteildicke als auch in mehreren Schichten weiter ausgewertet. Mit einer Versuchsmatrix von insgesamt 46 analysierten Positionen wird erstmalig ein Zusammenhang zwischen Faserorientierung und schichtenbezogener Faserlänge über der Bauteildicke hergestellt. Es wird der Zusammenhang von Orientierungsgrad und Füllstoffgehalt analysiert und mit der Faserlängenverteilung in Zusammenhang gebracht.

Da die Identifikation von Orientierungsmodellparametern in den bestehenden Simulationsprozess eingebunden werden soll, ist eine Minimierung der benötigten Rechenzeiten neben der universellen Anwendbarkeit ein Kernkriterium. Die Faserorientierungsberechnung ist in kommerziellen Spritzgießtools ein reines Postprocessing, weshalb die Idee einer von der Prozesssimulation weitestgehend losgelösten Umsetzung den Kern des gewählten Ansatzes bildet.

Da bei Prozesssimulationen keine Rückkopplung von Orientierungszustand auf

rheologische Eigenschaften der Schmelze stattfindet, hat die Faserorientierung keinen Einfluss auf die Schmelzgeschwindigkeit. Die Schmelzgeschwindigkeit ist aber die einzige zeitabhängige Variable aller Orientierungsmodelle. Darum wird die Prozesssimulation nur einmalig zur Berechnung der Schmelzgeschwindigkeit verwendet. Die so erlangten Daten werden als Eingangsgrößen für das implementierte Orientierungsmodell eingesetzt. So wird die erste Reduktion der Rechenzeit erreicht, da bei einer Iteration der Modellparameter das erneute Berechnen, der unveränderten, Schmelzgeschwindigkeit entfällt. Die zweite und weitaus größere Reduktion an Rechenzeit wird durch die gezielte Integration nur der Elemente erreicht, für die auch experimentelle Ergebnisse zum Abgleich vorliegen.

Abschließend wird das FOLGAR-TUCKER Modell verwendet um mit der beschriebenen Methode den Interaktionskoeffizienten C_i am Beispiel eines Formteils zu bestimmen. Obwohl eine Verbesserung zu den in der Prozesssimulation standardmäßig erzielten Ergebnissen erreicht werden kann, zeigen sich die in der Literatur bereits bekannten Unzulänglichkeiten des Modells. Die Geometrieabhängigkeit des Parameters C_i zeigt sich in den unterschiedlichen Ergebnissen in Abhängigkeit von der Position. Da die Faserlänge ebenfalls ein Parameter des Modells ist, wird über eine elementweise Zuordnung verschiedener, im Experiment ermittelter Faserlängen versucht, eine weitere Verbesserung der Ergebnisse zu erzielen.

Dieser Ansatz sollte weiter untersucht werden. Die zu hohe Orientierungsrate ist eines der Kernthemen bei der Weiterentwicklung von Orientierungsmodellen und wurde bis jetzt noch nicht über einen physikalischen Ansatz modelliert. Die Ergebnisse von Modellanalysen zeigen, dass die Orientierungsrate direkt von der Faserlänge abhängig ist und so unter Einbeziehung einer im Experiment ermittelten schichtenbezogenen Faserlänge, positiv Einfluss auf die Orientierungsberechnung genommen werden könnte.

Abschließend ist festzuhalten, dass über die externe Identifikation der Modellparameter nicht nur ein immenser Zeitgewinn zu Buche schlägt. Es bietet sich vielmehr auch die Möglichkeiten, des direkten Zugriffs auf Schließungsformulierungen und die Variation der Faserlängen über der Bauteildicke.

A Anhang

Alle im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten μ -CT Analysen wurden bezüglich des Orientierungstensors 2. Stufe \mathbf{A} , der integralen Faserlängenverteilung l_{nr} , der volumengewichteten integralen Längenverteilung l_V und der volumengewichteten Schichtweisen Längenverteilung ausgewertet und sind in diesem Anhang zusammengestellt. Für die Zuordnung der Ergebnisse zu den Positionen in den Halbzeuggeometrien können den Abbildungen 4.5 und 4.6 die Positionen entnommen werden.

Die vorliegenden Ergebnisse können zusammen mit den Verarbeitungsparametern in Tabelle 6.1 und den Geometriedetails der Halbzeuggeometrien aus [10, 15] für weitere Untersuchungen verwendet werden. Insbesondere bei der Entwicklung und Validierung neuer Orientierungsmodelle oder Modelle für die Berechnung der Längenverteilung kann von diesen Ergebnissen profitiert werden.

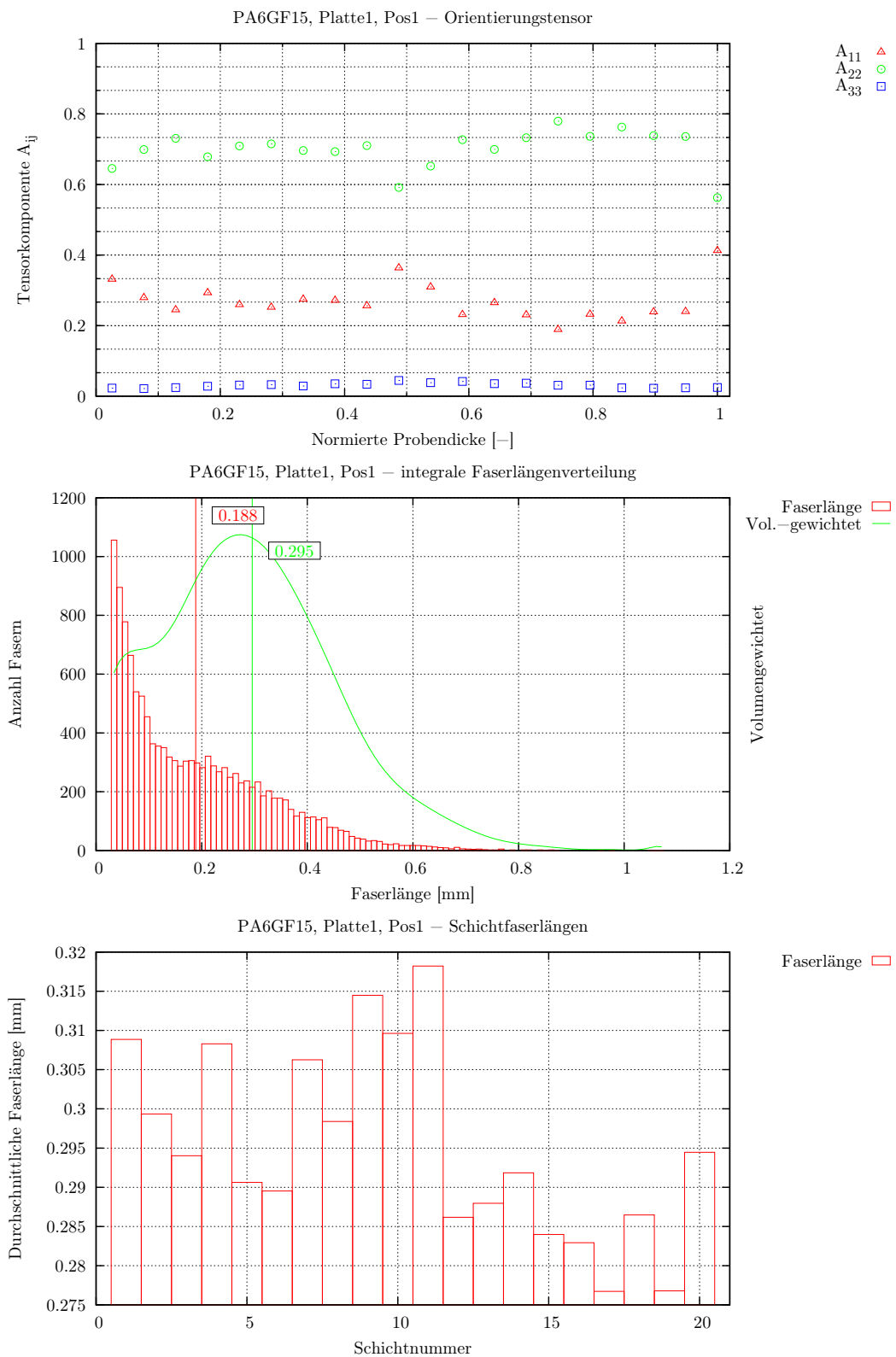


Abbildung A.1: PA6GF15, Platte, Position 1

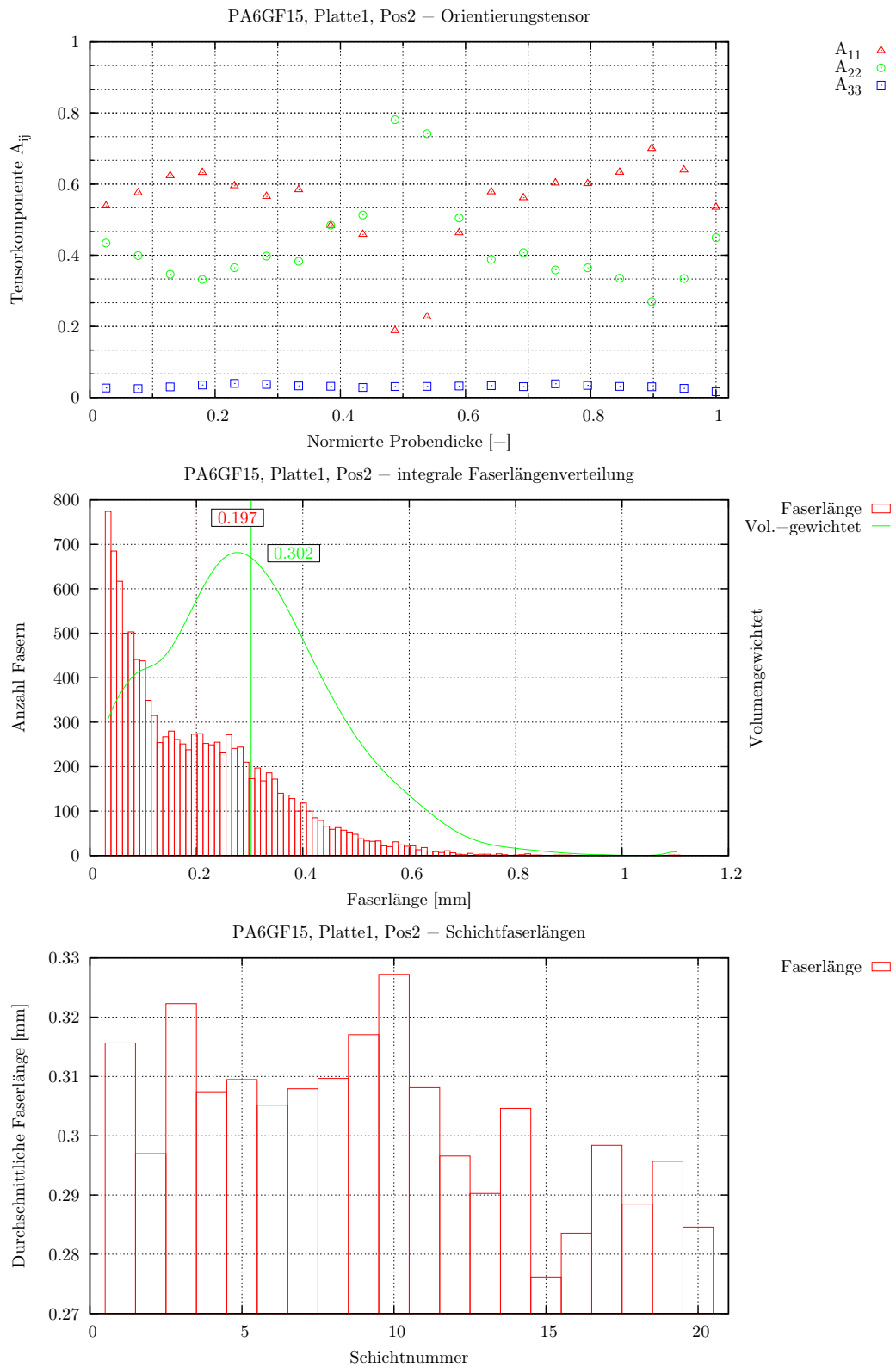


Abbildung A.2: PA6GF15, Platte, Position 2

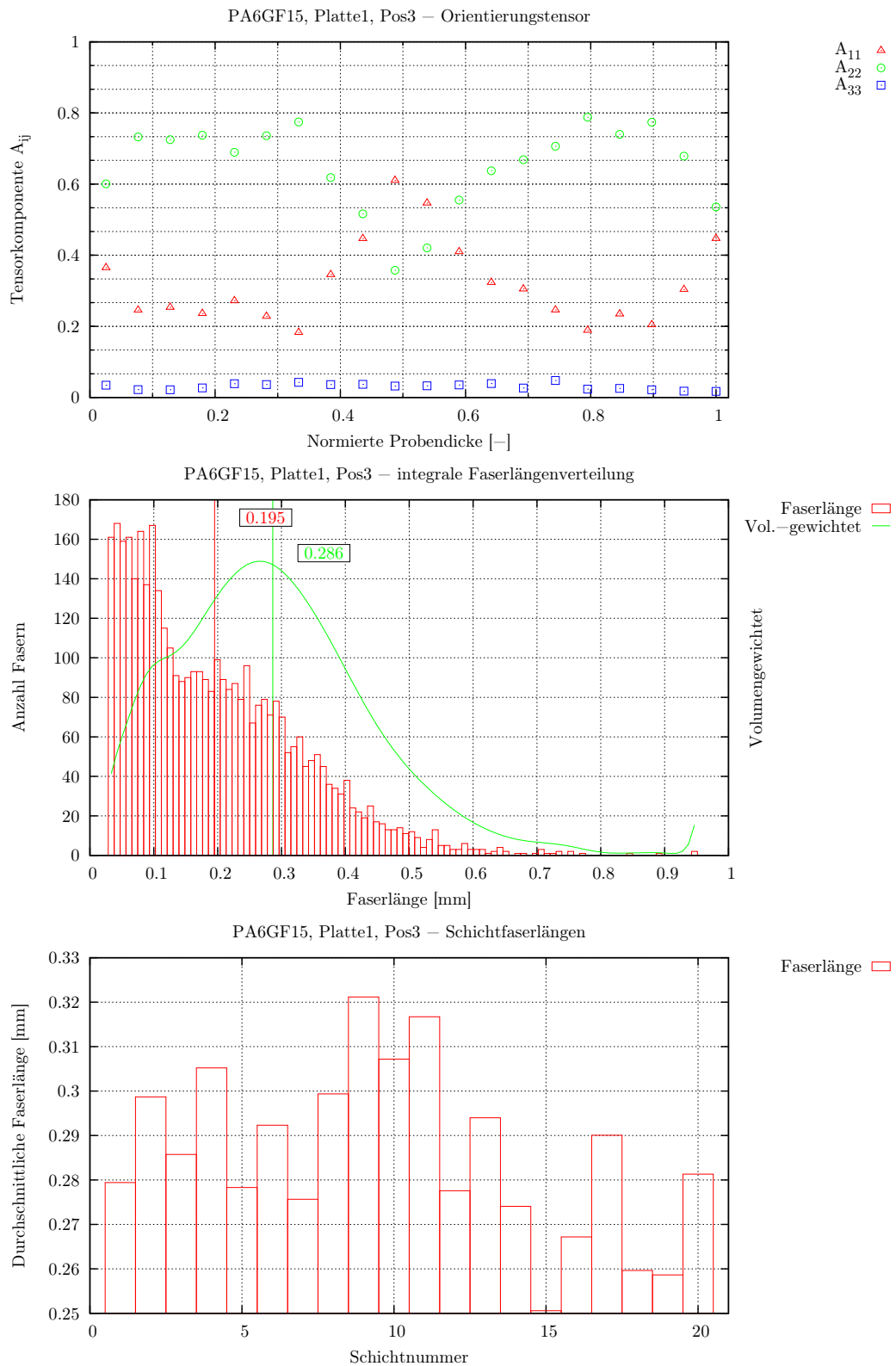


Abbildung A.3: PA6GF15, Platte, Position 3

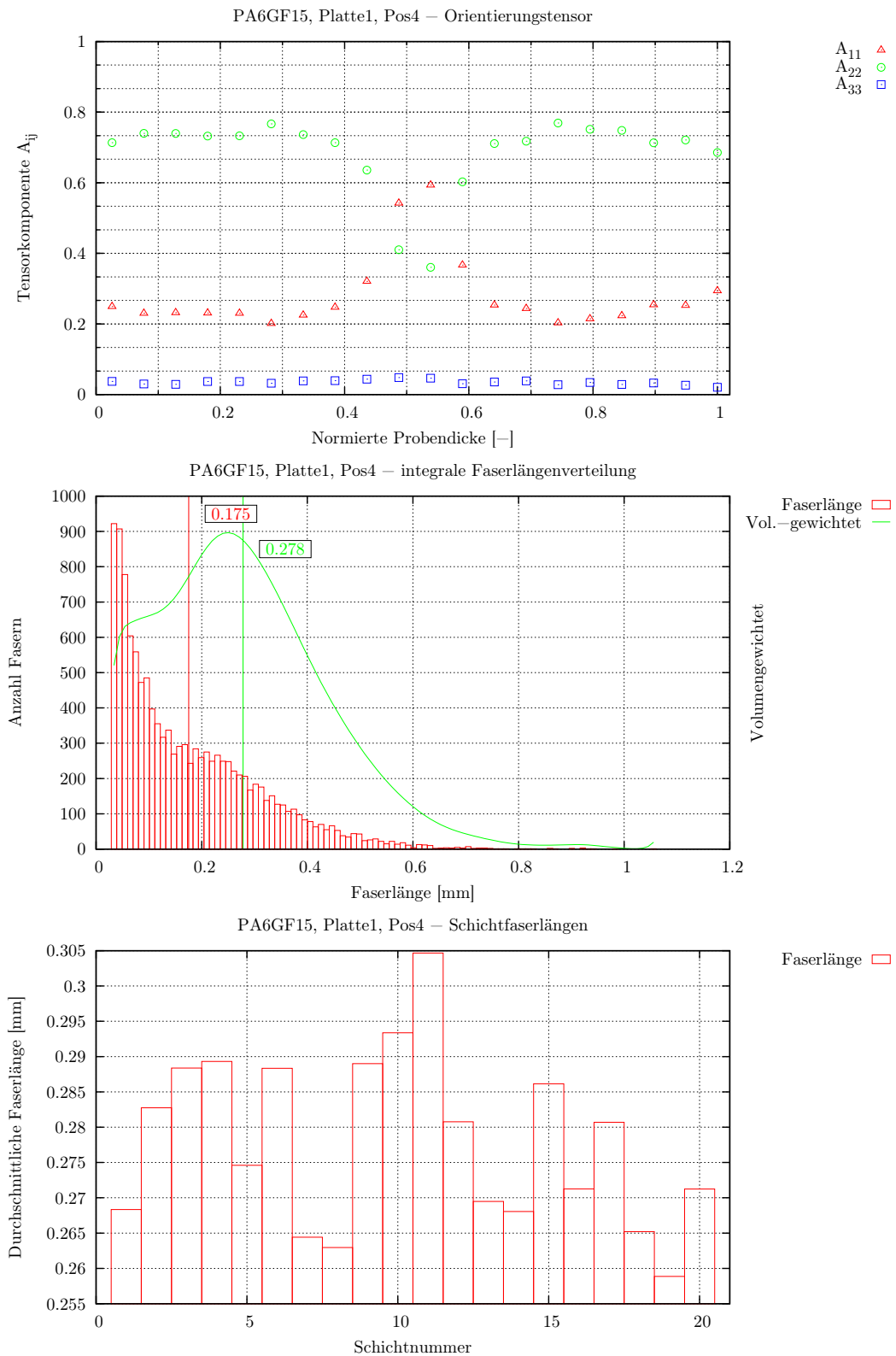


Abbildung A.4: PA6GF15, Platte, Position 4

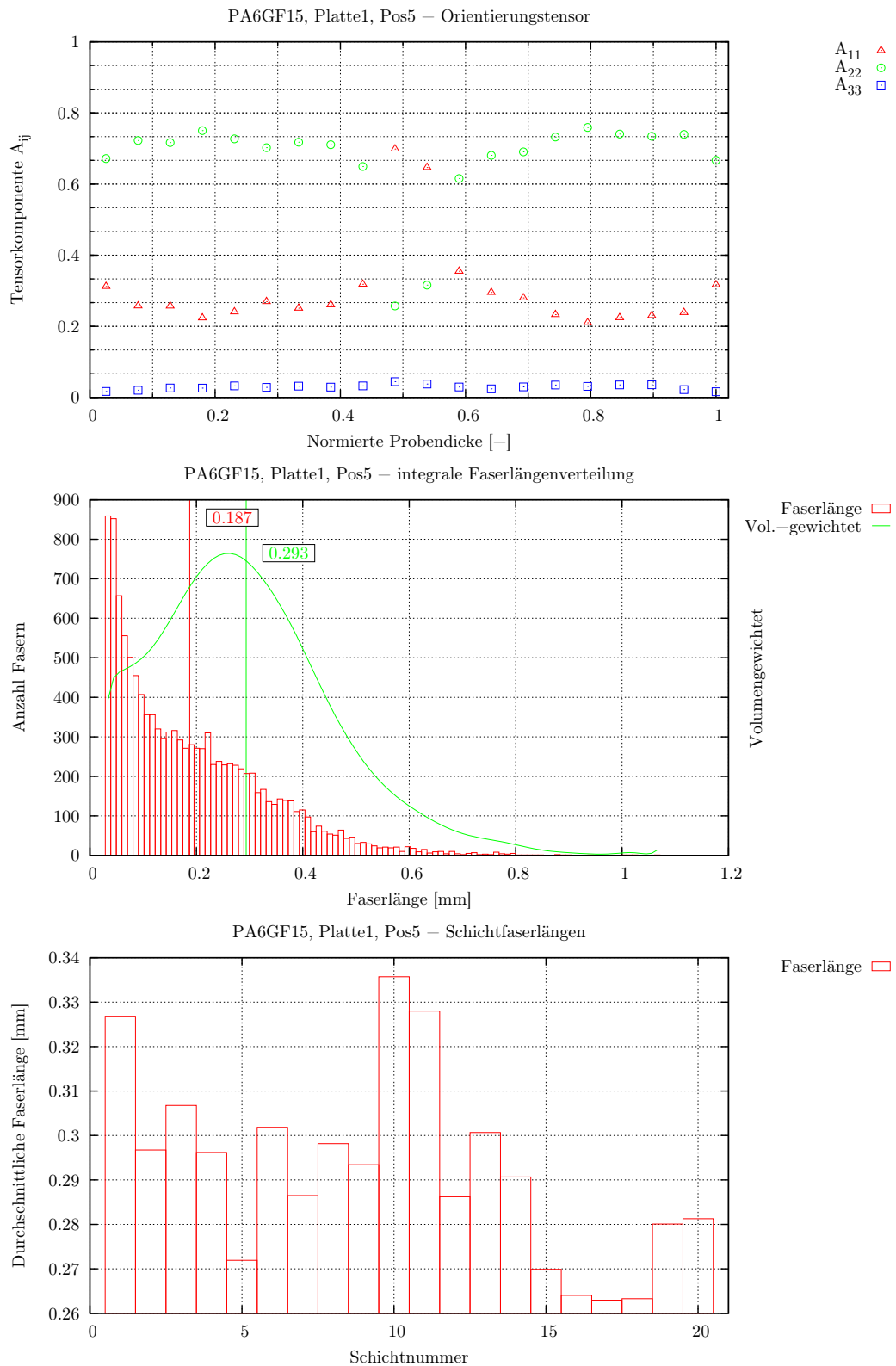


Abbildung A.5: PA6GF15, Platte, Position 5

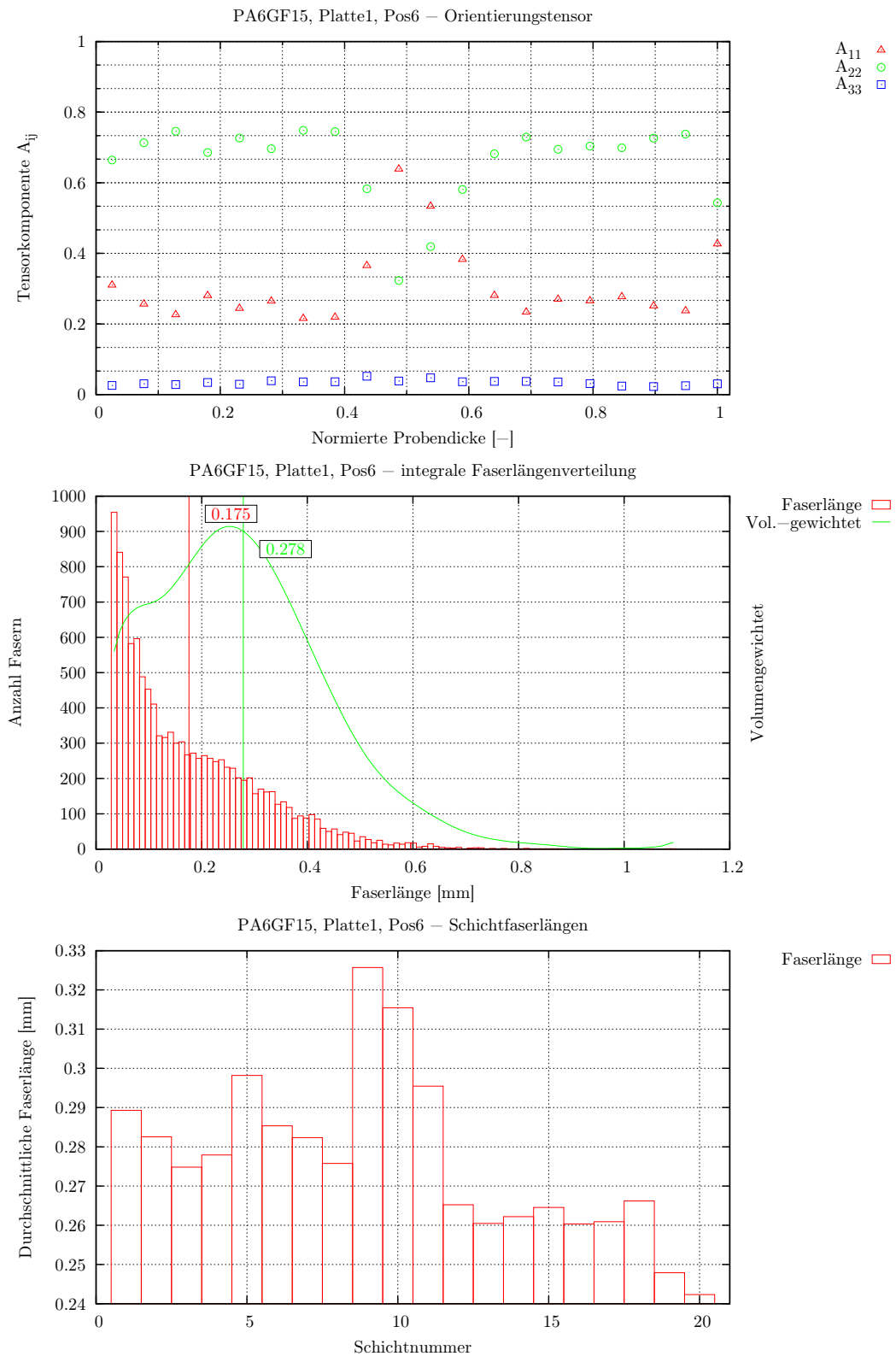


Abbildung A.6: PA6GF15, Platte, Position 6

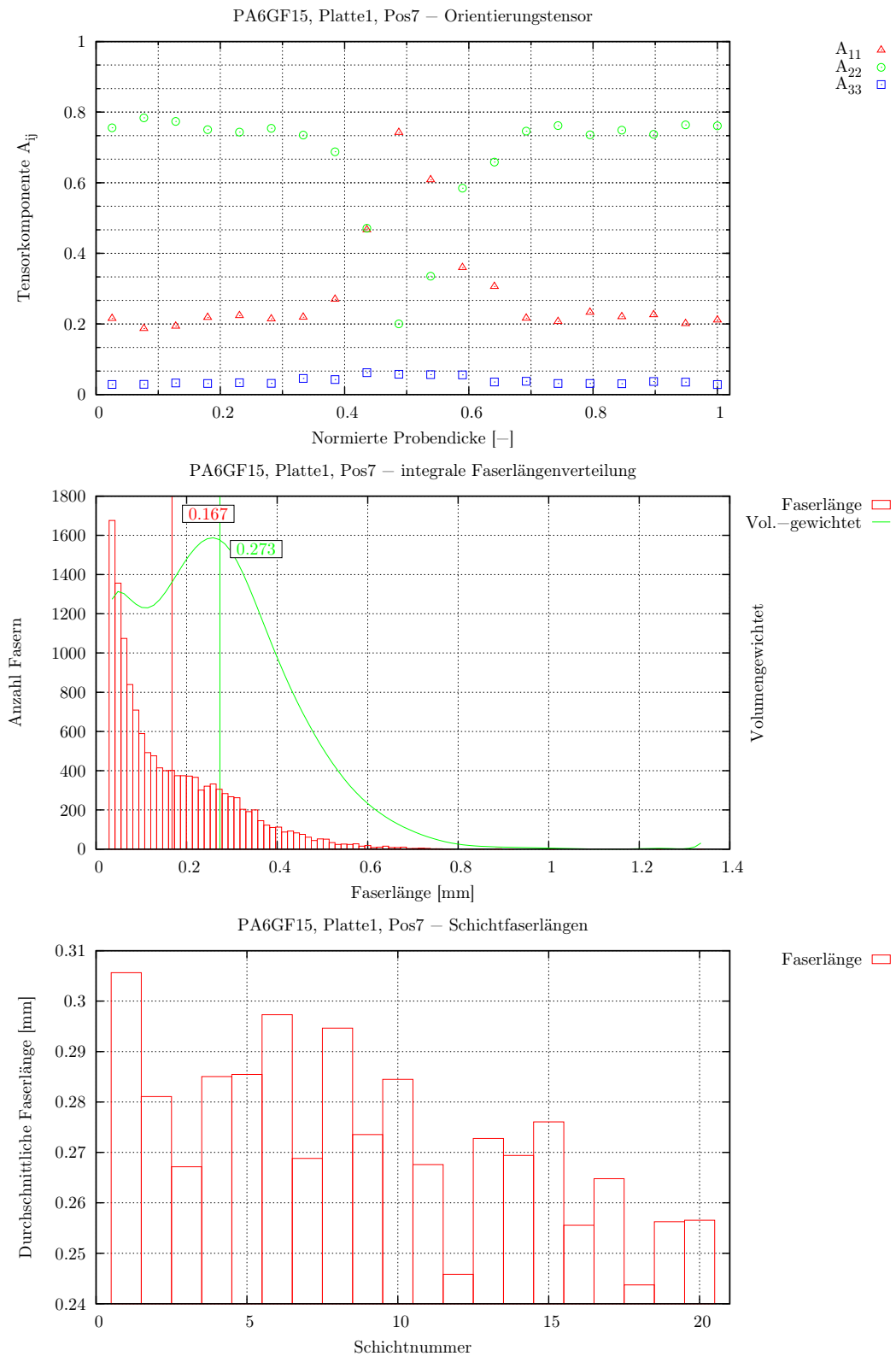


Abbildung A.7: PA6GF15, Platte, Position 7

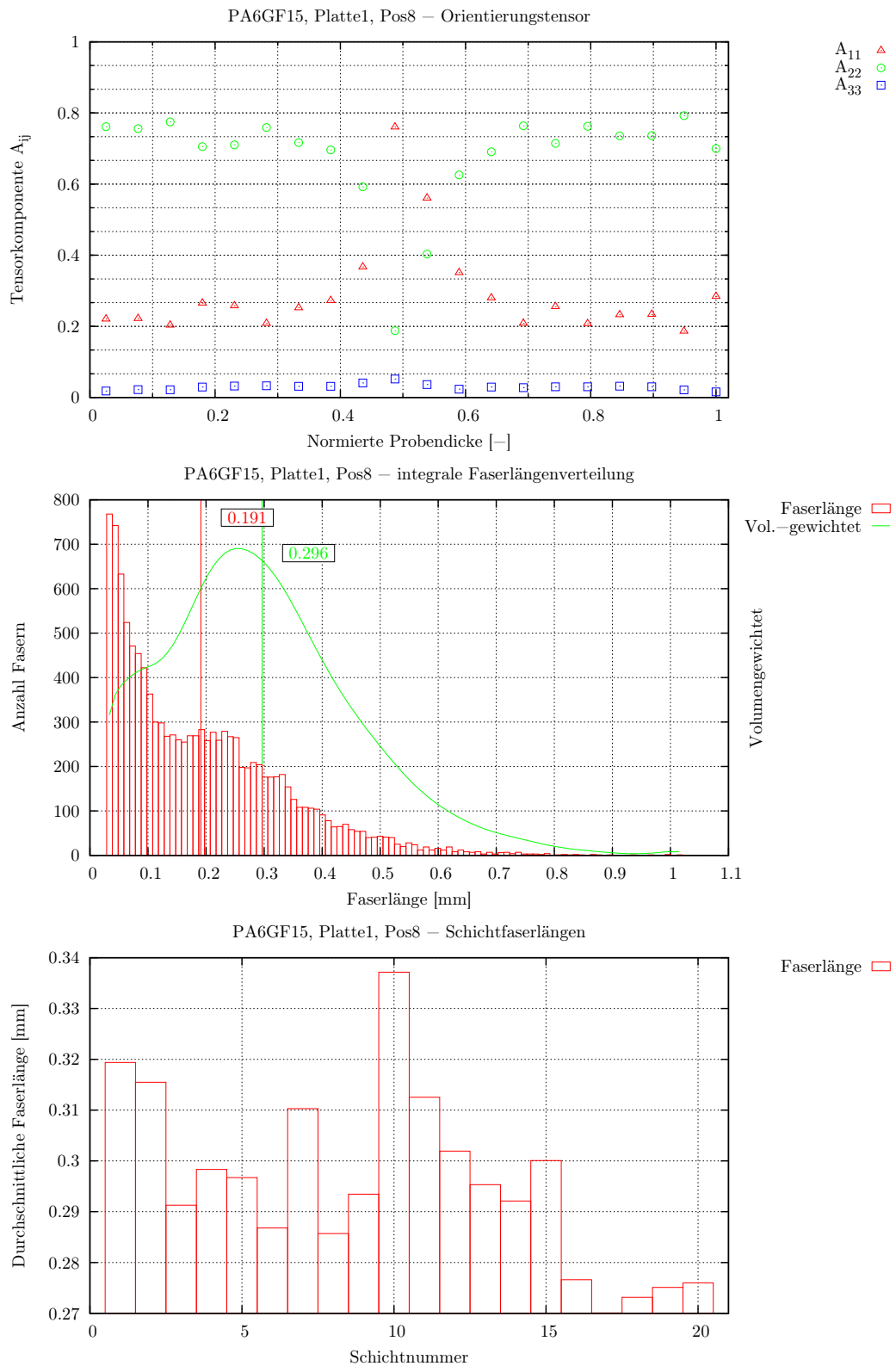


Abbildung A.8: PA6GF15, Platte, Position 8

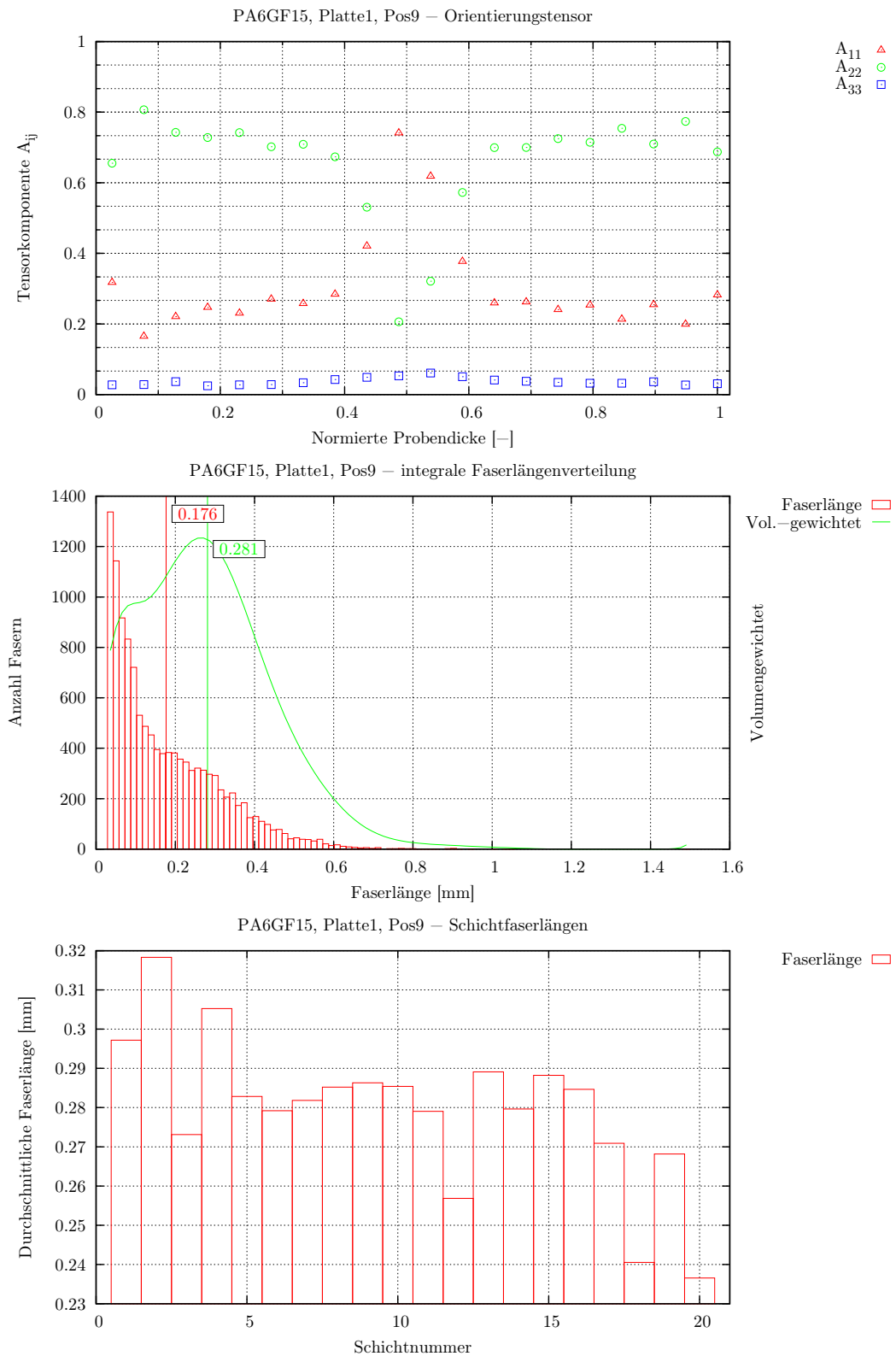


Abbildung A.9: PA6GF15, Platte, Position 9

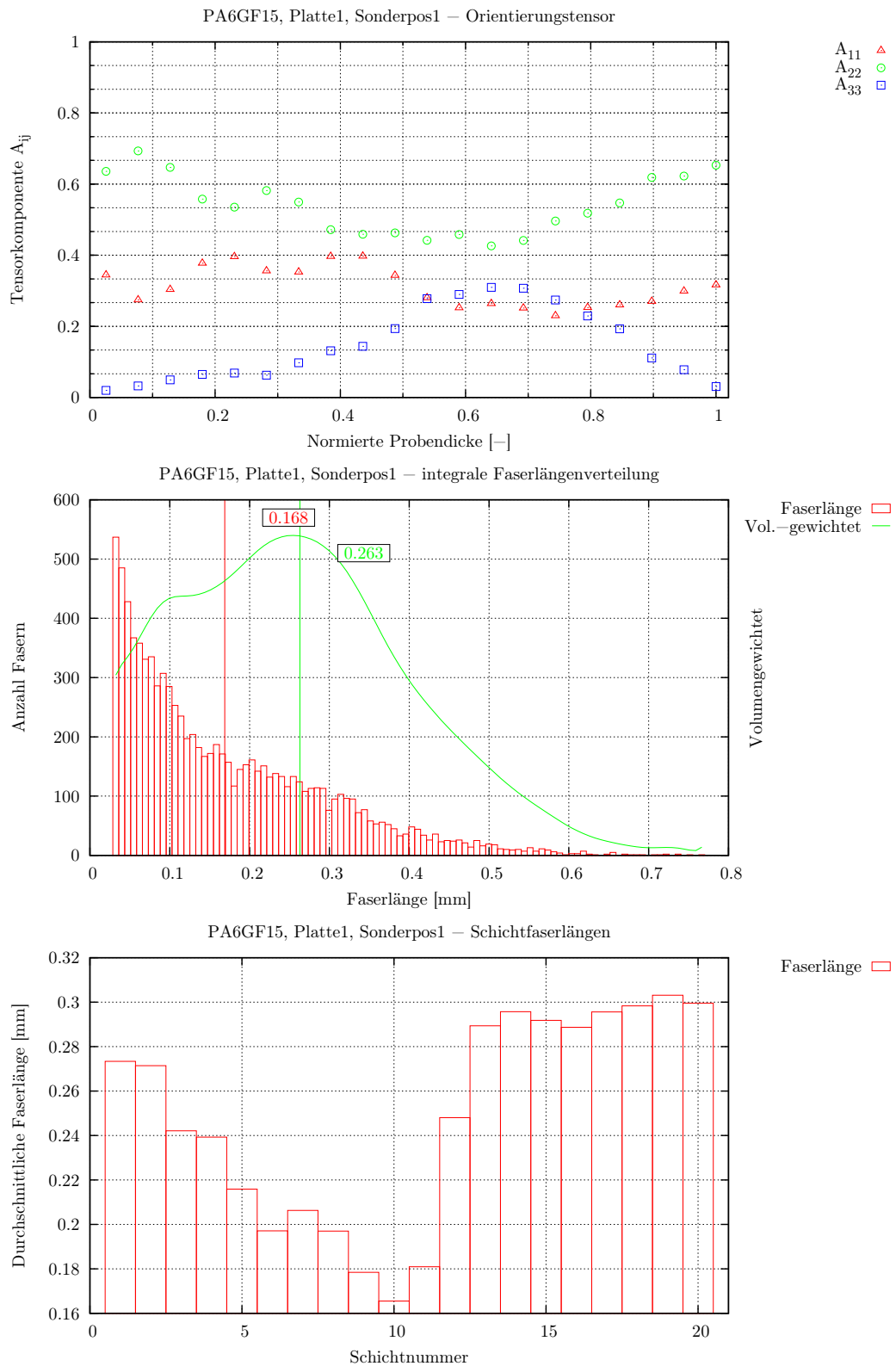


Abbildung A.10: PA6GF15, Platte, Sonderposition 1

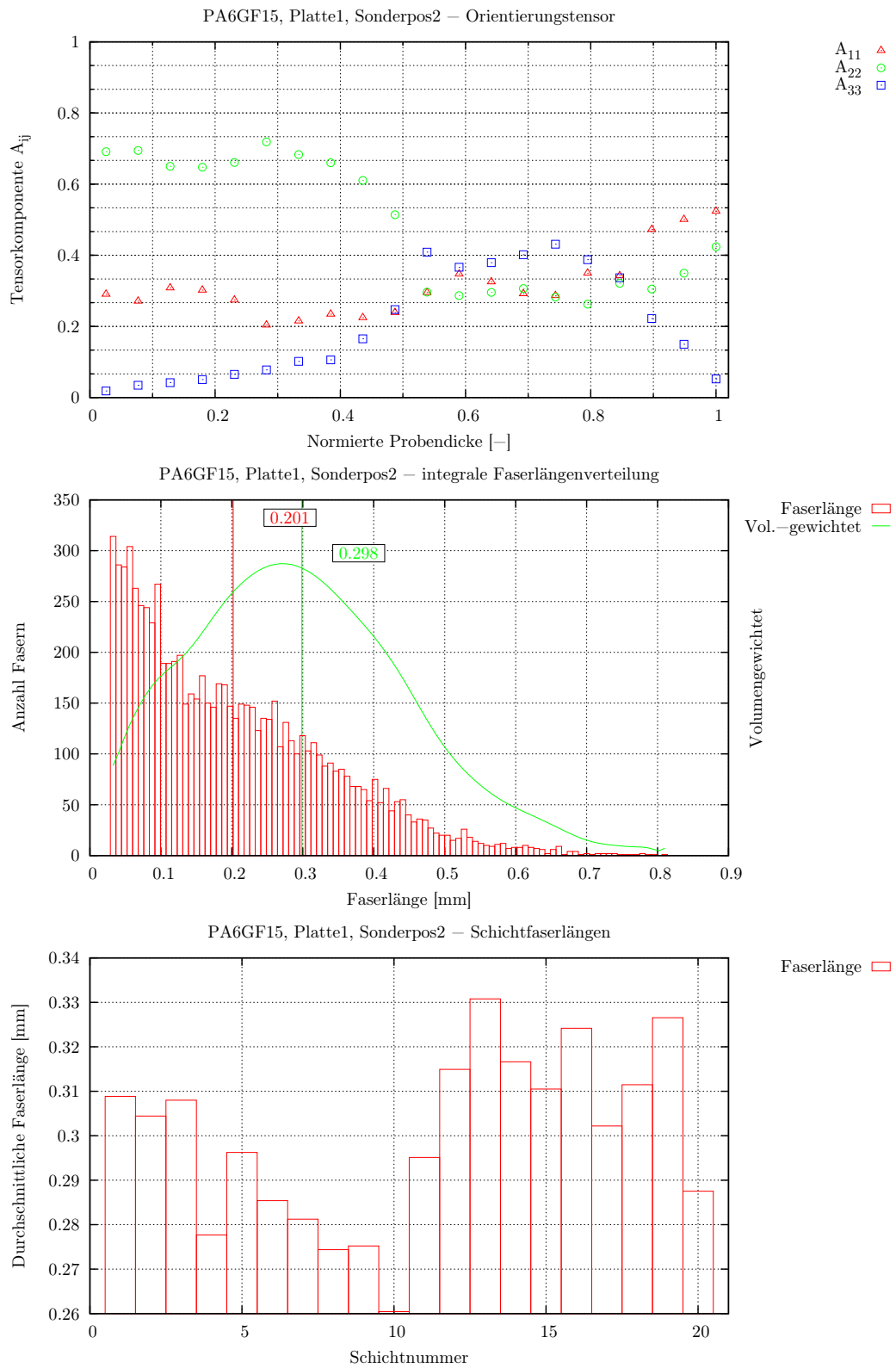


Abbildung A.11: PA6GF15, Platte, Sonderposition 2

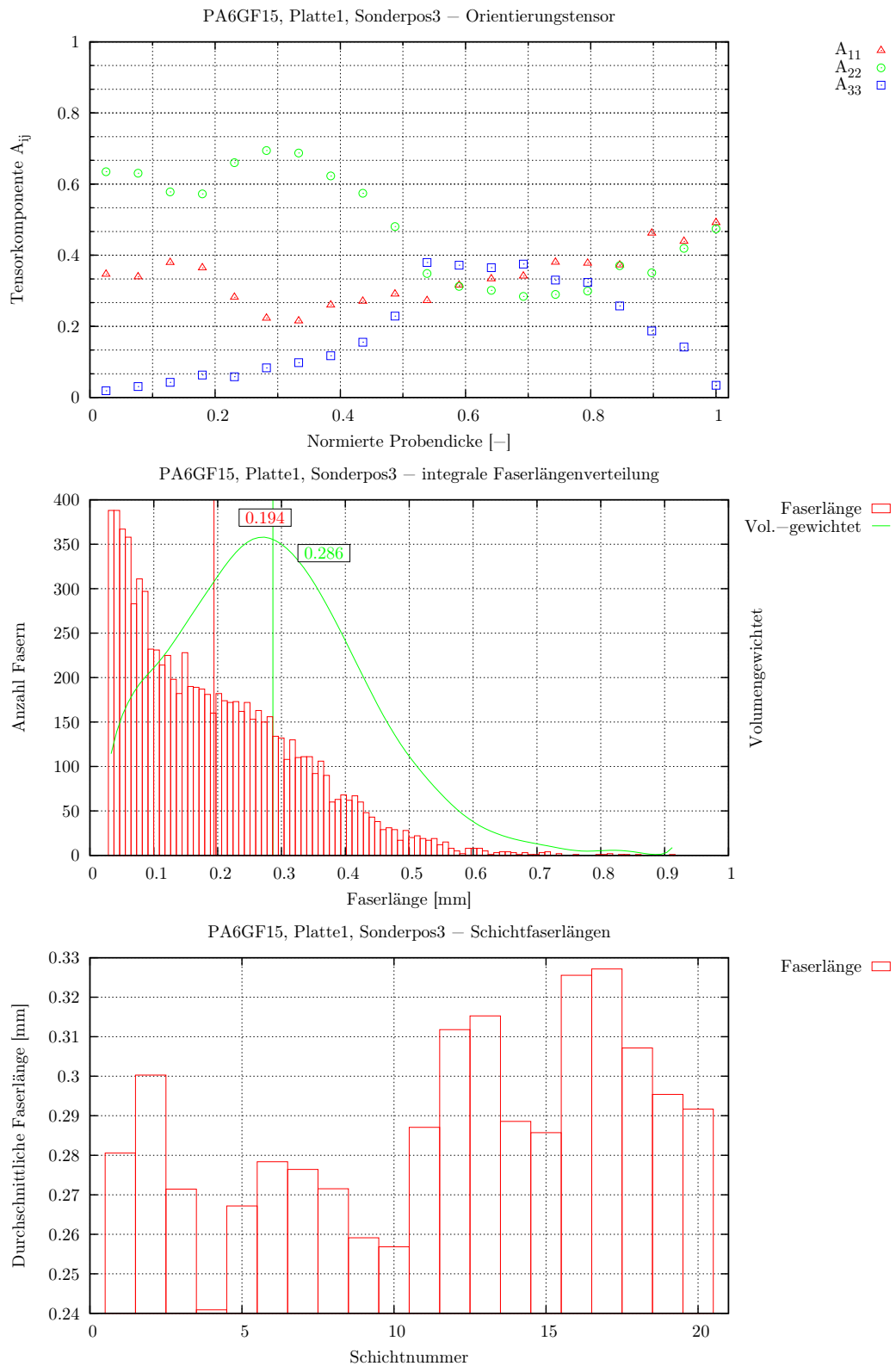


Abbildung A.12: PA6GF15, Platte, Sonderposition 3

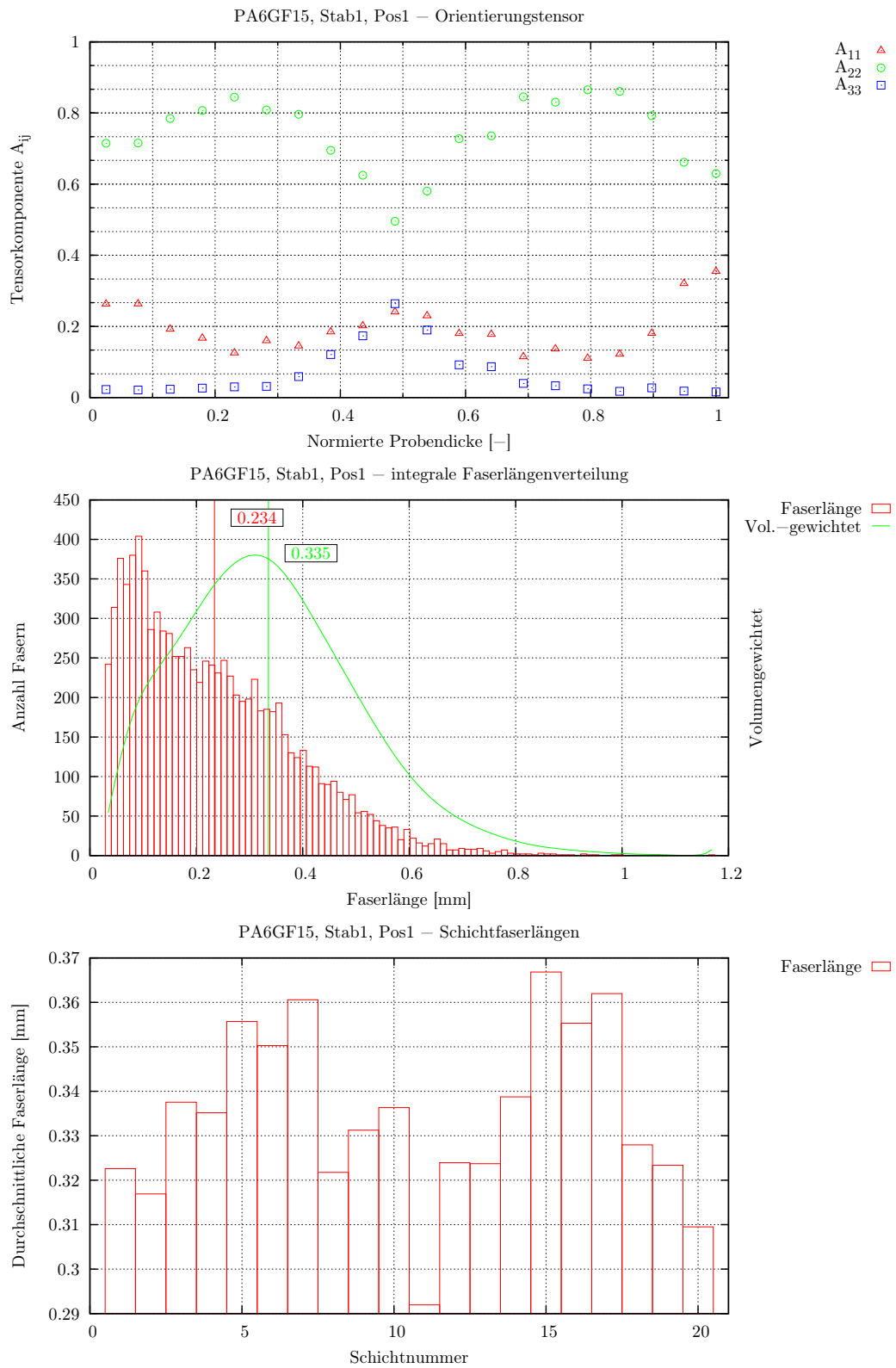


Abbildung A.13: PA6GF15, Stab, Position 1

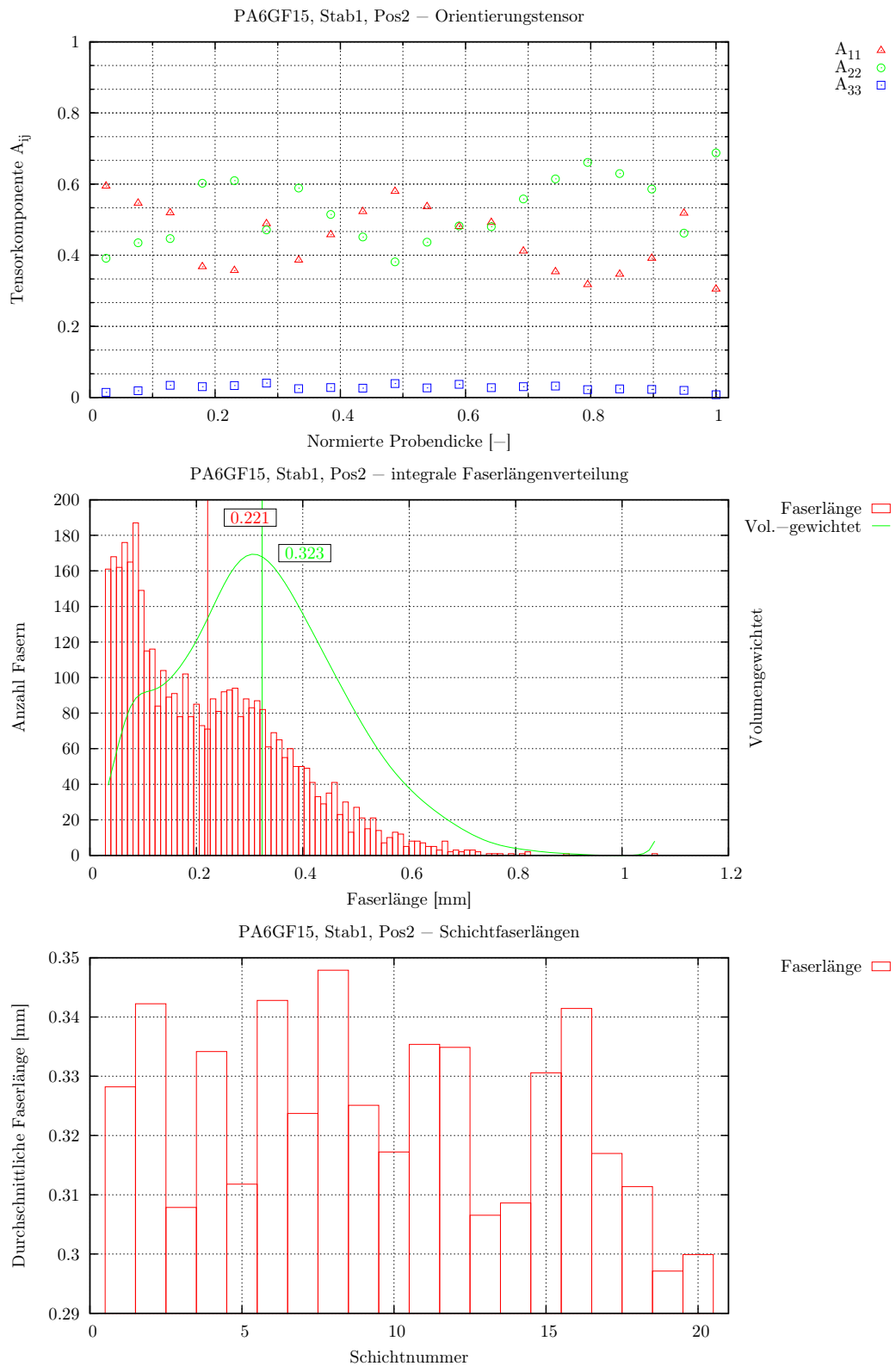


Abbildung A.14: PA6GF15, Stab, Position 2

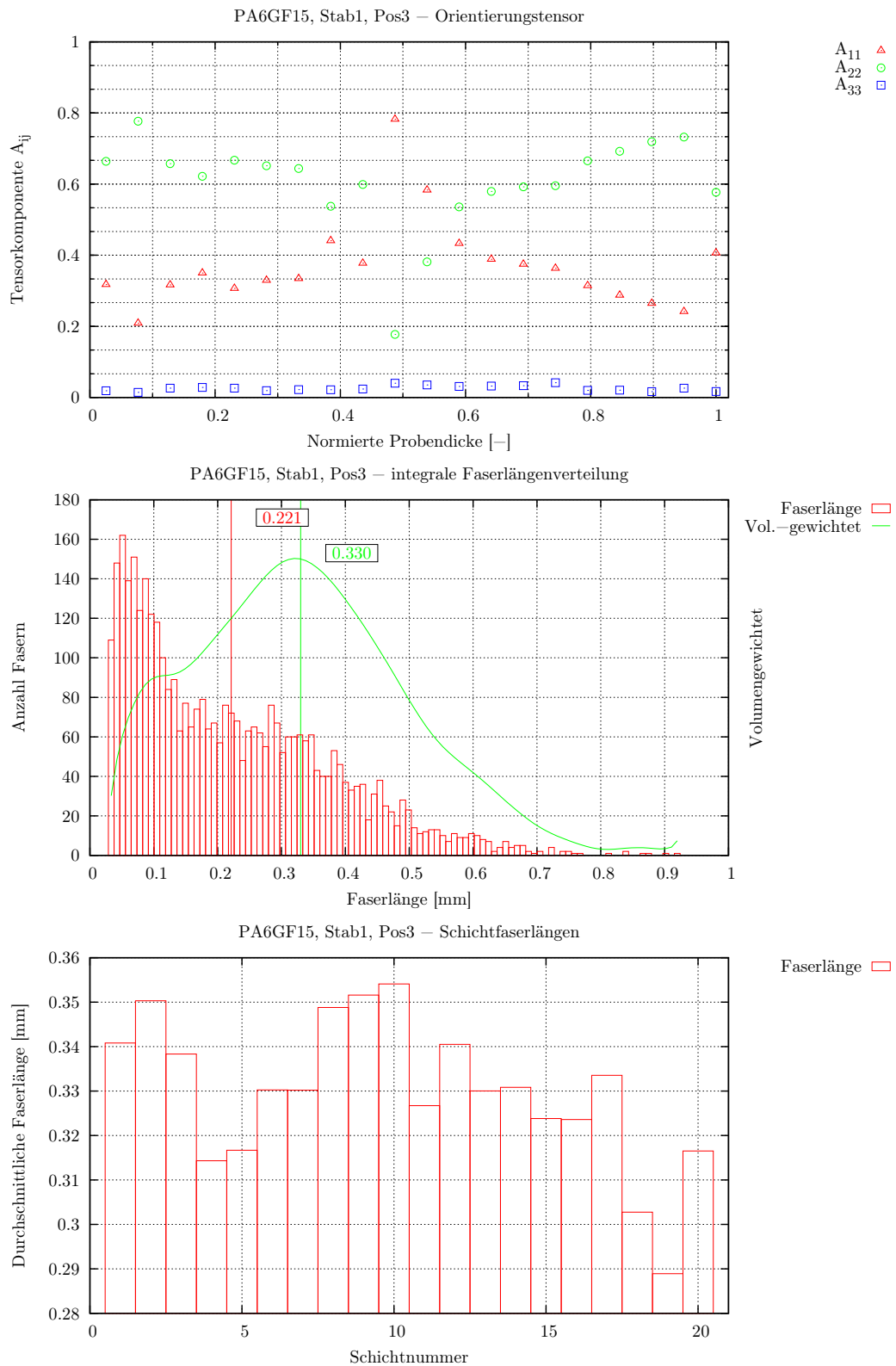


Abbildung A.15: PA6GF15, Stab, Position 3

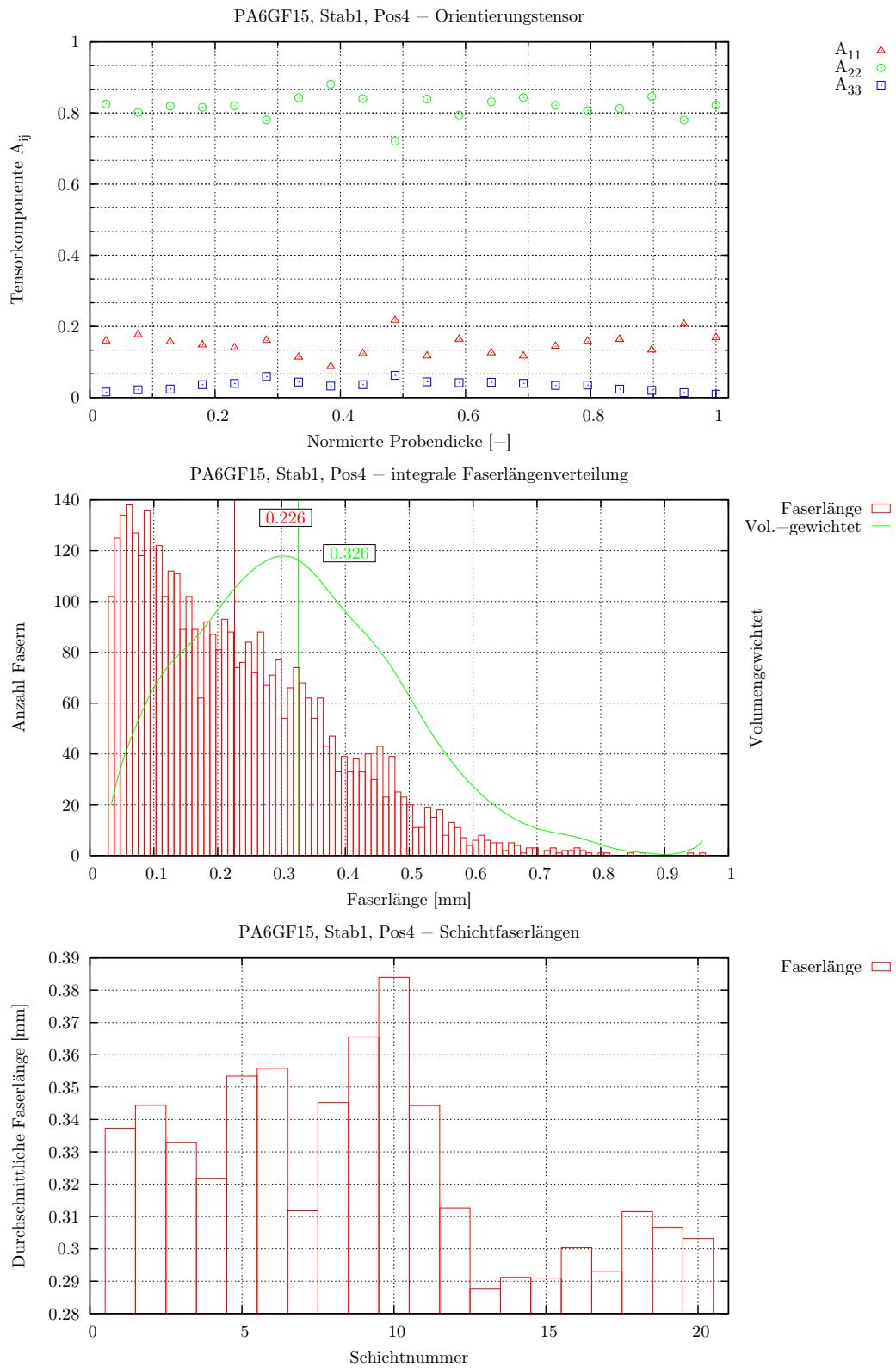


Abbildung A.16: PA6GF15, Stab, Position 4

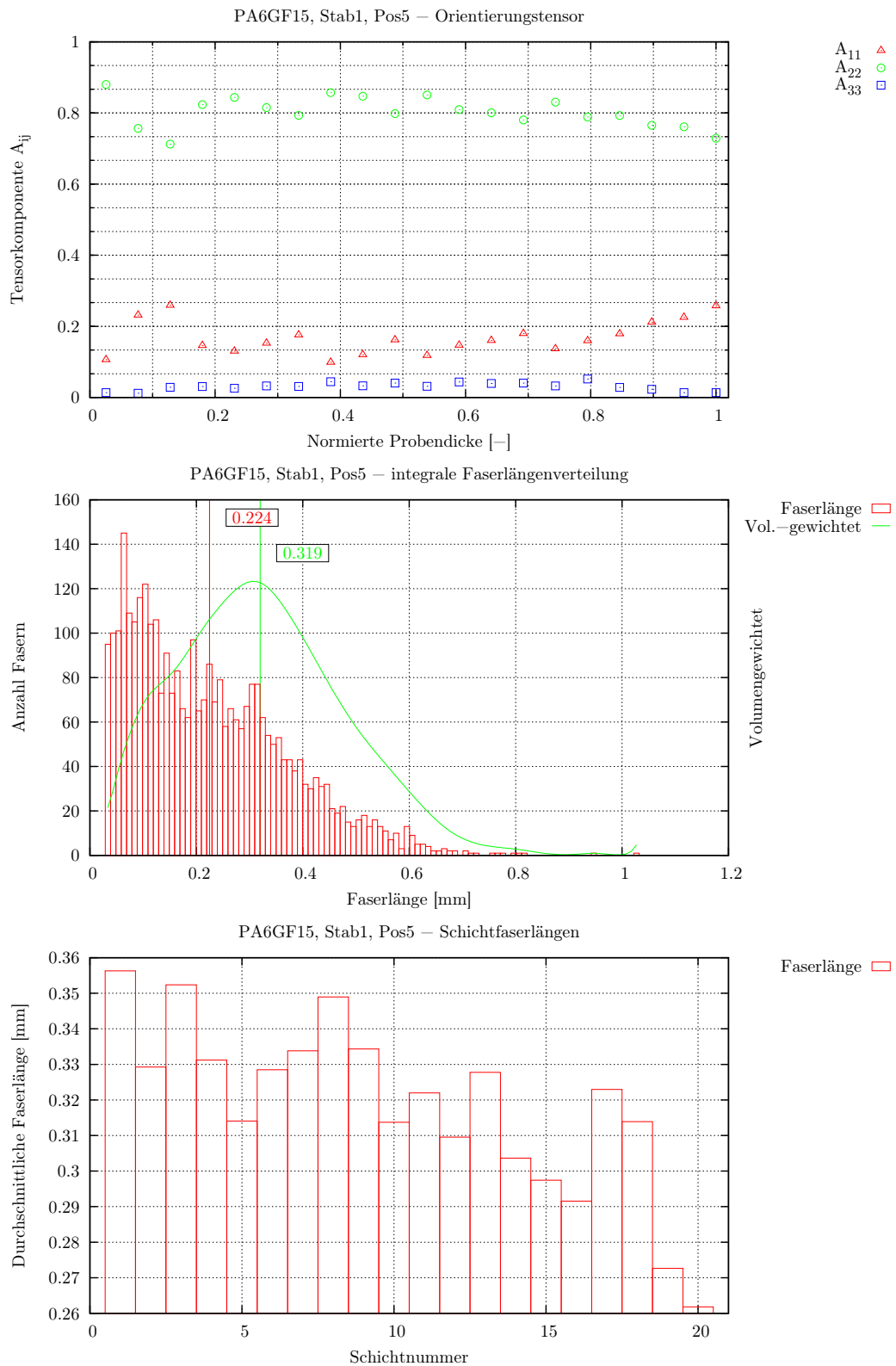


Abbildung A.17: PA6GF15, Stab, Position 5

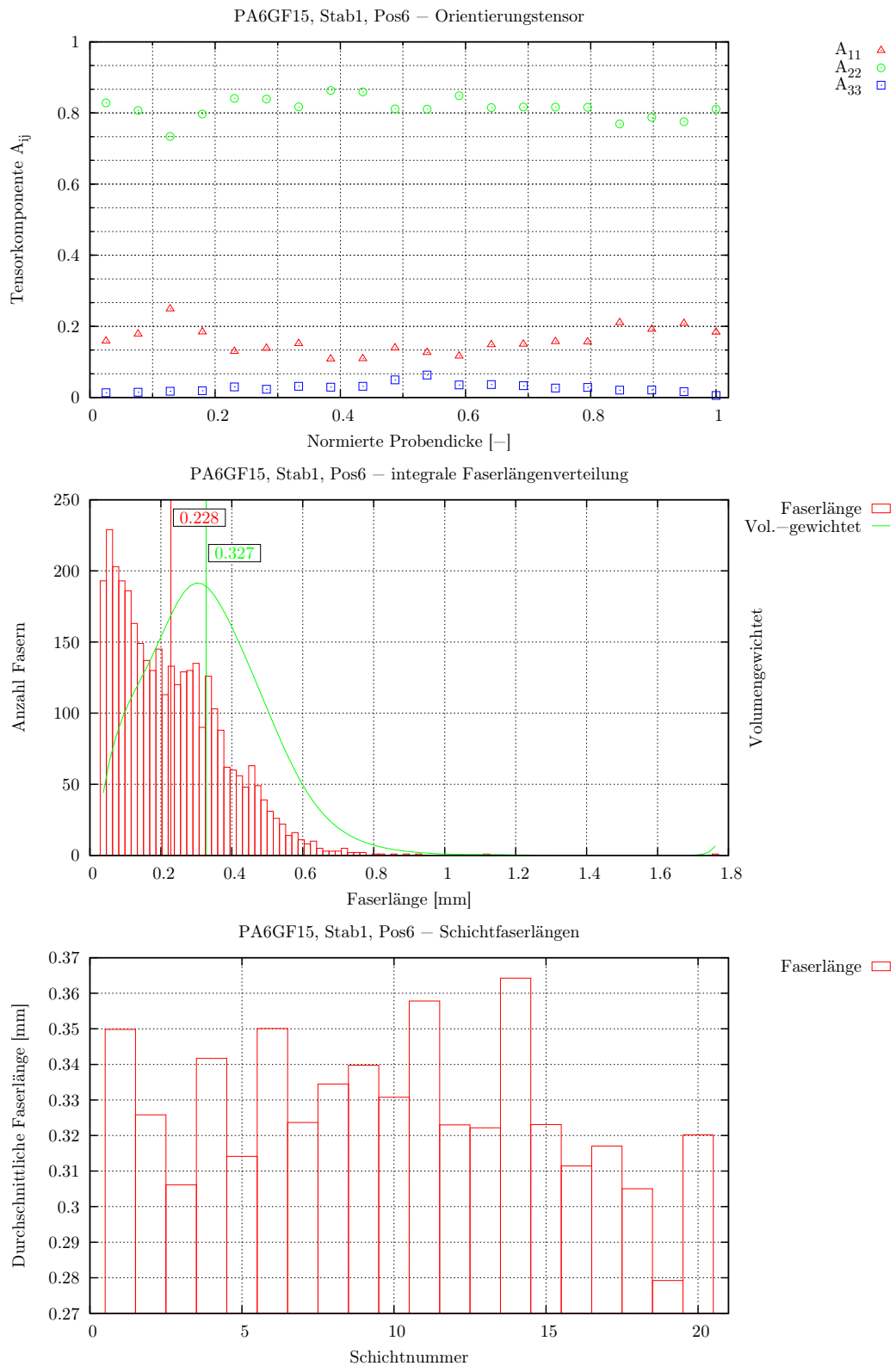


Abbildung A.18: PA6GF15, Stab, Position 6

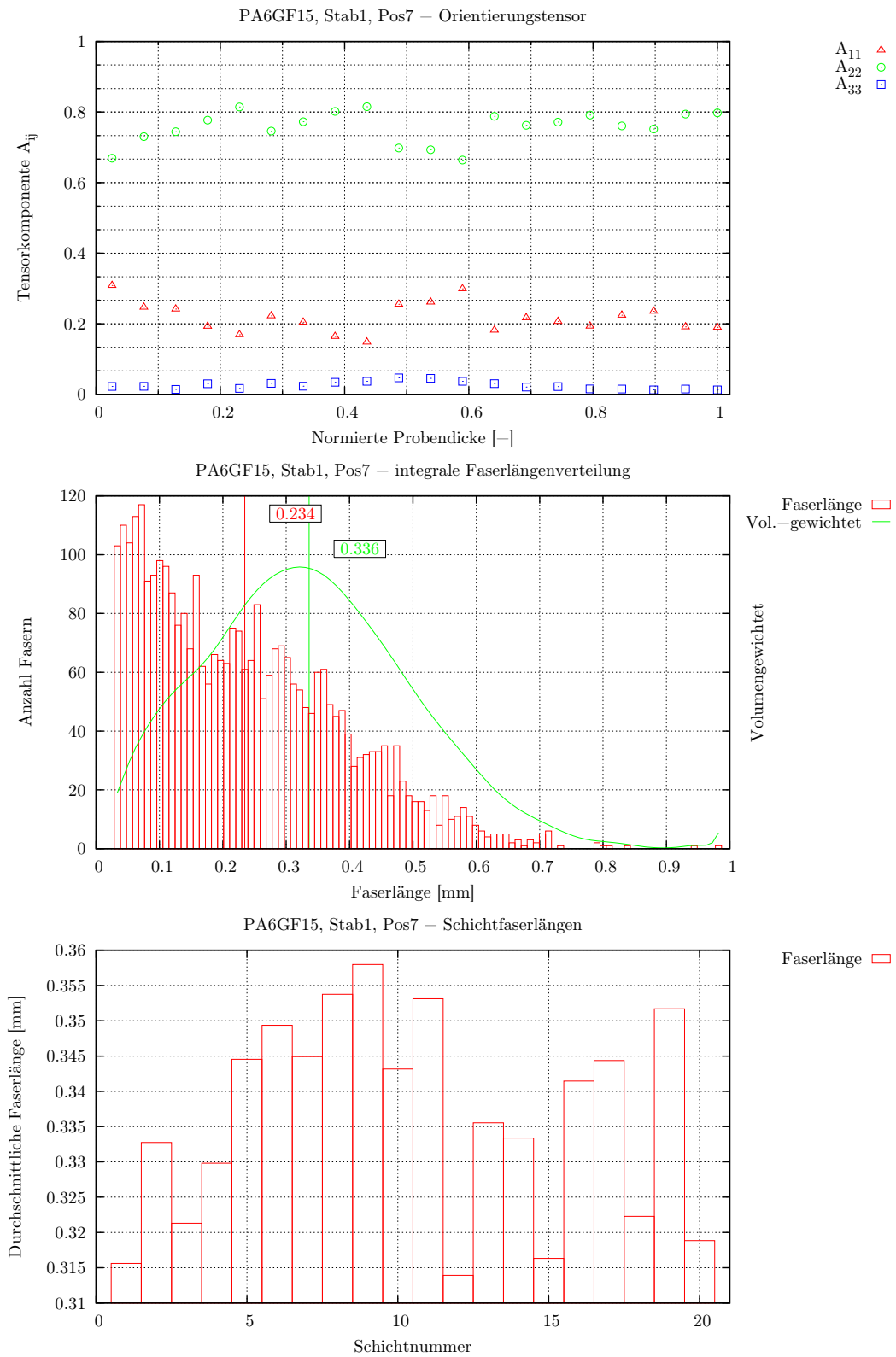


Abbildung A.19: PA6GF15, Stab, Position 7

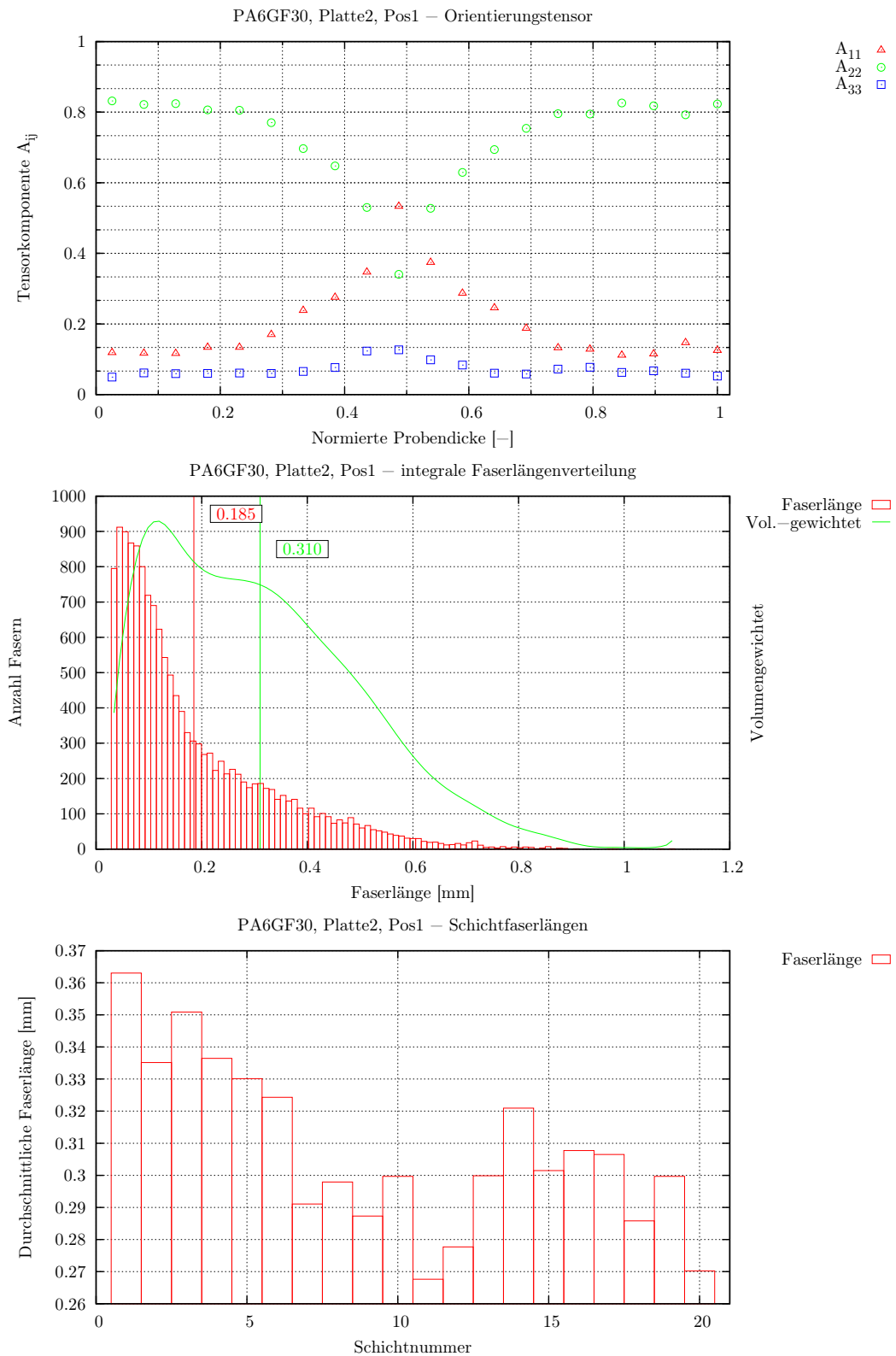


Abbildung A.20: PA6GF30, Platte, Position 1

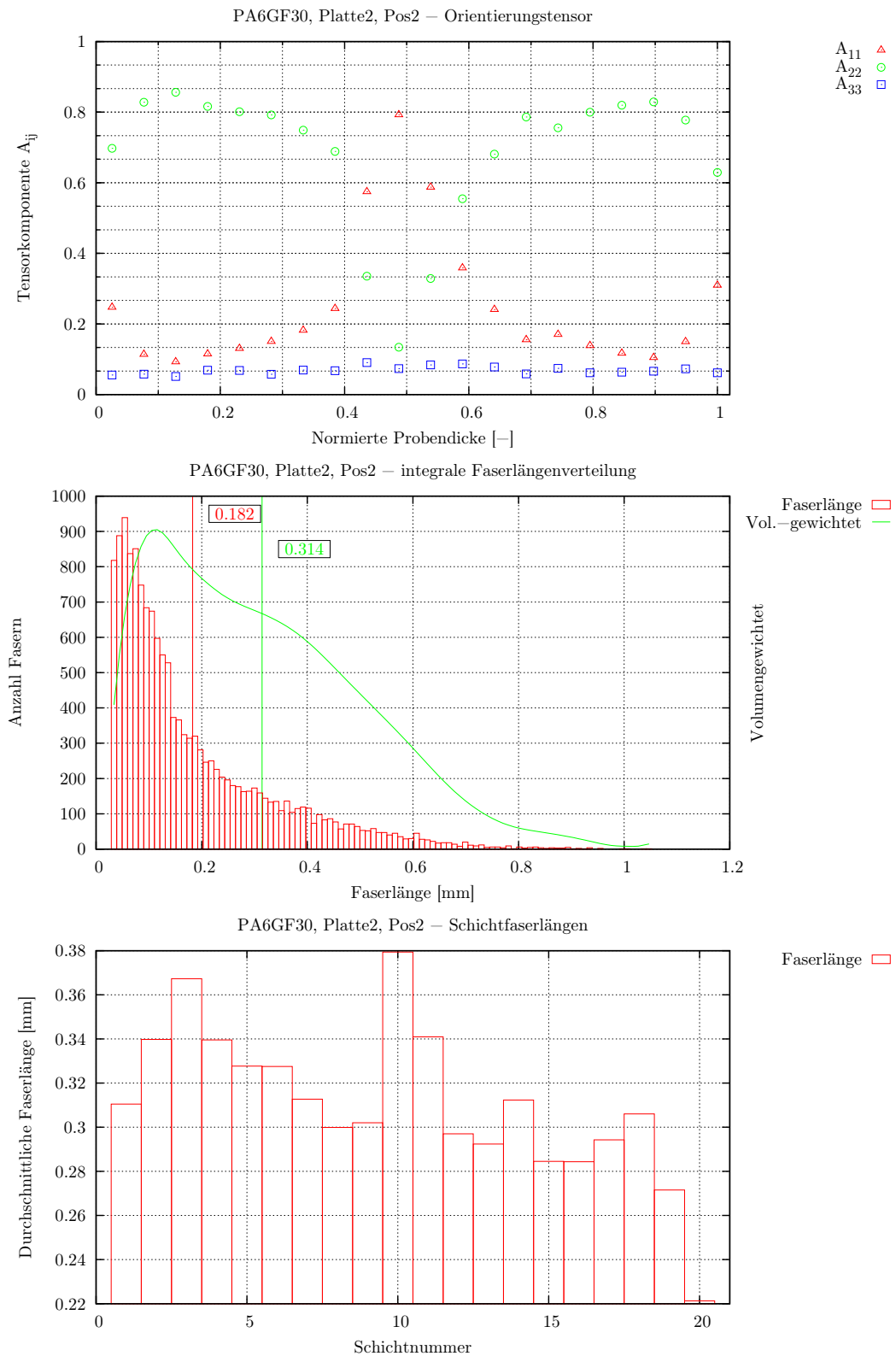


Abbildung A.21: PA6GF30, Platte, Position 2

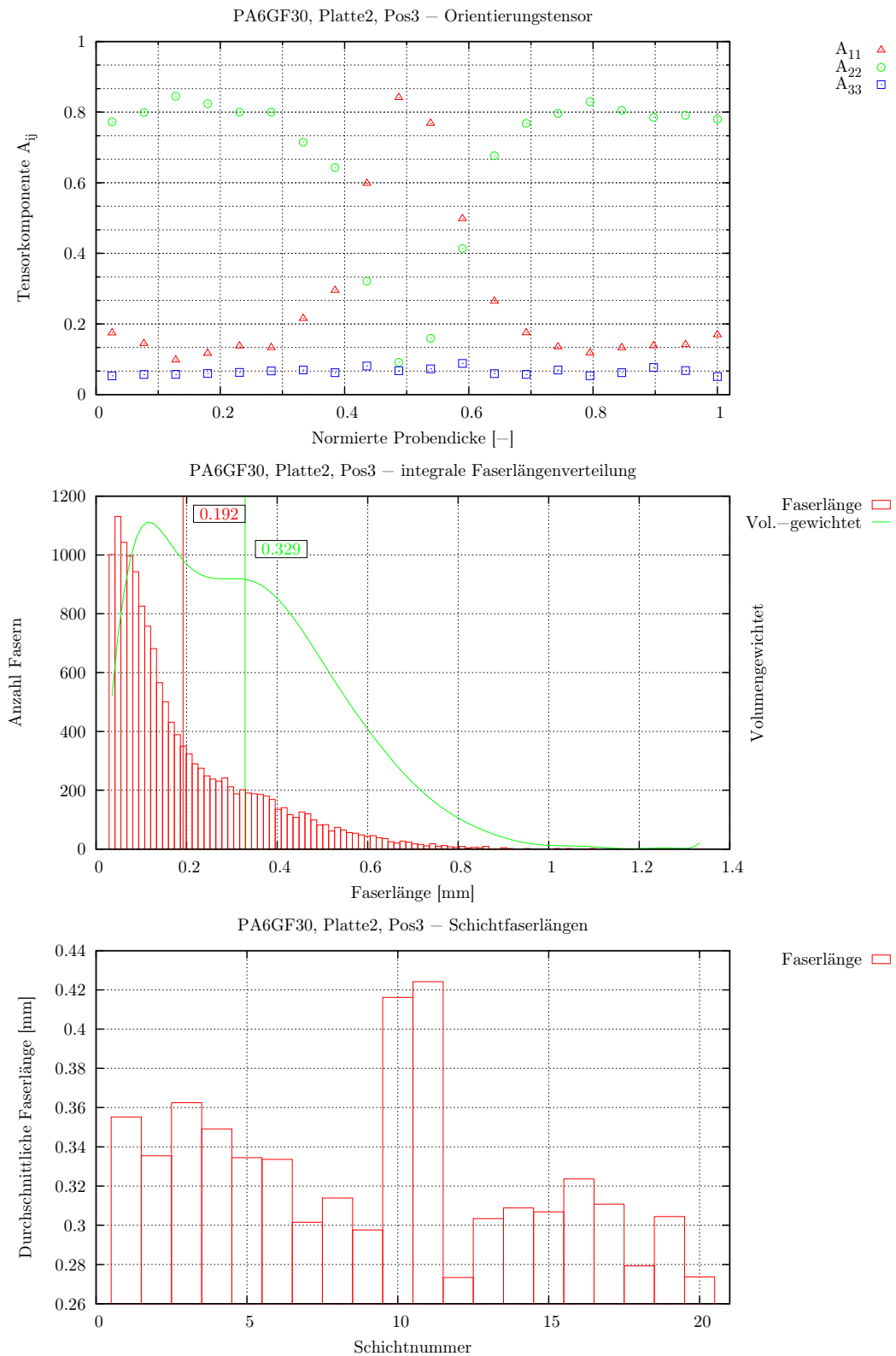


Abbildung A.22: PA6GF30, Platte, Position 3

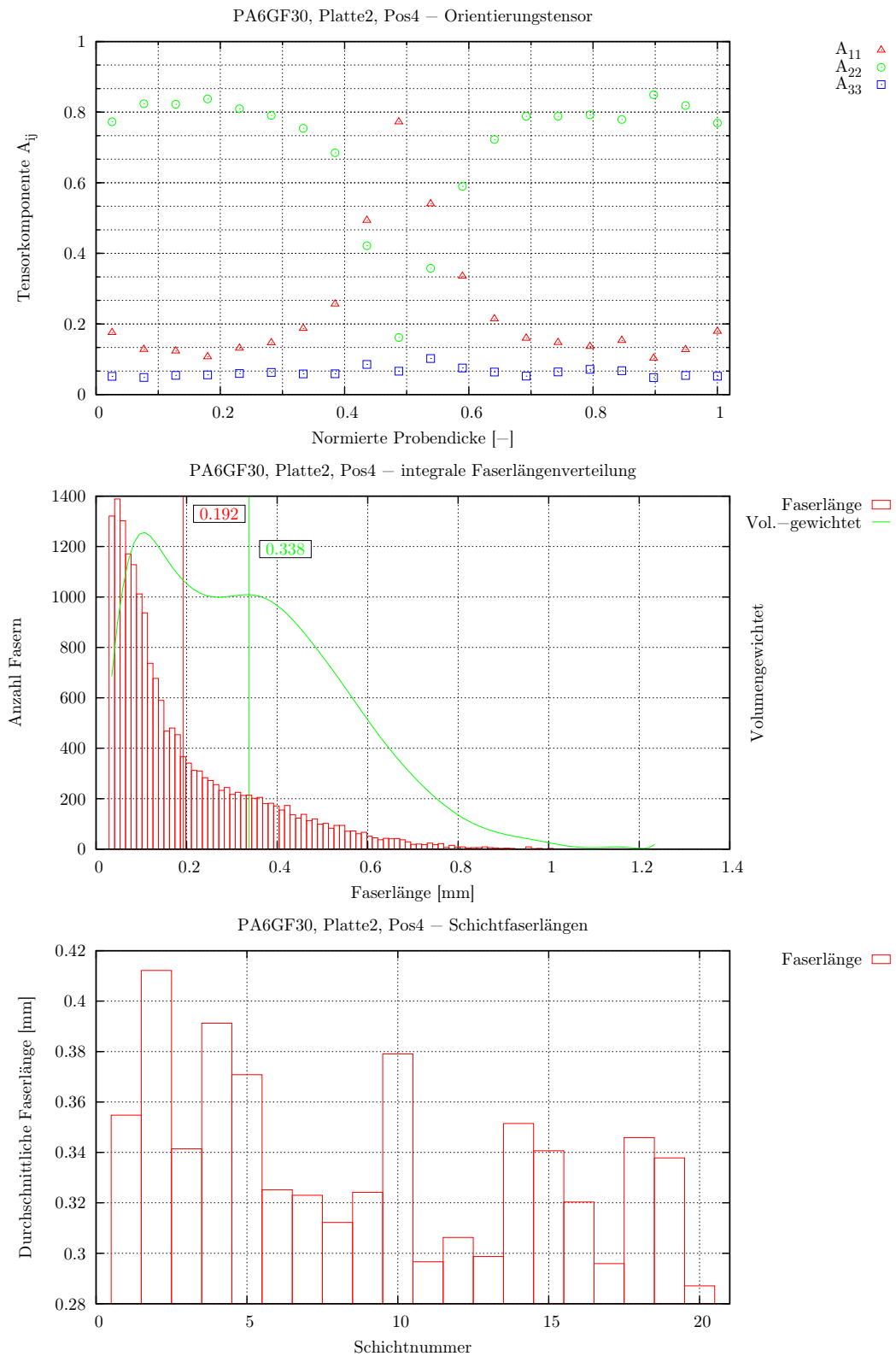


Abbildung A.23: PA6GF30, Platte, Position 4

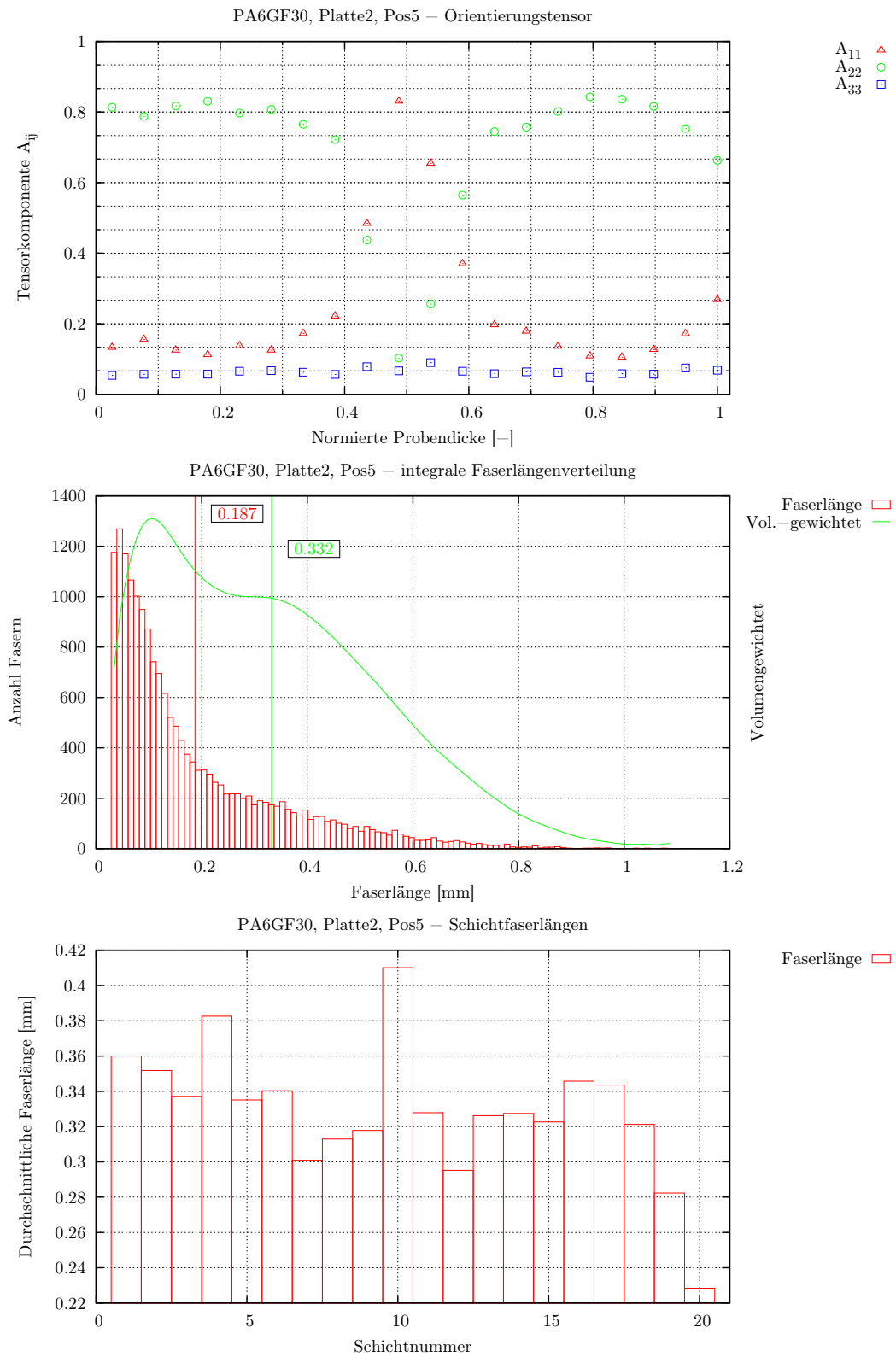


Abbildung A.24: PA6GF30, Platte, Position 5

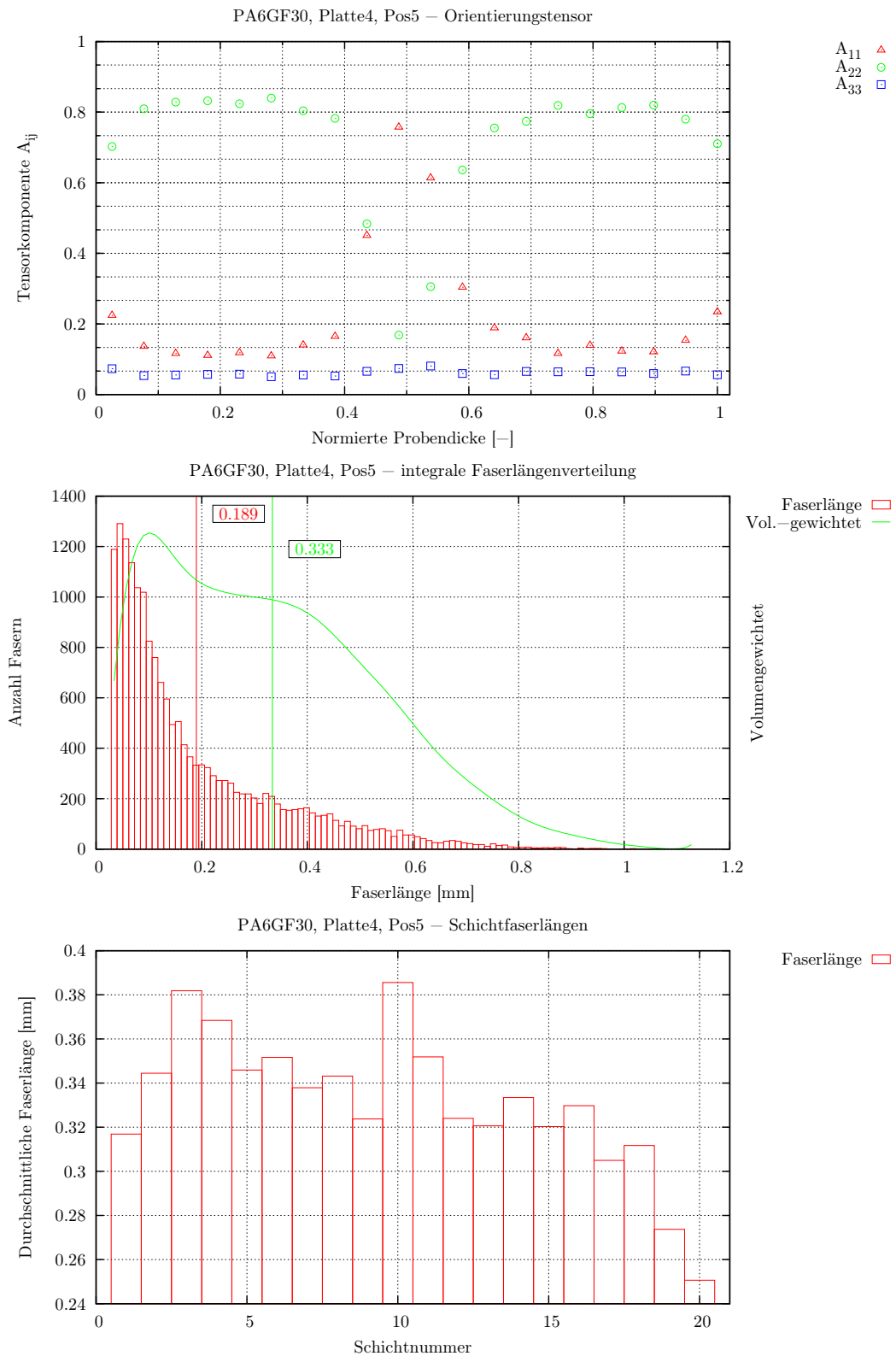


Abbildung A.25: PA6GF30, Platte 4, Position 5

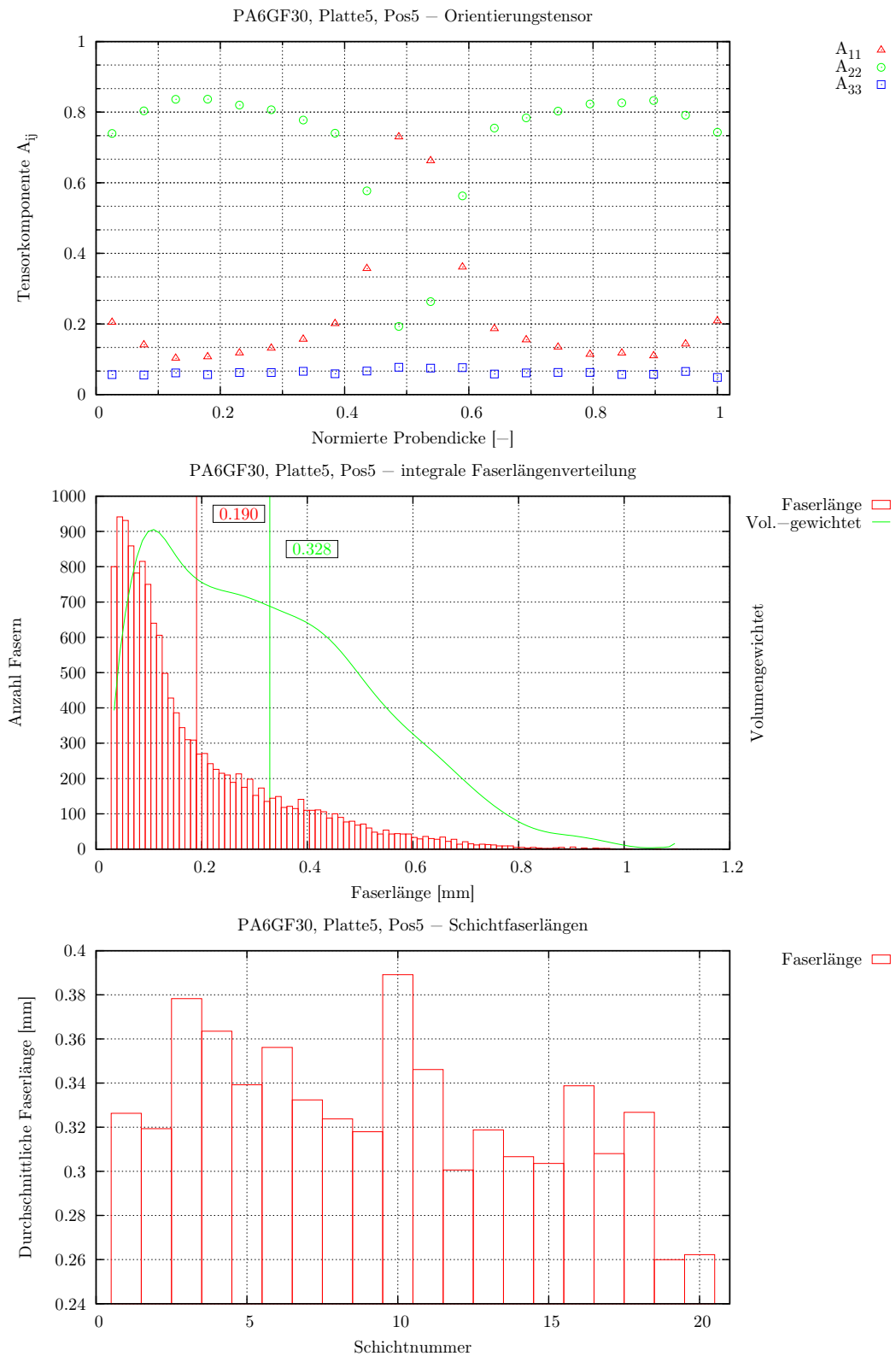


Abbildung A.26: PA6GF30, Platte 5, Position 5

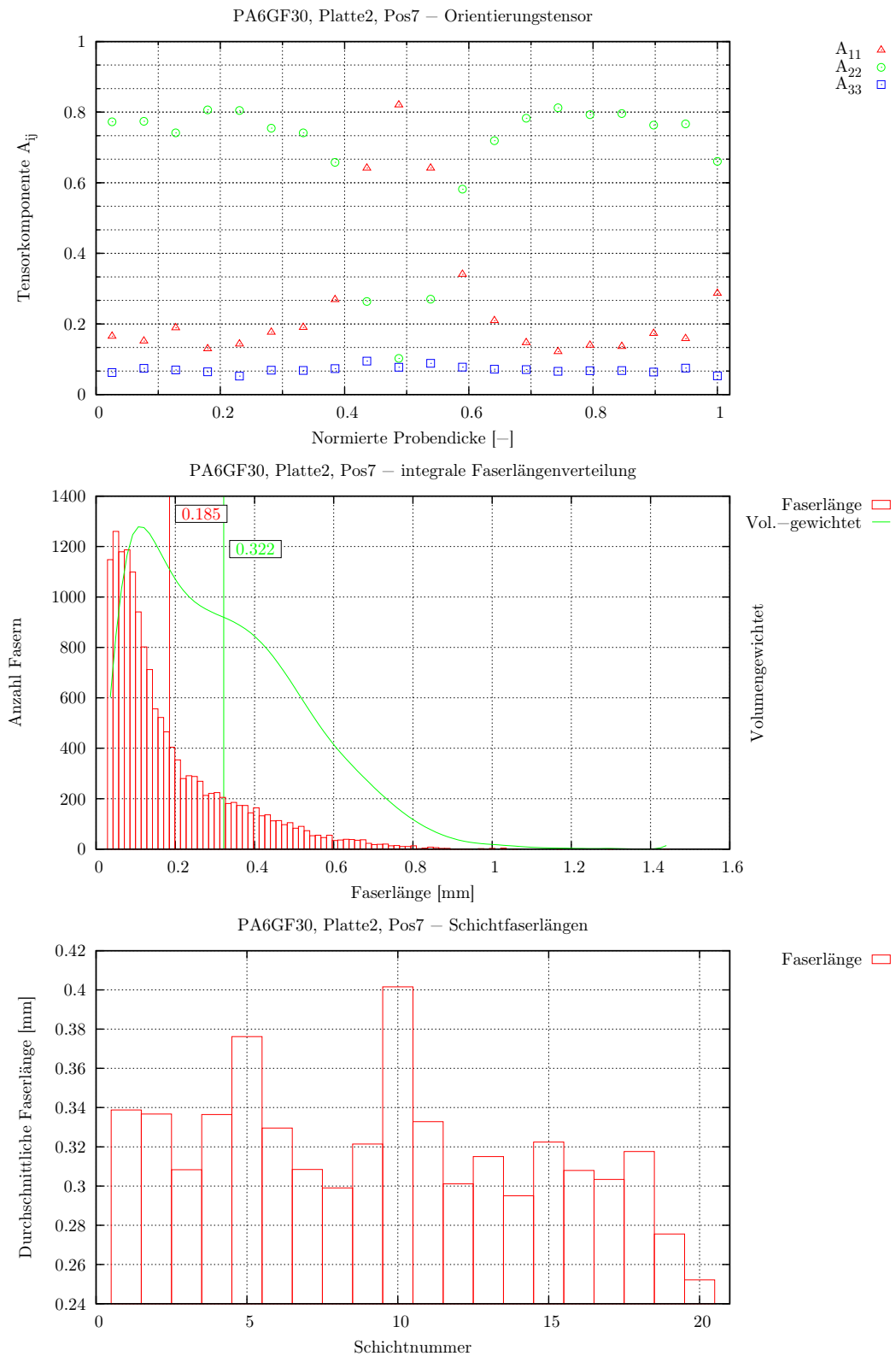


Abbildung A.27: PA6GF30, Platte, Position 7

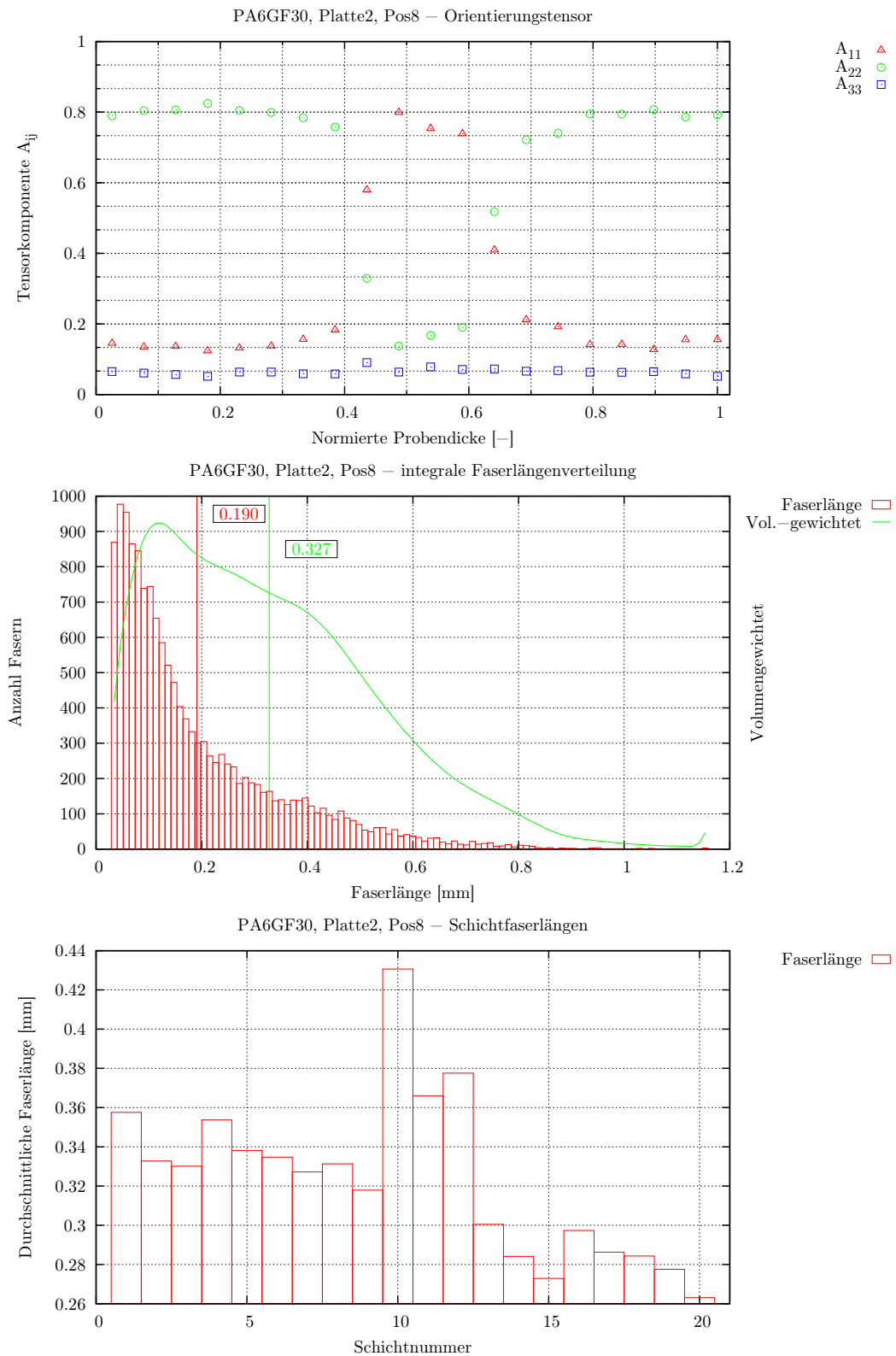


Abbildung A.28: PA6GF30, Platte, Position 8

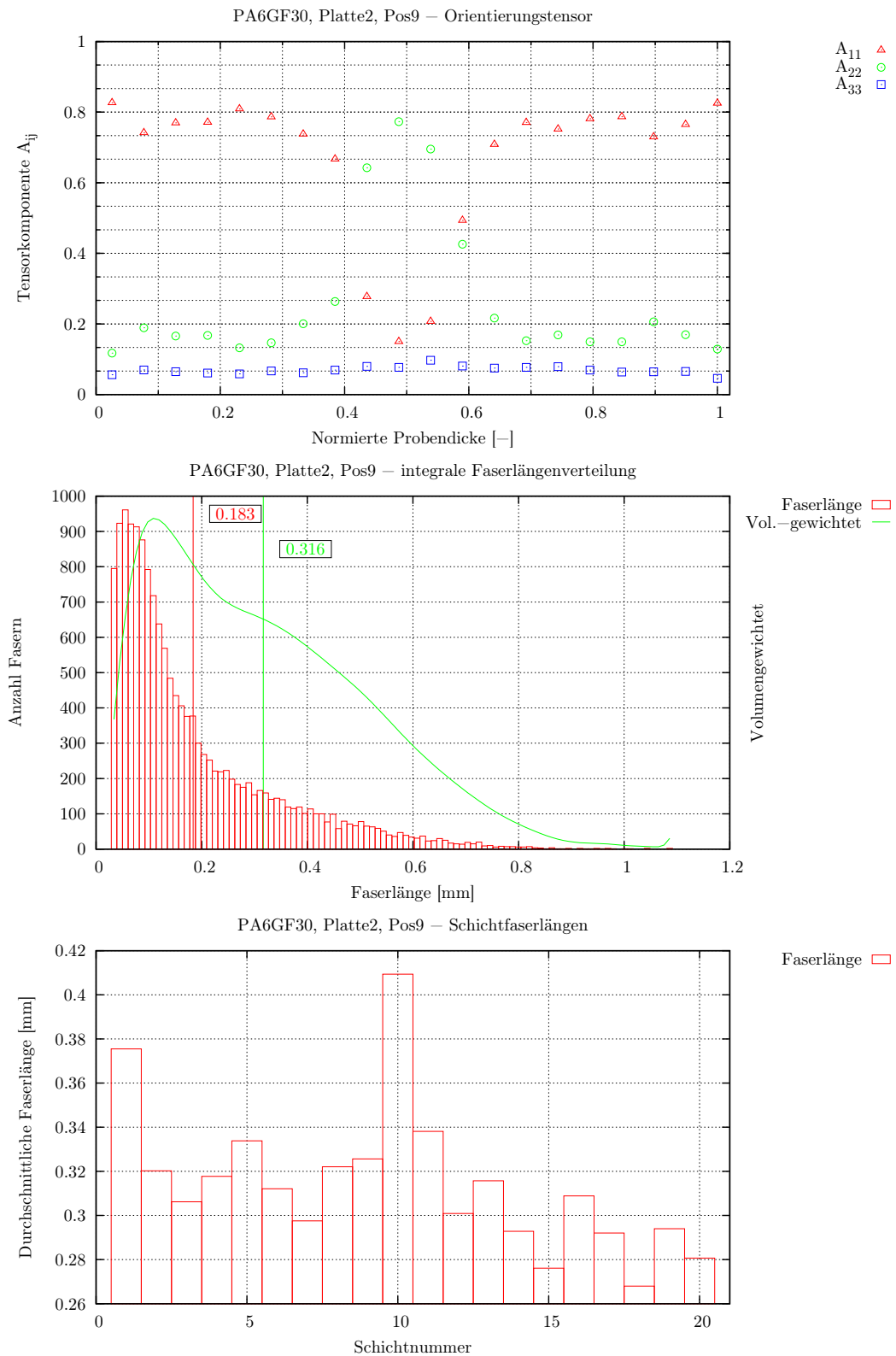


Abbildung A.29: PA6GF30, Platte, Position 9

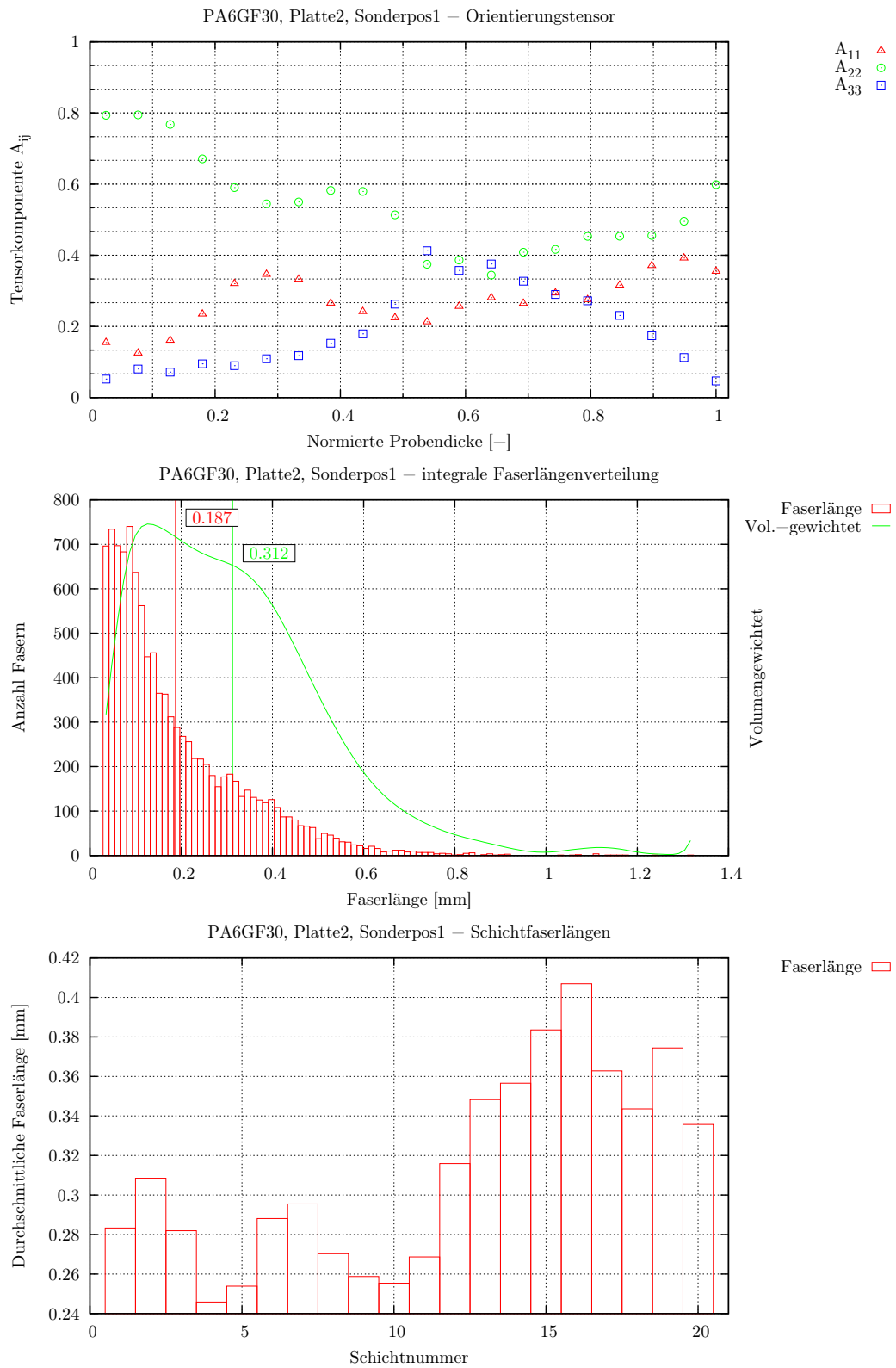


Abbildung A.30: PA6GF30, Platte, Sonderposition 1

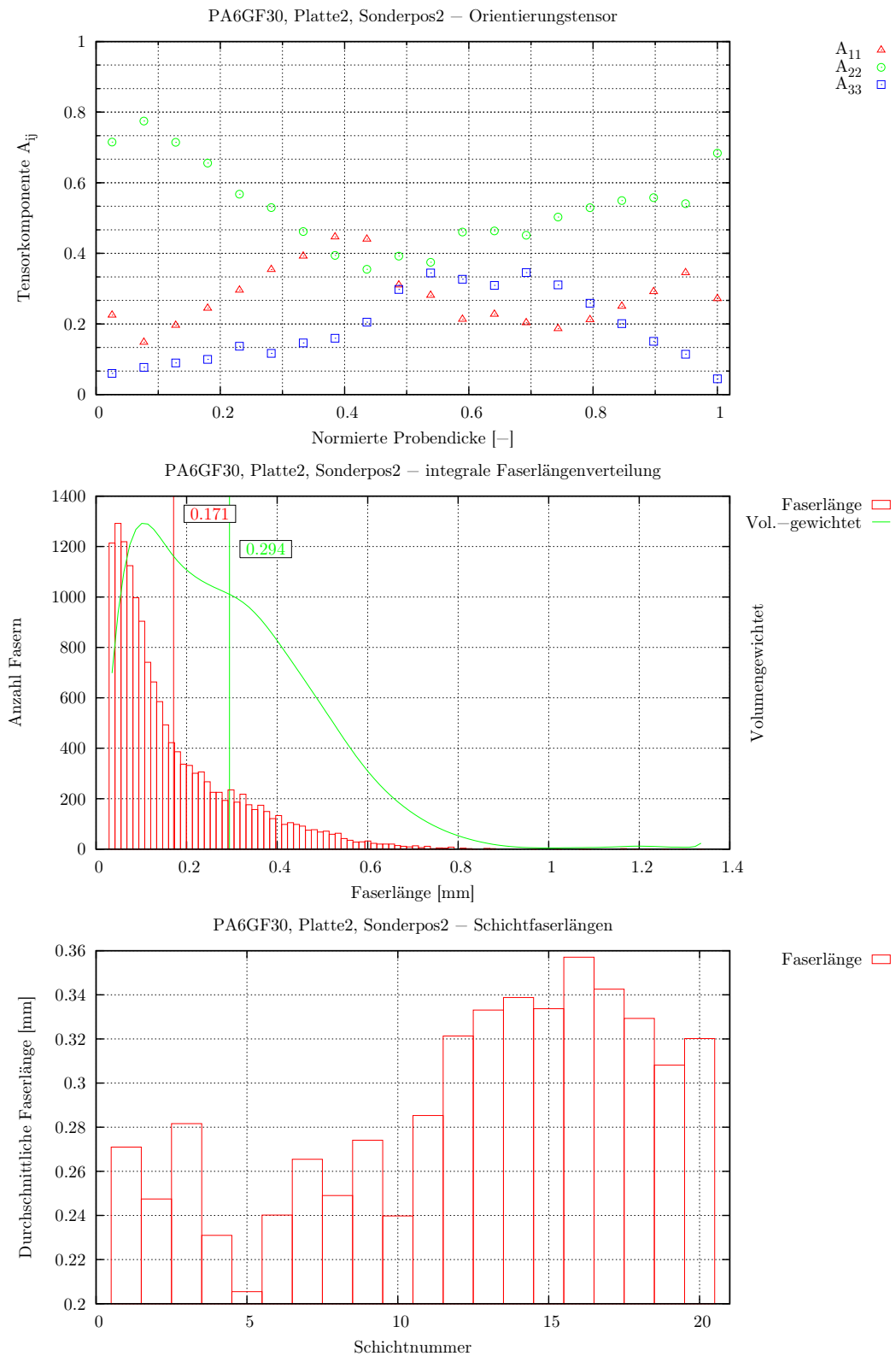


Abbildung A.31: PA6GF30, Platte, Sonderposition 2

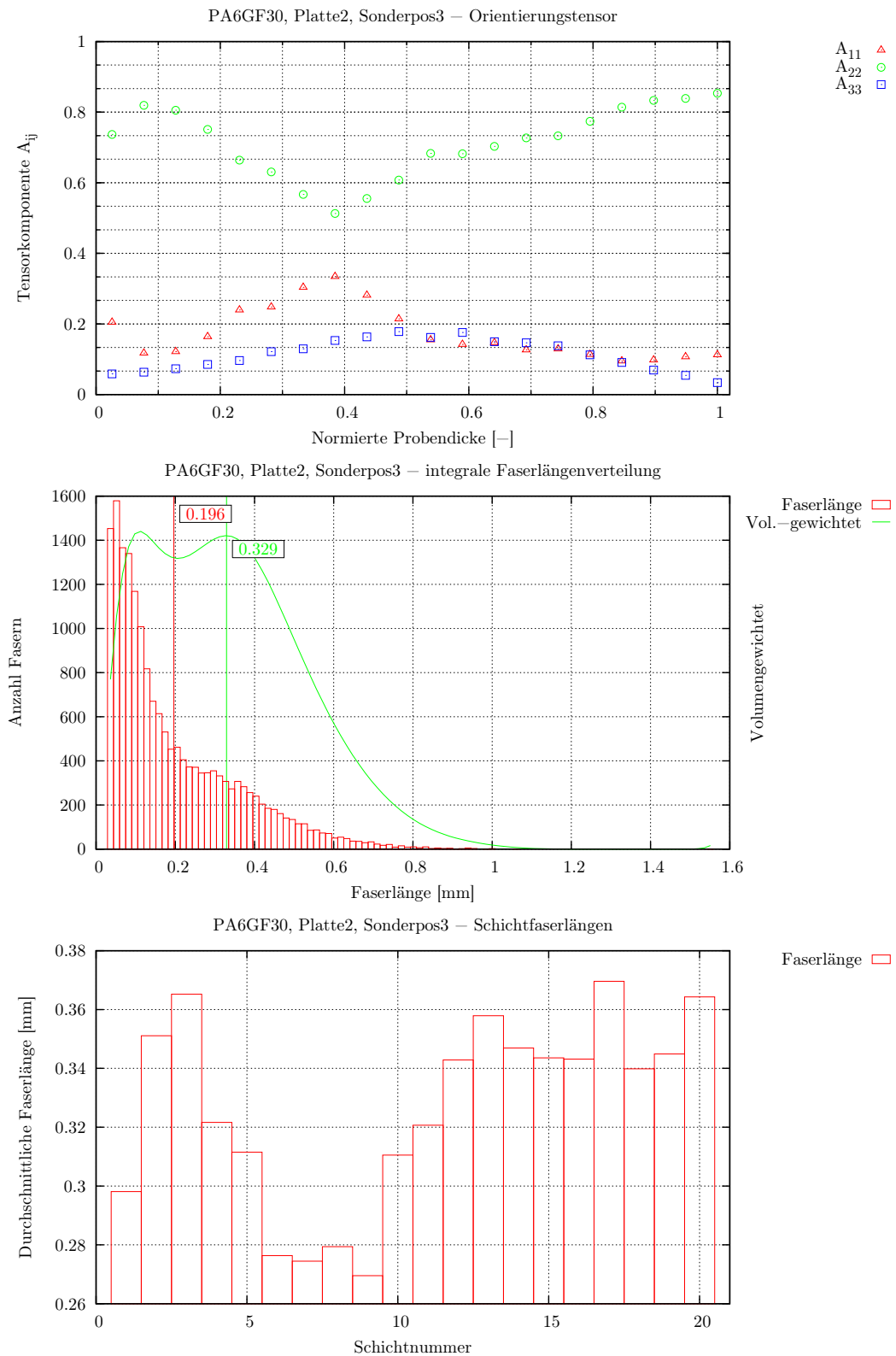


Abbildung A.32: PA6GF30, Platte, Sonderposition 3

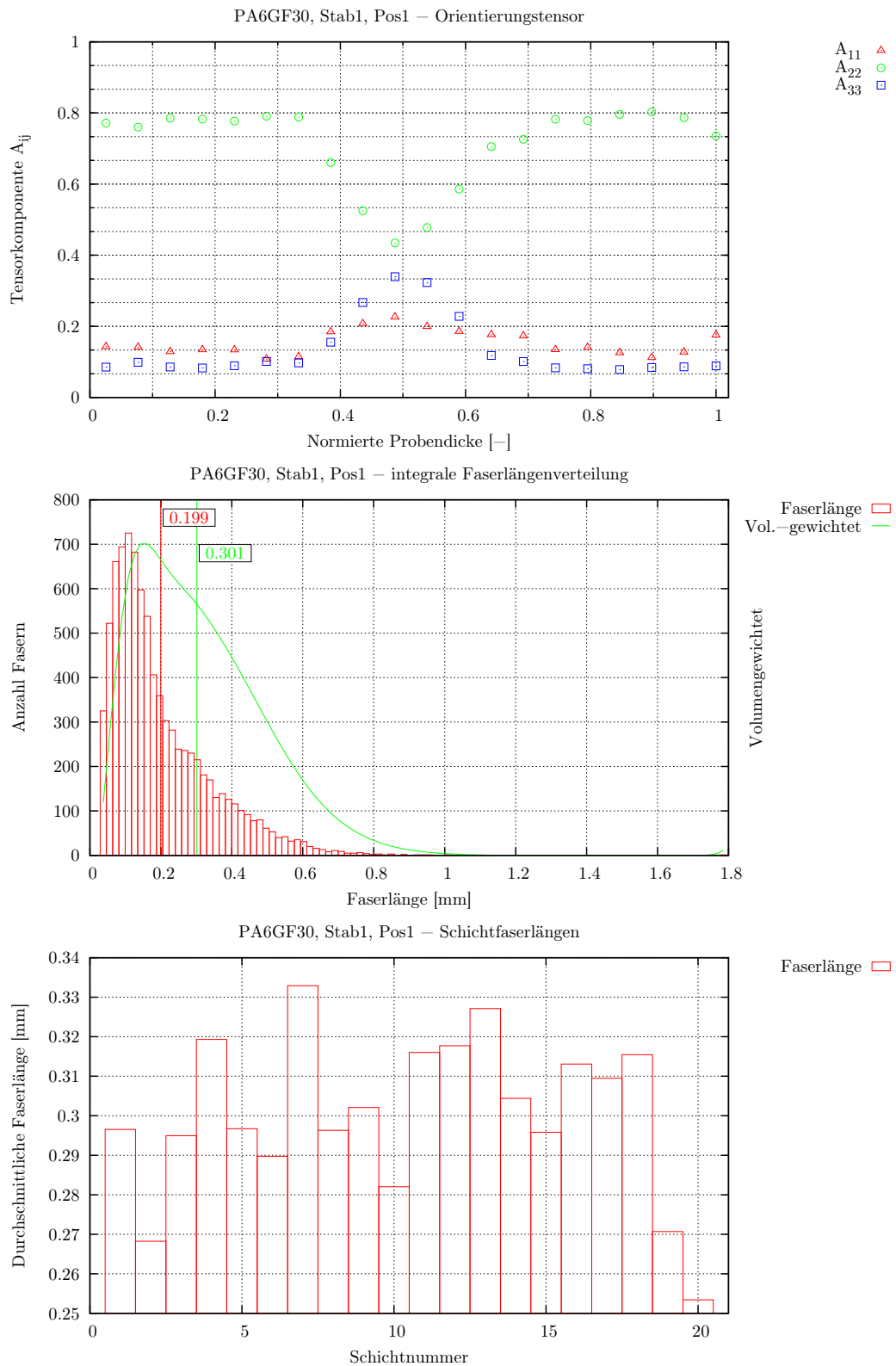


Abbildung A.33: PA6GF30, Stab, Position 1

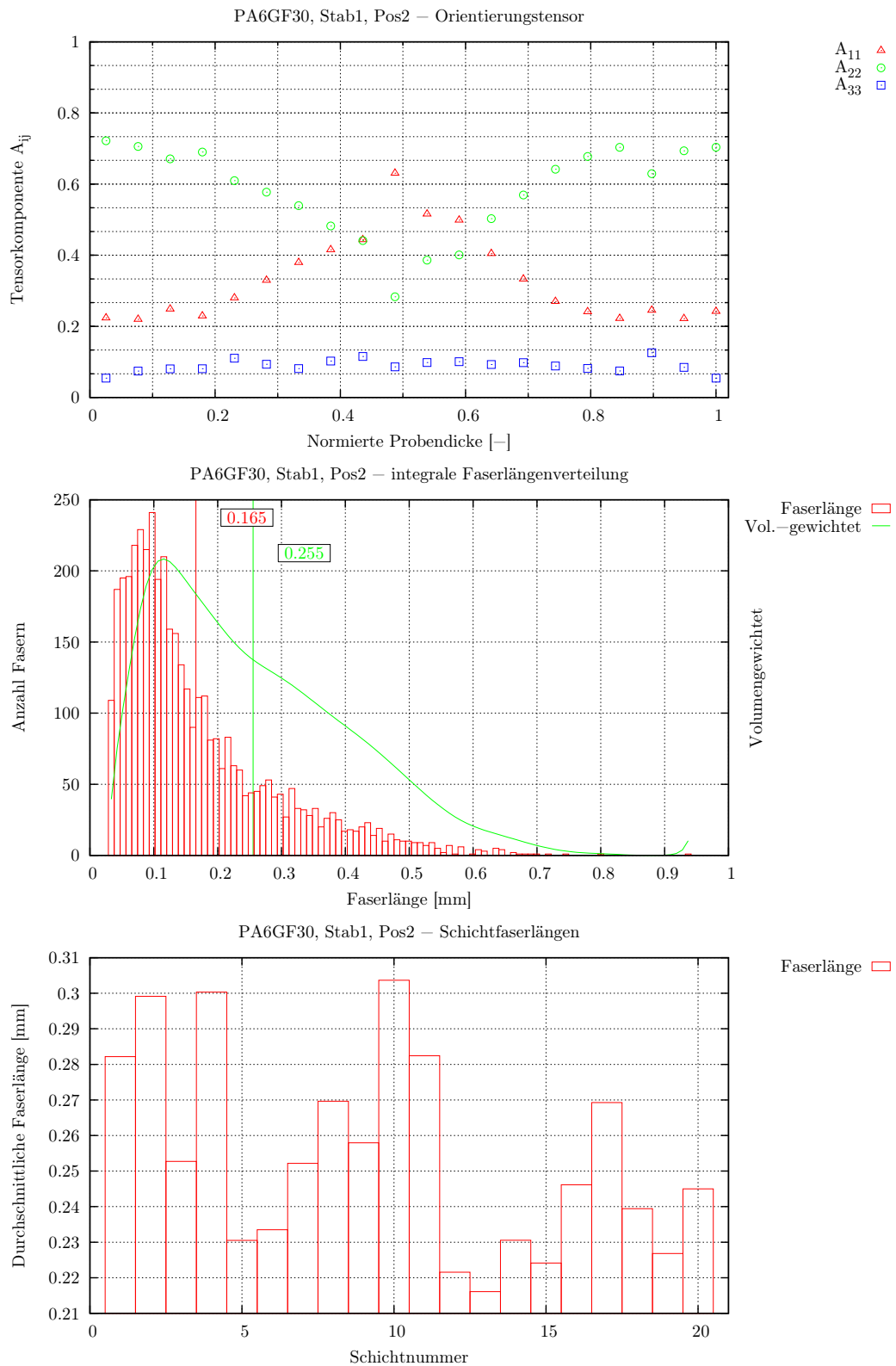


Abbildung A.34: PA6GF30, Stab, Position 2

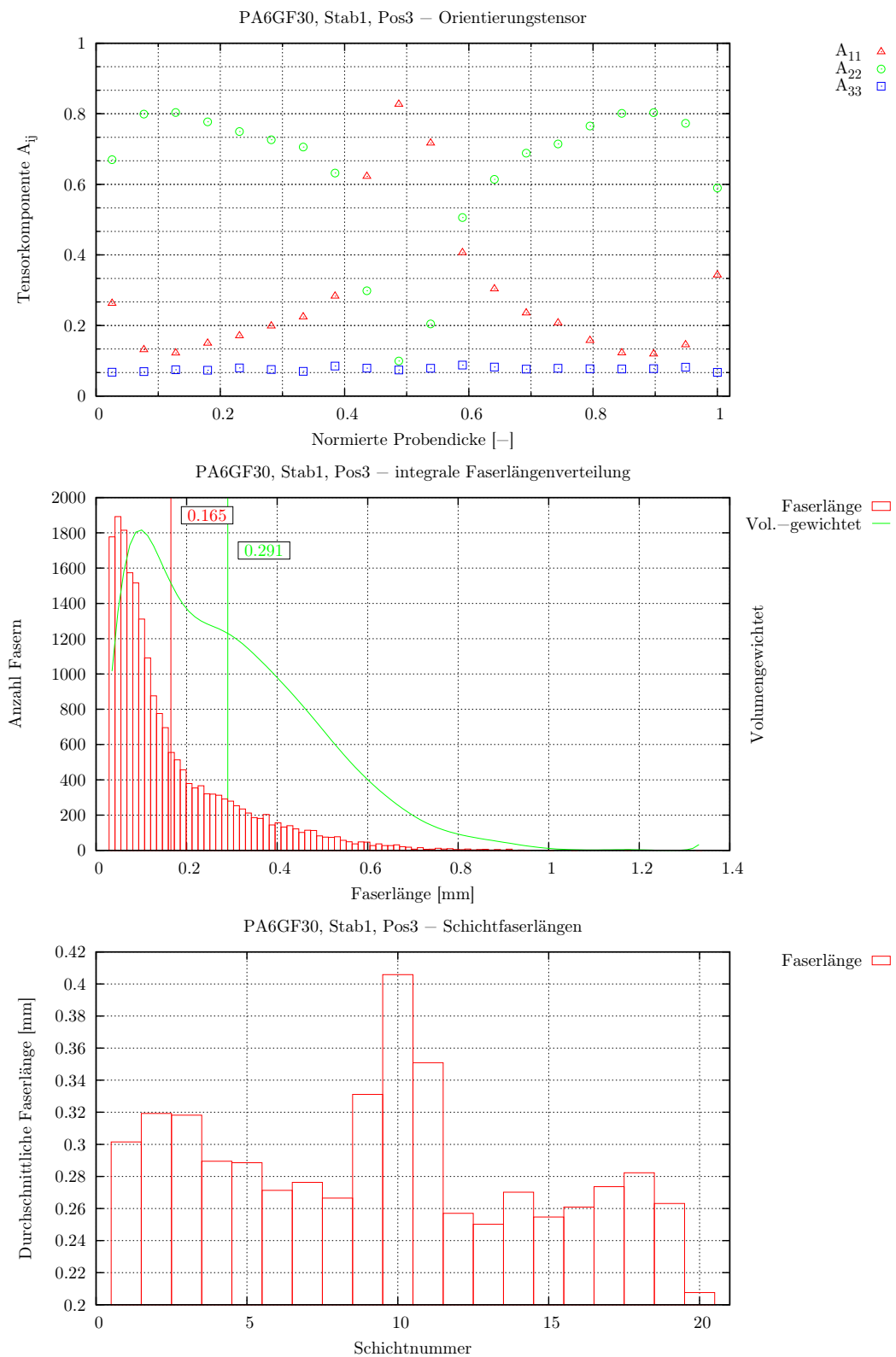


Abbildung A.35: PA6GF30, Stab, Position 3

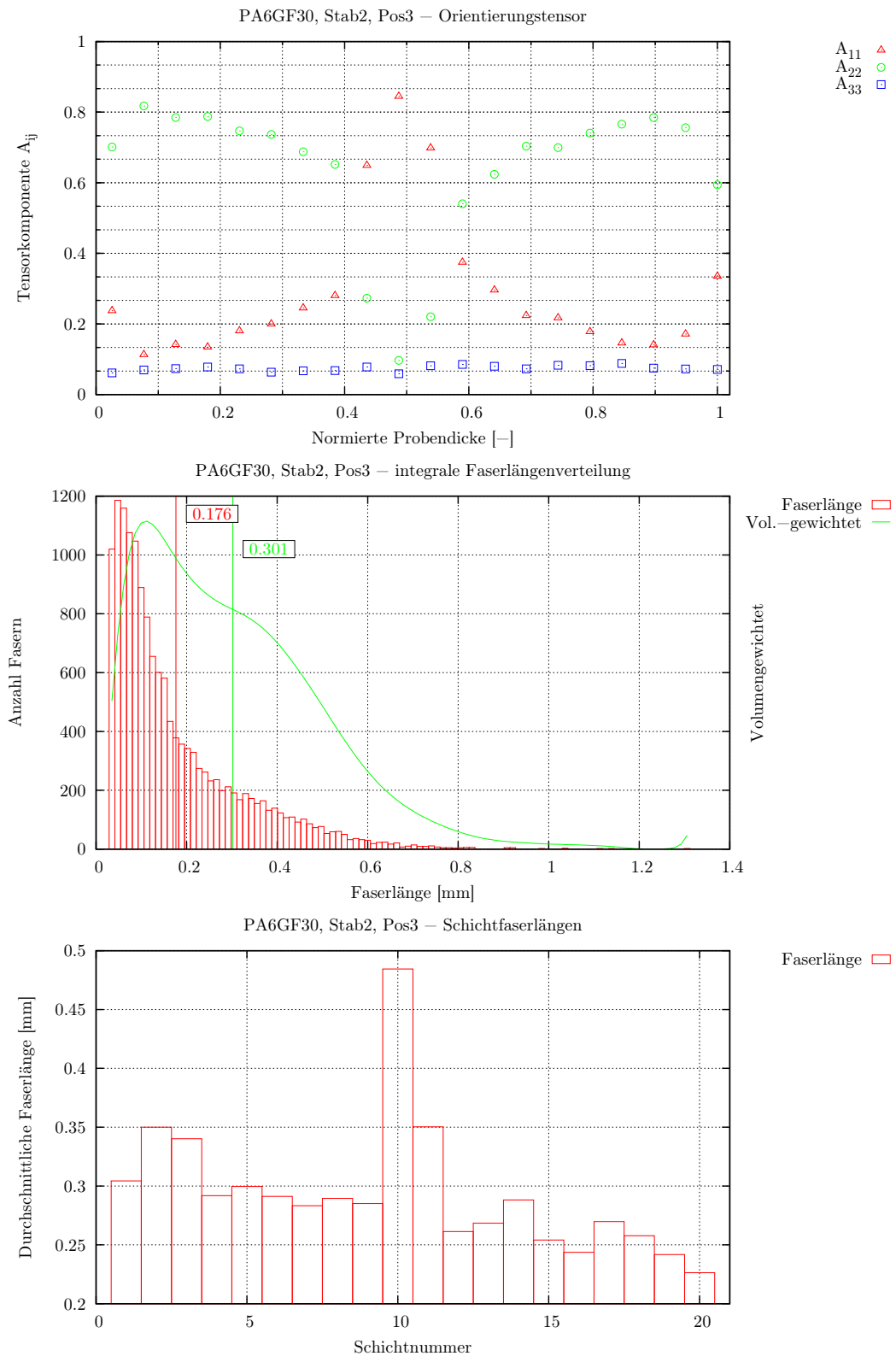


Abbildung A.36: PA6GF30, Stab 2, Position 3

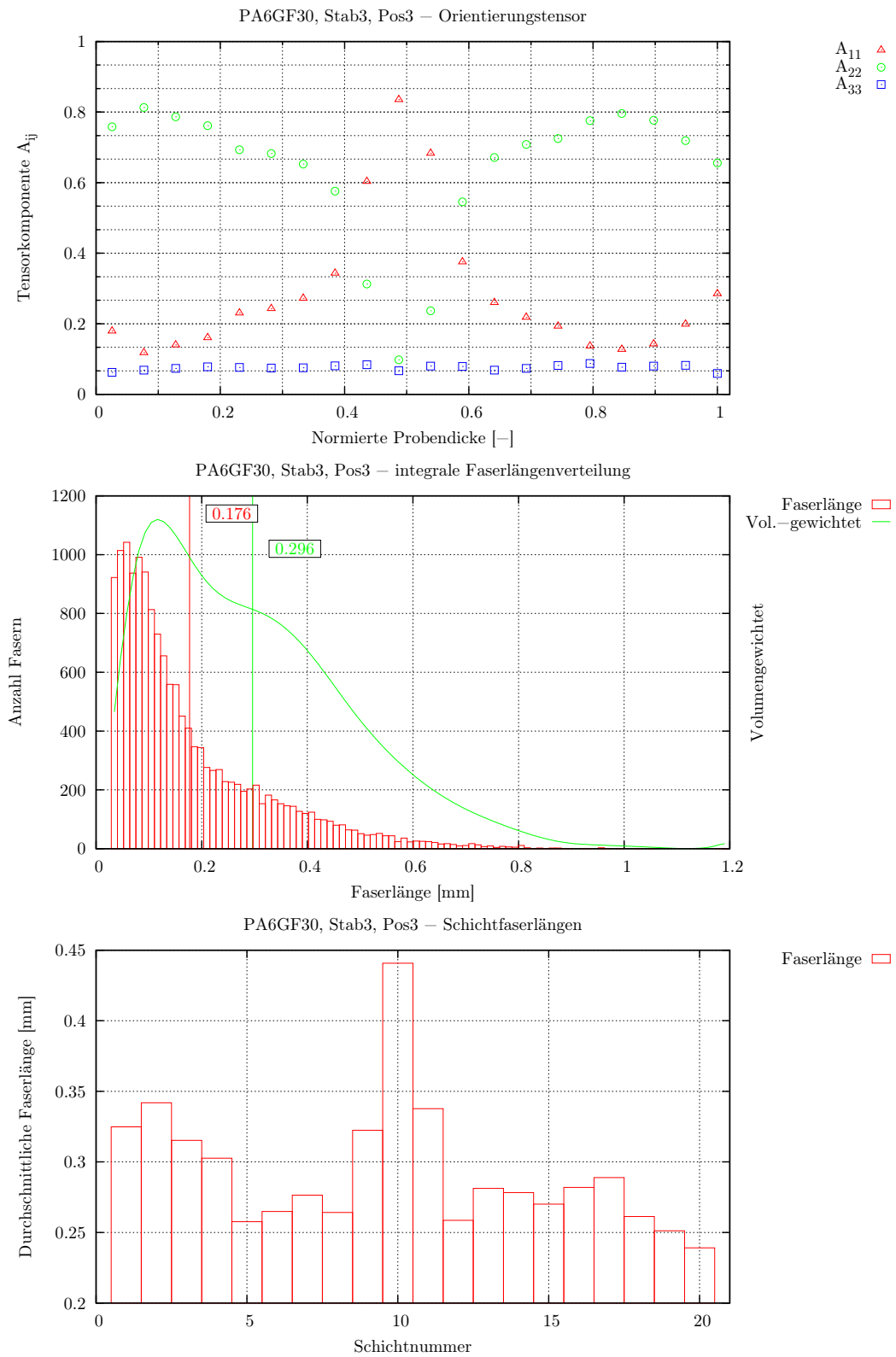


Abbildung A.37: PA6GF30, Stab 3, Position 3

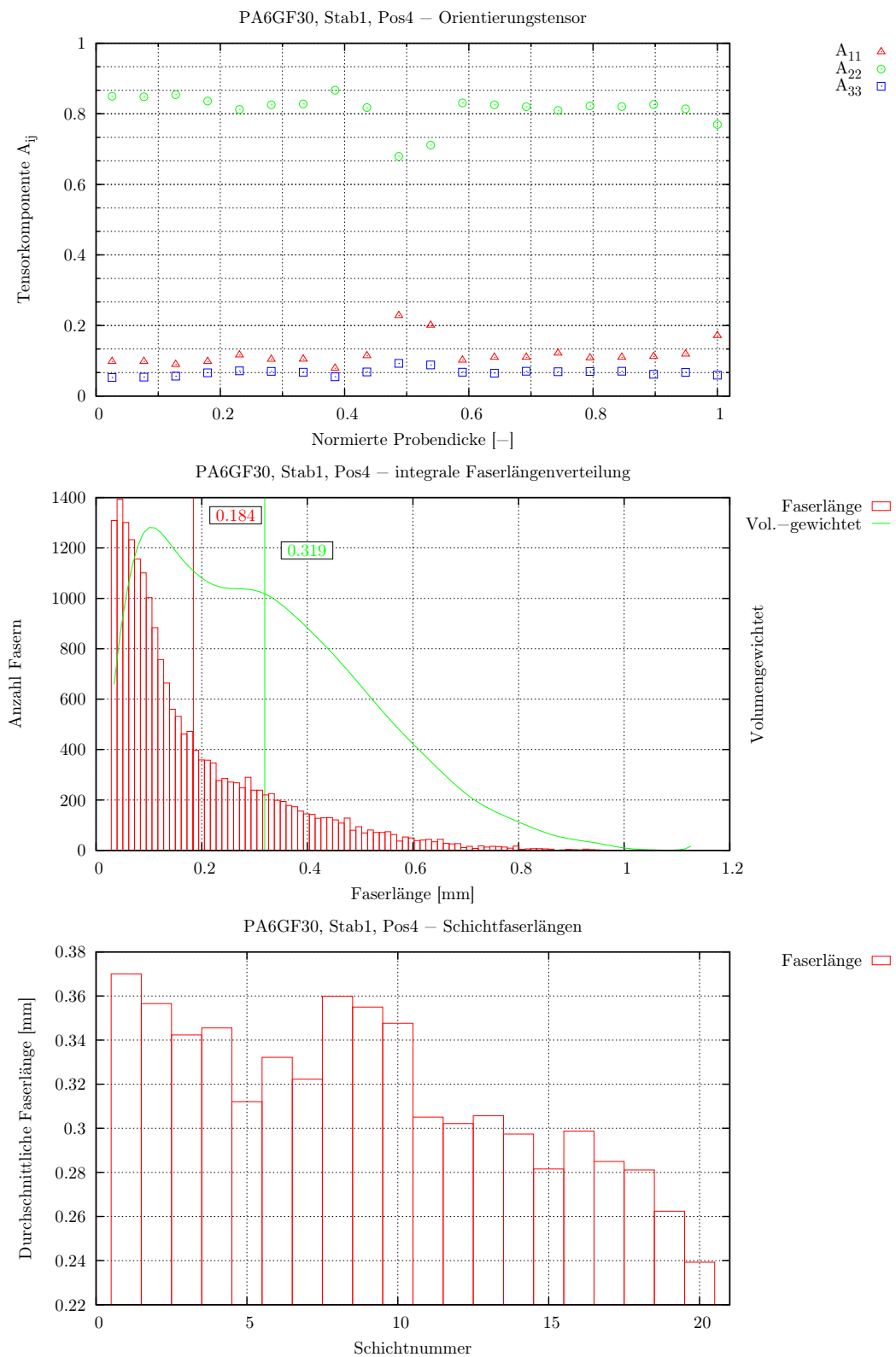


Abbildung A.38: PA6GF30, Stab, Position 4

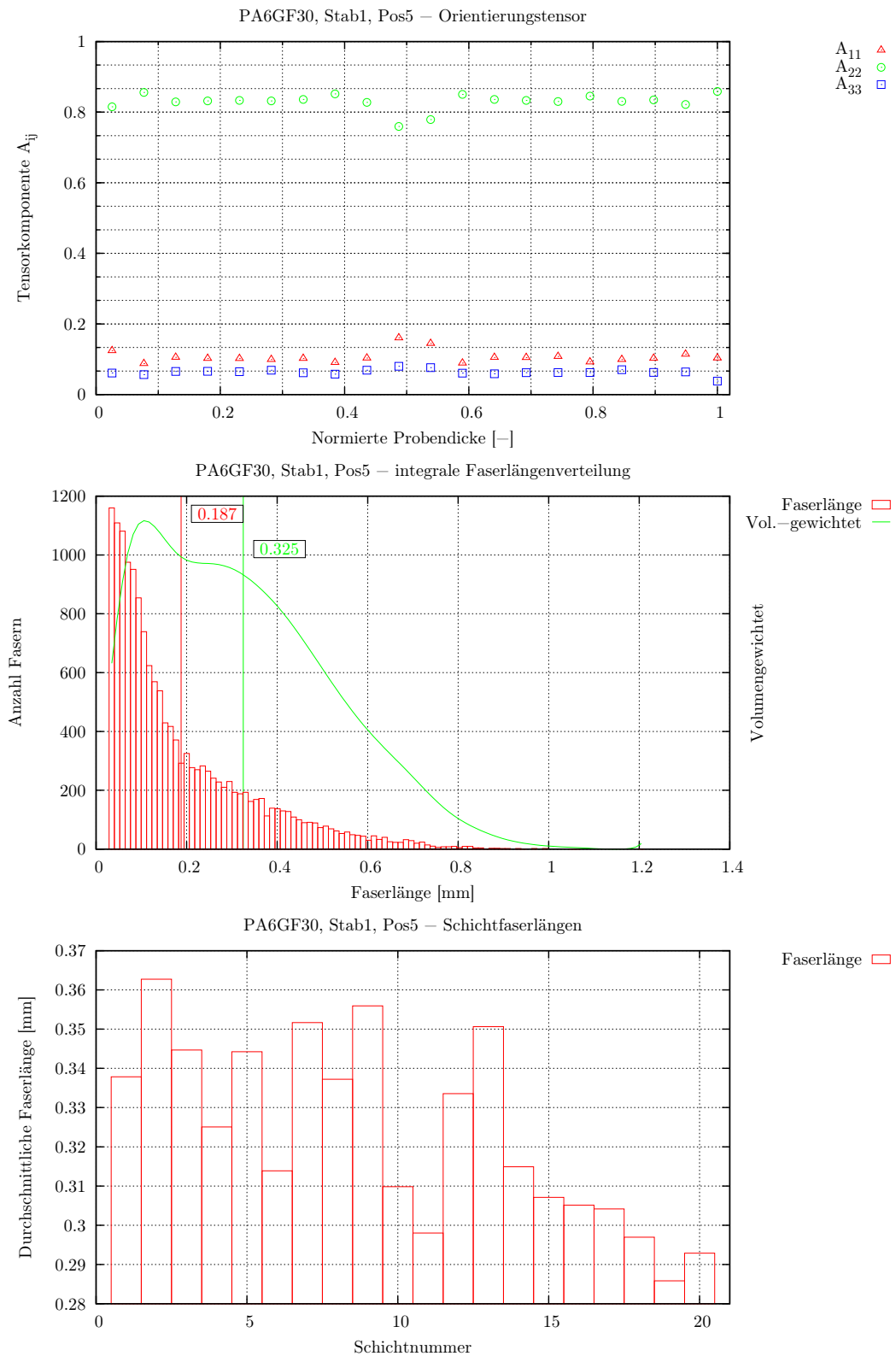


Abbildung A.39: PA6GF30, Stab, Position 5

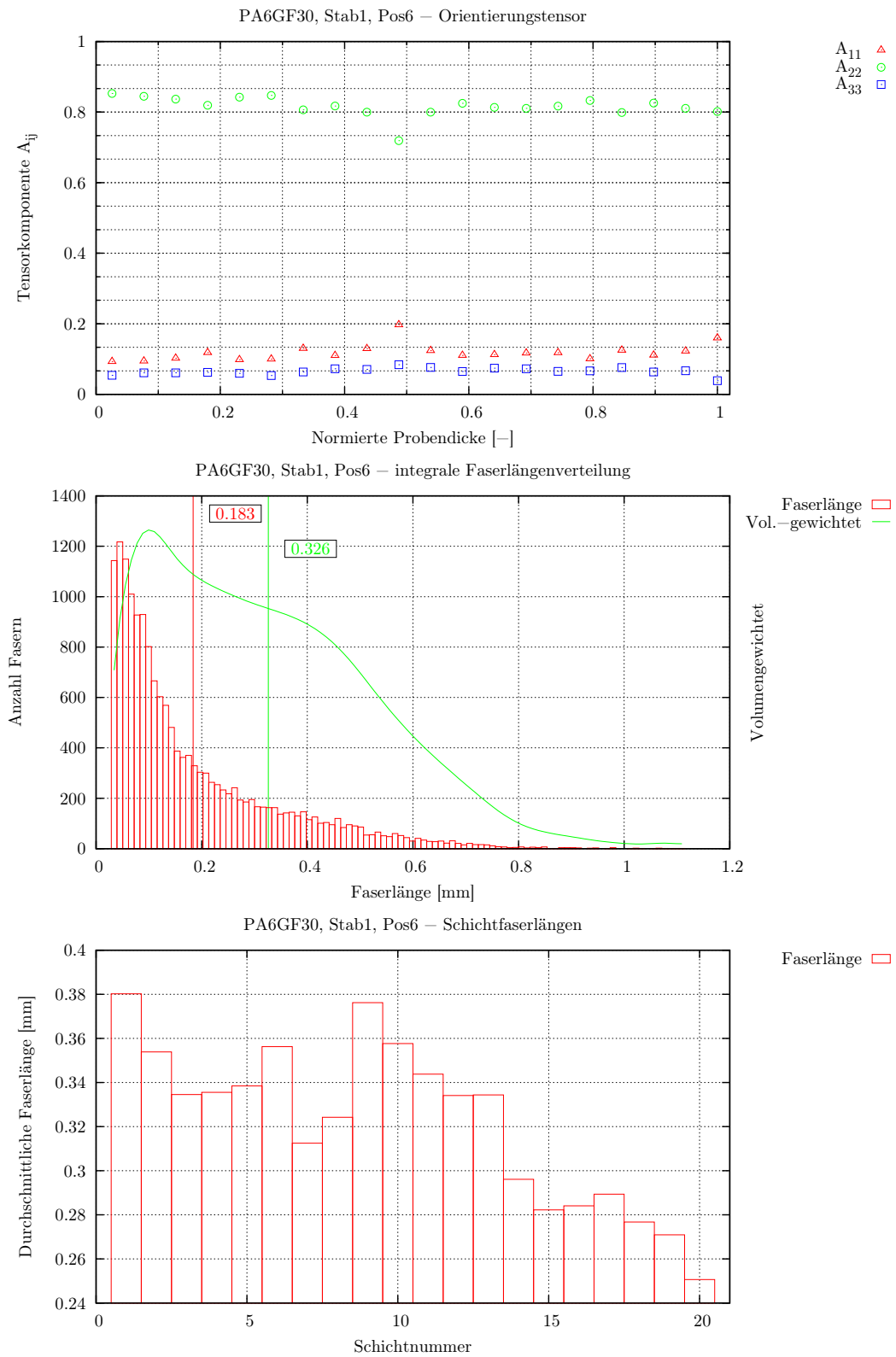


Abbildung A.40: PA6GF30, Stab, Position 6

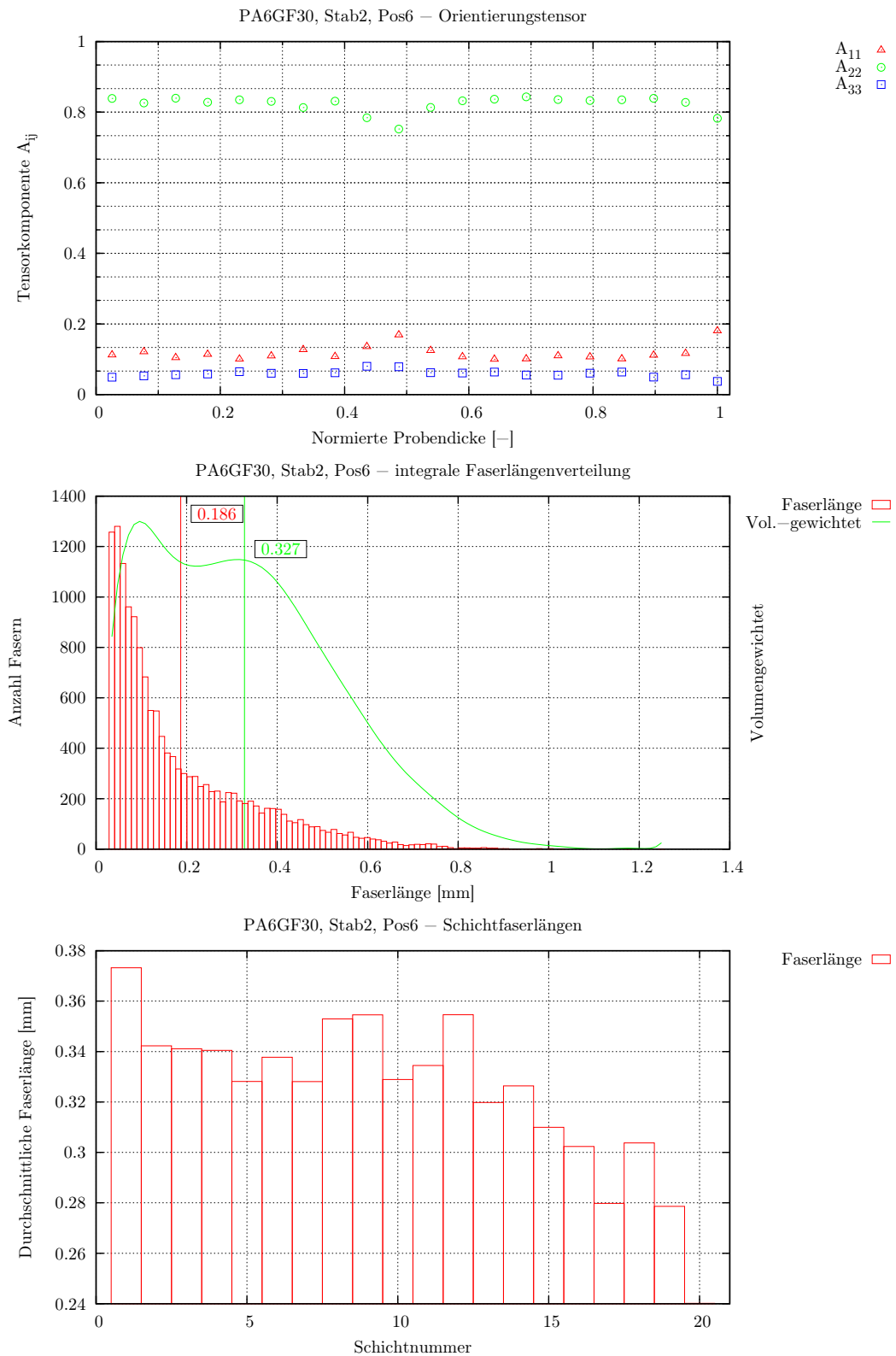


Abbildung A.41: PA6GF30, Stab 2, Position 6

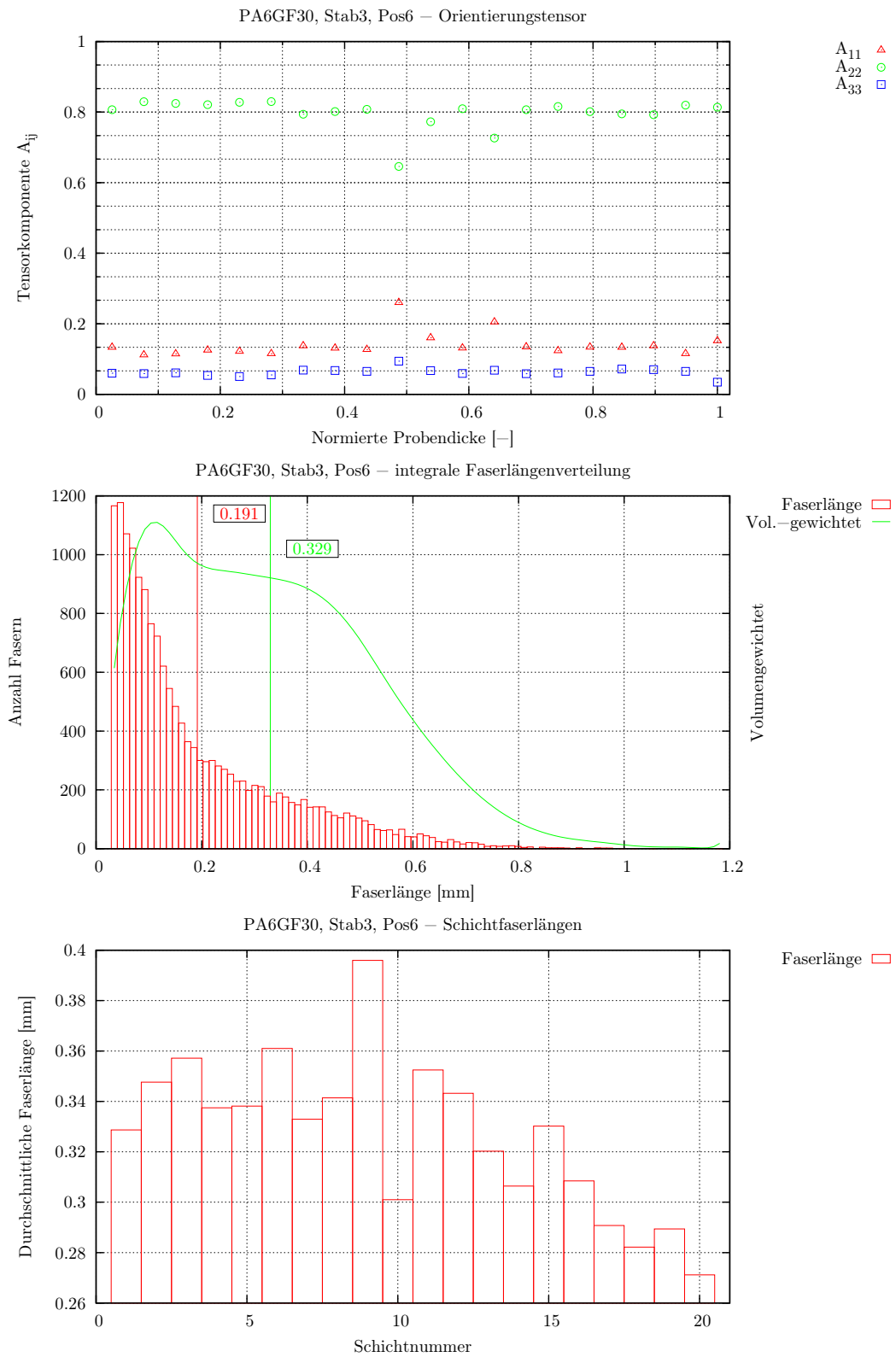


Abbildung A.42: PA6GF30, Stab 3, Position 6

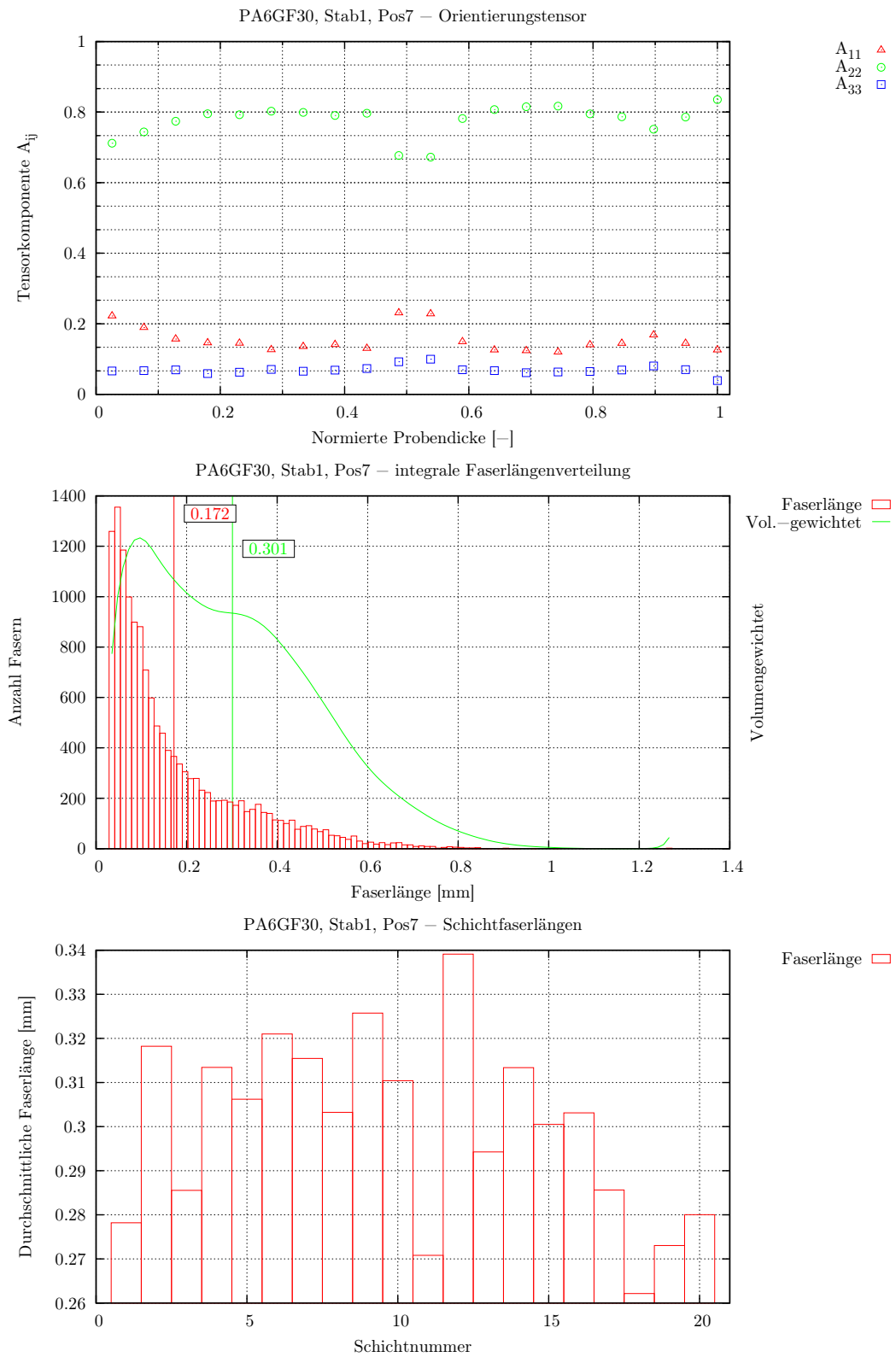


Abbildung A.43: PA6GF30, Stab, Position 7

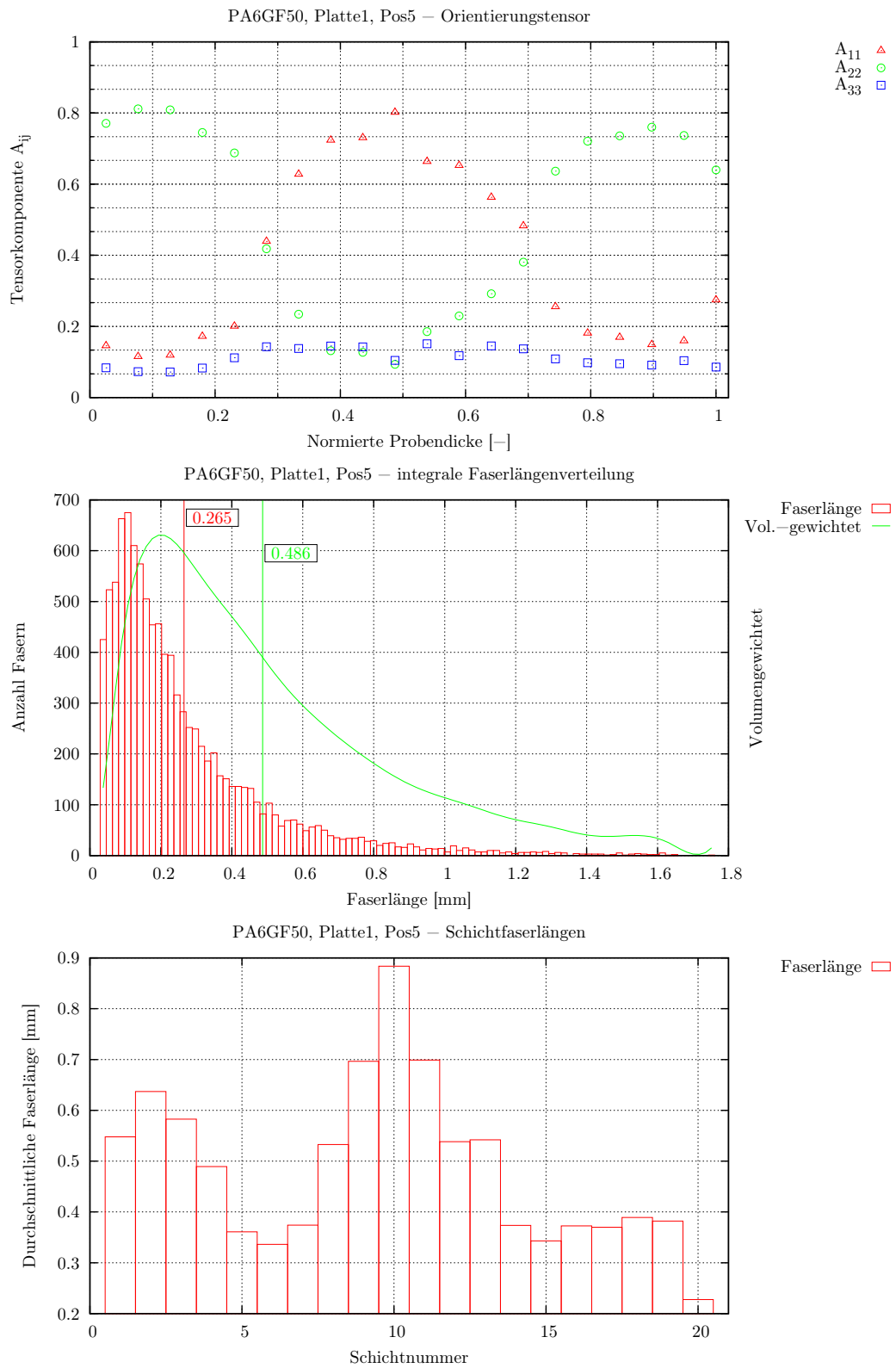


Abbildung A.44: PA6GF50, Platte, Position 5

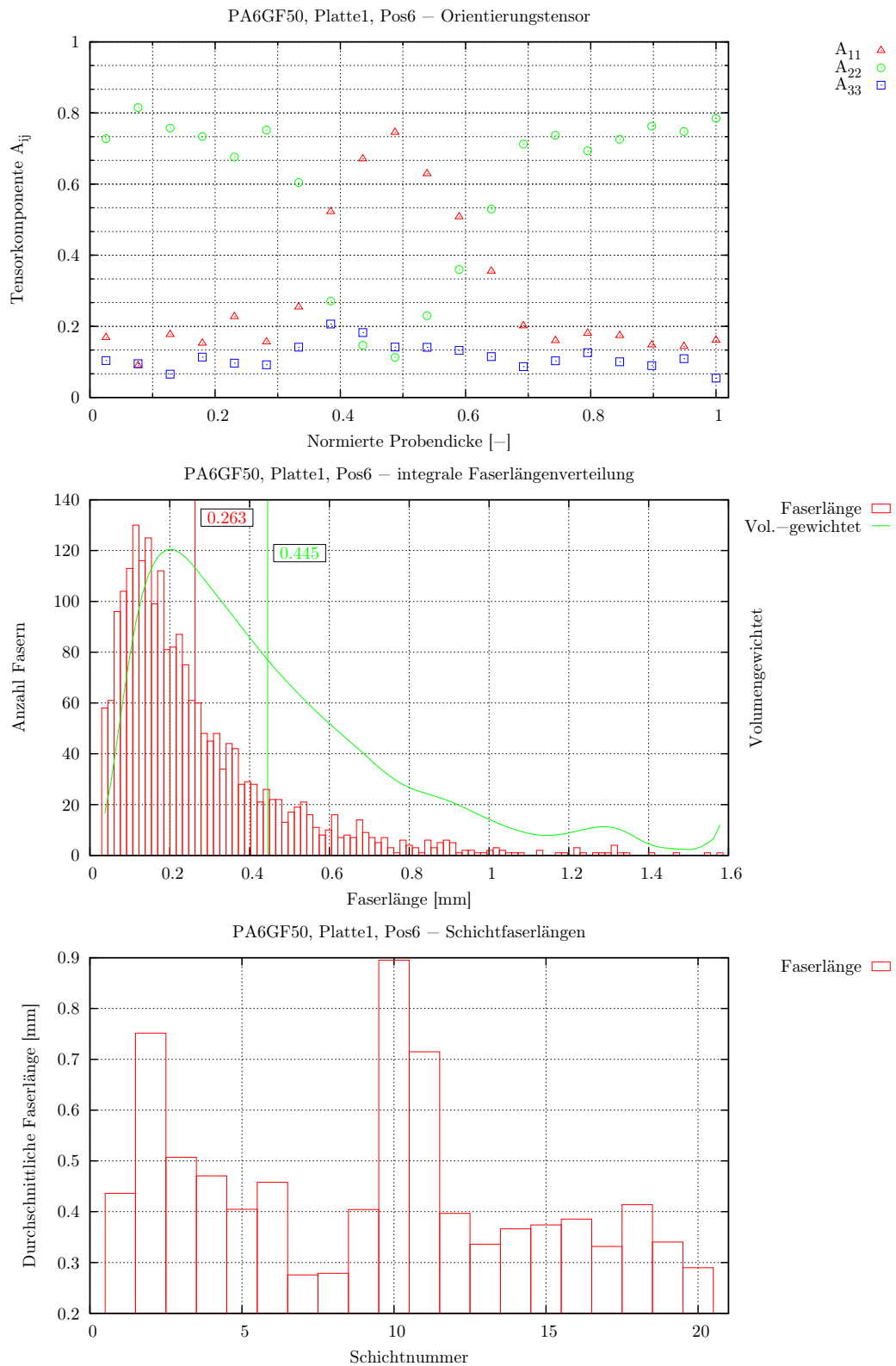


Abbildung A.45: PA6GF50, Platte, Position 6

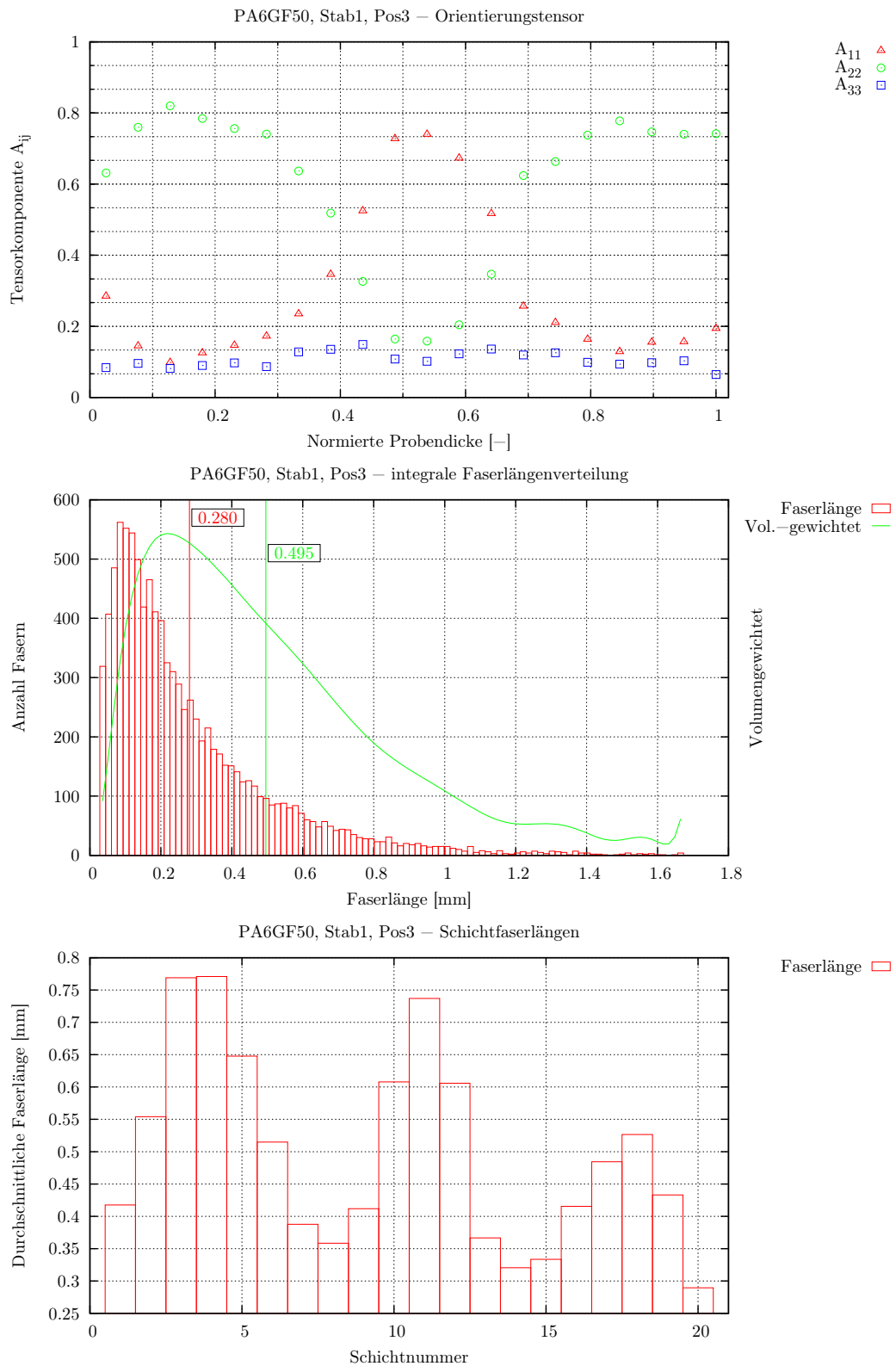


Abbildung A.46: PA6GF50, Stab, Position 3

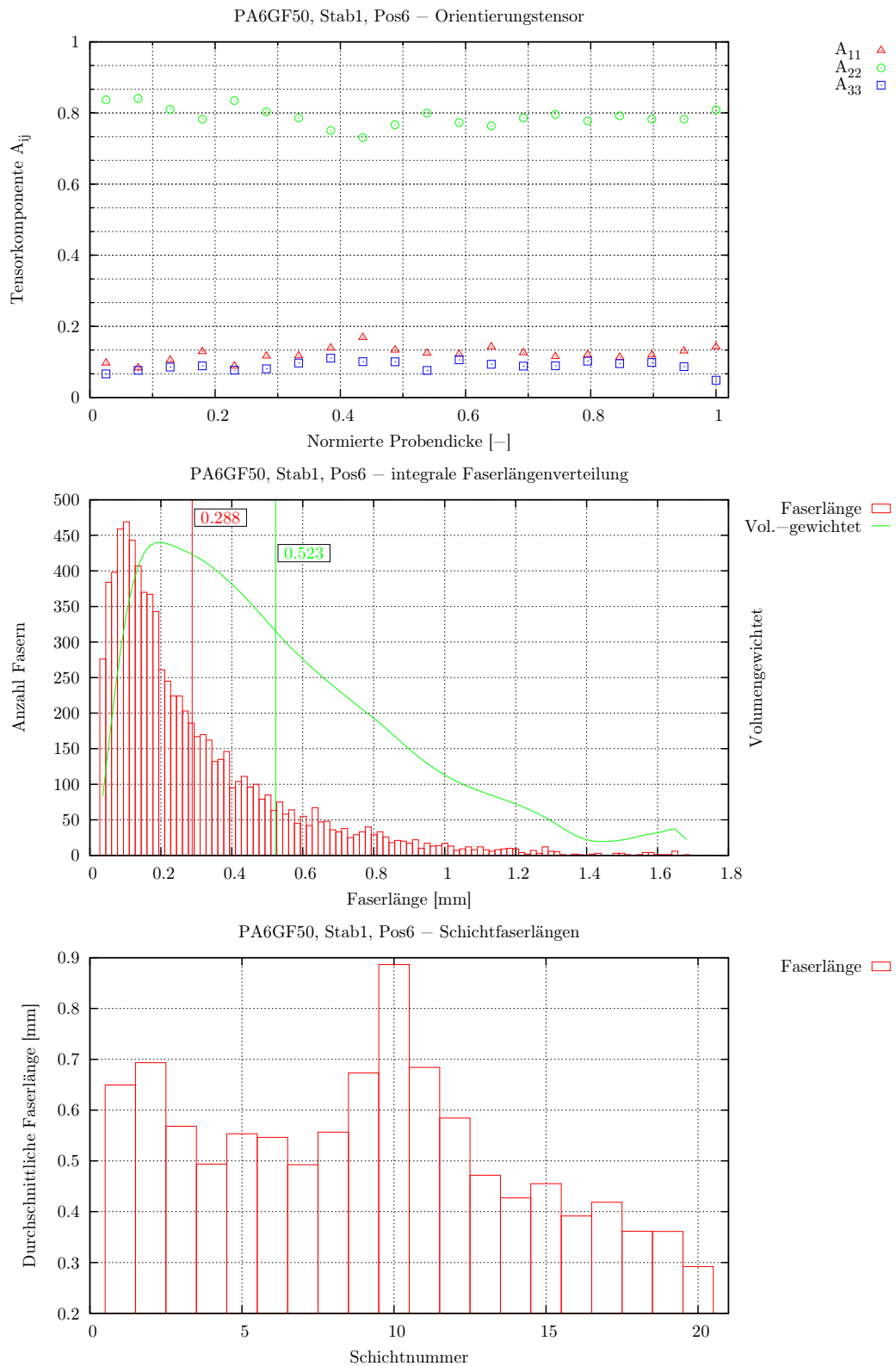


Abbildung A.47: PA6GF50, Stab, Position 6

Literaturverzeichnis

- [1] SCHÜRMAN, H.: *Konstruieren mit Faser-Kunststoff-Verbunden*. Springer Verlag, 2007
- [2] STITZ, S. ; KELLER, W.: *Spritzgießtechnik*. Carl Hanser Verlag, 2004
- [3] KAISER, J.-M.: *Beitrag zur mikromechanischen Berechnung kurzfaserverstärkter Kunststoffe - Deformation und Versagen*, Universität des Saarlandes, Diss., 2013
- [4] MORI, T. ; TANAKA, K.: Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. In: *Acta Metallurgica* 21 (1973), S. 571–574
- [5] TANDON, G. P. ; WENG, G. J.: The effect of aspect ratio of inclusions on the elastic properties of unidirectionally aligned composites. In: *Polymer Composites* 5 (1984), S. 327–333
- [6] CHEN, C.-H. ; CHENG, C.-H.: Effective elastic moduli of misoriented short-fiber composites. In: *International Journal of Solids and Structures* 33 (1996), S. 2519–2539
- [7] DILLENBERGER, F.: Entwicklung einer neuen Validierungsmethode für die Finite Element Simulation mit Verwendung optischer Sensoren / Deutsches Kunststoff-Institut. 2014 (59 EN). – Forschungsbericht
- [8] BECKER, F.: *Entwicklung einer Beschreibungsmethodik für das mechanische Verhalten unverstärkter Thermoplaste bei hohen Dehnraten*, Universität Halle, Diss., 2009

- [9] LASPALAS, M. ; CRESPO, C. ; JIMÉNEZ, M. A. ; GARCIA, B. ; PELEGAY, J. L.: Application of micromechanical models for elasticity and failure to short fibre reinforced composites. Numerical implementation and experimental validation. In: *Computers & Structures* 88 (2008), S. 977–987
- [10] AMBERG, J.: Ermittlung temperaturabhängiger anisotroper Stoffwerte für die Spritzgießsimulation / Deutsches Kunststoff-Institut. 2004 (13220 N). – Forschungsbericht
- [11] AUTODESK: *Simulation Moldflow Insight - Manual*, 2013
- [12] CORETECH SYSTEM CO. LTD.: *Moldex 3D - Manual*, 2014
- [13] SCHÄFER, M.: *Numerik im Maschinenbau*. Springer Verlag, 1999
- [14] BECKER, S.: *Sensitivitätsanalyse der spritzgussinduzierten Faserorientierung in kurzglasfaserverstärkten Thermoplasten*, Technische Hochschule Mittelhessen, Diplomarbeit, 2014
- [15] AMBERG, J.: Entwicklung einer Methodik zur Bestimmung der orientierungsabhängigen thermischen Ausdehnung und Kompressibilität für die Auslegung faserverstärkter Kunststoffbauteile / Deutsches Kunststoff-Institut. 2008 (14453 N). – Forschungsbericht
- [16] CORETECH SYSTEM CO. LTD.: *Moldex3D*. 1995. – Release 10
- [17] SPURK, J. H.: *Strömungslehre: Eine Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer Verlag, 2004
- [18] KLUSEMANN, B.: Homogenization methods for multi-phase elastic composites Comparisons and benchmarks. In: *Technische Mechanik* 1 (2009), S. 374–386
- [19] DOGHRI, I. ; TINEL, L.: Micromechanics of inelastic composites with misaligned inclusions: Numerical treatment of orientation. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 195 (2006), S. 1387–1406
- [20] PIERARD, O.: *Micromechanics of inclusion-reinforced composites in elasto-plasticity and elasto-viscoplasticity : modeling and computation*, Université Catholique de Louvain, Diss., 2006

- [21] DOGHRI, I. ; TINEL, L.: Micromechanical modeling and computation of elasto-plastic materials reinforced with distributed-orientation fibers. In: *International Journal of Plasticity* 21 (2004), S. 1919–1940
- [22] PERSSON, La. ; PERSSON, Le. ; SVANSTEDT, N. ; WYLLER, J.: *The Homogenization Method*. Chartwell-Bratt Publishing & Training Ltd, 1993
- [23] KAISER, J.-M. ; STOMMEL, M.: Modified mean-field formulations for the improved simulation of short fiber reinforced thermoplastics. In: *Composites Science and Technology* 99 (2014), S. 75–81
- [24] KAISER, J.-M. ; STOMMEL, M.: Micromechanical modeling and strength prediction of short fiber reinforced polymers. In: *Journal of Polymer Engineering* 32 (2012), S. 43–52
- [25] STOMMEL, M. ; STOJEK, M. ; KORTE, W.: *FEM zur Berechnung von Kunststoff-und Elastomerbauteilen*. Carl Hanser Verlag, 2011
- [26] KOLLING, S. ; RÜHL, A. ; ROTH, M. ; VOGLER, M. ; MÖNNICH, S.: Current Problems in Material Modeling of Polymers: Glass-Fiber Reinforced Plastics. In: *12th LS-Dyna Forum*, 2013
- [27] MÖNNICH, S. ; KOLLING, S. ; GLÖCKNER, R. ; VOGLER, M. ; SCHÖPFER, J.: Short Fiber Reinforced Polymers: Part I - Experimental Characterization and Simulation with LS-DYNA. In: *11th LS-Dyna Forum*, 2012
- [28] VOGLER, M. ; SCHÖPFER, J. ; KOLLING, S. ; MÖNNICH, S. ; GLÖCKNER, R.: Short Fiber Reinforced Polymers: Part II - Anisotropic Extension of the SAMP-Model. In: *11th LS-Dyna Forum*, 2012
- [29] MÖNNICH, S.: Integrative Simulation von Spritzgussbauteilen. In: *Polymer Forschung* 01 (2013), S. 30–31
- [30] JEFFERY, G. B.: The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid. In: *Royal Society of London Proceedings Series A*, 102 (1922), S. 161–179
- [31] BRONSTEIN, I. N. ; SEMENDJAEV, K. A.: *Taschenbuch der Mathematik*. Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main, 2000

- [32] SILLEM, A.: *Fundamental theory and implementation of the Wang-O'Gara-Tucker model for the modeling of fiber orientation in fiber filled injection molded thermoplastics*, Delft University of Technology, Diplomarbeit, 2010
- [33] FOLGAR, F. ; TUCKER III, C. L.: Orientation Behavior of Fibers in Concentrated Suspensions. In: *Journal of Reinforced Plastics and Composites* 3 (1984), S. 98–119
- [34] DINH, S. M.: *On the Rheologie of Concentrated Fiber Suspensions*, MIT, Diss., 1981
- [35] MASON, S. G. ; MANLEY, R. St. J.: Particle motions in sheared suspensions: orientations and interactions of rigid rods. In: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* Bd. 238 The Royal Society, 1956, S. 117–131
- [36] TREVELYAN, B. J. ; MASON, S. G.: Particle Motions in Sheared Suspensions. I. Rotations. In: *Journal of Colloid Science* 6 (1951), S. 354–367
- [37] HARRIS, J. B. ; PITTMAN, J. F. T.: Equivalent ellipsoidal axis ratios of slender rod-like particles. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 50 (1975), S. 280–282
- [38] ARP, P. A. ; MASON, S. G.: Interactions between two rods in shear flow. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 59 (1977), S. 378
- [39] GOETTLER, L. A. ; BUCHDAHL, R.: Controlling flow orientation in molding of short-fiber compounds / DTIC Document. 1970. – Forschungsbericht
- [40] OWEN, M. J. ; THOMAS, D. H. ; FOUND, M. S.: Flow, fiber orientation and mechanical property relationships in polyester DMC. In: *Proc. 33rd SPI Conf*, 1978
- [41] TAGGART, D. G. ; PIPES, R. B.: *Processing Induced Fiber Orientation in Transfer and Injection Molding*. Center for Composite Materials, College of Engineering, University of Delaware, 1979

- [42] BRIGHT, P. F. ; CROWSON, R. J. ; FOLKES, M. J.: A study of the effect of injection speed on fibre orientation in simple mouldings of short glass fibre-filled polypropylene. In: *Journal of Materials Science* 13 (1978), S. 2497–2506
- [43] JACKSON, W. C. ; ADVANI, S. G. ; TUCKER III, C. L.: Predicting the orientation of short fibers in thin compression moldings. In: *Journal of Composite Materials* 20 (1986), S. 539–557
- [44] WHITE, J. L. ; SPRUIELL, J. E.: The specification of orientation and its development in polymer processing. In: *Polymer Engineering & Science* 23 (1983), S. 247–256
- [45] WHITE, J. L. ; SPRUIELL, J. E.: Specification of biaxial orientation in amorphous and crystalline polymers. In: *Polymer Engineering & Science* 21 (1981), S. 859–868
- [46] MCGEE, S. H. ; MCCULLOUGH, R. L.: Characterization of fiber orientation in short-fiber composites. In: *Journal of Applied Physics* 55 (1984), S. 1394–1403
- [47] BIRD, R. B. ; ARMSTRONG, R. C. ; HASSAGER, O. ; CURTISS, C. F.: *Dynamics of polymeric liquids*. Wiley New York, 1977
- [48] HINCH, E. J. ; LEAL, L. G.: Constitutive equations in suspension mechanics. Part 1. General formulation. In: *Journal of Fluid Mechanics* 71 (1975), S. 481–495
- [49] DOI, M.: Molecular-dynamics and rheological properties of concentrated-solutions of rodlike polymers in isotropic and liquid-crystalline phases. In: *Journal of Polymer Science Part B-Polymer Physics* 19 (1981), S. 229–243
- [50] HAND, G. L.: A theory of anisotropic fluids. In: *Journal of Fluid Mechanics* 13 (1962), S. 33–46
- [51] ADVANI, S. G. ; TUCKER III, C. L.: The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites. In: *Journal of Rheology* 31 (1987), S. 751–784

- [52] ONAT, E. T. ; LECKIE, F. A.: Representation of mechanical behavior in the presence of changing internal structure. In: *Journal of Applied Mechanics* 55 (1988), S. 1–10
- [53] DRAY, D. ; GILORMINI, P. ; RÉGNIER, G.: Comparison of several closure approximations for evaluating the thermoelastic properties of an injection molded short-fiber composite. In: *Composites Science and Technology* 67 (2007), S. 1601–1610
- [54] CHUNG, D. H. ; KWON, T. H.: Improved model of orthotropic closure approximation for flow induced fiber orientation. In: *Polymer Composites* 22 (2001), S. 636–649
- [55] CINTRA JR., J. S. ; TUCKER III, C. L.: Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. In: *Journal of Rheology* 39 (1995), S. 1095–1122
- [56] ADVANI, S. G. ; TUCKER III, C. L.: Closure approximations for three dimensional structure tensors. In: *Journal of Rheology* 34 (1990), S. 367–387
- [57] TSENG, H.-C. ; CHANG, R.-Y. ; HSU, C.-H.: Phenomenological improvements to predictive models of fiber orientation in concentrated suspensions. In: *Journal of Rheology* 57 (2013), S. 1597–1631
- [58] AGBOOLA, B. O. ; JACK, D. A. ; MONTGOMERY-SMITH, S.: Effectiveness of recent fiber-interaction diffusion models for orientation and the part stiffness predictions in injection molded short-fiber reinforced composites. In: *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* 43 (2012), S. 1959 – 1970
- [59] EBERLE, A. P. R. ; VELEZ-GARCIA, G. M. ; BAIRD, D. G. ; WAPPEROM, P.: Fiber orientation kinetics of a concentrated short glass fiber suspension in startup of simple shear flow. In: *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 165 (2010), S. 110 – 119
- [60] NGUYEN, B. N. ; JIN, X. ; WANG, J. ; PHELPS, J. ; C. L. TUCKER III ; KUNC, V. ; BAPANAPALLI, S. ; SMITH, M.: Implementation of New

Process Models for Tailored Polymer Composite Structures into Processing Software Packages / Pacific Northwest National Laboratory (PNNL), Richland, WA (US). 2010. – Forschungsbericht

- [61] WANG, J. ; JIN, X.: Comparison of recent fiber orientation models in Autodesk Moldflow insight simulations with measured fiber orientation data. In: *Polymer Processing Society 26th Annual Meeting*, 2010
- [62] ALTENBACH, H. ; BRIGADNOV, I. ; NAUMENKO, K.: Rotation of a slender particle in a shear flow: influence of the rotary inertia and stability analysis. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 89 (2009), S. 823–832
- [63] REGNIER, G. ; DRAY, D. ; JOURDAIN, E. ; LE ROUX, S. ; SCHMIDT, F. M.: A simplified method to determine the 3D orientation of an injection molded fiber-filled polymer. In: *Polymer Engineering & Science* 48 (2008), S. 2159–2168
- [64] ALTENBACH, H. ; NAUMENKO, K. ; PYLYPENKO, S. ; RENNER, B.: Influence of rotary inertia on the fiber dynamics in homogeneous creeping flows. In: *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 87 (2007), S. 81–93
- [65] ALTENBACH, H. ; NAUMENKO, K. ; PYLYPENKO, S. ; RENNER, B.: On the free particle rotation in a polymer melt. In: *Strojnícky Časopis.-Bratislava* 57 (2006), S. 112–126
- [66] VINCENT, M. ; GIROUD, T. ; CLARKE, A. ; EBERHARDT, C.: Description and modeling of fiber orientation in injection molding of fiber reinforced thermoplastics. In: *Polymer* 46 (2005), S. 6719–6725
- [67] CATON-ROSE, P. ; COATES, P. D. ; WHITESIDE, B. ; HINE, P. ; DUCKETT, A. ; JITTMAN, P. ; CHAPMAN, C. ; SMITH, G.: Measurement and Prediction of Fibre Orientation within A Three-Dimensional Flow. In: *ANTEC* 2 (2004), S. 2241–2245
- [68] HINE, P. J. ; DUCKETT, R. A.: Fiber orientation structures and mechanical properties of injection molded short glass fiber reinforced ribbed plates. In: *Polymer Composites* 25 (2004), S. 237–254

- [69] SHIRAISHI, Y. ; NARAZAKI, N. ; KIKUTANI, T.: Numerical predictions of 3-D filler orientation and elastic compliance for reinforced plastics containing fillers with aspect ratio distribution. In: *Polymer Composites* 25 (2004), S. 194–213
- [70] LEE, K. S. ; LEE, S. W. ; CHUNG, K. ; KANG, T. J. ; YOUN, J. R.: Measurement and numerical simulation of three-dimensional fiber orientation states in injection-molded short-fiber-reinforced plastics. In: *Journal of Applied Polymer Science* 88 (2003), S. 500–509
- [71] HAN, K.-H. ; IM, Y.-T.: Numerical simulation of three-dimensional fiber orientation in short-fiber-reinforced injection-molded parts. In: *Journal of Materials Processing Technology* 124 (2002), S. 366–371
- [72] KWON, T. H. u. a.: Fiber orientation in the processing of polymer composites. In: *Korea-Australia Rheology Journal* 14 (2002), S. 175–188
- [73] MICHAELI, W. ; KRATZ, M.: 3D-FE Simulation of injection molding - Calculation of fiber Orientation and Crystallization / Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV). Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV), 2002. – Forschungsbericht
- [74] ZAK, G. ; PARK, C. B. ; BENHABIB, B.: Estimation of Three-Dimensional Fibre-Orientation Distribution in Short-Fibre Composites by a Two-Section Method. In: *Journal of Composite Materials* 35 (2001), S. 316–339
- [75] MCGRATH, J. J. ; WILLE, J. M.: Determination of 3D fiber orientation distribution in thermoplastic injection molding. In: *Composites Science and Technology* 53 (1995), S. 133–143
- [76] CHUNG, S. T. ; KWON, T. H.: Numerical Simulation of Injection Molding Filling Process of Short-Fiber-Reinforced Thermoplastics. In: *The Korean Journal of Rheology* 5 (1993), S. 109–124
- [77] GUPTA, M. ; WANG, K. K.: Fiber orientation and mechanical properties of short-fiber-reinforced injection-molded composites: Simulated and experimental results. In: *Polymer Composites* 14 (1993), S. 367–382

- [78] BAY, R. S. ; TUCKER III, C. L.: Fiber orientation in simple injection moldings. Part I: Theory and numerical methods. In: *Polymer Composites* 13 (1992), S. 317–331
- [79] PARK, J. M. ; PARK, S. J.: Modeling and simulation of fiber orientation in injection molding of polymer composites. In: *Mathematical Problems in Engineering* 2011 (2011)
- [80] LEE, Y. ; LEE, S. ; YOUN, J. ; CHUNG, K. ; KANG, T.: Characterization of fiber orientation in short fiber reinforced composites with an image processing technique. In: *Materials Research Innovations* 6 (2002), S. 65–72
- [81] BAY, R. S. ; TUCKER III, C. L.: Fiber orientation in simple injection moldings. Part II: Experimental results. In: *Polymer Composites* 13 (1992), S. 332–341
- [82] SHORTALL, J. B. ; PENNINGTON, D.: The Characterization of fiber length distribution in injection molded plastics. In: *Plastics and Rubber Processing and Applications* 2 (1982), S. 33–40
- [83] EBERHARDT, C. ; CLARKE, A.: Fibre-orientation measurements in short-glass-fibre composites. Part I: automated, high-angular-resolution measurement by confocal microscopy. In: *Composites Science and Technology* 61 (2001), S. 1389–1400
- [84] EBERHARDT, C. ; CLARKE, A. ; VINCENT, M. ; GIROUD, T. ; FLOURET, S.: Fibre-orientation measurements in short-glass-fibre composites-II: a quantitative error estimate of the 2D image analysis technique. In: *Composites Science and Technology* 61 (2001), S. 1961–1974
- [85] WANG, J. ; O'GARA, J. F. ; TUCKER III, C. L.: An objective model for slow orientation kinetics in concentrated fiber suspensions: Theory and rheological evidence. In: *Journal of Rheology (1978-present)* 52 (2008), S. 1179–1200
- [86] PHELPS, J. ; TUCKER III, C. L.: An anisotropic rotary diffusion model for fiber orientation in short- and long-fiber thermoplastics. In: *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 156 (2008), S. 165–176

- [87] GLÖCKNER, R.: Auslegung und Dimensionierung von Spritzguß-Bauteilen aus faserverstärkten Thermoplastwerkstoffen / Deutsches Kunststoff-Institut. 1998 (11316 N). – Forschungsbericht
- [88] GADALA-MARIA, F. ; PARSI, F.: Measurement of fiber orientation in short-fiber composites using digital image processing. In: *Polymer Composites* 14 (1993), S. 126–131
- [89] FISCHER, G. ; EYERER, P.: Measuring spatial orientation of short fiber reinforced thermoplastics by image analysis. In: *Polymer Composites* 9 (1988), S. 297–304
- [90] MÖNNICH, S. ; GLÖCKNER, R. ; BECKER, F.: Analysis of Fibre Orientation using μ -CT Data. In: *8th European LS-Dyna User Conference Strassbourg*, 2011
- [91] GLÖCKNER, R. ; WIESER, J.: Modellbasierte Fasererkennung mittels CT. In: *ICT Conference at Wels*, 2010, S. 43–50
- [92] GLÖCKNER, R.: Schnelle quantitative Faserstrukturanalyse mittels Computertomografie / Deutsches Kunststoff-Institut. 2012 (16393 N). – Forschungsbericht
- [93] HEGER, Sabrina: *Rechnerische Bestimmung der Faserorientierung beim Spritzgießen*, Technische Universität Darmstadt, Diplomarbeit, 2014
- [94] DASSAULT SYSTEMES: *Abaqus Theory - Manual*, 2012

Studentische Arbeiten, die im Rahmen der Dissertation betreut wurden:

GALAMB, Miklos: *FE Berechnung und Optimierung eines Tiefeinsteiger Fahrradrahmens*, Technische Universität Darmstadt, Studienarbeit, 2010

FRANZ, Christian: *Konstruktion und Auslegung eines CFK Fahrradrahmens*, Technische Universität Darmstadt, Diplomarbeit, 2010

DILLENBERGER, Felix: *Ermittlung von Druckkennwerten an Kunststoffen*, Technische Universität Darmstadt, Masterthesis, 2011

HEGER, Sabrina: *Simulation und Optimierung eines Rohrprobekörpers für kurzfaserverstärkte Kunststoffe unter biaxialer Belastung*, Technische Universität Darmstadt, Bachelorthesis, 2011

KURBASIC, Robert: *Optimierung des Insassenschutzes beim Kopfaufprall*, Technische Universität Darmstadt, Studienarbeit, 2011

SCHMIDT, Philipp: *Validierung von Spritzgießsimulationen mit μ -CT Messungen*, Hochschule Darmstadt (hda), Diplomarbeit, 2011

FORNOFF, Alexander: *Berechnung eines Pedelec Motorlagers mit der Finite Element Methode*, Hochschule Darmstadt (hda), Bachelorthesis, 2011

KUNERT, Johannes: *Finite-Element-Simulation von Hartschaumstoffen unter Berücksichtigung der Integralstruktur*, Technische Universität Darmstadt, Diplomarbeit, 2012

FÖRDERER, Sebastian: *Anwendungsorientierte Analyse alternativer Verbundwerkstoffe zur Verstärkung von Kunststoff-Fensterprofilen*, Duale Hochschule Baden-Württemberg, Bachelorthesis, 2012

SOMMER, Philipp: *Geometrieauslegung von Kunststoffbauteilen unter Berücksichtigung der Lackierfähigkeit durch den pneumatischen oder elektrostatischen Lackierprozess*, Duale Hochschule Baden-Württemberg, Bachelorthesis, 2012

BECKER, Sonja: *Sensitivitätsanalyse der spritzgussinduzierten Faserorientierung in kurzglasfaserverstärkten Thermoplasten*, Technische Hochschule Mit-

telhessen, Diplomarbeit, 2014

HEGER, Sabrina: *Rechnerische Bestimmung der Faserorientierung beim Spritzgießen*, Technische Universität Darmstadt, Masterthesis, 2014

FORNOFF, Markus: *Optimierung einer Materialbeschreibung in Autodesk Moldflow*, Hochschule Darmstadt, Bachelorthesis, 2014