

# Homogenisierung und Modellierung des Materialverhaltens kurzfaserverstärkter Thermoplaste

Von der Fakultät für Maschinenbau der  
Technischen Universität Chemnitz  
genehmigte

## **Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktoringenieur  
(Dr.-Ing.)

vorgelegt

von Dipl.-Ing. Niels Goldberg  
geboren am 12. Mai 1989 in Karl-Marx-Stadt, jetzt Chemnitz  
eingereicht am 14. Mai 2018

Gutachter:

Prof. Dr. Jörn Ihlemann

Prof. Dr. Roland Herzog

Tag der Verteidigung: 09. August 2018



**Goldberg, Niels**

## **Homogenisierung und Modellierung des Materialverhaltens kurzfaserverstärkter Thermoplaste**

Dissertation an der Fakultät für Maschinenbau der Technischen Universität Chemnitz, Institut für Mechanik und Thermodynamik, Chemnitz, 2018

149 Seiten

58 Bilder

10 Tabellen

148 Literaturzitate

### **Referat**

Im Spritzguss hergestellte Bauteile mit Kurzfaserverstärkung weisen ein niedriges Gewicht bei hoher Steifigkeit auf und bieten damit beispielsweise in der Automobilbranche eine Alternative zu Bauteilen aus konventionellen Werkstoffen wie Stahl. Die Eigenschaften der Kunststoffbauteile sind das Resultat einer vielschichtigen Prozessgeschichte. Dabei erfährt das Material einen hohen Wärmeaustausch, wechselt seine Phase von flüssig zu fest, kühlt lokal unterschiedlich schnell ab und wird von den Orientierungen der eingebetteten Kurzfasern geprägt. Da die Bauteileigenschaften eine hohe Sensitivität gegenüber Variationen der Prozessparameter besitzen, sollen Simulationen des Fertigungsprozesses kostengünstige Vorhersagen zur Güte des Endproduktes ermöglichen. Den Simulationen liegen mathematische Gleichungen zu Grunde, die das effektive Materialverhalten beschreiben.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Formulierung eines solchen Materialmodells. Mit Hilfe von Homogenisierungen repräsentativer Volumenelemente wird zunächst der Einfluss der Faserorientierungsverteilung auf die mechanischen und thermischen Eigenschaften analysiert. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse fließen anschließend in die Modellierung des Materialverhaltens ein. Der in dieser Arbeit verwendete Modellierungsrahmen ist für große Deformationen ausgelegt, berücksichtigt den Phasenübergang sowie Temperaturabhängigkeiten in den viskoelastischen Steifigkeitsanteilen und stützt sich auf eine effektive Integrationsregel, um die Faserorientierungsverteilung einzubeziehen. Die Identifikation der Materialparameter geschieht mit Hilfe von Experimenten an Proben mit unidirektionaler Faserausrichtung. Das identifizierte Materialmodell wird schließlich in die kommerzielle Finite-Elemente-Umgebung ABAQUS implementiert und steht damit Simulationen der Abkühlung und der Beanspruchung eines spritzgegossenen Kettenglieds zur Verfügung.

### **Schlagworte**

Materialmodellierung, große Deformationen, Phasenübergang, Anisotropie, Polymere, Faserverstärkung, Finite-Elemente-Methode, RVE-Homogenisierung



## Vorwort und Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Professur Festkörpermechanik des Institutes für Mechanik und Thermodynamik an der Technischen Universität Chemnitz. Für die Unterstützung vor und während dieser Zeit möchte ich an dieser Stelle meinen Dank aussprechen.

Mein ganz besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Herrn Prof. Jörn Ihlemann, der mir die Anfertigung dieser Arbeit überhaupt erst ermöglichte. Sein entgegengebrachtes Vertrauen bei der Bearbeitung meines Projektes ließ mir den nötigen Spielraum, mich fachlich stetig weiterzuentwickeln, ohne dabei das Ziel aus den Augen zu verlieren. Die Arbeit an seiner Professur hat mir viel Freude bereitet und wird mir immer in guter Erinnerung bleiben.

Weiterhin möchte ich Herrn Prof. Roland Herzog für das Interesse an meiner Arbeit, die Übernahme des Zweitgutachtens und die damit verbundene Arbeit meinen Dank aussprechen.

Die letzten Jahre wurde ich von vielen Kollegen begleitet, die alle zu dieser Dissertation beigetragen haben. Besonders möchte ich mich bei den Herren Felix Ospald und Dr. Matti Schneider für die Zusammenarbeit in unserem Projekt sowie die Eröffnung neuer Blickwinkel auf Faserverteilungen bedanken. Herrn Dr. Hendrik Donner gebührt mein Dank für die Geduld, mit der er meine vielen Fragen zur Tensoralgebra und zu grundlegenden Fragen der Kontinuumsmechanik beantwortet und mir damit neue Möglichkeiten eröffnet hat. Für die Ablenkung von fachlichen Problemen danke ich meiner Zimmernachbarin Frau Carola Kirbach sowie den Kollegen, die sich mir zu ausgedehnten Mittagsspaziergängen angeschlossen haben.

Des Weiteren möchte ich meiner Familie dafür danken, dass sie mir den wissenschaftlichen Weg überhaupt ermöglicht und tapfer meine Arbeit Korrektur gelesen hat.

Mein größter Dank gilt schließlich meiner Frau Colleen. Ihre Liebe und ihr Rückhalt gaben mir auch in schwierigen Situationen die Kraft, alle Herausforderungen zu meistern. Die Geburt unseres Sohnes Joschua bereicherte unser Leben so wunderbar und beschert uns jeden Tag neue Freude.

*Niels Goldberg*



# Inhaltsverzeichnis

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Formelzeichen, Symbole und Abkürzungen</b>                             | <b>IX</b> |
| <b>1 Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| 1.1 Einordnung der Arbeit . . . . .                                       | 1         |
| 1.2 Inhalt der Arbeit . . . . .   | 3         |
| <b>2 Grundlagen</b>   | <b>5</b>  |
| 2.1 Grundlagen der Tensoralgebra . . . . .                                | 5         |
| 2.2 Grundlagen der Kontinuumsmechanik . . . . .                           | 7         |
| 2.2.1 Tensoren zur Beschreibung großer Deformation . . . . .              | 7         |
| 2.2.2 Spannungstensoren . . . . .   | 9         |
| 2.2.3 Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik . . . . .                  | 10        |
| 2.2.4 Bilanzgleichungen der Kontinuumsthermodynamik . . . . .             | 10        |
| 2.2.5 Formulierung der freien Energiedichte mittels Invarianten . . . . . | 12        |
| 2.2.6 Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten . . . . .       | 13        |
| 2.3 Finite-Elemente-Methode . . . . .                                     | 15        |
| 2.3.1 Grundgleichungen der FEM . . . . .                                  | 15        |
| 2.3.2 Anforderungen an die freie Energiedichte . . . . .                  | 17        |
| 2.4 Faserorientierungsverteilung . . . . .                                | 18        |
| <b>3 Prinzip der RVE-Homogenisierung</b>                                  | <b>23</b> |
| 3.1 Hintergrund . . . . .   | 23        |
| 3.1.1 Analytische Homogenisierung . . . . .                               | 24        |
| 3.1.2 Numerische Homogenisierung . . . . .                                | 25        |
| 3.2 Erstellung eines RVE mit Kurzfasern . . . . .                         | 26        |
| 3.3 Kopplung der Mikro- und Makroebene . . . . .                          | 27        |
| 3.3.1 Die Hill-Mandel-Bedingung für den Impulserhaltungssatz . . . . .    | 28        |
| 3.3.2 Die Hill-Bedingung für die Wärmeleitung . . . . .                   | 30        |
| 3.4 Diskretisierung des RVE . . . . .                                     | 32        |
| 3.5 Numerische Homogenisierung mit ABAQUS . . . . .                       | 35        |
| 3.5.1 Kopplung der Freiheitsgrade . . . . .                               | 35        |
| 3.5.2 Bestimmung effektiver Feldgrößen . . . . .                          | 37        |
| 3.5.3 Anwendungsbeispiele . . . . .                                       | 40        |
| 3.5.4 Konvergenzbetrachtungen am RVE . . . . .                            | 42        |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| <b>4</b> | <b>Effektive Eigenschaften viskoelastischer Faser-Matrix-Verbunde</b>         | <b>45</b> |
| 4.1      | Linearisierung der Mischregel . . . . .                                       | 45        |
| 4.1.1    | Allgemeine Laminat-Mischregel für viskoelastische Phasen . . . . .            | 46        |
| 4.1.2    | Validierung der Mischregel . . . . .  | 48        |
| 4.2      | Die effektive Steifigkeit . . . . .   | 49        |
| 4.3      | Die effektive thermische Deformation . . . . .                                | 52        |
| 4.4      | Die effektive Relaxation . . . . .  | 54        |
| 4.5      | Die effektive Wärmeleitung . . . . .  | 55        |
| 4.6      | Abhängigkeit von der Faserdichtefunktion . . . . .                            | 56        |
| <b>5</b> | <b>Modellierungsrahmen</b>  | <b>59</b> |
| 5.1      | Einbeziehen der Faserorientierungsverteilung . . . . .                        | 60        |
| 5.1.1    | Effektive Integration über die Sphäre . . . . .                               | 62        |
| 5.2      | Kinematik . . . . .   | 65        |
| 5.2.1    | Rheologisches Schaubild . . . . .   | 65        |
| 5.2.2    | Kommutatives Schaubild . . . . .  | 66        |
| 5.2.3    | Thermische Deformation . . . . .  | 68        |
| 5.2.4    | Berücksichtigung des Phasenübergangs . . . . .                                | 70        |
| 5.3      | Auswertung der Bilanzgleichungen . . . . .                                    | 71        |
| 5.3.1    | Ansatz der freien Energiedichte . . . . .                                     | 71        |
| 5.3.2    | Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung . . . . .                           | 74        |
| 5.3.3    | Auswertung der Energiebilanz . . . . .  | 78        |
| 5.3.4    | Bestimmung der Materialtangente . . . . .                                     | 78        |
| 5.3.5    | Bestandteile des Materialmodells . . . . .                                    | 83        |
| 5.4      | Eigenschaften des Materialmodells . . . . .                                   | 84        |
| 5.4.1    | Zug bei Referenztemperatur . . . . .  | 85        |
| 5.4.2    | Spannung bei Erwärmung mit festgehaltener Deformation . . . . .               | 85        |
| 5.4.3    | Hysterese bei zyklischer Scherung . . . . .                                   | 86        |
| 5.4.4    | Relaxation mit Phasenübergang . . . . .                                       | 87        |
| 5.4.5    | Thermomechanische Kopplung bei zyklischer Belastung . . . . .                 | 88        |
| 5.4.6    | Temperaturabhängigkeit des Relaxationsspektrums . . . . .                     | 89        |
| 5.5      | Anpassung an synthetische RVE-Daten . . . . .                                 | 89        |
| <b>6</b> | <b>Parameteridentifikation</b>  | <b>93</b> |
| 6.1      | Spannungsfreie Ausdehnung . . . . .   | 93        |
| 6.1.1    | Probekörperfertigung . . . . .  | 93        |
| 6.1.2    | Versuchsaufbau und -durchführung . . . . .                                    | 93        |
| 6.1.3    | Messdaten . . . . .   | 94        |
| 6.1.4    | Modellierung und Identifikation der thermischen Ausdehnungsfunktion . . . . . | 95        |
| 6.2      | Relaxationsversuche bei unterschiedlichen Temperaturen . . . . .              | 96        |
| 6.2.1    | Versuchsdurchführung . . . . .  | 97        |



---

|          |   |            |
|----------|---|------------|
| 6.2.2    | Messdaten   | 97         |
| 6.2.3    | Modellierung  | 99         |
| 6.2.4    | Identifikation  | 101        |
| 6.3      | Bestimmung der kalorischen Eigenschaften                  | 103        |
| 6.3.1    | Messdaten und deren Aufarbeitung                          | 104        |
| 6.3.2    | Modellierung der spezifischen inneren thermischen Energie | 105        |
| 6.3.3    | Identifikation der Materialparameter                      | 111        |
| 6.3.4    | Ableitung nach der Temperatur                             | 113        |
| 6.4      | Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit                         | 115        |
| 6.5      | Messung der Referenzdichte                                | 116        |
| 6.6      | Übersicht der identifizierten Materialparameter           | 116        |
| <b>7</b> | <b>Anwendung in einer FE-Umgebung</b>                     | <b>119</b> |
| 7.1      | Numerische Umsetzung des Stoffgesetzes                    | 119        |
| 7.1.1    | Größen der Schnittstelle <i>UMAT</i>                      | 120        |
| 7.1.2    | Größen der Schnittstelle <i>UMATHHT</i>                   | 121        |
| 7.1.3    | Verhalten bei großen Rotationen                           | 121        |
| 7.2      | Simulation eines Kettenglieds                             | 124        |
| 7.2.1    | Anfangsbedingungen  | 124        |
| 7.2.2    | Abkühlung in der Kavität                                  | 127        |
| 7.2.3    | Abkühlung und Verzug nach Auswurf                         | 128        |
| 7.2.4    | Verhalten bei zyklischer Deformation                      | 130        |
| <b>8</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>                       | <b>135</b> |
| 8.1      | Ergebnisse der Arbeit                                     | 135        |
| 8.2      | Weitere Forschungsansätze                                 | 137        |
|          | <b>Literatur</b>  | <b>139</b> |



# Formelzeichen, Symbole und Abkürzungen

## Abkürzungen

|     |  |
|-----|--|
| ACG | Angular Central Gaussian   |
| CDU | Clausius-Duhem-Ungleichung   |
| DSC | Differential Scanning Calorimetry  |
| FDf | Faserdichtefunktion  |
| FOV | Faserorientierungsverteilung (teilweise auch FO als Abkürzung für Faserorientierung) |
| FEM | Finite-Elemente-Methode (teilweise auch FE als Abkürzung für Finite-Elemente)        |
| GST | Generalisierter Strukturtensor   |
| LDV | Längen-Dicken-Verhältnis   |
| PBC | Periodic Boundary Conditions   |
| PP  | Polypropylen   |
| RSA | Random-Sequential-Adsorption   |
| RVE | Repräsentatives Volumenelement   |

## Kennzeichnungen

| Symbol   | Beschreibung                             | Gleichung      |
|--|--|----------------|
| $s, \underline{v}, \underline{X}, \underline{K}$ | Tensoren 0. - 4. Stufe                   | (2.1)          |
| $\underline{X}^{-1}$                             | Inverser Tensor                          | (2.6)          |
| $\underline{X}^T$                                | Transponierter Tensor                    | (2.5)          |
| $\underline{X}^S, \underline{X}^A$               | Symmetrischer bzw. antimetrischer Anteil | (2.7)          |
| $\underline{X}'$                                 | Deviatorischer Anteil                    | (2.8)          |
| $\underline{\bar{X}}$                            | Unimodularer Anteil                      | (2.9)          |
| $\ \underline{X}\ $                              | Frobenius-Norm                           | (2.10)         |
| $\dot{\underline{X}}$                            | Substantielle Zeitableitung              | (2.11)         |
| $(\bullet)^{T_{24}}, (\bullet)^{S_{24}}$         | $T_{24}$ -, $S_{24}$ -Operator           | (2.15), (2.16) |
| $(\tilde{\bullet})$                              | Größe der Referenzkonfiguration          | (2.18)         |

|   |   |        |
|---|---|--------|
| $\int_G, \oint_{\mathcal{R}}$             | Gebiets- und Randintegral                                 | (2.17) |
| ${}^t(\bullet), {}^{t+\Delta t}(\bullet)$ | Diskrete Zeitpunkte                                       | (2.74) |
| $(\bullet)^n, (\bullet)^{n+1}$            | Diskrete Newton-Iterationen                               | (2.76) |
| $(\bullet)_M$                             | Größe der Makroebene                                      | (3.3)  |
| $(\bullet)_h, (\bullet)_f$                | Homogener bzw. fluktuierender Anteil                      | (3.14) |
| $(\bullet)^p$                             | Auf Richtung $\underline{\tilde{p}}$ bezogen              | (5.1)  |
| $\langle \bullet \rangle$                 | Mittelungsoperator  | (5.1)  |
| $\oint$                                   | Integral über Sphäre                                      | (5.1)  |
| $(\bullet)_m, (\bullet)_\vartheta$        | Mechanischer bzw. thermischer Anteil                      | (5.10) |
| $(\bullet)_i, (\bullet)_e$                | Inealstischer bzw. elastischer Anteil                     | (5.11) |
| $(\bullet)_{mp}, (\bullet)_{me}$          | Mechanisch-plastischer bzw. mechanisch-elastischer Anteil | (5.11) |
| $(\bullet)_\parallel, (\bullet)_\perp$    | Parallel bzw. quer zur Faserrichtung                      | (5.14) |

### Produkte

| Symbol  | Beschreibung           | Gleichung |
|---|------------------------|-----------|
| $\underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{X}}$       | Einfaches Punktprodukt | (2.3)     |
| $\underline{\underline{X}} \cdot \cdot \underline{\underline{X}}$ | Doppeltes Punktprodukt | (2.3)     |
| $\underline{\underline{X}} \circ \underline{\underline{X}}$       | Dyadisches Produkt     | (2.3)     |

### Skalare (lateinische Symbole)

| Symbol                     | Beschreibung                            | Beispiel       |
|----------------------------|---|----------------|
| $c_1, c_2$                 | Konzentrationen im Mischvoxel           | Abbildung 3.4  |
| $C_\vartheta$              | Wärmekapazität                          | (5.66)         |
| $\mathcal{D}, \mathcal{R}$ | Dissipation                             | (2.49), (5.67) |
| $e$                        | Spezifische innere Energie              | (2.43)         |
| $\mathcal{F}$              | Funktional der schwachen Formulierung   | (2.69)         |
| $f_{Ph}$                   | Glättungsfunktion beim Phasenübergang   | (5.30)         |
| $f_\vartheta$              | Temperaturfunktion für den Schubmodul   | (6.3)          |
| $G, K, E_F$                | Schub-, Kompressions-, E-Modul          | (5.31), (5.36) |
| $h$                        | Spezifische Enthalpie                   | (2.56)         |
| $I_{1-5}$                  | Hauptinvarianten                        | (2.64)         |
| $J_3$                      | Determinante des Deformationsgradienten | (2.24)         |
| $\mathcal{K}$              | Konfiguration                           | Abbildung 2.1  |

|                  |   |               |
|------------------|---|---------------|
| $\mathbb{K}$     | Ableitung nach Knotenfreiheitsgraden          | (2.78)        |
| $N_{IP}, N_{MW}$ | Anzahl Integrationsstellen / Maxwell-Elemente | (5.8), (5.37) |
| $\mathcal{P}$    | Leistung                                      | (2.37)        |
| $r$              | Wärmequelle                                   | (2.44)        |
| $s$              | Spezifische Entropie                          | (2.48)        |

**Skalare (griechische Symbole)**

| Symbol              | Beschreibung                       | Beispiel       |
|---------------------|------------------------------------|----------------|
| $\alpha$            | Thermischer Ausdehnungskoeffizient | (5.14)         |
| $\beta$             | Faserwinkel                        | Abbildung 6.1  |
| $\delta$            | Kronecker-Delta                    | (2.2)          |
| $\eta$              | Viskosität                         | (5.52)         |
| $\gamma$            | Kristallisationsgrad               | (6.17)         |
| $\lambda$           | Wärmeleitfähigkeit                 | (5.59)         |
| $\psi$              | Spezifische freie Energie          | (2.51)         |
| $\varphi$           | Thermische Ausdehnungsfunktion     | (5.19)         |
| $\varrho$           | Dichte                             | (2.39)         |
| $\rho$              | Faserdichtefunktion                | (2.79)         |
| $\tau$              | Dämpfungsparameter                 | (6.17)         |
| $\vartheta, \Theta$ | Temperatur, Knotentemperatur       | (2.49), (2.73) |
| $\xi$               | Relative Koordinate                | (5.30)         |

**Vektoren**

| Symbol                         | Beschreibung                                   | Gleichung      |
|--------------------------------|--|----------------|
| $\underline{a}$                | Transformierte Richtung                        | (2.83)         |
| $\underline{\nabla}$           | Nabla-Operator                                 | (2.23)         |
| $\underline{n}$                | Normalenvektor                                 | (2.17)         |
| $\underline{p}$                | Untransformierte Richtung                      | (2.83)         |
| $\underline{q}$                | Wärmestrom                                     | (2.44)         |
| $\underline{Q}$                | Knotenkraftvektor                              | (3.28)         |
| $\underline{r}$                | Ortsvektor                                     | (2.18)         |
| $\underline{t}$                | Spannungsvektor                                | (2.33)         |
| $\underline{u}, \underline{U}$ | Verschiebungsvektor, Knotenverschiebungsvektor | (2.18), (2.73) |

$\underline{v}$  Geschwindigkeitsvektor (2.11)

### Tensoren zweiter und höherer Stufe

| Symbol   | Beschreibung                                     | Gleichung      |
|--|--|----------------|
| $\underline{\underline{A}}, \underline{\underline{\underline{A}}}$   | 2., 4. Moment der Faserdichtefunktion            | (2.81)         |
| $\underline{\underline{B}}$  | B-Tensor der Angular Central Gaussian Verteilung | (2.82)         |
| $\underline{\underline{C}}$  | Rechter Cauchy-Green-Tensor                      | (2.25)         |
| $\underline{\underline{D}}$  | Tensor der Deformationsgeschwindigkeiten         | (2.29)         |
| $\underline{\underline{F}}$  | Deformationsgradient                             | (2.20)         |
| $\underline{\underline{\gamma}}$   | Green-Lagrange-Verzerrungstensor                 | (2.26)         |
| $\underline{\underline{H}}$  | Verschiebungsgradient                            | (2.21)         |
| $\underline{\underline{\underline{D}}}, \underline{\underline{\underline{S}}}$<br>$\underline{\underline{\underline{J}}}, \underline{\underline{\underline{J}}}$ | Deviatorisierer, Symmetrisierer                  | (2.14), (2.13) |
| $\underline{\underline{L}}$  | Geschwindigkeitsgradient                         | (2.28)         |
| $\underline{\underline{\lambda}}$  | Wärmeleitfähigkeitstensor                        | (5.57)         |
| $\underline{\underline{P}}$  | Strukturtensor                                   | (2.62)         |
| $\underline{\underline{\sigma}}$   | Cauchy-Spannungstensor                           | (2.33)         |
| $\underline{\underline{\tau}}$   | Kirchhoff-Spannungstensor                        | (2.35)         |
| $\underline{\underline{\underline{T}}}, \underline{\underline{\underline{\tilde{T}}}}$   | 1., 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor           | (2.34), (2.36) |

# 1 Einleitung

## 1.1 Einordnung der Arbeit

Faserverstärkte Kunststoffe vereinen die positiven Eigenschaften der Kunststoffe wie beispielsweise niedrige Dichte, gute Isolation, Korrosionsbeständigkeit und leichte Formbarkeit mit der verstärkenden Wirkung steifer Fasern. Damit bieten sie beispielsweise in der Automobilbranche eine Alternative zu konventionellen Werkstoffen mit hoher Dichte wie Stahl. Vor dem Hintergrund der Wirtschaftlichkeit und Ressourceneffizienz werden an der *TU Chemnitz* im Rahmen des Bundesexzellenzclusters *MERGE* großserientaugliche Produktionsverfahren für kurzfaserverstärkte Thermoplaste entwickelt.

Ein solches Verfahren ist das urformende Thermoplast-Spritzgießen, welches sich durch folgende Prozessschritte auszeichnet. Der zu verarbeitende Werkstoff wird in einer Plastifiziereinheit aufgeschmolzen und zur Einspritzdüse transportiert. Von dort wird er unter hohem Druck innerhalb kürzester Zeit in die formgebende Kavität gespritzt. Diese ist in der Regel an ein Kühlsystem angeschlossen, damit die Wärme der Schmelze abtransportiert werden kann. Während der Abkühlung erfährt die Schmelze einen Nachdruck. Nach Ablauf der Kühlzeit wird das abgekühlte Bauteil aus der Kavität ausgestoßen und der Umgebungstemperatur ausgesetzt. Weiterführende Grundlagen des Spritzgießens sind unter anderem den Arbeiten von Johannaber & Michaeli (2002) und Stitz & Keller (2001) zu entnehmen. Anders als beim Duroplast-Spritzgießen ist die Schmelze weniger dünnflüssig und weist dadurch ein anderes Fließverhalten mit den eingebetteten Kurzfasern auf. Dafür ermöglicht das Thermoplast-Spritzgießen niedrigere Taktzeiten pro Bauteil.

Während des Spritzgießens durchläuft das Material verschiedene physikalische Vorgänge, die sich auf seine thermomechanischen Eigenschaften auswirken. Ein solcher prägender Prozess ist der Wärmeaustausch mit der Kavität. Während die Schmelze ihre Wärme an der Wand der Spritzgussform abgibt, besitzt der Kern des Bauteils zunächst noch annähernd seine ursprüngliche Einspritztemperatur und kühlt zeitlich verzögert ab. Demzufolge erstarren die Außenbereiche des Bauteils eher als der innere Kernbereich, was wiederum die Entstehung von Eigenspannungen hervorruft, weil sich das Material im Kern nicht frei zusammenziehen kann. Während des Phasenübergangs von Schmelze zu Festkörper finden signifikante Änderungen der Steifigkeit des Materials statt. Weiterhin wirken sich zusätzlich benötigte Kristallisationsenthalpien auf die Abkühlgeschwindigkeit aus. Durch das Einbringen von Kurzfasern wird in dem Material eine Anisotropie induziert. Anders als beispielsweise bei Gelegen mit hoher Parallelität der Fasern über große Bereiche

des Bauteils, variieren die Orientierungsverteilungen der Fasern an jedem Punkt der spritzgegossenen Bauteile in Folge der Schmelzströmung.

Das vielschichtige Zusammenspiel der thermischen und mechanischen Effekte beim Spritzgießen hat zur Folge, dass Eigenschaften wie zum Beispiel Formtreue und Steifigkeit des fertigen Bauteils eine hohe Sensitivität gegenüber Variationen im Spritzgussprozess besitzen. So kann bereits ein Wechsel der Position des Einspritzpunktes eine andere Verteilung der Faserorientierungen hervorrufen und damit die versteifende Wirkung der Kurzfasern ändern. Inwiefern sich die Prozessparameter auf die resultierenden mechanischen Eigenschaften des Bauteils auswirken, wird an der *TU Chemnitz* im *Forschungsfeld F* des Exzellenzclusters *MERGE* mit Hilfe von Simulationen untersucht.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung eines Materialmodells zur Beschreibung des Materialverhaltens kurzfaserverstärkter Thermoplaste. Das Materialmodell berücksichtigt insbesondere eine hohe Bandbreite von Faserorientierungsverteilungen und wird für große Deformationen ausgelegt, sodass es auch bei faserverstärkten Elastomeren Anwendung finden kann. Des Weiteren enthält es eine thermodynamisch konsistente Beschreibung des Phasenübergangs. Die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells zur Abbildung verschiedener Faserorientierungszustände basieren auf den Erkenntnissen aus Homogenisierungen mit repräsentativen Volumenelementen. Da das Materialmodell für Bauteile mit thermoplastischem Werkstoff, die unter Betriebslast keine plastische Deformation erfahren, ausgelegt wird, entfällt die Modellierung plastischen Materialverhaltens.

Anwendung findet das Materialmodell bei der Simulation der Abkühlung eines im Spritzguss hergestellten Kettenglieds innerhalb der kommerziellen Finite-Elemente-Umgebung ABAQUS. Dabei wird das Material ab dem Zeitpunkt betrachtet, wenn die Schmelze in der Kavität nicht mehr fließt. Dieses Anwendungsbeispiel veranschaulicht wie die lokalen Informationen über die Faserorientierungsverteilung und die Temperaturverteilung eines Bauteils von einer Strömungssimulation in eine Festkörpersimulation übertragen werden können. Des Weiteren wird aufgezeigt, inwiefern sich eine Änderung des Einspritzpunktes auf die Verteilung der Faserrichtungen beim Füllen der Kavität und die Entstehung von Eigenspannungen beim Abkühlen des Bauteils auswirkt.

Als Werkstoffpaarung für den kurzfaserverstärkten Kunststoff steht ein Verbund aus Polypropylen (PP) der Firma *lyondellbasell* und E-Glas Fasern der Firma *LANXESS* zur Verfügung. Das Polypropylen unter dem Produktnamen *Moplen HP500V* zeichnet sich laut Hersteller durch sein hohes Fließvermögen aus, wodurch es sich zum Füllen dünnwandiger Bauteile eignet. *Moplen HP500V* ist ein isotaktisches, unpolares Homopolymer, welches beim Erstarren aus der Schmelze Teilkristalle mit sphärolithischer Struktur ausbildet. Es nimmt keine Feuchtigkeit auf und besitzt eine Glasübergangstemperatur unterhalb des Gefrierpunktes. Die Fasern bestehen aus E-Glas und werden der PP-Schmelze mit einem Längen-Dicken-Verhältnis von 10 beigemischt. Ihr Anteil am Gesamtvolumen des Bauteils beträgt 20 %.



## 1.2 Inhalt der Arbeit

In Kapitel 2 werden die Grundlagen der Mathematik und Mechanik dargelegt. Nach Einführung einer grundlegenden Tensoralgebra folgen die wichtigsten Gleichungen der Kontinuumsmechanik. Da das in dieser Arbeit entwickelte Materialmodell innerhalb einer Finite-Elemente-Umgebung umgesetzt werden soll, werden die wesentlichen Zusammenhänge der Finite-Elemente-Methode erläutert. Das Kapitel endet mit einem Abschnitt zu Faserorientierungsverteilungen und deren mathematischer Beschreibung.

Kapitel 3 stellt das Prinzip der Homogenisierung mit Hilfe repräsentativer Volumenelemente (RVE) vor. Die RVE-Homogenisierung erlaubt den Einblick in effektive Eigenschaften kurzfaserverstärkter Materialien. Das Kapitel legt sowohl die zu Grunde liegenden Anforderungen an die Randbedingungen der Homogenisierung sowie deren Umsetzung innerhalb der FE-Umgebung ABAQUS dar. Weiterhin werden Methoden zum Genauigkeitsgewinn bei gleich bleibender Anzahl finiter Elemente präsentiert.

Die RVE-Homogenisierung findet in Kapitel 4 Anwendung. Nachdem eine Methode zur Beschleunigung der Rechnungen unter Ausnutzung der Linearität der zu lösenden Gleichungen erklärt wird, erfolgt die Bestimmung der effektiven Steifigkeit, thermischen Deformation, Relaxation und Wärmeleitung von viskoelastischen Faser-Matrix-Verbunden. Die so gewonnen Erkenntnisse zum Einfluss der Faserorientierungsverteilungen auf die wichtigsten thermomechanischen Eigenschaften fließen unmittelbar in die Formulierung des Materialmodells ein. Des Weiteren wird in einem Vergleich mit einer alternativen Faserorientierungsverteilung aufgezeigt, welchen Einfluss die Wahl einer Faserdichtefunktion auf die effektiven mechanischen Eigenschaften hat.

Kapitel 5 beschreibt den Modellierungsrahmen für die Formulierung der konstitutiven Gleichungen zur Bestimmung von Spannung, Dissipation, Entropie und Wärmestrom. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Berücksichtigung der Faserorientierungsverteilung und deren effektive Umsetzung gelegt. Anschließend werden die kinematischen Grundannahmen, basierend auf einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten, vorgestellt. Die Auswertung der Bilanzgleichungen verschafft einen Zugang zu den gesuchten kontinuumsmechanischen Größen. Weiterhin werden wichtige Eigenschaften des Materialmodells veranschaulicht und eine Anpassung an Daten durchgeführt, die in Kapitel 4 mit RVE basierten Homogenisierungen gewonnen worden.

Das Materialmodell greift auf zahlreiche Materialparameter und -funktionen zurück, deren Identifikation anhand geeigneter Experimente Gegenstand des Kapitels 6 ist. Die experimentelle Basis umfasst die spannungsfreie Ausdehnung in Folge von Erwärmung, Relaxationsversuche bei unterschiedlichen Temperaturen sowie kalorimetrische Versuche mittels DSC-Verfahren. Eine Übersicht aller identifizierten Materialparameter ist am Ende dieses Kapitels zu finden.

Kapitel 7 zeigt die Umsetzung des Materialmodells innerhalb der kommerziellen FE-Umgebung ABAQUS auf. Insbesondere wird die Übertragung der konstitutiven Gleichungen auf die für ABAQUS benötigte Momentankonfiguration erläutert. Deren korrekte Umsetzung wird am Beispiel einer stark rotierenden Platte überprüft. Anschließend wird die Simulation der Abkühlung eines im Spritzguss gefertigten Kettenglieds gezeigt. Dabei wird der Einfluss der Position des Einspritzpunktes auf die Entwicklung des Temperaturfeldes und der Eigenspannungen untersucht. Die Simulation einer zyklischen Deformation des Kettenglieds veranschaulicht schließlich die Selbsterwärmung infolge dissipativer Vorgänge im Material.

Kapitel 8 fasst die Ergebnisse der Arbeit zusammen und stellt die Möglichkeiten weiterer Forschungsarbeiten vor.

## 2 Grundlagen

Die in diesem Kapitel beschriebenen Grundlagen dienen der Schaffung einer kontinuumsmechanischen Basis zur Formulierung des konstitutiven Stoffgesetzes. Die Notation des zu Grunde liegenden Tensorformalismus orientiert sich maßgeblich an der Schreibweise in den Arbeiten von Ihlemann (2003, 2014).

### 2.1 Grundlagen der Tensoralgebra

Der Begriff des Tensors n-ter Stufe beschreibt eine gerichtete Größe mit n Richtungsinformationen. Folgend sind Beispiele für Tensoren unterschiedlicher Stufen aufgeführt

$$\begin{aligned}
 s & \dots \text{Tensor 0. Stufe (Skalar)} \\
 \underline{v} = v_a \underline{e}_a & \dots \text{Tensor 1. Stufe (Vektor)} \\
 \underline{\underline{X}} = X_{ab} \underline{e}_a \circ \underline{e}_b & \dots \text{Tensor 2. Stufe} \\
 \underline{\underline{\underline{K}}} = K_{abcd} \underline{e}_a \circ \underline{e}_b \circ \underline{e}_c \circ \underline{e}_d & \dots \text{Tensor 4. Stufe}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Ein Tensor verknüpft eine Koeffizientenmatrix (z. B.:  $X_{ab}$ ) über die Einstein'sche Summationskonvention mit den Basisvektoren (z. B.:  $\underline{e}_a, \underline{e}_b$ ). Wird der Dimension der Basisvektoren ein euklidischer Raum zu Grunde gelegt, spannen diese eine karthesische Basis mit den Vektoren  $\underline{e}_x, \underline{e}_y, \underline{e}_z$  auf. Ein Tensor 0. Stufe entspricht einem einfachen Skalar und enthält keine Richtungsinformation. Dementsprechend entfällt der Basisvektor. Das einfache Punktprodukt zweier Basisvektoren ist über das Kronecker-Delta  $\delta$  definiert

$$\underline{e}_a \cdot \underline{e}_b = \delta_{ab} \quad \text{mit:} \quad \delta_{ab} = \begin{cases} 1, & a = b \\ 0, & a \neq b \end{cases} . \tag{2.2}$$

Da sich diese Arbeit ganz wesentlich auf algebraische Operationen von Tensoren 2. Stufe stützt, werden wichtige Vertreter dieser Operationen nachfolgend erläutert. Beliebige Tensoren 2. Stufe lassen sich über unterschiedliche Produkte miteinander verknüpfen

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{Z}} &= X_{ab} Z_{bc} \underline{e}_a \circ \underline{e}_c & \dots \text{einfaches Punktprodukt} \\
 \underline{\underline{X}} \circ \underline{\underline{Z}} &= X_{ab} Z_{cd} \underline{e}_a \circ \underline{e}_b \circ \underline{e}_c \circ \underline{e}_d & \dots \text{dyadisches Produkt} \\
 \underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{\underline{Z}}} &= X_{ab} Z_{cd} \delta_{bc} \delta_{ad} = X_{ab} Z_{ba} & \dots \text{doppeltes Punktprodukt}
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Während das einfache und das doppelte Punktprodukt die Basisvektoren der Tensoren entsprechend Gleichung (2.2) überschieben und damit die Stufe des resultierenden Tensors

herabsetzen, erhöht das dyadische Produkt die Stufe des resultierenden Tensors. Es sei betont, dass das doppelte Punktprodukt die Basisvektoren von innen nach außen miteinander verknüpft. Der zweistufige Einheitstensor  $\underline{\underline{I}}$  ergibt sich zu

$$\underline{\underline{I}} = \underline{e}_a \circ \underline{e}_a \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{I}} = \underline{\underline{X}}. \quad (2.4)$$

Die Transponierte  $\underline{\underline{X}}^T$  eines Tensors  $\underline{\underline{X}}$  folgt mit dem Vertauschen der Basisvektoren

$$\underline{\underline{X}}^T = X_{ab} \underline{e}_b \circ \underline{e}_a. \quad (2.5)$$

Die Inverse  $\underline{\underline{X}}^{-1}$  ergibt im Punktprodukt mit dem Tensor  $\underline{\underline{X}}$  den Einheitstensor

$$\underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{X}}^{-1} = \underline{\underline{I}}. \quad (2.6)$$

Tensoren 2. Stufe lassen sich in verschiedene Anteile zerlegen. Als ein Beispiel für solch eine Zerlegung ist die Aufteilung in einen symmetrischen Anteil  $\underline{\underline{X}}^S$  und einen antimetrischen Anteil  $\underline{\underline{X}}^A$  zu nennen

$$\underline{\underline{X}}^S = \frac{1}{2} (\underline{\underline{X}} + \underline{\underline{X}}^T) \quad ; \quad \underline{\underline{X}}^A = \frac{1}{2} (\underline{\underline{X}} - \underline{\underline{X}}^T). \quad (2.7)$$

Der spurfreie Deviator  $\underline{\underline{X}}'$  eines Tensors 2. Stufe folgt mit

$$\underline{\underline{X}}' = \underline{\underline{X}} - \frac{1}{3} (\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{X}}) \underline{\underline{I}}. \quad (2.8)$$

Der unimodulare Anteil  $\underline{\underline{X}}^{\bar{}}$  eines Tensors  $\underline{\underline{X}}$  ist wie folgt definiert

$$\underline{\underline{X}}^{\bar{}} = (\det \underline{\underline{X}})^{-1/3} \underline{\underline{X}} \quad (2.9)$$

und besitzt die Determinante Eins. Die Frobenius-Norm  $\|\underline{\underline{X}}\|$  berechnet sich zu

$$\|\underline{\underline{X}}\| = \sqrt{\underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{X}}^T}. \quad (2.10)$$

Die Zeitableitung  $\dot{\underline{\underline{X}}}$  eines vom Ort  $\underline{r}$  und der Zeit  $t$  abhängigen Tensors  $\underline{\underline{X}}(\underline{r}(t), t)$  ist als materielle Zeitableitung zu verstehen

$$\dot{\underline{\underline{X}}} = \left. \frac{\partial \underline{\underline{X}}}{\partial t} \right|_{\underline{r}=\text{konst.}} + \underline{v} \cdot (\underline{\nabla} \circ \underline{\underline{X}}) \quad (2.11)$$

und stützt sich auf den Geschwindigkeitsvektor  $\underline{v}$  sowie den in Gleichung (2.23) eingeführten Nabla Operator  $\underline{\nabla}$ . Mit Blick auf die Ableitung nach Tensoren 2. Stufe spielen einige Tensoren 4. Stufe eine wichtige Rolle. Als Vertreter solcher vierstufigen Tensoren sind die isotropen Tensoren  $\underline{\underline{\underline{J}}}_1, \underline{\underline{\underline{J}}}_2, \underline{\underline{\underline{J}}}_3$  mit den Eigenschaften

$$\underline{\underline{\underline{J}}}_1 \cdot \underline{\underline{X}} = (\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{X}}) \underline{\underline{I}} \quad ; \quad \underline{\underline{\underline{J}}}_2 \cdot \underline{\underline{X}} = \underline{\underline{X}}^T \quad ; \quad \underline{\underline{\underline{J}}}_3 \cdot \underline{\underline{X}} = \underline{\underline{X}} \quad (2.12)$$

zu nennen. Durch Linearkombination dieser Tensoren ergeben sich weitere nützliche Tensoren wie beispielsweise

$$\underline{\underline{J}}^S = \frac{1}{2} \left( \underline{\underline{J}}^2 + \underline{\underline{J}}^3 \right) \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{J}}^S \cdot \underline{\underline{X}} = \underline{\underline{X}}^S \quad (2.13)$$

sowie

$$\underline{\underline{J}}^D = \underline{\underline{J}}^3 - \frac{1}{3} \underline{\underline{J}} \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{J}}^D \cdot \underline{\underline{X}} = \underline{\underline{X}}'. \quad (2.14)$$

Das einfache Punktprodukt dreier zweistufiger Tensoren lässt sich mittels des  $(\bullet)^{T_{24}}$  Operators in einen Ausdruck mit doppeltem Punktprodukt überführen

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{B}} = (\underline{\underline{A}} \circ \underline{\underline{B}})^{T_{24}} \cdot \underline{\underline{X}}. \quad (2.15)$$

Wird der  $(\bullet)^{T_{24}}$  Operator von links und rechts zusätzlich symmetrisiert, resultiert daraus der  $(\bullet)^{S_{24}}$  Operator

$$(\bullet)^{S_{24}} = \underline{\underline{J}}^S \cdot (\bullet)^{T_{24}} \cdot \underline{\underline{J}}^S. \quad (2.16)$$

Gebietsintegrale einer Verknüpfung mit dem Nabla Operator  $\underline{\nabla}$  stehen über den Gauß'schen Integralsatz mit Randintegralen und dem Normalenvektor  $\underline{n}$  in Verbindung

$$\int_{\mathcal{G}} \underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{X}} \, dV = \oint_{\mathcal{R}} \underline{n} \cdot \underline{\underline{X}} \, dA. \quad (2.17)$$

## 2.2 Grundlagen der Kontinuumsmechanik

### 2.2.1 Tensoren zur Beschreibung großer Deformation

Die Beschreibung des Deformationszustandes eines Körpers mittels geeigneter Tensoren bildet die Grundlage für weitere kontinuumsmechanische Betrachtungen. Abbildung 2.1 stellt den Zustand eines Körpers zu zwei Zeitpunkten dar. In der Momentankonfiguration  $\mathcal{K}$  zum aktuellen Zeitpunkt  $t$  nimmt der Körper das Gebiet  $\mathcal{G}$  ein. Jeder Punkt des Körpers lässt sich über einen Ortsvektor  $\underline{r}$  beschreiben. In der Referenzkonfiguration  $\tilde{\mathcal{K}}$  nimmt der Körper das Gebiet  $\tilde{\mathcal{G}}$  ein. Der gleiche Punkt des Körpers wird von dem Ortsvektor  $\tilde{\underline{r}}$  beschrieben. Die Differenz beider Ortsvektoren definiert die Verschiebung, die der Punkt

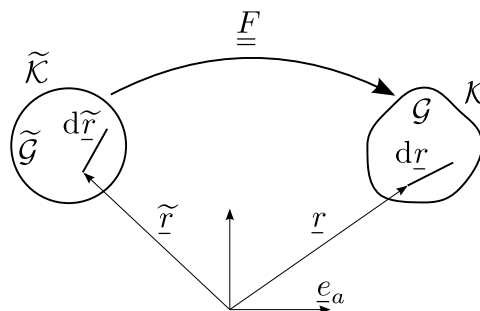


Abbildung 2.1: Deformation eines Körpers.

zwischen Referenz- und Momentankonfiguration erfährt

$$\underline{u} = \underline{r} - \underline{\tilde{r}}. \quad (2.18)$$

Der Nabla-Operator  $\underline{\tilde{\nabla}}$  der Referenzkonfiguration

$$\underline{\tilde{\nabla}} = \frac{\partial}{\partial \underline{\tilde{r}}_a} \underline{e}_a \quad (2.19)$$

erlaubt die Definition des Deformationsgradienten  $\underline{\underline{F}}$

$$\underline{\underline{F}} = \frac{\partial \underline{r}}{\partial \underline{\tilde{r}}} = (\underline{I} + \underline{\tilde{\nabla}} \circ \underline{u})^T \quad \text{mit:} \quad \det \underline{\underline{F}} > 0. \quad (2.20)$$

Die Differenz von Deformationsgradienten und Einheitstensor wird dem Verschiebungsgradienten  $\underline{\underline{H}}$  zugeordnet

$$\underline{\underline{H}} = \underline{\underline{F}} - \underline{I} = (\underline{\tilde{\nabla}} \circ \underline{u})^T. \quad (2.21)$$

Der Deformationsgradient  $\underline{\underline{F}}$  bildet materielle Linienelemente  $d\underline{r}$  von einer Konfiguration auf die andere über die Gleichung

$$d\underline{r} = \underline{\underline{F}} \cdot d\underline{\tilde{r}} \quad (2.22)$$

ab. Zwischen den Nabla-Operatoren der Referenz- und Momentankonfiguration besteht der Zusammenhang

$$\underline{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r_a} \underline{e} = \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \underline{\tilde{\nabla}}. \quad (2.23)$$

Die Determinante des Deformationsgradienten setzt Volumenelemente  $dV$  und  $d\tilde{V}$  über das Verhältnis

$$J_3 = \det \underline{\underline{F}} = \frac{dV}{d\tilde{V}} \quad (2.24)$$

in Verbindung. Der Deformationsgradient  $\underline{\underline{F}}$  stützt sich auf Vektoren beider Konfigurationen und ist damit eine sogenannte gemischte Größe. Aus  $\underline{\underline{F}}$  lassen sich jedoch Verzerrungsmaße ableiten, die einzig der Referenzkonfiguration (Lagrange'sche Tensoren) oder der Momentankonfiguration (Euler'sche Tensoren) zuzuordnen sind. Als Vertreter Lagrange'scher Verzerrungstensoren sind der rechte Cauchy-Green-Tensor  $\underline{\underline{C}}$

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{F}}^T \cdot \underline{\underline{F}} \quad (2.25)$$

sowie der Green-Lagrange-Tensor  $\underline{\underline{\gamma}}$

$$\underline{\underline{\gamma}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{C}} - \underline{I}) \quad (2.26)$$

zu nennen. Demgegenüber steht der linke Cauchy-Green-Tensor  $\underline{\underline{b}}$

$$\underline{\underline{b}} = \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{F}}^T, \quad (2.27)$$

dessen Basisvektoren in der Momentankonfiguration existieren. Die Zeitableitung der Beziehung (2.22) liefert die Definition des Geschwindigkeitsgradienten  $\underline{\underline{L}}$

$$d\underline{v} = \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot d\underline{\tilde{r}} = \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot d\underline{r} \rightsquigarrow \underline{\underline{L}} = \dot{\underline{\underline{F}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}. \quad (2.28)$$

Eine Zerlegung von  $\underline{\underline{L}}$  liefert den symmetrischen Tensor der Formänderungsgeschwindigkeiten  $\underline{\underline{D}}$  sowie den antimetrischen Drehgeschwindigkeitstensor  $\underline{\underline{W}}$

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{W}} \quad ; \quad \underline{\underline{D}} = \underline{\underline{L}}^S \quad ; \quad \underline{\underline{W}} = \underline{\underline{L}}^A. \quad (2.29)$$

Zwischen der Zeitableitung  $\dot{\underline{\underline{C}}}$  des rechten Cauchy-Green-Tensors und dem Tensor  $\underline{\underline{D}}$  besteht der Zusammenhang

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2} \underline{\underline{F}}^{-T} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1}. \quad (2.30)$$

Weiterhin lässt sich die zeitliche Rate von  $\underline{\underline{\gamma}}$  über  $\dot{\underline{\underline{C}}}$  ausdrücken

$$\dot{\underline{\underline{\gamma}}} = \frac{1}{2} \dot{\underline{\underline{C}}}. \quad (2.31)$$

Für den Fall eines spurfreien Tensors  $\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{D}}'$  folgt automatisch eine isochore Deformation mit  $J_3 = \text{konst.}$ , denn es gilt

$$\dot{J}_3 = J_3(\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{D}}) = 0. \quad (2.32)$$

## 2.2.2 Spannungstensoren

Die Spannungen eines freigeschnittenen Körpers lassen sich aus der Betrachtung der resultierenden Kräfte an den Schnittflächen gewinnen. Die Schnittflächen werden durch den Normalenvektor  $\underline{n}$  sowie dem auf der Schnittfläche wirkenden Spannungsvektor  $\underline{t}$  bestimmt. Letzteres entspricht einer Beschreibung auf der Momentankonfiguration. Die analogen Größen des Normalenvektors und des Spannungsvektors auf der Referenzkonfiguration werden von  $\tilde{\underline{n}}$  und  $\tilde{\underline{t}}$  beschrieben. Mit Hilfe der Spannungs- und Normalvektoren lassen sich der Cauchy-Spannungstensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  über

$$\underline{t} = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (2.33)$$

sowie der 1. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor  $\underline{\underline{T}}$  über

$$\tilde{\underline{t}} = \tilde{\underline{n}} \cdot \underline{\underline{T}} \quad (2.34)$$

definieren. Davon abgeleitete Spannungsmaße sind der Kirchhoff-Spannungstensor  $\underline{\underline{\tau}}$

$$\underline{\underline{\tau}} = J_3 \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{T}} \quad (2.35)$$

sowie der 2. Piola-Kirchhoff-Spannungstensor  $\underline{\underline{\tilde{T}}}$

$$\underline{\underline{\tilde{T}}} = \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-T} = \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-T}. \quad (2.36)$$

Das Gebietsintegral der Spannungsmaße multipliziert mit ihren leistungskonjugierten Deformationsraten liefert die Spannungsleistung  $\mathcal{P}_{\text{Sp}}$  mit

$$\mathcal{P}_{\text{Sp}} = \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{D}} \, dV = \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{D}} \, d\tilde{V} = \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{T}} \cdot \dot{\underline{\underline{F}}} \, d\tilde{V} = \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \dot{\underline{\underline{\gamma}}} \, d\tilde{V}. \quad (2.37)$$

Während die resultierende Spannungsleistung  $\mathcal{P}_{\text{Sp}}$  nicht von der Konfiguration abhängt, sind die Spannungsleistungsdichten  $\underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{\underline{D}}$ ,  $\underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{D}}$ ,  $\underline{\underline{T}} \cdot \dot{\underline{\underline{F}}}$  und  $\underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \dot{\underline{\underline{\gamma}}}$  in ihren jeweiligen Konfigurationen verhaftet.

### 2.2.3 Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik

Die Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik beschreiben die Wechselwirkungen eines Körpers mit seiner Umgebung. Sie gelten unabhängig von dem Material, aus dem der Körper besteht und existieren sowohl in globaler Form (für gesamtes Gebiet des Körpers) als auch in lokaler Form (für Teilgebiet des Körpers). Die wichtigsten Bilanzgleichungen der Kontinuumsmechanik bilden die **Massebilanz**, die **Impulserhaltung** und die **Drehimpulserhaltung** und werden folgend kurz zusammengefasst.

- Die **Massebilanz** postuliert den Erhalt der Masse während einer Deformation und lautet in lokaler Form

$$dm = \tilde{\varrho} d\tilde{V} = \varrho dV = \text{konst.} \quad (2.38)$$

In Verbindung mit Gleichung (2.24) folgt damit der Zusammenhang von Volumen- und Dichteänderung

$$J_3 = \frac{dV}{d\tilde{V}} = \frac{\tilde{\varrho}}{\varrho}. \quad (2.39)$$

- Die **Impulserhaltung** verlangt, dass die resultierende Kraft eines freigeschnittenen Körpers Null bleibt. Unter Vernachlässigung von Volumenkräften gilt in lokaler Form

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = \underline{0} \quad \text{bzw.} \quad \underline{\tilde{\nabla}} \cdot \underline{\underline{T}} = \underline{0}. \quad (2.40)$$

Während Gleichung (2.40)<sub>1</sub> einer Betrachtung der aktuellen Konfiguration zuzuordnen ist, bezieht sich Gleichung (2.40)<sub>2</sub> auf das Referenzvolumen. Die Vernachlässigung der Volumenkräfte stellt keine notwendige, sondern eine zweckmäßige Einschränkung in dieser Arbeit dar.

- Mit der Forderung der **Drehimpulserhaltung** nach einem Null-Moment als resultierendes Moment ergeben sich Symmetrien der Cauchy-Spannung sowie der 2. Piola-Kirchhoff-Spannung

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^T \quad ; \quad \underline{\underline{T}} = \underline{\underline{T}}^T. \quad (2.41)$$

Für eine terminologische Abklärung sei an dieser Stelle auf die Unterscheidung globaler und lokaler Formen einer fiktiven Größe  $\phi$  verwiesen. Der Term  $\tilde{\varrho}\phi$  beschreibt die Dichte von  $\phi$  bezogen auf das Volumen der Referenzkonfiguration. Die Größe  $\phi$  für sich wird als spezifische Größe bezogen auf die Masse bezeichnet. Die Größe  $\Phi$  wird der globalen Form zugeordnet und steht mit den anderen beiden Formen in folgendem Zusammenhang

$$\Phi = \int_B \phi dm = \int_{\tilde{g}} \tilde{\varrho} \phi d\tilde{V} = \int_G \varrho \phi dV. \quad (2.42)$$

### 2.2.4 Bilanzgleichungen der Kontinuumsthermodynamik

Die Bilanzgleichungen der Kontinuumsthermodynamik umfassen die Hauptsätze der Thermodynamik und werden im Folgenden erläutert.



## 1. Hauptsatz der Thermodynamik

Der erste Hauptsatz der Thermodynamik stellt eine Energiebilanz für die Rate der inneren Energie  $E$ , die Wärmeleistung  $\mathcal{P}_Q$  sowie die von den Spannungen verrichtete Leistung  $\mathcal{P}_{Sp}$  auf. Die innere Energie  $E$  ist definiert als

$$E = \int_{\mathcal{B}} e \, dm = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} e \, d\tilde{V} \quad ; \quad \dot{E} = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} \dot{e} \, d\tilde{V}. \quad (2.43)$$

Die Wärmeleistung  $\mathcal{P}_Q$  bilanziert sowohl die Gradienten der Wärmeströme  $\tilde{\underline{q}}$  als auch die Dichten von Wärmequellen  $\tilde{\rho}r$

$$\mathcal{P}_Q = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} -\tilde{\underline{\nabla}} \cdot \tilde{\underline{q}} \, d\tilde{V} + \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} r \, d\tilde{V}. \quad (2.44)$$

Zusammen mit der bereits in Gleichung (2.37) eingeführten Spannungsleistung  $\mathcal{P}_{Sp}$  lautet der 1. Hauptsatz der Thermodynamik in globaler Form

$$\begin{aligned} \dot{E} &= \mathcal{P}_{Sp} + \mathcal{P}_Q, \\ \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} \dot{e} \, d\tilde{V} &= \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\underline{T}} \cdot \cdot \underline{\dot{\underline{\gamma}}} \, d\tilde{V} + \int_{\tilde{\mathcal{G}}} -\tilde{\underline{\nabla}} \cdot \tilde{\underline{q}} \, d\tilde{V} + \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} r \, d\tilde{V} \end{aligned} \quad (2.45)$$

bzw. in lokaler Form

$$\tilde{\rho} \dot{e} = \tilde{\underline{T}} \cdot \cdot \underline{\dot{\underline{\gamma}}} - \tilde{\underline{\nabla}} \cdot \tilde{\underline{q}} + \tilde{\rho} r. \quad (2.46)$$

Für den Sonderfall eines stationären Zustandes ohne Wärmequellen verbleibt vom ersten Hauptsatz die **stationäre Wärmeleitungsgleichung**

$$\tilde{\underline{\nabla}} \cdot \tilde{\underline{q}} = \underline{0}. \quad (2.47)$$

## 2. Hauptsatz der Thermodynamik

Mit Einführung der Entropie  $S$  und ihrer Rate  $\dot{S}$

$$S = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} s \, d\tilde{V} \quad ; \quad \dot{S} = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\rho} \dot{s} \, d\tilde{V} \quad (2.48)$$

sowie der Temperatur  $\vartheta$  beschreibt der zweite Hauptsatz der Thermodynamik die Dissipationsungleichung bzw. Clausius-Duhem-Ungleichung (CDU)

$$\tilde{\mathcal{D}} = \vartheta \tilde{\rho} \dot{s} + (\tilde{\underline{\nabla}} \cdot \tilde{\underline{q}} - \tilde{\rho} r) - \frac{1}{\vartheta} \tilde{\underline{q}} \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \geq 0. \quad (2.49)$$

Die CDU verlangt eine positive innere Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}$ . Mit Einführung des thermischen Anteils  $\tilde{\mathcal{D}}_Q$  der inneren Dissipation und dem Einsetzen des 1. Hauptsatzes (2.46) in die C.D.U. verbleibt

$$\tilde{\mathcal{D}} = \tilde{\underline{T}} \cdot \cdot \underline{\dot{\underline{\gamma}}} - (\tilde{\rho} \dot{e} - \vartheta \tilde{\rho} \dot{s}) + \tilde{\mathcal{D}}_Q \geq 0 \quad \text{mit:} \quad \tilde{\mathcal{D}}_Q = -\frac{1}{\vartheta} \tilde{\underline{q}} \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta). \quad (2.50)$$

Unter Verwendung der Gibbs-Relation

$$\tilde{\varrho}\psi = \tilde{\varrho}e - \vartheta\tilde{\varrho}s \quad (2.51)$$

und deren Zeitableitung

$$\tilde{\varrho}\dot{\psi} = \tilde{\varrho}\dot{e} - \tilde{\varrho}s\dot{\vartheta} - \vartheta\tilde{\varrho}\dot{s} \quad (2.52)$$

lässt sich die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  in die CDU einführen und resultiert in

$$\tilde{\mathcal{D}} = \tilde{\mathcal{D}}_m + \tilde{\mathcal{D}}_Q \geq 0 \quad \text{mit:} \quad \tilde{\mathcal{D}}_m = \underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\gamma}}} - \tilde{\varrho}\dot{\psi} - \tilde{\varrho}s\dot{\vartheta}. \quad (2.53)$$

Die Forderung der Nichtnegativität der inneren Dissipation lässt sich auf die Teildissipationen übertragen

$$\tilde{\mathcal{D}}_m \geq 0 \quad \wedge \quad \tilde{\mathcal{D}}_Q \geq 0. \quad (2.54)$$

Werden Gleichungen (2.52) und (2.53) in den ersten Hauptsatz eingesetzt, verbleibt die kompakte Form

$$\vartheta\tilde{\varrho}\dot{s} = \tilde{\mathcal{D}}_m - \underline{\underline{\tilde{\nabla}}} \cdot \underline{\underline{\tilde{q}}} + \tilde{\varrho}r. \quad (2.55)$$

Die Einführung der spezifischen Enthalpie  $h$  nach Haupt (2002)

$$h = \frac{1}{\tilde{\varrho}} \underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \underline{\underline{\gamma}} - e \quad (2.56)$$

und deren Zeitableitung

$$\dot{h} = \frac{1}{\tilde{\varrho}} \underline{\underline{\dot{\tilde{T}}}} \cdot \underline{\underline{\gamma}} + \frac{1}{\tilde{\varrho}} \underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\gamma}}} - \dot{e} \quad (2.57)$$

liefert eine alternative Form der beiden Hauptsätze der Thermodynamik

$$\begin{aligned} -\tilde{\varrho}\dot{h} &= -\underline{\underline{\dot{\tilde{T}}}} \cdot \underline{\underline{\gamma}} - \underline{\underline{\tilde{\nabla}}} \cdot \underline{\underline{\tilde{q}}} + \tilde{\varrho}r, \\ \tilde{\mathcal{D}} &= -\underline{\underline{\dot{\tilde{T}}}} \cdot \underline{\underline{\gamma}} + \tilde{\varrho}\dot{h} + \vartheta\tilde{\varrho}\dot{s} + \tilde{\mathcal{D}}_Q \geq 0. \end{aligned} \quad (2.58)$$

## 2.2.5 Formulierung der freien Energiedichte mittels Invarianten

Die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  beschreibt die Dichte der Energie, die ein Körper in Folge einer mechanischen oder thermischen Belastung speichert und bei Entlastung wieder abgeben kann. Im Folgenden wird auf Anforderungen an die Formulierung der mechanischen freien Energiedichte in Abhängigkeit von der Deformation des Körpers eingegangen.

Die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi : \underline{\underline{X}} \rightarrow s$  bildet Tensoren (üblicherweise Verzerrungstensoren) 2. Stufe auf einen Skalar ab und muss dabei unter anderem dem Kriterium der materiellen Objektivität (vgl. Truesdell & Noll (2004); Haupt (2002); Holzapfel (2010)) genügen. Dieses Kriterium verlangt eine Unabhängigkeit gegenüber Beobachterrotation, d.h. eine Invarianz, und bedingt

$$\tilde{\varrho}\psi(\underline{\underline{X}}) = \tilde{\varrho}\psi(\underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{X}} \cdot \underline{\underline{Q}}^T) \quad \forall \underline{\underline{Q}} \in \mathcal{O}(3). \quad (2.59)$$

Dabei umfasst  $\mathcal{O}(3)$  die Gruppe aller orthogonalen Transformationen (Rotation und Spiegelung). In der Regel werden aus dieser Gruppe die Spiegelungen ausgeschlossen, was zu der neuen Teilgruppe  $\mathcal{SO}(3)$  führt. Werden statt des Argumentes  $\underline{X}$  selbst, dessen Invarianten eingesetzt, bleibt die Invarianz der freien Energiedichte erhalten und es gilt

$$\tilde{\varrho}\psi(\underline{X}) = \tilde{\varrho}\psi(I_1(\underline{X}), I_2(\underline{X}), \dots). \quad (2.60)$$

Für das Argument lassen sich beliebig viele Invarianten formulieren. Mit Blick auf die Theorien der irreduziblen Integritätsbasis (vgl. Spencer (1961); Smith (1965); Rieger (2004)) findet sich für ein einzelnes Argument ein minimaler Satz von Invarianten

$$I_1 = \underline{I} \cdot \underline{X} \quad ; \quad I_2 = \underline{I} \cdot \underline{X}^2 \quad ; \quad I_3 = \underline{I} \cdot \underline{X}^3. \quad (2.61)$$

Die Berücksichtigung einer ausgezeichneten Richtung  $\tilde{p}$  in der freien Energiedichte erfordert zunächst eine geeignete Tensorrepräsentation zur Wahrung der materiellen Objektivität. Zu diesem Zweck hat sich die Verwendung von Strukturtenoren (vgl. Boehler (1987); Schröder & Neff (2003)) der Form

$$\underline{\tilde{P}} = \tilde{p} \circ \tilde{p} \quad \text{mit:} \quad |\tilde{p}| = 1 \quad (2.62)$$

bewährt. Mit dem Strukturtensor wird ein weiteres Argument in die freie Energiedichte aufgenommen

$$\tilde{\varrho}\psi = \tilde{\varrho}\psi(\underline{X}, \underline{\tilde{P}}), \quad (2.63)$$

was eine Erweiterung der Integritätsbasis um weitere Invarianten nach sich zieht. Wird als Argument  $\underline{X}$  wie in der Literatur üblich (vgl. Holzapfel (2010)) der rechte Cauchy-Green-Tensor  $\underline{C}$  verwendet, folgt die Menge der linear unabhängigen Invarianten

$$\begin{aligned} I_1 &= \underline{I} \cdot \underline{C} & I_2 &= \frac{1}{2} [(\underline{I} \cdot \underline{C})^2 - \underline{I} \cdot \underline{C}^2] & I_3 &= J_3 = \det \underline{F}, \\ I_4 &= \underline{C} \cdot \underline{\tilde{P}} & I_5 &= \underline{C}^2 \cdot \underline{\tilde{P}}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Neben den in Gleichung (2.64) aufgeführten Invarianten existieren zahlreiche andere Formulierungen für Invarianten. Ihnen gemein ist allerdings, dass sie sich alle auf Linearkombinationen von  $I_1$  bis  $I_5$  zurückführen lassen.

## 2.2.6 Multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten

Die Modellierung komplexeren physikalischen Verhaltens lässt sich in der Regel nicht mehr mit einem einzigen Deformationsmaß beschreiben. Aus diesem Grund wurden verschiedene Ansätze zur Aufteilung der kinematischen Grundgleichungen in mehrere Bestandteile entwickelt. Die Arbeit von Xiao et al. (2006) gibt eine sehr ausführliche Übersicht dieser Konzepte. Eines davon legt eine multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten zu Grunde und geht zurück auf die Arbeit von Kröner (1959). Darin lässt sich der

Deformationsgradient  $\underline{\underline{F}}$  als eine Nacheinanderausführung zweier Teildeformationen  $\underline{\underline{F}}_1$  und  $\underline{\underline{F}}_2$  verstehen

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_2 \cdot \underline{\underline{F}}_1. \quad (2.65)$$

Diese Annahme bedingt die Existenz einer fiktiven Zwischenkonfiguration  $\widehat{\mathcal{K}}$ . Der Deformationsgradient  $\underline{\underline{F}}_1$  bildet Linienelemente  $d\tilde{r}$  von der Referenzkonfiguration  $\widehat{\mathcal{K}}$  auf die Zwischenkonfiguration  $\widehat{\mathcal{K}}$  ab. Die Abbildung der Linienelemente  $d\widehat{r}$  auf die Momentankonfiguration  $\mathcal{K}$  wird von der zweiten Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_2$  beschrieben. Es gilt

$$d\widehat{r} = \underline{\underline{F}}_1 \cdot d\tilde{r} \quad ; \quad d\underline{r} = \underline{\underline{F}}_2 \cdot d\widehat{r}. \quad (2.66)$$

Anwendung findet die multiplikative Zerlegung bei verschiedenen Problemstellungen wie beispielsweise

- **Thermisch-mechanische Zerlegung:**

Die auf die Arbeit von Lu & Pister (1975) zurückgehende Zerlegung  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_m \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta(\vartheta)$  in eine mechanische ( $\underline{\underline{F}}_m$ ) und eine thermische ( $\underline{\underline{F}}_\vartheta$ ) Teildeformation erlaubt eine eindeutige Bestimmung der mechanischen Teildeformation aus der Gesamtdeformation  $\underline{\underline{F}}$  und der Temperatur  $\vartheta$ .

- **Trennung von Gestalt- und Volumenänderung:**

Die Trennung der Gestaltänderungsanteile  $\underline{\underline{F}}$  und Volumenänderungsanteile  $\overset{V}{\underline{\underline{F}}}$  durch die Zerlegung  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}} \cdot \overset{V}{\underline{\underline{F}}}$  wurde erstmals in der Arbeit von Flory (1961) vorgestellt. Beide Teildeformationen lassen sich unmittelbar aus der Gesamtdeformation ausrechnen.

- **Elastisch-inelastische Zerlegung:**

Die Aufspaltung des Deformationsgradienten  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_e \cdot \underline{\underline{F}}_i$  in einen elastischen ( $\underline{\underline{F}}_e$ ) und einen inelastischen ( $\underline{\underline{F}}_i$ ) Anteil stellt einen Ansatz zur Modellierung verschiedener Materialklassen dar. In der Arbeit von Lubliner (1985) wird der Ansatz auf die Modellierung viskoelastischen Materialverhaltens übertragen. Im Gegensatz zu den bisherigen Beispielen der multiplikativen Zerlegung bedarf es einer weiteren konstitutiven Gleichung zur Bestimmung der Teildeformationen.

Eine Schwachstelle der multiplikativen Zerlegung liegt in der Unbestimmtheit der Zwischenkonfiguration  $\widehat{\mathcal{K}}$ . Die Arbeit von Xiao et al. (2006) weist darauf hin, dass den Teildeformationen beliebige Rotationen  $\underline{\underline{Q}}$  derart hinzugefügt werden können ( $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_2 \cdot \underline{\underline{Q}}^T \cdot \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{F}}_1$ ), dass die Gleichung (2.65) nicht verletzt wird. Diese Unbestimmtheit der Rotationen wirkt sich wiederum negativ aus, wenn auf der zweiten Teildeformationen freie Energiedichten mit Abhängigkeit von einer normierten Richtung  $\widehat{r}$  verhaftet sind. Diesem Problem lässt sich beispielsweise durch die Vorgabe einer kompletten Teildeformation (vgl. Unterabschnitt 5.2.4) oder der Vorgabe einer Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_1$ , bei der Vektoren  $\tilde{r} = \widehat{r}$  keine Rotation erfahren, begegnen.

## 2.3 Finite-Elemente-Methode

Die in Gleichung (2.40) beschriebene Impulserhaltung sowie die in Gleichung (2.55) formulierte Energiebilanz des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik stellen Systeme partieller Differentialgleichungen dar, deren analytische Lösung im Allgemeinen nicht existiert. Einen Zugang zur Lösung der zu Grunde liegenden Feldgleichungen bietet die Finite-Elemente-Methode (FEM) nach Überführung des Feldproblems in seine schwache Form. Das Grundprinzip der FEM soll im Folgenden kurz erläutert und am Beispiel des thermomechanisch gekoppelten Feldproblems in der Referenzkonfiguration aufgeführt werden. Die Herleitung der zugehörigen Gleichungen kann Standardwerken wie Zienkiewicz (1987); Bathe (2002); Parisch (2003) und Wriggers (2001) entnommen werden.

### 2.3.1 Grundgleichungen der FEM

Das Überschieben der globalen Form des Impulserhaltungssatzes mit einer virtuellen Verschiebung  $\delta \underline{u}$  liefert die schwache Form des Impulserhaltungssatzes

$$\int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\underline{T}} \cdot \tilde{\underline{F}}^T) \cdot \delta \underline{u} \, d\tilde{V} = 0. \quad (2.67)$$

Unter Ausnutzung der Produktregel sowie des Gauß'schen Integralsatzes lässt sich die schwache Formulierung in ein Gebiets- und ein Randintegral aufteilen

$$\int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\underline{T}} \cdot [\tilde{\underline{F}}^T \cdot (\tilde{\nabla} \circ \delta \underline{u})^T] \, d\tilde{V} - \oint_{\tilde{\mathcal{R}}} \tilde{\underline{t}} \, d\tilde{A} \cdot \delta \underline{u} = 0. \quad (2.68)$$

Mit Hilfe der Definition (2.20) des Deformationsgradienten folgt das Funktional

$$\mathcal{F}_u(\underline{u}, \vartheta, \delta \underline{u}) = \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\underline{T}} \cdot \delta \underline{\gamma} \, d\tilde{V} - \oint_{\tilde{\mathcal{R}}} \tilde{\underline{t}} \, d\tilde{A} \cdot \delta \underline{u} = 0 \quad (2.69)$$

mit dem virtuellen Verzerrungstensor  $\delta \underline{\gamma} = [(\tilde{\nabla} \circ \delta \underline{u})^T + (\tilde{\nabla} \circ \underline{u}) \cdot (\tilde{\nabla} \circ \delta \underline{u})^T]^S$ .

Das zu  $\mathcal{F}_u$  analoge Funktional  $\mathcal{F}_\vartheta$  wird aus der Überführung der Energiebilanz in die schwache Formulierung gewonnen. Zu diesem Zweck erfolgt eine Überschiebung der globalen Energiebilanz mit einer virtuellen Temperatur  $\delta \vartheta$

$$\int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\varrho} \dot{s} \delta \vartheta \, d\tilde{V} + \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\underline{q}} \delta \vartheta \, d\tilde{V} - \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\mathcal{D}}_m \delta \vartheta \, d\tilde{V} = 0. \quad (2.70)$$

Da in dieser Arbeit keine Wärmequellen  $\tilde{\varrho} r$  verwendet werden, entfallen sie bei den Betrachtungen der Energiebilanz. Nach der Anwendung der Produktregel sowie des Gauß'schen Integralsatzes verbleibt

$$\int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\varrho} \dot{s} \delta \vartheta \, d\tilde{V} - \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\mathcal{D}}_m \delta \vartheta \, d\tilde{V} + \oint_{\tilde{\mathcal{R}}} \tilde{\underline{n}} \cdot \tilde{\underline{q}} \delta \vartheta \, d\tilde{A} + \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\nabla}(\delta \vartheta) \cdot \tilde{\underline{q}} \, d\tilde{V} = 0. \quad (2.71)$$

Mit der gängigen Annahme des Fourier-Modells (vgl. Gleichung (5.56)) folgt das gesuchte Funktional

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\vartheta(\underline{u}, \vartheta, \delta \vartheta) &= \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\varrho} \dot{s} \delta \vartheta \, d\tilde{V} - \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\mathcal{D}}_m \delta \vartheta \, d\tilde{V} \\ &+ \oint_{\tilde{\mathcal{R}}} \tilde{\underline{n}} \cdot \tilde{\underline{q}} \delta \vartheta \, d\tilde{A} - \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\nabla}(\delta \vartheta) \cdot \tilde{\underline{\lambda}} \cdot \tilde{\nabla}(\vartheta) \, d\tilde{V} = 0. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Das betrachtete Gebiet erfährt eine räumliche Diskretisierung mit finiten Elementen, deren Ansatzfunktionen  $\hat{N}_K^u$  und  $\hat{N}_K^\vartheta$  das Verschiebungsfeld  $\underline{u}$  und die Temperatur  $\vartheta$  innerhalb eines Elementes mit  $K$  Knoten interpolieren

$$\underline{u}(\tilde{r}) = \hat{N}_K^u \underline{U}_K \quad ; \quad \vartheta(\tilde{r}) = \hat{N}_K^\vartheta \Theta_K. \quad (2.73)$$

Darin sind  $\underline{U}_K$  die Knotenverschiebungen und  $\Theta_K$  die Knotentemperaturen. Die gleichen Interpolationsregeln werden für die virtuellen Verschiebungen und Temperaturen angesetzt.

Die Forderung nach der Gültigkeit der Gleichungen (2.69) und (2.72) für beliebige virtuelle Verschiebungen  $\delta \underline{u}$  und Temperaturen  $\delta \vartheta$  ermöglicht nach dem Fundamentalsatz der Variationsrechnung den Zugang zu einem nichtlinearen, gekoppelten Gleichungssystem zur Bestimmung der unbekanntenen Knotenverschiebungen und -temperaturen. Die darin enthaltenen Zeitableitungen lassen sich mit einem Zeitdiskretisierungsverfahren bestimmen. Demnach ergeben sich nach dem Euler-Rückwärts-Verfahren beispielsweise die Temperaturraten zum neuen Zeitpunkt  $t + \Delta t$  nach der Vorschrift

$${}^{t+\Delta t} \dot{\vartheta} = \frac{1}{\Delta t} ({}^{t+\Delta t} \vartheta - {}^t \vartheta). \quad (2.74)$$

Dem nichtlinearen Charakter des Gleichungssystems wird üblicherweise mit einer Linearisierung mittels Newton-Raphson-Verfahren begegnet. Die zu linearisierende Funktion  $R$  folgt aus der Ableitung der Funktionale nach den virtuellen Knotenverschiebungen  $\delta \underline{U}$  und -temperaturen  $\delta \Theta$

$$\begin{bmatrix} [R_u] \\ [R_\vartheta] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left[ \frac{\partial \mathcal{F}_u}{\partial \delta \underline{U}} \right] \\ \left[ \frac{\partial \mathcal{F}_\vartheta}{\partial \delta \Theta} \right] \end{bmatrix}. \quad (2.75)$$

Zum Zwecke einer kompakten Darstellung ohne Knotenindizes beschreiben die Terme in eckigen Klammern die Vektoren der Knotengrößen. Das Newton-Inkrement der  $n$ -ten Newton-Iteration zum alten Zeitpunkt  $t$

$$\begin{bmatrix} [\Delta {}^t \underline{U}^n] \\ [\Delta {}^t \Theta^n] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [{}^t \underline{U}^{n+1}] \\ [{}^t \Theta^{n+1}] \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} [{}^t \underline{U}^n] \\ [{}^t \Theta^n] \end{bmatrix} \quad (2.76)$$

lässt sich mit dem linearisierten Gleichungssystem

$$- \begin{bmatrix} [\mathbb{K}_{uu}({}^t \underline{U}^n, {}^t \Theta^n)] & [\mathbb{K}_{u\vartheta}({}^t \underline{U}^n, {}^t \Theta^n)] \\ [\mathbb{K}_{\vartheta u}({}^t \underline{U}^n, {}^t \Theta^n)] & [\mathbb{K}_{\vartheta\vartheta}({}^t \underline{U}^n, {}^t \Theta^n)] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} [\Delta {}^t \underline{U}^n] \\ [{}^t \Theta^n] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\Delta {}^t R_u^n] \\ [{}^t R_\vartheta^n] \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

lösen. Die darin enthaltenen Matrizen  $\mathbb{K}$  entsprechen den Ableitungen der Funktionen  $R$  nach den jeweiligen Freiheitsgraden der Knoten

$$\mathbb{K}_{ij} = \frac{\partial [{}^t R_i^n]}{\partial [j]} \quad \text{mit: } i \in \{u, \vartheta\}, \quad j \in \{{}^t \underline{U}^n, {}^t \Theta^n\}. \quad (2.78)$$

Dabei bedarf es einer Integration über die Elementvolumen. Da diese Integrale in der Regel keine analytischen Lösungen besitzen, werden sie mittels Gaußpunkt-Integration an den Gaußpunkten der Elemente ausgewertet.

### 2.3.2 Anforderungen an die freie Energiedichte

Damit das Newton-Raphson-Verfahren gegen eine Lösung konvergiert, muss die freie Energiedichte einige Anforderungen erfüllen (vgl. Balzani (2006)). Von freien Energiedichten zur Beschreibung isotropen Materialverhaltens wird die Einhaltung der Baker-Eriksen-Ungleichung (vgl. Baker & Eriksen (1954)) gefordert. Dieses Kriterium besagt, dass sowohl die maximale Eigenspannung als auch die maximale Eigendehnung in die gleiche Richtung zeigen. Die Baker-Eriksen-Ungleichung greift jedoch nicht bei anisotropen Materialien, bei denen stattdessen die Legendre-Hadamard-Ungleichung, eine Forderung nach reellen Wellenausbreitungsgeschwindigkeiten im Material, angesetzt wird. Neben diesen physikalisch interpretierbaren Kriterien soll die freie Energiedichte eine eindeutige Lösung des Funktionals (2.69) garantieren, das heißt, es muss ein Verschiebungsfeld existieren, bei dem  $\mathcal{F}_u$  Null wird. Solch ein mathematisches Kriterium stellt die Kombination von Koerzivität nach der Arbeit von Ciarlet (1993) und Konvexität bezüglich des Deformationsgradienten dar. Die Konvexität garantiert eine eindeutige Lösung, ist aber zu streng, weil beispielsweise Instabilitätsprobleme von ihr ausgeschlossen werden. Eine weniger strenge Forderung bildet die Quasi-Konvexität nach der Arbeit von Morrey (1952). Sie formuliert eine integrale Bedingung, die für einen homogenen Körper unter homogenen Randbedingungen ein homogenes Dehnungsfeld verlangt. Ihr integraler Charakter erschwert jedoch ihre praktische Anwendung. Praktikabler gestaltet sich die Bedingung der Polykonvexität (vgl. Ball (1976)). Dass Polykonvexität Quasi-Konvexität impliziert, wird in den Arbeiten von Krawietz (1986) und Dacorogna (2007) dargelegt. Als schwächstes Kriterium sei noch die Rank-1-Konvexität, welche der Legendre-Hadamard-Ungleichung entspricht, genannt. Konvexität bedingt automatisch Polykonvexität, welche Quasi-Konvexität impliziert und diese wiederum beinhaltet Rank-1-Konvexität. Diese Abhängigkeiten bestehen allerdings nicht in die andere Richtung.

Wie bereits erwähnt, hat sich das Kriterium der Polykonvexität als sehr praktikabel herausgestellt. Das Kriterium besagt:

Es existiert eine Funktion  $P : \mathbb{R}^{3 \times 3} \times \mathbb{R}^{3 \times 3} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\tilde{\varrho}\psi = P(\underline{\underline{F}}, \text{Adj}\underline{\underline{F}}, \det(\underline{\underline{F}}))$  und  $P$  ist konvex bezüglich seiner Argumente.

Am Beispiel  $\tilde{\varrho}\psi = \det(\underline{\underline{F}})$  lässt sich der Unterschied zwischen Konvexität und Polykonvexität darstellen. Für das Kriterium der Konvexität muss die zweite Ableitung  $\partial^2 \tilde{\varrho}\psi / \partial \underline{\underline{F}}^2$  auf Konvexität bzgl.  $\underline{\underline{F}}$  überprüft werden, was aber nicht der Fall ist. Nach dem Kriterium der Polykonvexität lässt sich  $\tilde{\varrho}\psi$  jedoch als Funktion von  $\det \underline{\underline{F}}$  darstellen und muss deshalb lediglich die Forderung  $\partial^2 \tilde{\varrho}\psi / \partial J_3^2 \geq 0$  erfüllen, was sie auch tut. Eine Reihe polykonvexer Funktionen findet sich in der Arbeit von Schröder & Neff (2003).

## 2.4 Faserorientierungsverteilung

Mit Kurzfasern verstärkte Materialien beinhalten eine große Anzahl von Fasern, die in irgendeiner Weise zueinander ausgerichtet sind. Die Form dieser Ausrichtung kann beliebig variieren, sodass Konstellationen denkbar sind, bei denen alle Fasern in die gleiche Richtung zeigen oder Konstellationen, bei denen alle Fasern in einer Ebene liegen. Klar ist, dass sich die Faserausrichtungen maßgeblich auf die effektiven Eigenschaften des Materials auswirken und eine mathematische Beschreibung des Materialverhaltens eine vernünftige Quantifizierung der Faserrichtungen bedingt. Dazu wird in diesem Abschnitt ein stochastischer Zugang zur Beschreibung der Faserorientierungsverteilung (FOV) vorgestellt.

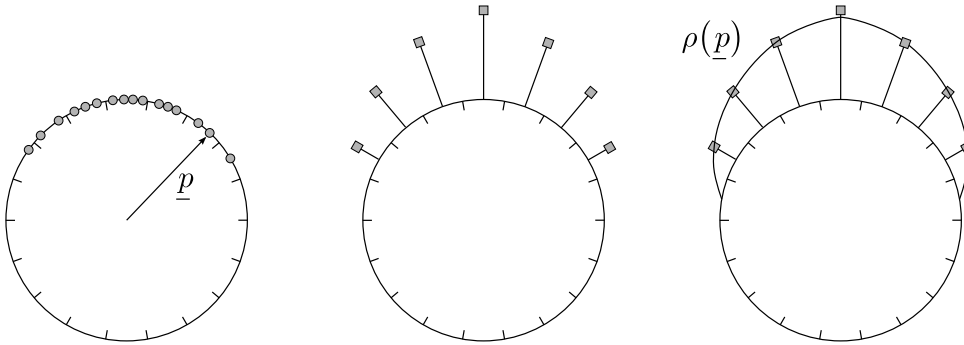


Abbildung 2.2: Skizze zur Bestimmung der Faserdichtefunktion.

Ausgehend von einem betrachteten Gebiet  $\Omega$  können alle darin befindlichen Fasern und deren normierte Richtung  $\underline{p}$  erfasst werden. Das Gebiet  $\Omega$  sollte dabei hinreichend groß sein, um eine zuverlässige Aussage zu gewinnen. Die Gesamtheit aller möglichen Faserorientierungen wird von der Oberfläche einer Kugel mit Radius Eins, der Einheitssphäre, beschrieben. Für eine quantifizierbare Beschreibung der FOV wird die Einheitssphäre zunächst in kleine Teilbereiche unterteilt. Anschließend werden die identifizierten Faserrichtungen diesen Teilbereichen zugeordnet (siehe Abbildung 2.2 links). Wurde das gesamte Gebiet  $\Omega$  ausgewertet, liegt mit der unterteilten Einheitssphäre ein Mengendiagramm vor, das die Häufigkeit der einzelnen Faserrichtungen in diskreter Form angibt (siehe Abbildung 2.2 Mitte). Ein Übergang von dieser diskreten Beschreibung hin zu einer stetigen Funktion erlaubt schließlich den Zugang zur Faserdichtefunktion (FDF)  $\rho(\underline{p})$ . Diese sagt aus, mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Faserrichtung  $\underline{p}$  im Gebiet  $\Omega$  vorkommt (siehe Abbildung 2.2 rechts).

Die FDF soll bestimmten Forderungen genügen. Da der Richtungssinn einer Faser keinen zusätzlichen Informationsgewinn bringt, ist die FDF gerade

$$\rho(\underline{p}) = \rho(-\underline{p}). \quad (2.79)$$

Die Summe der Wahrscheinlichkeiten aller möglichen Faserrichtungen soll Eins betragen, was in der Normalitätsbedingung

$$\oint \rho(\underline{p}) dS = 1 \quad (2.80)$$



mündet. Dabei wird über die Einheitssphäre  $S$  integriert. Die ersten vier Momente der FDF sind wie folgt definiert

$$\begin{aligned} \underline{A} &= \oint \rho(\underline{p}) \underline{p} dS & \underline{\underline{A}} &= \oint \rho(\underline{p}) \underline{p} \circ \underline{p} dS \\ \underline{\underline{A}} &= \oint \rho(\underline{p}) \underline{p} \circ \underline{p} \circ \underline{p} dS & \underline{\underline{\underline{A}}} &= \oint \rho(\underline{p}) \underline{p} \circ \underline{p} \circ \underline{p} \circ \underline{p} dS. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Da die FDF eine gerade Funktion ist, werden alle ungeraden Momente zu Null. Momente höherer Ordnung als Vier werden üblicherweise nicht berücksichtigt, weil sie mit zu hohem Rechenaufwand einhergehen. Deswegen reduziert sich die Menge der relevanten Momente von  $\rho(\underline{p})$  auf  $\underline{A}$  und  $\underline{\underline{A}}$ .

Die Momente weisen zahlreiche Symmetrien auf. Beim Moment zweiter Ordnung mit zwei Indizes  $(a,b)$  folgt daher

$$A_{ab} = A_{ba}.$$

Beim Moment vierter Ordnung wird ersichtlich, dass die Indizes beliebig vertauscht bzw. permutiert werden können ohne dass sich der zugehörige Koeffizient ändert, das heißt,

$$A_{abcd} = A_{acbd} = A_{dbca} = \dots \text{ usw.}$$

Außerdem ist beiden Momenten gemein, dass ihre Spur immer Eins ist. Das zweite Moment  $\underline{A}$  erlaubt eine geometrische Interpretation der FOV. Seine Eigenwerte beschreiben den Anteil der Fasern, der in die zugehörige Eigenrichtung von  $\underline{A}$  zeigt. So kann ein zweites Moment mit der Koeffizientenmatrix  $\text{diag}(0,2 \ 0,3 \ 0,5)$  einer FOV zugeordnet werden, bei der 20% der Fasern in die erste Eigenrichtung zeigen, 30% der Fasern in die zweite Eigenrichtung und 50% der Fasern in die dritte Eigenrichtung. Trotz dieser geometrischen Interpretierbarkeit lassen sich im Allgemeinen keine eindeutigen Rückschlüsse vom zweiten Moment  $\underline{A}$  auf die genaue FDF ziehen. Jedes  $\underline{A}$  lässt sich durch unendlich viele verschiedene FOV realisieren. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, sich auf eine FDF festzulegen.

## Die Angular Central Gaussian-Verteilung

Als Faserdichtefunktion wird in dieser Arbeit die Angular Central Gaussian (ACG)-Verteilung verwendet. Sie ergibt sich zu

$$\rho_B(\underline{p}) = \frac{1}{4\pi} (\underline{p} \cdot \underline{B} \cdot \underline{p})^{-3/2} \quad (2.82)$$

und verwendet den dimensionslosen, symmetrischen und unimodularen Tensor  $\underline{B}$  (vgl. Tyler (1987)). Einen wichtigen Vorteil der ACG-Verteilung stellt die Eineindeutigkeit zwischen  $\underline{A}$  und  $\rho_B(\underline{p})$  dar. Die Arbeiten von Montgomery-Smith et al. (2011a,b) erklären, wie  $\rho_B(\underline{p})$  über das Lösen eines nichtlinearen Gleichungssystems unter Verwendung von Carlson-elliptischen Integralen aus  $\underline{A}$  gewonnen wird. Weiterhin erlaubt die Vorschrift

$$\underline{a} = \frac{\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{p}}{|\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{p}|} \quad (2.83)$$

einen einfachen Zugang zur Realisierung einer beliebigen ACG-Verteilung mit Tensor  $\underline{\underline{B}}$ . Gleichung (2.83) transformiert die ursprünglich uniform verteilten Vektoren  $\underline{p}$  so, dass die neugewonnenen Vektoren  $\underline{a}$  der zugehörigen ACG-Verteilung entsprechen. Der Sonderfall  $\underline{\underline{B}}^{-1/2} \cdot \underline{p} = \underline{0}$  wird darüber abgefangen, dass  $\underline{a} = \underline{0}$  gesetzt wird. Tabelle 2.1 veranschaulicht beide vorteilhaften Eigenschaften der ACG-Verteilung. Ausgehend von drei verschiedenen Momenten  $\underline{\underline{A}}$  werden die zugehörigen FDF bestimmt. Dabei zeigt sich, dass auch degenerierte FOV, bei denen ein Eigenwert von  $\underline{\underline{A}}$  Null ist, kein Problem darstellen. In der letzten Zeile von Tabelle 2.1 sind Realisierungen der entsprechenden  $\rho_B(\underline{p})$  mit 210 Richtungen  $\underline{a}_i$  zu sehen.

Da mit dem in dieser Arbeit entwickelten Stoffgesetz eine umfassende Beschreibung kurzfaserverstärkter Materialien angestrebt wird, ist eine Betrachtung aller möglichen FOV wünschenswert. Die Wahl der ACG als FDF erlaubt solch eine umfängliche Betrachtung, weil die Eineindeutigkeit zwischen  $\rho_B(\underline{p})$  und  $\underline{\underline{A}}$  die Betrachtung aller möglichen FOV auf die Betrachtung aller möglichen  $\underline{\underline{A}}$  reduziert. Unter Ausnutzung der Eigenschaft  $\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{A}} = 1$  lässt sich die Menge aller einzigartigen Momente  $\underline{\underline{A}}$ , die nicht nur durch Drehung aus anderen Momenten gewonnen werden, in dem ternären Diagramm in Abbildung 2.3 darstellen.

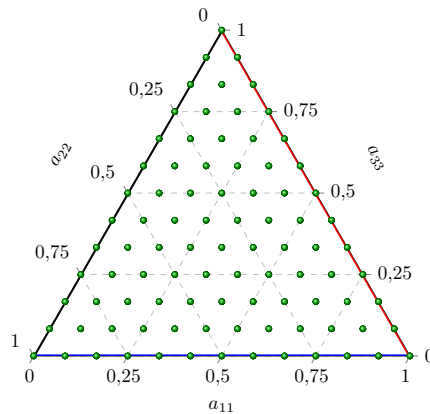
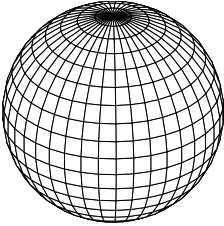
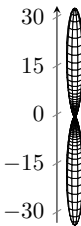
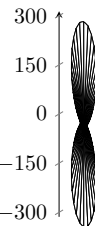
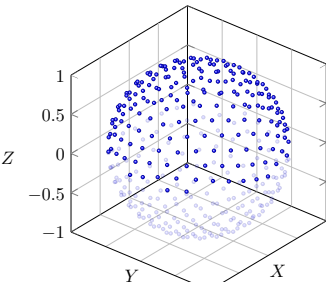
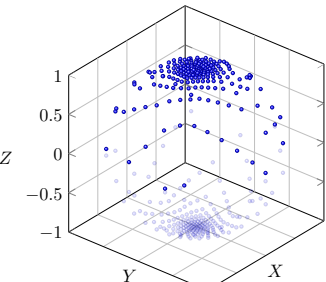
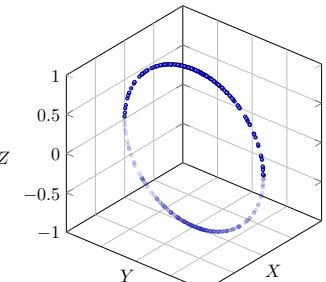


Abbildung 2.3: Menge aller einzigartigen Momente  $\underline{\underline{A}}$ , die sich nicht durch Drehung aus anderen Momenten gewinnen lassen. Die 91 grünen Kugeln bilden die diskrete Teilmenge der Faserorientierungsverteilungen, die in dieser Arbeit untersucht wird.

Dabei beziehen sich die Achsen auf die Koeffizienten von  $[A_{ab}] = \text{diag}(a_{11} \ a_{22} \ a_{33})$  in Diagonalform. Die grünen Kugeln in Abbildung 2.3 bestimmen eine diskrete Teilmenge von 91 verschiedenen FOV, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen. Diese Teilmenge enthält einige Sonderfälle wie beispielsweise die drei Ecken des Faserorientierungsdreiecks. Für diese FOV sind jeweils zwei Eigenwerte von  $\underline{\underline{A}}$  gleich Null und damit alle Fasern parallel zueinander ausgerichtet. Die drei Außenkanten beschreiben planare FOV, bei denen jeweils ein Eigenwert Null ist, und der Schwerpunkt des Dreiecks gehört zu einer isotropen FOV, bei der alle Faserrichtungen zufällig verteilt liegen.

Tabelle 2.1: Veranschaulichung der Angular Central Gaussian Faserdichtefunktion. Jedem Moment  $\underline{A}$  kann eine eindeutige Dichtefunktion  $\rho_B(\underline{p})$  zugeordnet werden, welche sich mit den Vektoren  $\underline{a}_i$  realisieren lässt.

| Nr.                     | 1  | 2   | 3  |
|-------------------------|--|---|--|
| $[A_{ab}]$              | $\begin{bmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix}$          | $\begin{bmatrix} 1/9 & 0 & 0 \\ 0 & 1/9 & 0 \\ 0 & 0 & 7/9 \end{bmatrix}$           | $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 3/4 \end{bmatrix}$              |
| $\rho_B(\underline{p})$ |   |    |   |
| $\underline{a}_i$       |  |  |  |



### 3 Prinzip der RVE-Homogenisierung

Dieses Kapitel stellt eine Methode zur Ermittlung effektiver Eigenschaften von Verbundwerkstoffen vor. Nach einer kurzen Darstellung etablierter analytischer Herangehensweisen wird die numerische Methode unter Verwendung eines repräsentativen Volumenelements (RVE) präsentiert. Im Anschluss daran wird der Aufbau eines RVE zur Nachbildung kurzfaserverstärkter Kunststoffe skizziert und auf die Wahl der Randbedingungen beim Rechnen mit den RVEs eingegangen. Abschließend werden die Implementierung innerhalb der FEM-Umgebung ABAQUS sowie verschiedene Anwendungsfälle dargestellt.

#### 3.1 Hintergrund

Verbundwerkstoffe gewannen in den letzten Jahren immer mehr Relevanz bei technischen Anwendungen (vgl. Vogt (2015); VDI (2014)), weil sie die positiven Eigenschaften verschiedener Konstituenten vereinen und die ungewünschten Nachteile abschwächen. Die Konstituenten liegen in unterschiedlicher Form vor. Häufig wird ein Werkstoff 1 in eine Matrix bestehend aus Werkstoff 2 eingebettet (vgl. Abbildung 3.1). Die Geometrie des Werkstoffs 1 kann beispielsweise die Gestalt von Fasern, Kugeln oder Spiralen annehmen. Die Betrachtung des Verbundes erfolgt auf unterschiedlichen Skalen bzw. Ebenen, welche im Folgenden eingeführt werden.

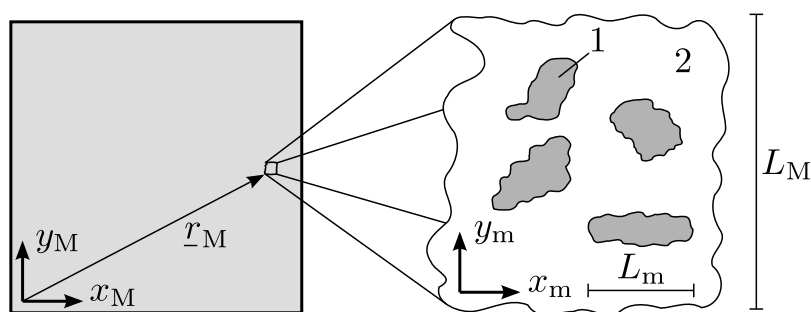


Abbildung 3.1: Skizze eines Verbundwerkstoffes mit Darstellung der Mikro- (rechts) und Makroebene (links). Die Indizes „m/M“ beziehen sich auf die Mikro-/Makroebene.

Auf der Mikroebene lassen sich die einzelnen Bestandteile des Verbundes sowohl optisch als auch physikalisch voneinander unterscheiden. Die Größenordnung der Mikroebene lässt sich nicht pauschalisieren, sondern richtet sich nach den Abmaßen  $L_m$  (vgl. Abbildung 3.1)

der Konstituenten. Weil die lokal differenzierbaren Heterogenitäten auf der Mikroebene unterschiedliche Eigenschaften besitzen, bauen sich zwischen ihnen vielschichtige Wechselwirkungen auf.

Demgegenüber steht die Makroebene mit Abmaßen im Bereich von  $L_M$ . Damit wird diejenige Größenskala verknüpft, bei der die Materialeigenschaften lokal nicht mehr variieren. Im Gegensatz zur Mikroebene, lässt sich auf der Makroebene lediglich ein effektives bzw. homogenes Materialverhalten beobachten, welches aus den komplizierten Wechselwirkungen auf der Mikroebene resultiert. Die Extraktion homogener Materialeigenschaften aus einer Mikroebene wird dem Begriff der Homogenisierung zugeordnet.

Die Homogenisierung bildet resultierende effektive Eigenschaften auf die Makroebene ab. Wie genau diese Abbildung aussieht hängt von Einflussfaktoren, wie beispielsweise Volumengehalt, Form, Verteilung, Rotation der Einschlüsse ab. Im Folgenden werden einige Modelle zur Homogenisierung unter Berücksichtigung verschiedener Faktoren vorgestellt. Es sei darauf hingewiesen, dass fortan die Begriffe „homogenes Verhalten“, „effektive Eigenschaften“ und „makroskopisches Verhalten“ im gleichen Kontext gebraucht werden.

### 3.1.1 Analytische Homogenisierung

Die ersten analytischen Homogenisierungsmethoden werden den Arbeiten von Voigt (1887) und Reuss (1929) zugesprochen. Ihre Ansätze basieren auf der Annahme konstanter Dehnungen (Voigt) bzw. konstanter Spannungen (Reuss) im Verbund und beschreiben eine Linearkombination der Steifigkeiten der einzelnen Konstituenten in Abhängigkeit von deren Volumengehalten. Rheologisch lassen sich diese Modelle mit einer Parallelschaltung (Voigt) und Reihenschaltung (Reuss) vergleichen, weswegen sie die obere bzw. untere Schranke der effektiven Steifigkeit liefern. Weitere bekannte Schranken von Mischungsregeln sind die Hashin-Shtrikman-Schranken für Kugeleinschlüsse (vgl. Hashin & Shtrikman (1962a,b, 1963)) und die Schranken von Walpole für Ellipsoide (vgl. Walpole (1966a,b)) und Endlosfasern (vgl. Walpole (1969)).

Mit dem Shear-Lag-Modell (vgl. Cox (1952)) wird die effektive Steifigkeit diskontinuierlicher Faserverbundwerkstoffe mit ideal paralleler Ausrichtung der Fasern bestimmt. Diese Theorie postuliert einen Shear-Lag-Parameter, der die Lastübertragung zwischen dem Mantel einer Faser und der umgebenden Matrix beschreibt. Damit wird im Unterschied zu den beiden vorherigen Modellen die Geometrie der Inklusion auf primitive Weise berücksichtigt. Eine umfangreichere Erfassung der Fasergeometrie schließt das Modell der Autoren in Halpin & Kardos (1976) ein, indem es einen empirischen Formfaktor verwendet. In diesen Formfaktor fließt insbesondere das Längen-Dicken-Verhältnis (LDV) der Fasern ein.

Eshelby (vgl. Eshelby (1957)) formulierte eine Homogenisierungsmethode für ellipsoidische Einschlüsse. Die Grundlage dieser Theorie bildet die Annahme, dass sich eine fiktive Eigendehnung eines einzelnen Einschlusses auf sein gesamtes Umfeld überträgt. Diese

fiktive Eigendehnung wird maßgeblich von der Geometrie des Einschlusses bestimmt. Für ihre Berechnung wird der Eshelby-Tensor verwendet (vgl. Richter (2005)). Auf dieser Theorie aufbauend entstanden das Mori-Tanaka- und das Tandon-Weng-Modell (vgl. Mori & Tanaka (1973); Tandon & Weng (1984)). Während das Eshelby-Modell lediglich das Umfeld eines einzelnen Einschlusses betrachtet, finden auch die Bereiche zwischen den Einschlüssen in den beiden zuletzt genannten Modellen Berücksichtigung.

Alle genannten Methoden bestimmen die effektiven Eigenschaften linear elastischer Verbundwerkstoffe. Deren Erweiterung auf nichtlineare Materialien bildet den aktuellen Stand der Forschung. Beispielhaft seien die nichtlinearen Analoga zur Parallel- und Reihenschaltung mit den Modellen von Taylor und Sachs genannt. Weitere Modelle sowohl für die lineare als auch für die nichtlineare Theorie finden sich in der Übersicht von Mishnaevsky (2007).

### 3.1.2 Numerische Homogenisierung

Die Modelle der analytischen Homogenisierung besitzen alle den Vorteil der unmittelbaren Bestimmung effektiver Eigenschaften in Abhängigkeit von Volumengehalt, Geometrie, etc., doch sie liefern in der Regel nur bei kleinen Volumengehalten der Inklusionen und niedrigen Längen-Dicken-Verhältnissen zuverlässige Ergebnisse. Die analytischen Modelle basieren auf mathematischen Annahmen für die Nah- und Fernfelder in der Mikroebene; diese Annahmen können aber immer nur eine Vereinfachung der Wirklichkeit wiedergeben.

Einen alternativen Zugang zur Ermittlung effektiver Eigenschaften bietet die Methode der numerischen Homogenisierung, welche sich vor dem Hintergrund der schnell wachsenden Computertechnik immer mehr etabliert. Dabei werden die tatsächliche Mikrostruktur modelliert und die gesuchten effektiven Feldgrößen numerisch bestimmt. Die Arbeit von Böhm (2004) klassifiziert vier Kategorien der numerischen Homogenisierung:

1. Einheitszellenmethode: Die Mikrostruktur wird als periodische Aneinanderreihung von Einheitszellen betrachtet (vgl. Li (1999)).
2. Eingebettete Zellen: Ist ähnlich der Einheitszellenmethode; zusätzlich wird die Einheitszelle von einer Randschicht mit den effektiven Eigenschaften des Verbundes umgeben. Dadurch fließen die Einflüsse des Randes in die Homogenisierung ein (vgl. Dong & Schmauder (1996)).
3. Fensteransatz: Die Makroebene wird in viele kleine Fenster unterteilt. Jedes dieser Fenster bildet einen hinreichend großen Ausschnitt der Mikroebene ab. Die effektiven Eigenschaften aller Fenster werden gemittelt (vgl. Nemat-Nasser & Hori (1993)).
4. Die gesamte Mikrostruktur wird modelliert.

Eine umfangreiche Übersicht mit zahlreichen Anwendungsbeispielen wird in der Arbeit von Mishnaevsky (2007) dargestellt. Dass die numerische Mittelung andere Ergebnisse

liefert als die analytische Mittelung, zeigen zahlreiche Vergleiche. Exemplarisch sei hier die Arbeit von Bayreuther (2005) erwähnt.

Häufige Anwendung findet die Einheitszellenmethode. Ihr Vorteil liegt in dem überschaubaren Rechenaufwand, da sich der betrachtete Bereich auf einen Ausschnitt der Mikrostruktur beschränkt. An diesen Ausschnitt werden Anforderungen gesetzt, damit er die gesamte Mikrostruktur repräsentiert. Die Autoren Gross & Seelig (2001) stellen fest, dass die Größe  $L_M$  (vgl. Abbildung 3.1) des betrachteten Bereichs deutlich größer sein soll als die charakteristische Größe  $L_m$  des eingeschlossenen Konstituenten (vgl. Abbildung 3.1). Damit einher geht auch, dass genügend viele Heterogenitäten vorhanden sind, um eine statistisch stabile Mittelung zu gewährleisten. Des Weiteren darf der Ort  $\underline{r}_M$  die Eigenschaften der Einheitszelle nicht beeinflussen. Werden alle diese Anforderungen erfüllt, repräsentiert die Einheitszelle die Mikrostruktur des Verbundes. Es wird also ein repräsentatives Volumenelement (RVE) betrachtet.

## 3.2 Erstellung eines RVE mit Kurzfasern

Das RVE beschreibt ein klar definiertes Volumen im euklidischen Raum, die Domäne. Die Domäne kann verschiedene Formen wie beispielsweise Quader, Spat, Ellipsoid, Zylinder, Torus und mehr annehmen. Als Domäne dieser Arbeit dient ein einfacher Würfel. In dieser Domäne sollen hinreichend viele Kurzfasern platziert werden, sodass statistisch zuverlässige effektive Eigenschaften bestimmt werden können. Die Kurzfasern besitzen typischerweise einen Durchmesser von ca.  $15\ \mu\text{m}$ , wonach die Kantenlänge der Domäne in der Größenordnung von  $1000\ \mu\text{m}$  liegen muss. Im Zuge der Homogenisierung werden allerdings nur abgeleitete Größen wie Dehnungen und Spannungen betrachtet, wodurch die absoluten Werte der Längen keine Rolle spielen. Ob das RVE also eine Kantenlänge von  $100\ \mu\text{m}$  oder  $100\ \text{m}$  besitzt, wirkt sich nicht auf die effektiven Eigenschaften (bei stationären und insbesondere nicht dynamischen) Problemen aus. Entscheidender ist das Verhältnis der charakteristischen Längen zueinander. Deswegen wird versucht, eine hinreichend große Anzahl von Kurzfasern mit einem bestimmten Längen-Dicken-Verhältnis in der Domäne zu platzieren. Das LDV von Kurzfasern liegt üblicherweise im Bereich von 10-30 und somit kann zusammen mit einem vorgegebenen Faservolumengehalt und der Anzahl an Fasern eine Wahl der Domänenabmaße und des Faserdurchmessers getroffen werden.

Die Kurzfasern werden vereinfacht mit der Geometrie von Kapseln (Zylinder mit Halbkugeln an den Stirnflächen) abgebildet. Ihre Lage und Orientierung in der Domäne können beliebig variieren. Im Sinne einer gezielten Untersuchung der Abhängigkeit effektiver Eigenschaften von einer Faserorientierungsverteilung werden die Richtungen der einzelnen Fasern jedoch so gewählt, dass sie der Realisierung einer ACG-Verteilung (vgl. Abschnitt 2.4) entsprechen. Insgesamt werden 91 verschiedene RVEs erstellt, von denen jedes einer FOV aus Abbildung 2.3 zugeordnet werden kann.



Das Platzieren der Kurzfasern in der Domäne stellt ein weites Forschungsfeld dar, welches allerdings nicht Schwerpunkt dieser Arbeit ist. Deswegen sei an dieser Stelle nur erwähnt, dass die Kurzfasern mit Hilfe eines Random-Sequential-Adsorption Algorithmus (RSA) angeordnet werden (vgl. Feder (1980)). Dabei werden die Kurzfasern nach und nach zufällig in die Domäne gesetzt. Das Setzen einer Faser beinhaltet die Prüfung der neuen Faser auf Durchdringung mit den bereits gesetzten Fasern. Fällt diese Prüfung negativ aus, wird die neue Faser akzeptiert. Bei Durchdringung hingegen wird der Setzversuch an einer zufälligen neuen Stelle wiederholt. Die Methode der RSA arbeitet schnell und ist einfach zu implementieren. Allerdings existieren Schranken für den Faservolumengehalt, bei denen keine neuen Fasern mehr erfolgreich gesetzt werden können. Diese Schranken hängen neben dem Faservolumengehalt auch sehr stark vom LDV der Fasern ab. Für diese Arbeit wurde ein LDV von 10 bei einem Faservolumengehalt von 20% gewählt. Es sei erwähnt, dass mit Blick auf die Randbedingungen (vgl. Abschnitt 3.3) eine Periodizität der Fasern innerhalb der Domäne gewährleistet werden muss. Das heißt, Fasern, die eine Seite des RVE durchdringen, stoßen auf der gegenüberliegenden Seite wieder ins RVE hinein. Abbildung 3.2 zeigt zwei Beispiele für ein RVE mit Kurzfasern und periodischen Rändern.

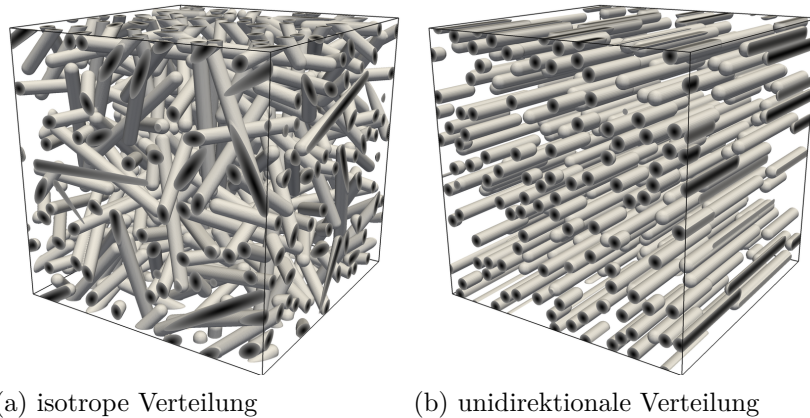


Abbildung 3.2: Beispiele für ein RVE mit Kurzfasern. Dargestellt werden nur die Fasern.

### 3.3 Kopplung der Mikro- und Makroebene

Mit den erstellten RVEs können Feldprobleme verschiedener Art auf der Mikroebene betrachtet und gelöst werden. Als Beispiele dafür seien das mechanische Problem der Impulserhaltung (s. Gl. (2.40))

$$\underline{\tilde{\nabla}} \cdot \underline{\tilde{T}}(\tilde{r}) = \underline{0} \quad (3.1)$$

sowie das rein thermische Problem der stationären Wärmeleitung (s. Gl. (2.47))

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{q}(r) = \underline{\tilde{\nabla}} \cdot \underline{\tilde{q}}(\tilde{r}) = 0 \quad (3.2)$$

aufgeführt. Damit sich die daraus resultierenden effektiven Größen nicht unabhängig von den makroskopischen Größen einstellen, wird eine Kopplung zwischen Mikro- und Makroebene benötigt. Abbildung 3.3 zeigt die Feldgrößen der Makro- und der Mikroebene in der Referenzkonfiguration. Am Punkt  $\tilde{\underline{r}}_M$  liegen die effektiven Feldgrößen der Makroebene vor. Diese effektiven Eigenschaften werden als konstant innerhalb des RVE angenommen. Das RVE mit den Kurzfasern repräsentiert die Mikroebene und erstreckt sich über das Gebiet  $\tilde{\mathcal{G}}$ . Auf seinem Rand  $\tilde{\mathcal{R}}$  wirken beispielsweise Spannungs- und Verschiebungsrandbedingungen. Die lokalen Feldgrößen innerhalb des RVE sind abhängig vom Ort  $\tilde{\underline{r}}$  und beinhalten den konstanten makroskopischen Anteil. Aus Gründen der Übersicht entfallen im Folgenden die Abhängigkeiten der lokalen RVE-Größen vom Ort. Es sei erwähnt, dass Abbildung 3.3 zwar die Feldgrößen sowohl des mechanischen als auch des thermischen Problems beinhaltet, dies aber nur einer kompakten Darstellung dient. Im Zuge der Homogenisierung werden beide Feldprobleme niemals gleichzeitig betrachtet.

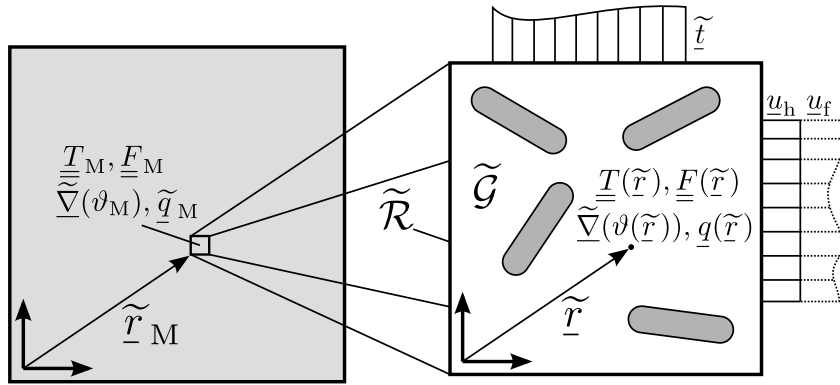


Abbildung 3.3: Darstellung der Feldgrößen von Makro- (links) und Mikroebene (rechts).

### 3.3.1 Die Hill-Mandel-Bedingung für den Impulserhaltungssatz

Hill (vgl. Hill (1963)) forderte für das mechanische Problem, also die Impulserhaltung, die Hill-Mandel-Bedingung

$$\frac{1}{\tilde{V}} \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \underline{T} \cdot \dot{\underline{F}} \, d\tilde{V} = \underline{T}_M \cdot \dot{\underline{F}}_M = \underline{T}_M \cdot \dot{\underline{H}}_M. \quad (3.3)$$

Die linke Seite der Gleichung (3.3) lässt sich als Mittelung aller Spannungsleistungen des RVE verstehen, während die rechte Seite der Spannungsleistung gebildet aus den Mittelwerten von  $\underline{T}$  und  $\dot{\underline{F}}$  entspricht. Diese beiden Mittelwerte werden den effektiven Werten, also den makroskopischen Werten  $\underline{F}_M$  und  $\underline{T}_M$  zugeordnet. Die Hill-Mandel-Bedingung stellt also den Zusammenhang zwischen der mittleren Spannungsleistung der Mikroebene und der Spannungsleistung der Makroebene her. Es sei erwähnt, dass Hill diese Bedingung ursprünglich für die Spannungsenergie aufstellte und die Erweiterung auf die Spannungsleistung erst später vorgenommen wurde.

Gleichung (3.3) lässt sich in eine Darstellung mit Oberflächenintegralen überführen (vgl. Glüge et al. (2012)). Ausgehend von der Annahme einer additiven Zerlegung des Verschiebungsfeldes  $\underline{u}$  in einen konstanten homogenen Anteil  $\underline{u}_h$  und einen fluktuierenden Anteil  $\underline{u}_f$  (dargestellt in Abbildung 3.3) gilt mit dem Geschwindigkeitsfeld  $\underline{v}$

$$\frac{1}{\tilde{V}} \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \underline{T} \cdot \dot{\underline{F}} \, d\tilde{V} = \underline{T}_M \cdot \dot{\underline{H}}_M \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{\tilde{V}} \oint_{\tilde{\mathcal{R}}} \tilde{\underline{t}} \cdot \underline{v}_f \, d\tilde{A} = 0. \quad (3.4)$$

Diese Darstellungsweise verdeutlicht, dass die Randbedingungen des RVE maßgeblich für die Erfüllung der Hill-Mandel-Bedingung sind.

### Periodische Randbedingungen beim mechanischen Problem

In Abschnitt 3.2 wurde bereits die Periodizität der Kurzfasern im RVE erwähnt. In diesem Unterabschnitt wird die uneingeschränkte Erfüllung der Hill-Mandel-Bedingung in Gleichung (3.4) durch die periodischen Randbedingungen (engl.: periodic boundary conditions = PBC) gezeigt.

Der Begriff der Periodizität umschreibt eine mathematische Voraussetzung an die Gradienten der Freiheitsgrade gegenüberliegender Punkte mit den Ortsvektoren  $\tilde{\underline{r}}_1, \tilde{\underline{r}}_2$ , deren Normalenvektoren entgegengesetzt gerichtet sind, d.h.,  $\tilde{\underline{n}}_1 = -\tilde{\underline{n}}_2$ . Dann folgt für die Verschiebungen dieser Punkte

$$\underline{u}_1 - \underline{u}_2 = \underline{H}_M \cdot (\tilde{\underline{r}}_1 - \tilde{\underline{r}}_2) = \underline{H}_M \cdot \Delta \tilde{\underline{r}} \quad (3.5)$$

mit dem homogenen Verschiebungsgradienten  $\underline{H}_M$  bzw. für die Geschwindigkeiten

$$\underline{v}_1 - \underline{v}_2 = \dot{\underline{H}}_M \cdot (\tilde{\underline{r}}_1 - \tilde{\underline{r}}_2) = \dot{\underline{H}}_M \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}. \quad (3.6)$$

Unter Verwendung periodischer Randbedingungen gilt automatisch die Gleichheit der Geschwindigkeitsfluktuation gegenüberliegender Punkte sowie die entgegengesetzte Richtung der zugehörigen Spannungsvektoren

$$\underline{v}_{f_1} = \underline{v}_{f_2} \quad ; \quad \tilde{\underline{t}}_1 = -\tilde{\underline{t}}_2. \quad (3.7)$$

Nach der Aufteilung des Randes in zwei punktsymmetrische Hälften  $\tilde{\mathcal{R}}_1$  und  $\tilde{\mathcal{R}}_2$  wird ersichtlich, dass die Hill-Mandel-Bedingung erfüllt ist

$$\frac{1}{\tilde{V}} \left[ \oint_{\tilde{\mathcal{R}}_1} \tilde{\underline{t}}_1 \cdot \underline{v}_{1f} \, d\tilde{A} + \oint_{\tilde{\mathcal{R}}_2} \tilde{\underline{t}}_2 \cdot \underline{v}_{2f} \, d\tilde{A} \right] = \frac{1}{\tilde{V}} \left[ \oint_{\tilde{\mathcal{R}}_1} \tilde{\underline{t}}_1 \cdot \underline{v}_{1f} \, d\tilde{A} - \oint_{\tilde{\mathcal{R}}_2} \tilde{\underline{t}}_1 \cdot \underline{v}_{1f} \, d\tilde{A} \right] = 0. \quad (3.8)$$

Die periodischen Randbedingungen beziehen sich ausschließlich auf die Kopplung der Freiheitsgrade gegenüberliegender Knoten. Periodizität im Sinne, dass Kopien des RVE nahtlos aneinander geknüpft werden können, ist nicht erforderlich. Die Autoren in Glüge et al. (2012) stellen dar, dass sphärische RVEs sogar den Vorteil einer schnelleren Konvergenz zum effektiven Materialverhalten besitzen. Trotzdem werden in dieser Arbeit kubische RVEs verwendet, weil sie deutlich leichter zu implementieren sind.

### Andere effektive Spannungsmaße

Die Hill-Mandel-Bedingung setzt die Spannungen und Deformationen der gemischten Betrachtungsweise in Verbindung. Der effektive erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor sowie der effektive Deformationsgradient folgen mit

$$\underline{\underline{T}}_M = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{T}} d\underline{\underline{V}} \quad ; \quad \underline{\underline{F}}_M = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{F}} d\underline{\underline{V}}. \quad (3.9)$$

Die Arbeiten von Glüge et al. (2012) und vor allem von Nemat-Nasser (1999) gehen auf weitere Spannungsmaße ein. So lässt sich zeigen, dass der effektive Kirchhoff-Spannungstensor aus

$$\underline{\underline{\tau}}_M = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{T}} d\underline{\underline{V}} = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\tau}} d\underline{\underline{V}} \quad (3.10)$$

resultiert. Für den effektiven Cauchy-Spannungstensor sowie den effektiven zweiten Piola-Kirchhoff-Spannungstensor lassen sich solche Beziehungen jedoch im Allgemeinen nicht aufstellen

$$\underline{\underline{\sigma}}_M \neq \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \frac{1}{J_3} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{T}} d\underline{\underline{V}} = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\sigma}} d\underline{\underline{V}} \quad ; \quad \underline{\underline{\tilde{T}}}_M \neq \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{F}}^{-1} d\underline{\underline{V}} = \frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{\tilde{T}}} d\underline{\underline{V}}. \quad (3.11)$$

Stattdessen werden die üblichen kontinuumsmechanischen Zusammenhänge auf makroskopischer Ebene angewandt

$$\underline{\underline{\sigma}}_M = \frac{1}{\det \underline{\underline{F}}_M} \underline{\underline{F}}_M \cdot \underline{\underline{T}}_M \quad ; \quad \underline{\underline{\tilde{T}}}_M = \underline{\underline{T}}_M \cdot \underline{\underline{F}}_M^{-1}. \quad (3.12)$$

### 3.3.2 Die Hill-Bedingung für die Wärmeleitung

Im Folgenden beziehen sich die Betrachtungen zur Wärmeleitung auf die aktuelle Konfiguration. Weil das betrachtete Gebiet keine Deformationen erfährt, gleicht diese Betrachtung der in der Referenzkonfiguration. Analog zur Hill-Mandel-Bedingung (3.3) lässt sich eine Vorschrift zur Kopplung von Mikro- und Makroebene beim thermischen Wärmeleitproblem finden. Die Arbeit von Ostoja-Starzewski (2002) verlangt die Gleichheit des Produktes von Entropieänderung und Temperatur auf beiden Ebenen mit Hilfe von

$$\frac{1}{\underline{\underline{V}}} \int_{\underline{\underline{G}}} \underline{\underline{q}} \cdot \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta) dV = \underline{\underline{q}}_M \cdot \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta_M). \quad (3.13)$$

Die Größen der rechten Seite entsprechen den makroskopischen Werten von Temperaturgradient und Wärmestrom und sind im ganzen RVE konstant. Gleichung (3.13) wird ebenfalls von den Autoren in Özdemir et al. (2008a,b) aufgegriffen und in eine Voraussetzung an die Randbedingungen umformuliert. Dazu wird zunächst ähnlich der Zerlegung des Verschiebungsfeldes auch das Temperaturfeld additiv in einen konstanten homogenen ( $\vartheta_h$ ) sowie einen fluktuierenden Anteil ( $\vartheta_f$ ) zerlegt

$$\vartheta = \vartheta_h + \vartheta_f = \vartheta_p + \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta_M) \cdot (\underline{\underline{r}} - \underline{\underline{r}}_p) + \vartheta_f. \quad (3.14)$$

Dabei bezieht sich der Index „p“ auf einen beliebigen Punkt innerhalb des RVE. Eingesetzt in das Volumenintegral des Temperaturgradienten folgt

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{G}} \underline{\nabla}(\vartheta) dV = \underline{\nabla}(\vartheta_M) + \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}} \vartheta_f \underline{n} dA. \quad (3.15)$$

Es gilt also

$$\underline{\nabla}(\vartheta_M) = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{G}} \underline{\nabla}(\vartheta) dV \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}} \vartheta_f \underline{n} dA = 0. \quad (3.16)$$

Damit ist die Erfüllung der Mikro- Makrokopplung des Temperaturgradienten an die Fluktuation der Randtemperatur geknüpft.

### Periodische Randbedingungen bei der stationären Wärmeleitung

Periodische Randbedingungen gewährleisten die Erfüllung von Gleichung (3.16). Ähnlich Gleichung (3.5) werden konstante Gradienten des Freiheitsgrades für gegenüberliegende Punkte mit entgegengesetzten Normalen gefordert

$$\vartheta_1 - \vartheta_2 = \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot (\underline{r}_1 - \underline{r}_2) = \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \underline{\Delta r}. \quad (3.17)$$

Analog zum mechanischen Problem gehen mit den PBC gleiche Fluktuationen der Temperatur auf gegenüberliegenden Rändern einher, wodurch Gleichung (3.16) erfüllt wird

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}} \vartheta_f \underline{n} dA &= \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} \vartheta_{1f} \underline{n}_1 dA + \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_2} \vartheta_{2f} \underline{n}_2 dA \\ &= \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} \vartheta_{1f} \underline{n}_1 dA - \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} \vartheta_{1f} \underline{n}_1 dA = 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Folglich wird der Temperaturgradient auf Mikro- und Makroebene gekoppelt. Unter Kenntnis der Randbedingung wird die Gültigkeit von Gleichung (3.13) gezeigt,

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{\mathcal{G}} \underline{\nabla}(\vartheta) \cdot \underline{q} dV &= \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} \vartheta_1 \underline{q} \cdot \underline{n}_1 dA + \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_2} \vartheta_2 \underline{q} \cdot \underline{n}_2 dA \\ &= \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} (\vartheta_1 - \vartheta_2) \underline{q} \cdot \underline{n}_1 dA \\ &= \frac{1}{V} \oint_{\mathcal{R}_1} \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot (\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \cdot (\underline{q} \cdot \underline{n}_1) dA \\ &= \frac{1}{V} \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \oint_{\mathcal{R}} \underline{r} \cdot (\underline{q} \cdot \underline{n}) dA \\ &= \frac{1}{V} \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \int_{\mathcal{G}} (\underline{r} \cdot \underline{q}) \cdot \underline{\nabla} dV \\ &= \frac{1}{V} \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \int_{\mathcal{G}} \underbrace{(\underline{\nabla} \circ \underline{r})}_{=I} \cdot \underline{q} + \underbrace{\underline{r}(\underline{\nabla} \cdot \underline{q})}_{=0} dV \\ &= \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \frac{1}{V} \int_{\mathcal{G}} \underline{q} dV = \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \underline{q}_M, \end{aligned} \quad (3.19)$$

womit die Hill-Bedingung für das stationäre Wärmeproblem unter Verwendung von PBC erfüllt wird.

## 3.4 Diskretisierung des RVE

Die mit dem RVE zu lösenden Feldprobleme werden von Differentialgleichungen (DGL) mit partiellen Ableitungen beschrieben. Zur Lösung dieser DGL wird auf den Ansatz der FEM zurückgegriffen. Die FEM wiederum erfordert eine räumliche Diskretisierung des RVE in Elemente mit bekannter Ansatzfunktion. Erst durch diese Diskretisierung wird die Verbindung zwischen der geometrischen Beschreibung des RVE und der numerischen Homogenisierung geschaffen. Mit Blick auf Rechenzeit und Speicherkapazität müssen Kompromisse zwischen Abbildungsgenauigkeit und Feinheit der Diskretisierung gemacht werden. Es stehen verschiedene Arten der Diskretisierung zur Auswahl, wovon in den nächsten Unterabschnitten zwei Vertreter kurz vorgestellt werden. Schließlich erfordert die Wahl periodischer Randbedingungen auch noch, dass jedem Punkt auf dem Rand ein gegenüberliegender Punkt mit entgegengesetztem Normalenvektor zugeordnet werden kann.

### Mikrobasierte Vernetzung

Bei der mikrobasierten Vernetzung werden die finiten Elemente den Grenzen der einzelnen Phasen angepasst. Für das Beispiel dieser Arbeit bedeutet das, dass die Ränder der Kurzfasern von Elementkanten begrenzt werden. Der Vorteil dieser Methode liegt in der Möglichkeit, die Geometrie des RVE genau in die FEM-Umgebung transportieren zu können. Allerdings bringt dieser Prozess auch einige Nachteile mit sich. Besitzen die Inklusionen eine allgemeine, fraktale Oberfläche, so ist allein schon die Vernetzung der einzelnen Inklusionen mit viel Aufwand verbunden. Eine weitere Herausforderung bildet die Vernetzung der Matrix, wenn die Inklusionen mit unterschiedlichen Orientierungen vorliegen und die Kompatibilität der Elemente gewahrt bleiben soll. Eine Vernetzung solcher allgemeinen Strukturen ist in der Regel bei dreidimensionalen Problemen nur mit Tetraederelementen und sehr kleiner Elementgröße möglich. Aber selbst dann stellt die Vernetzung ein nicht triviales Problem dar, wenn eine Mindestqualität der Elemente (keine spitzen Innenwinkel, etc.) gefordert wird und zusätzlich jedem Knoten am RVE-Rand ein Knoten auf der anderen Seite gegenüberliegen soll.

### Voxelbasierte Vernetzung

Das Problem der aufwendigen Vernetzung stellt sich bei dem voxelbasierten Ansatz nicht. Dabei wird das RVE unabhängig von der Mikrostruktur mit einem regelmäßigen Voxelnetz diskretisiert. Der Vernetzungsaufwand hängt nur von der Form der RVE-Domäne ab. Bei kubischen RVEs, wie in dieser Arbeit, fällt die Vernetzung besonders einfach aus. Hierfür können sogar ohne Aufwand die numerisch günstigeren Hexaederelemente verwendet werden. Durch dieses gleichmäßige Netz wird auch automatisch gewährleistet, dass den Knoten am Rand ein gegenüberliegender Knoten zugeordnet werden kann.

Die Mikrostruktur findet bei der Materialzuweisung Berücksichtigung. Dabei stehen verschiedene Möglichkeiten der Zuordnung der einzelnen Phasen zur Verfügung (vgl. Wilmers & Lenhof (2013)). Enthält ein Voxel lediglich eine einzige Phase, werden dem gesamten Voxel die Eigenschaften dieser Phase zugewiesen. Da die Vernetzung losgelöst von der Geometrie der Mikrostruktur erfolgt, wird es jedoch in der Regel Voxel geben, die mehrere Phasen enthalten (siehe Abbildung 3.4 links). Diese Voxel werden im Folgenden als Mischvoxel bezeichnet und erfordern eine gesonderte Zuweisung der Materialeigenschaften.

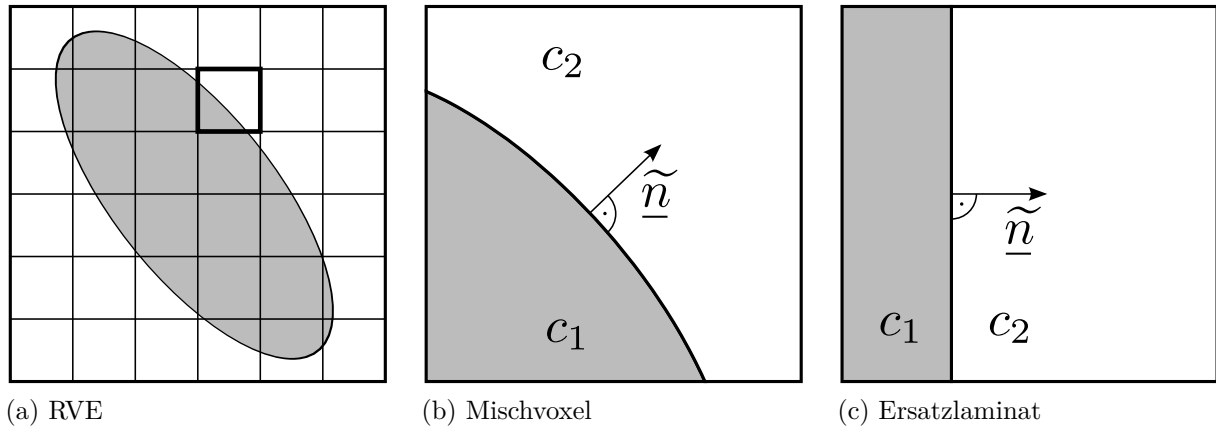


Abbildung 3.4: Überführung der im RVE enthaltenen Mischvoxel, bestehend aus zwei Phasen, in Laminate mit äquivalenten Konzentrationen  $c_1, c_2$  und mittlerem Normalenvektor  $\tilde{n}$ .

Ein simpler Ansatz dafür wäre, zu schauen, in welcher Phase sich der Mittelpunkt eines Elements befindet und dem ganzen Element anschließend die Eigenschaften dieser Phase zuzuweisen. Eine Erweiterung dieser Methode bestünde darin, die Konzentrationen  $c_1, c_2$  der einzelnen Phasen (siehe Abbildung 3.4 mittig) im Mischvoxel zu bestimmen und die Materialeigenschaften ähnlich einer Voigt-Mischregel zuzuweisen. Diese voxelweise Materialzuweisung erfordert eine hinreichend feine Diskretisierung des RVE, damit der Einfluss der Mischvoxel klein genug bleibt. Einen vermeintlichen Genauigkeitsgewinn bei gleicher Diskretisierung bietet die Möglichkeit der Materialzuweisung auf Gaußpunkt-Ebene. Dabei wird geschaut, in welcher Phase sich die Gaußpunkte eines Elements befinden und dann die entsprechenden Eigenschaften zugewiesen. Da die Gaußpunkte in den standardisierten isoparametrischen Elementen mit linearer Ansatzfunktion jedoch die gleichen Wichtungsfaktoren besitzen, entspricht diese Art der Materialzuweisung bei großen RVEs ungefähr der voxelweisen Materialzuweisung unter Berücksichtigung der Konzentrationen der Phasen. Zu den Nachteilen der Gaußpunkt-methode zählt, dass sich der effektive Volumengehalt der Gaußpunkte mit Fasermaterial von dem tatsächlichen Volumengehalt der Fasern der Mikrostruktur unterscheiden kann.

Bei linearen Problemen wie dem Wärmeleitproblem, lassen sich die Eigenschaften des Mischvoxels durch eine Reuss-Mittelung bestimmen. Zusammen mit der Voigt-Mischregel

stehen also die untere (Reuss) und die obere (Voigt) Schranke der effektiven Eigenschaften der Mischvoxel zur Verfügung.

In dieser Arbeit kommt eine weitere Methode der Materialzuweisung bei Mischvoxeln zum Einsatz. Sie basiert auf der Annahme, dass sich das Umfeld der Grenzfläche zwischen den beiden Phasen wie ein Laminat verhält (vgl. Kabel et al. (2016)). Das heißt, jedes Mischvoxel lässt sich unter Kenntnis der einzelnen Konzentrationen der Phasen sowie des mittleren Normalenvektors der Grenzfläche in ein äquivalentes Laminat überführen (vgl. Abbildung 3.4 rechts). Die Forderung der Kontinuität des Spannungsvektors bzw. des Wärmestroms an der Grenzfläche bedingt einen Sprung des Deformationsgradienten bzw. des Temperaturgradienten. Dieser Sprung lässt sich im Falle des mechanischen Problems mit Hilfe der Spannungskontinuität ausiterieren und im Falle des Wärmeleitproblems sogar explizit bestimmen. Die effektiven Spannungen bzw. Wärmeströme des Mischvoxels folgen aus der gewichteten Summe der Bestandteile beider Phasen. Tabelle 3.1 fasst die drei wichtigsten Mischregeln für Mischvoxel zusammen. Die Größen  $\underline{\underline{F}}_h$  und  $\underline{\nabla}(\vartheta_h)$  bezeichnen den mittleren Deformationsgradienten bzw. den mittleren Temperaturgradienten des Voxels. Der Vektor  $\underline{a}$  lässt sich dem Sprung im Deformationsgradienten und das Skalar  $a$  dem Sprung im Temperaturgradienten zuordnen.

Tabelle 3.1: Verschiedene Mischregeln für Mischvoxel.

|                | $\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}} = 0$  | $\underline{\nabla} \cdot \underline{q} = 0$   |
|----------------|---|--|
| <b>Voigt</b>   | $\underline{\underline{F}}_1 = \underline{\underline{F}}_2 = \underline{\underline{F}}_h$ $\underline{\underline{T}} = c_1 \frac{\partial \tilde{q} \psi_1}{\partial \underline{\underline{F}}}(\underline{\underline{F}}_1) + c_2 \frac{\partial \tilde{q} \psi_2}{\partial \underline{\underline{F}}}(\underline{\underline{F}}_2)$   | $\underline{\nabla}(\vartheta_1) = \underline{\nabla}(\vartheta_2) = \underline{\nabla}(\vartheta_h)$ $\underline{q} = -(c_1 \underline{\lambda}_1 + c_2 \underline{\lambda}_2) \cdot \underline{\nabla}(\vartheta_h)$   |
| <b>Reuss</b>   | -   | $\underline{q}_1 = \underline{q}_2$ $\underline{\lambda}_1 = \lambda_1 \underline{I} \quad ; \quad \underline{\lambda}_2 = \lambda_2 \underline{I}$ $\underline{q} = -\frac{\lambda_1 \lambda_2}{c_2 \lambda_1 + c_1 \lambda_2} \underline{\nabla}(\vartheta_h)$   |
| <b>Laminat</b> | $\underline{\underline{F}}_1 = \underline{\underline{F}}_h + c_2 \underline{a} \circ \tilde{n}$ $\underline{\underline{F}}_2 = \underline{\underline{F}}_h - c_1 \underline{a} \circ \tilde{n}$ $\tilde{n} \cdot \underline{\underline{T}}_1 = \tilde{n} \cdot \underline{\underline{T}}_2 \rightarrow \underline{a}$ $\underline{\underline{T}} = c_1 \frac{\partial \tilde{q} \psi_1}{\partial \underline{\underline{F}}}(\underline{\underline{F}}_1) + c_2 \frac{\partial \tilde{q} \psi_2}{\partial \underline{\underline{F}}}(\underline{\underline{F}}_2)$ | $\underline{\nabla}(\vartheta_1) = \underline{\nabla}(\vartheta_h) + c_2 \underline{a} n$ $\underline{\nabla}(\vartheta_2) = \underline{\nabla}(\vartheta_h) - c_1 \underline{a} n$ $a = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{c_2 \lambda_1 + c_1 \lambda_2} (\underline{\nabla}(\vartheta_h) \cdot \underline{n})$ $\underline{q} = -c_1 \underline{\lambda}_1 \cdot \underline{\nabla}(\vartheta_1) - c_2 \underline{\lambda}_2 \cdot \underline{\nabla}(\vartheta_2)$ |



## 3.5 Numerische Homogenisierung mit Abaqus

Gleichungen (3.5) und (3.17) formulieren Zwangsbedingungen zwischen Freiheitsgraden gegenüberliegender Punkte. Die Freiheitsgrade werden bei der FEM von den Knoten bestimmt. Folglich müssen zur Umsetzung der periodischen Randbedingungen Zwangsbedingungen an die Freiheitsgrade der Knoten gestellt werden.

### 3.5.1 Kopplung der Freiheitsgrade

#### Kopplung der Verschiebungen

Die Arbeit von Goldberg et al. (2015) erläutert die Möglichkeit, lineare Zwangsbedingungen zwischen den Verschiebungsfreiheitsgraden in ABAQUS umzusetzen (vgl. Abaqus (2014a)) und damit PBC zu realisieren. Die Ansätze der Autoren werden im Folgenden aufgegriffen und dargelegt. Die Ausgangsbasis zur Realisierung der PBC bilden ein zusätzliches Ko-

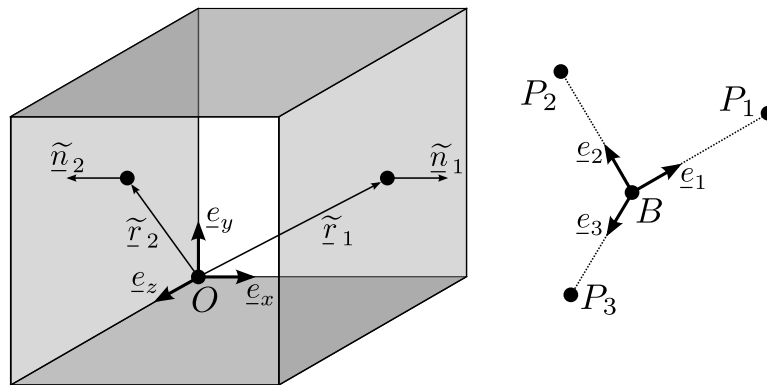


Abbildung 3.5: Prinzipskizze des RVE in ABAQUS mit allen relevanten Knoten.

ordinatensystem mit den Basisvektoren  $e_1, e_2, e_3$  sowie die Hilfsknoten  $P_1, P_2, P_3, B$  (vgl. Abbildung 3.5). Dabei handelt es sich um ein kartesisches Koordinatensystem, welches gegenüber dem globalen  $x, y, z$  Koordinatensystem beliebig gedreht ist. Das RVE wird so positioniert, dass der Knoten  $O$  im Ursprung des globalen Koordinatensystems liegt. Letzteres ist lediglich eine zweckmäßige, jedoch keine zwingende Bedingung. Der Basisknoten  $B$  befindet sich im Ursprung des lokalen Koordinatensystems. Die Pilotknoten  $P_i$  liegen auf den lokalen Koordinatenachsen und besitzen den Abstand  $l_i$  zum Basisknoten, sodass gilt

$$\underline{OP}_i - \underline{OB} = l_i e_i \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.20)$$

Die Seitenflächen des RVE lassen sich nach der Richtung ihrer Normalenvektoren einordnen. In Abbildung 3.5 sind exemplarisch zwei gegenüberliegende Knoten mit entgegengesetzten Normalenvektoren, die parallel zum Basisvektor  $e_x$  liegen, eingezeichnet. Der konstante homogene Verschiebungsgradient  $\underline{\underline{H}}_M$  wird über die Verschiebungen der vier Hilfsknoten

wie folgt beschrieben

$$\underline{\underline{H}}_M = \frac{1}{l_1}(\underline{u}_{P_1} - \underline{u}_B) \circ \underline{e}_1 + \frac{1}{l_2}(\underline{u}_{P_2} - \underline{u}_B) \circ \underline{e}_2 + \frac{1}{l_3}(\underline{u}_{P_3} - \underline{u}_B) \circ \underline{e}_3, \quad (3.21)$$

bzw. unter Vorgabe von  $\underline{u}_B = \underline{0}$  in kompakter Schreibweise

$$\underline{\underline{H}}_M = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{l_i} \underline{u}_{P_i} \circ \underline{e}_i. \quad (3.22)$$

Die Verschiebung des Basisknotens wird zu Null gehalten, um Starrkörpertranslationen des RVE zu verhindern. Dazu wird zusätzlich die Verschiebung des Knotens  $O$  an die Verschiebung des Basisknotens gekoppelt

$$\underline{u}_O = \underline{u}_B. \quad (3.23)$$

Mit Hilfe der Pilotknotenverschiebungen kann ein homogener Verschiebungsgradient für das gesamte RVE vorgegeben werden. Dabei müssen nicht alle Koeffizienten des Tensors  $\underline{\underline{H}}_M$  definiert sein. Wird der Verschiebung eines Pilotknotens erlaubt sich frei einzustellen, stellt sich auch der entsprechende Koeffizient von  $\underline{\underline{H}}_M$  frei ein, indem die zugehörige Spannung Null anstrebt. Die Anzahl der freien Verschiebungen der Pilotknoten wird allerdings von der Forderung nach unterbundener Starrkörperrotation begrenzt. Um diese zu verhindern, muss aus den Koeffizientenpaaren  $(H_{M_{12}}, H_{M_{21}})$ ,  $(H_{M_{13}}, H_{M_{31}})$ ,  $(H_{M_{23}}, H_{M_{32}})$  jeweils ein Koeffizient vorgeschrieben werden.

Mit Gleichung (3.22) lässt sich Gleichung (3.5) als lineare Beziehung der beteiligten Knotenverschiebungen in kompakter Tensor-Notation für jedes Knotenpaar aufschreiben

$$\underline{u}_1 - \underline{u}_2 = \left[ \sum_{i=1}^3 \frac{1}{l_i} \underline{u}_{P_i} \circ \underline{e}_i \right] \cdot (\tilde{\underline{r}}_1 - \tilde{\underline{r}}_2). \quad (3.24)$$

Dabei ist zu beachten, dass ABAQUS die Vorgabe linearer Kopplungsgleichungen im globalen Koordinatensystem in Koeffizientenschreibweise erwartet und sich die Verschiebungen der Pilotknoten auf das lokale Koordinatensystem beziehen. Eine Anleitung zur korrekten Verrechnung beider Koordinatensystem wird in der Arbeit von Goldberg et al. (2015) geschildert.

### Kopplung der Temperaturen

In ähnlicher Weise kann bei dem Wärmeleitproblem verfahren werden. Für den homogenen Temperaturgradienten  $\underline{\nabla}(\vartheta_M)$  gilt

$$\underline{\nabla}(\vartheta_M) = \frac{(\vartheta_{P_1} - \vartheta_B)}{l_1} \underline{e}_1 + \frac{(\vartheta_{P_2} - \vartheta_B)}{l_2} \underline{e}_2 + \frac{(\vartheta_{P_3} - \vartheta_B)}{l_3} \underline{e}_3 \quad (3.25)$$

bzw. unter Vorgabe von  $\vartheta_B = 0$  in kompakter Form

$$\underline{\nabla}(\vartheta_M) = \sum_{i=1}^3 \frac{\vartheta_{P_i}}{l_i} \underline{e}_i. \quad (3.26)$$

Damit lässt sich unter Vorgabe dreier Knotentemperaturen  $(\vartheta_{P_1}, \vartheta_{P_2}, \vartheta_{P_3})$  ein homogener Temperaturgradient vorgeben. Die zugehörige Kopplungsgleichung für die PBC folgt mit

$$\vartheta_1 - \vartheta_2 = \left[ \sum_{i=1}^3 \frac{\vartheta_{P_i}}{l_i} \underline{e}_i \right] \cdot (\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \quad . \quad (3.27)$$

### 3.5.2 Bestimmung effektiver Feldgrößen

Zweck der Homogenisierung ist die Bestimmung effektiver Eigenschaften des RVE. Gleichungen (3.22) und (3.26) veranschaulichen, dass dafür keine Integration über die Domäne des RVE notwendig ist, sondern eine Auswertung der Pilotknoten reicht. Wie genau sich diese Auswertung für die effektive Spannung sowie den effektiven Wärmefluss gestaltet, wird im Folgenden dargelegt.

#### Die effektive Spannung

Zur Bestimmung der effektiven Spannung wird die Leistung der Knoten als Produkt von Knotenkraft  $\underline{Q}$  und Knotengeschwindigkeit  $\underline{v}$  betrachtet

$$\mathcal{P}_{\text{Sp}} = \sum_{K=1}^N \underline{Q}_K \cdot \underline{v}_K = \sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} \cdot (\underline{v}_{AK_1} - \underline{v}_{AK_2}) \quad . \quad (3.28)$$

Dabei erfolgt die Summation über diejenigen Seiten des RVE (erste Summe), für die gilt  $\underline{n}_A \cdot \underline{e}_A = 1$ , sowie über alle  $N_A$  Knoten pro Seite (zweite Summe). Des Weiteren erlaubt das statische Gleichgewicht eine Zusammenfassung gegenüberliegender Seiten, weil die Knotenkräfte sich nur in ihrem Richtungssinn unterscheiden. Mit den periodischen Randbedingungen folgt weiterhin

$$\mathcal{P}_{\text{Sp}} = \sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} \cdot \underline{\dot{H}}_M \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A = \sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} (\Delta \tilde{\underline{r}}_A \circ \underline{Q}_{AK}) \cdot \underline{\dot{H}}_M \quad . \quad (3.29)$$

Kurzes Umsortieren und Erweitern mit Eins ergibt

$$\mathcal{P}_{\text{Sp}} = \frac{1}{\tilde{V}} \sum_{A=X}^Z \Delta \tilde{\underline{r}}_A \circ \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} \cdot \tilde{V} \underline{\dot{H}}_M \quad , \quad (3.30)$$

womit unter Beachtung von (3.3) der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor identifiziert werden kann

$$\underline{\underline{T}}_M = \frac{1}{\tilde{V}} \sum_{A=X}^Z \Delta \tilde{\underline{r}}_A \circ \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} \quad . \quad (3.31)$$

In dieser Formulierung erfordert der homogene Spannungstensor eine Summation über alle Randknoten des RVE. Diese Formulierung soll auf eine Abhängigkeit von den Kräften der Pilotknoten überführt werden. Dazu wird Gleichung (3.22) in die Spannungsleistung eingesetzt

$$\mathcal{P}_{\text{Sp}} = \sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} \cdot \left[ \frac{1}{l_1} (\underline{e}_1 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) v_{P_1} + \frac{1}{l_2} (\underline{e}_2 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) v_{P_2} + \frac{1}{l_3} (\underline{e}_3 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) v_{P_3} \right] \quad . \quad (3.32)$$

Daraus lassen sich die Knotengeschwindigkeiten ausklammern und es verbleiben die leistungskonjugierten Knotenkräfte der Pilotknoten

$$\begin{aligned}\underline{Q}_{P_1} &= \frac{1}{l_1} \sum_{A=X}^Z (\underline{e}_1 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK}, \\ \underline{Q}_{P_2} &= \frac{1}{l_2} \sum_{A=X}^Z (\underline{e}_2 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK}, \\ \underline{Q}_{P_3} &= \frac{1}{l_3} \sum_{A=X}^Z (\underline{e}_3 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK}.\end{aligned}\tag{3.33}$$

Diese Ausdrücke finden sich beispielsweise für den Pilotknoten  $P_1$  in Gleichung (3.31) wieder

$$\frac{\tilde{V}}{l_1} \underline{e}_1 \cdot \underline{T}_M = \frac{1}{l_1} \sum_{A=X}^Z (\underline{e}_1 \cdot \Delta \tilde{\underline{r}}_A) \sum_{K=1}^{N_A} \underline{Q}_{AK} = \underline{Q}_{P_1}.\tag{3.34}$$

Im Umkehrschluss gilt

$$(\underline{e}_1 \circ \underline{e}_1) \cdot \underline{T}_M = \frac{l_1}{\tilde{V}} \underline{e}_1 \circ \underline{Q}_{P_1}\tag{3.35}$$

bzw. für alle drei Pilotknoten

$$\underline{T}_M = \underline{I} \cdot \underline{T}_M = \sum_{i=1}^3 (\underline{e}_i \circ \underline{e}_i) \cdot \underline{T}_M = \frac{1}{\tilde{V}} \sum_{i=1}^3 l_i \underline{e}_i \circ \underline{Q}_{P_i}.\tag{3.36}$$

Damit lassen sich sowohl die Deformations- als auch die Spannungswerte der makroskopischen Größen allein an den Pilotknoten ablesen

$$\underline{H}_M = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{l_i} \underline{u}_{P_i} \circ \underline{e}_i \quad ; \quad \underline{T}_M = \frac{1}{\tilde{V}} \sum_{i=1}^3 l_i \underline{e}_i \circ \underline{Q}_{P_i}.\tag{3.37}$$

Häufig werden Spannungen der Momentan- bzw. Referenzkonfiguration im Zuge der Homogenisierung gesucht. Mit  $\underline{F}_M = \underline{I} + \underline{H}_M$  lässt sich dazu der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor einfach per Push-forward- bzw. Pull-back-Operation transformieren (vgl. Gl. (3.12))

$$\underline{\sigma}_M = \frac{1}{\det \underline{F}_M} \underline{F}_M \cdot \underline{T}_M \quad ; \quad \tilde{\underline{T}}_M = \underline{T}_M \cdot \underline{F}_M^{-T}.$$

### Der effektive Wärmestrom

In gleicher Weise kann bei der Bestimmung der effektiven Größen des Wärmeleitproblems verfahren werden. Auch hier erfolgt zunächst die Betrachtung des Terms in der Hill-Bedingung. Für das Produkt aus Wärmestrom und Temperaturgradient gilt

$$\int_{\mathcal{G}} \underline{q} \cdot \underline{\nabla}(\vartheta) \, dV = - \oint_{\mathcal{R}} \vartheta q \, dA\tag{3.38}$$

mit dem flächenbezogenen Wärmestrom  $\underline{q} = -(\underline{n} \cdot \underline{q})$  normal zur Oberfläche. Das Äquivalent der Knotengrößen lautet

$$\sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} -[q_{AK}(\vartheta_{AK_1} - \vartheta_{AK_2})]. \quad (3.39)$$

Einsetzen der PBC (3.17) liefert

$$\sum_{A=X}^Z \sum_{K=1}^{N_A} -q_{AK} (\underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \Delta \underline{r}_A) = - \sum_{A=X}^Z (\underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \Delta \underline{r}_A) \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK}. \quad (3.40)$$

Umsortieren und Erweitern mit Eins resultiert in

$$-V \underline{\nabla}(\vartheta_M) \cdot \frac{1}{V} \sum_{A=X}^Z \Delta \underline{r}_A \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK}, \quad (3.41)$$

worin sich mit der Hill-Bedingung (3.13) der effektive Wärmestrom identifizieren lässt

$$\underline{q}_M = -\frac{1}{V} \sum_{A=X}^Z \Delta \underline{r}_A \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK}. \quad (3.42)$$

Auch diese Gleichung soll in eine Form überführt werden, die nur noch die Größen der Pilotknoten enthält. Dazu wird die Bestimmungsgleichung für den Temperaturgradienten in Gleichung (3.40) eingesetzt

$$\begin{aligned} -\vartheta_{P_1} \left[ \sum_{A=X}^Z \frac{1}{l_1} (\underline{e}_1 \cdot \Delta \underline{r}_A) \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK} \right] &- \vartheta_{P_2} \left[ \sum_{A=X}^Z \frac{1}{l_2} (\underline{e}_2 \cdot \Delta \underline{r}_A) \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK} \right] \\ &- \vartheta_{P_3} \left[ \sum_{A=X}^Z \frac{1}{l_3} (\underline{e}_3 \cdot \Delta \underline{r}_A) \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK} \right]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Die darin enthaltenen Terme in den eckigen Klammern lassen sich den Reaktionsströmen der Pilotknoten zuordnen. Ebenso kann eine Verbindung zu Gleichung (3.42) gefunden werden

$$\frac{V}{l_1} \underline{e}_1 \cdot \underline{q}_M = -\frac{1}{l_1} \sum_{A=X}^Z (\underline{e}_1 \cdot \Delta \underline{r}_A) \sum_{K=1}^{N_A} q_{AK} = -q_{P_1}. \quad (3.44)$$

Diese Gleichung nach dem homogenen Wärmestrom umgestellt liefert

$$(\underline{e}_1 \circ \underline{e}_1) \cdot \underline{q}_M = -\frac{l_1}{V} q_{P_1} \underline{e}_1 \quad (3.45)$$

bzw. allgemein

$$\underline{q}_M = \underline{I} \cdot \underline{q}_M = -\sum_{i=1}^3 (\underline{e}_i \circ \underline{e}_i) \cdot \underline{q}_M = -\frac{1}{V} \sum_{i=1}^3 l_i q_{P_i} \underline{e}_i. \quad (3.46)$$

Damit folgt für den kompletten mittleren Temperaturgradienten sowie den mittleren Wärmestrom

$$\underline{\nabla}(\vartheta_M) = \sum_{i=1}^3 \frac{\vartheta_{P_i}}{l_i} \underline{e}_i \quad ; \quad \underline{q}_M = -\frac{1}{V} \sum_{i=1}^3 l_i q_{P_i} \underline{e}_i. \quad (3.47)$$

### 3.5.3 Anwendungsbeispiele

Mit den Gleichungen (3.37) und (3.47) können die effektiven Feldgrößen des mechanischen und des thermischen Problems unmittelbar abgelesen werden. Daraus lassen sich bereits wichtige Aussagen über das Verhalten des Verbundes aus Matrix und Kurzfasern ableiten. Für eine umfangreichere Betrachtung des Materials sind jedoch zusätzlich abgeleitete Größen von Interesse. Das prinzipielle Vorgehen zur Bestimmung einiger dieser Größen wird im Folgenden vorgestellt.

#### Effektive Steifigkeit

Die Steifigkeit eines Materials beschreibt die Linearisierung der Spannung mit Bezug zur Dehnung in Abhängigkeit vom Deformationszustand. Für den Fall der Nichtlinearität ändert sich die Steifigkeit mit der Deformation. Eine Bestimmung der Steifigkeit würde zunächst eine Simulation der Deformation und anschließend eine Linearisierung um diesen Zustand erfordern. Für eine umfangreiche Beschreibung des Materials wäre also eine Betrachtung zahlreicher verschiedener Deformationen und derer Steifigkeiten notwendig.

Beim Sonderfall der linearen Elastizität jedoch bleibt die Steifigkeit stets konstant und kann unmittelbar in der Referenzkonfiguration bestimmt werden. Deswegen wird auf diese Steifigkeit zurückgegriffen. Der formale Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung lautet dafür

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}. \quad (3.48)$$

Aus Gründen der Übersicht wurde auf den Index für die Makroebene verzichtet, es sei aber erwähnt, dass sich die folgenden Ausführungen auf die homogenisierten Größen des RVE beziehen. In der üblicheren Voigt-Notation unter Ausnutzung der Symmetrie folgt

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{23} \end{bmatrix}. \quad (3.49)$$

Unter Vorgabe sechs verschiedener Deformationszustände können mit Hilfe der zugehörigen effektiven Spannungen aus Gleichung (3.49) die Koeffizienten des Steifigkeitstensors berechnet werden. Zweckmäßigerweise werden die sechs Deformationen wie folgt gewählt

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 2 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \lambda \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 3 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 4 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \lambda \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 5 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \lambda \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 6 \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \lambda \end{bmatrix},$$

wobei  $\lambda$  ein hinreichend kleines Skalar ist. Für die Koeffizienten des Steifigkeitstensors gilt dann

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} = \frac{1}{\lambda} \begin{bmatrix} \overset{1}{\sigma}_{11} & \overset{2}{\sigma}_{11} & \overset{3}{\sigma}_{11} & \overset{4}{\sigma}_{11} & \overset{5}{\sigma}_{11} & \overset{6}{\sigma}_{11} \\ \overset{1}{\sigma}_{22} & \overset{2}{\sigma}_{22} & \overset{3}{\sigma}_{22} & \overset{4}{\sigma}_{22} & \overset{5}{\sigma}_{22} & \overset{6}{\sigma}_{22} \\ \overset{1}{\sigma}_{33} & \overset{2}{\sigma}_{33} & \overset{3}{\sigma}_{33} & \overset{4}{\sigma}_{33} & \overset{5}{\sigma}_{33} & \overset{6}{\sigma}_{33} \\ \overset{1}{\sigma}_{12} & \overset{2}{\sigma}_{12} & \overset{3}{\sigma}_{12} & \overset{4}{\sigma}_{12} & \overset{5}{\sigma}_{12} & \overset{6}{\sigma}_{12} \\ \overset{1}{\sigma}_{13} & \overset{2}{\sigma}_{13} & \overset{3}{\sigma}_{13} & \overset{4}{\sigma}_{13} & \overset{5}{\sigma}_{13} & \overset{6}{\sigma}_{13} \\ \overset{1}{\sigma}_{23} & \overset{2}{\sigma}_{23} & \overset{3}{\sigma}_{23} & \overset{4}{\sigma}_{23} & \overset{5}{\sigma}_{23} & \overset{6}{\sigma}_{23} \end{bmatrix}. \quad (3.50)$$

Die Bestimmung der effektiven Cauchy-Spannungen wird durch Gleichung (3.12) ermöglicht. Der Zusammenhang zwischen der Dehnung  $\underline{\underline{\varepsilon}}_M$  und dem mittleren Verschiebungsgradienten  $\underline{\underline{H}}_M$  bei kleinen Deformationen wird durch

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_M = \frac{1}{2} (\underline{\underline{H}}_M + \underline{\underline{H}}_M^T) \quad (3.51)$$

beschrieben. Damit folgen die vorzugebenden mittleren Verschiebungsgradienten

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \overset{1}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{2}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{3}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \overset{2}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{5}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \overset{3}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{6}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \overset{4}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{5}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \overset{5}{H}_{M_{ij}} \\ \overset{6}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \overset{6}{H}_{M_{ij}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Somit können unter Vorgabe der entsprechenden Verschiebungsgradienten alle Koeffizienten des Steifigkeitstensors in der Referenzkonfiguration bestimmt werden.

### Effektive Wärmeleitung

Ähnlich der Steifigkeit beim mechanischen Problem beschreibt die Wärmeleitung  $\underline{\underline{\lambda}}$  eine Linearisierung des Wärmestroms mit Bezug zum Temperaturgradienten. Unter Hinzunahme des Fourier'schen Ansatzes gilt

$$\underline{\underline{q}} = -\underline{\underline{\lambda}} \cdot \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta) \quad (3.52)$$

bzw. für die Koeffizienten im lokalen Koordinatensystem der Pilotknoten

$$\begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta)_1 \\ \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta)_2 \\ \underline{\underline{\nabla}}(\vartheta)_3 \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

Auch hier wird Bezug auf die effektiven Größen des RVE genommen und der Index für die Makroebene weggelassen. Unter Vorgabe dreier Temperaturgradienten lassen sich die Koeffizienten des Wärmeleitungstensors bestimmen. Zweckmäßigerweise werden sie zu

$$\begin{bmatrix} \overset{1}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \\ \overset{2}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \\ \overset{3}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} ; \quad \begin{bmatrix} \overset{2}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \\ \overset{5}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \varepsilon \\ 0 \end{bmatrix} ; \quad \begin{bmatrix} \overset{3}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \\ \overset{6}{\underline{\underline{\nabla}}}(\vartheta)_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \varepsilon \end{bmatrix} \quad (3.54)$$

gewählt, wobei  $\varepsilon$  ein hinreichend kleines Skalar ist. Für die Koeffizienten des Wärmeleitungstensors folgt dann

$$\begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} \end{bmatrix} = -\frac{1}{\varepsilon} \begin{bmatrix} \overset{1}{q}_1 & \overset{2}{q}_1 & \overset{3}{q}_1 \\ \overset{1}{q}_2 & \overset{2}{q}_2 & \overset{3}{q}_2 \\ \overset{1}{q}_3 & \overset{2}{q}_3 & \overset{3}{q}_3 \end{bmatrix}. \quad (3.55)$$

### Effektive thermische Deformation

Als drittes Anwendungsbeispiel soll die Bestimmung der effektiven thermischen Deformation betrachtet werden. Wird das RVE einer Temperaturänderung unterzogen, stellt sich eine mittlere Deformation ein, die mit den mittleren Spannungsrandbedingungen korrespondiert. Im Falle von  $\underline{T}_M = \underline{0}$  entspricht die resultierende mittlere Deformation automatisch der effektiven thermischen Deformation. Die Randbedingungen für diese Simulationen im lokalen Koordinatensystem werden wie folgt gewählt

$$\begin{bmatrix} T_{M_{11}} = 0 & F_{M_{12}} = 0 & F_{M_{13}} = 0 \\ T_{M_{12}} = 0 & T_{M_{22}} = 0 & F_{M_{23}} = 0 \\ T_{M_{13}} = 0 & T_{M_{23}} = 0 & T_{M_{33}} = 0 \end{bmatrix}. \quad (3.56)$$

Die drei Koeffizienten des Deformationsgradienten werden festgehalten, um Starrkörperrotationen zu verhindern. Die konjugierten Koeffizienten des ersten Piola-Kirchhoff-Spannungstensors ergeben sich trotzdem zu Null. Enthielte das RVE nur ein einziges Material, würde sich als Deformationsgradient ein Vielfaches des Einheitstensors einstellen. Weil aber die Phasen von Kurzfasern und Matrix unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten und Steifigkeiten besitzen, weicht der resultierende Deformationsgradient vom Vielfachen des Einheitstensors ab. Auf diese Weise kann der Einfluss der Fasern auf die thermische Deformation untersucht werden. Jeder Deformationsgradient lässt sich mit Hilfe der Polarzerlegung in eine reine Streckung  $\underline{U}$  sowie eine reine Drehung  $\underline{R}$  zerlegen. Letztere wirkt sich nicht auf die effektiven Spannungen des RVE aus. Mit den Randbedingungen (3.56) wird jedoch bereits eine Rotation vorgeschrieben. Aus diesem Grund wird die effektive Deformation  $\underline{F}_M$  um die Rotation bereinigt und nur die reine effektive Streckung  $\underline{U}_M$  ermittelt.

### 3.5.4 Konvergenzbetrachtungen am RVE

In diesem Abschnitt soll das Konvergenzverhalten des RVE dargestellt werden. Bereits in Abschnitt 3.4 wurde erwähnt, dass die Feinheit der Diskretisierung bei einer voxelbasierten Vernetzung das Ergebnis der Homogenisierung maßgeblich beeinflusst. Dazu werden am Beispiel der effektiven Steifigkeit und der effektiven Wärmeleitung die drei Methoden aus Tabelle 3.1 miteinander verglichen. Als Vergleichsgrößen dienen die Norm der Steifigkeit  $\|\underline{C}\|$  sowie die Norm der Wärmeleitung  $\|\underline{\lambda}\|$ . Die Norm eines Tensors besitzt zwar keine



Richtungsinformation, jedoch wurde bei den Konvergenzbetrachtungen festgestellt, dass die verschiedenen Steifigkeits- bzw. Wärmeleitungstensoren alle coaxial zueinander liegen, was eine Reduktion des Tensors auf seine Norm als Vergleichsmaß zulässt. Die Normen werden für verschiedene Diskretisierungsstufen ermittelt. Dabei wird die Anzahl der Elemente pro Raumrichtung bzw. pro Kante des RVE variiert. Auf Grund der Würfelform des RVE bedeutet also eine Elementzahl von  $N$  pro Kante eine Gesamtelementzahl von  $N^3$ . Den einzelnen Phasen des RVE werden bei der Bestimmung der effektiven Steifigkeit freie Energiedichten des Neo-Hooke Materials zugewiesen

$$\tilde{\varrho}\psi_i = \frac{G_i}{2}(\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{C}} - 3) + \frac{K_i}{2}(J_3 - 1)^2 \quad ; \quad i = \{\text{Matrix, Faser}\}.$$

Für die Konvergenzbetrachtung der effektiven Wärmeleitung werden den Phasen lediglich isotrope Wärmeleitungstensoren  $\lambda_i \underline{\underline{I}}$  zugeordnet.

Tabelle 3.2: Materialparameter der zwei Phasen im RVE bei der Konvergenzbetrachtung.

| $i$    | $G$ [GPa] | $K$ [GPa] | $\lambda$ [W/(mK)] |
|--------|-----------|-----------|--------------------|
| Matrix | 1         | 10        | 0,23               |
| Faser  | 50        | 108       | 10                 |

Tabelle 3.2 beinhaltet die zugehörigen Materialparameter. Die Fasern im RVE gehorchen einer isotropen bzw. zufälligen Faserorientierungsverteilung und weisen somit auf Grund ihrer unterschiedlichen Ausrichtungen möglichst komplizierte Wechselwirkungen auf. Die Ergebnisse der Konvergenzbetrachtungen sind in Abbildung 3.6 zu finden.

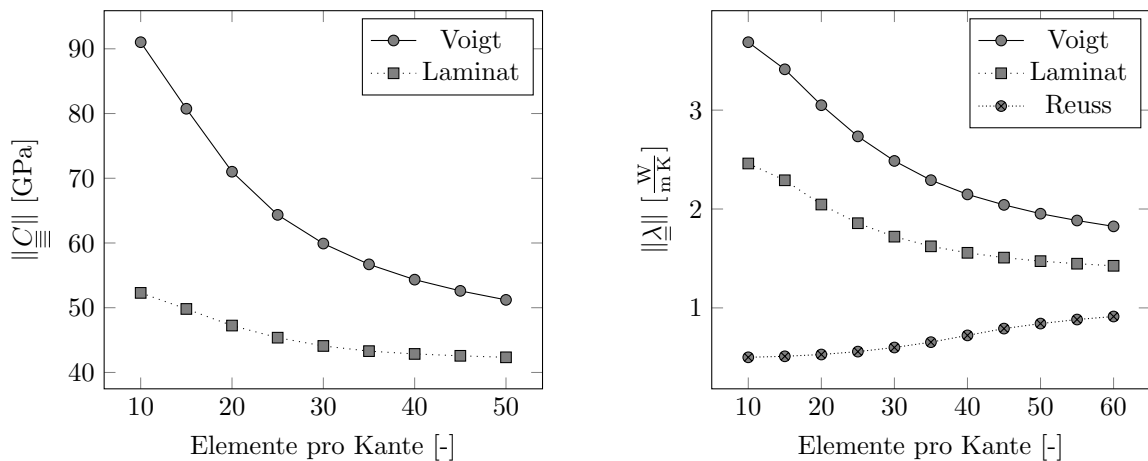


Abbildung 3.6: Konvergenzbetrachtungen des RVE bezüglich der effektiven Steifigkeit (links) und der effektiven Wärmeleitung (rechts). Dargestellt werden die Normen der tensoriellen Größen über der Anzahl der Elemente pro Raumrichtung.

Die Konvergenzstudie der effektiven Steifigkeit erfolgt nur für die Voigt- und die Laminat-Mischregel. Beide Graphen verlaufen monoton fallend bei steigender Elementzahl pro Kante. Es ist deutlich erkennbar, dass die Voigt-Regel eine steifere Antwort als die Laminat-Regel liefert. Letztere hat sich bei 50 Elementen pro Kante schon mehr einem Grenzzustand angenähert als die Voigt-Regel, welche einen stärkeren Abstieg erkennen lässt. Beide Methoden müssen im konvergierten Zustand das gleiche Ergebnis liefern, weil bei einer theoretisch unendlich feinen Diskretisierung der Einfluss der Grenzfläche, also der Mischvoxel, gegen Null konvergiert. Vor diesem Hintergrund deutet die Konvergenzstudie bis  $50^3$  Elementen bereits an, dass die Voigt-Regel das effektive RVE Verhalten nur sehr langsam konvergieren lässt. Die Laminat-Regel ist zwar auch noch nicht konvergiert, aber mit ihr können bereits bei deutlich weniger Elementen effektive Steifigkeiten ermittelt werden, die sich näher am konvergierten Zustand befinden.

Bei der Konvergenzstudie der effektiven Wärmeleitung wird zusätzlich das Ergebnis der Reuss-Methode dargestellt. Dem Diagramm lässt sich sehr gut entnehmen, dass Voigt- und Reuss-Methode die obere und untere Schranken liefern. Beide Methoden werden sich bei immer feiner werdender Diskretisierung immer weiter annähern bis sie das gleiche Ergebnis liefern. Ab dieser Diskretisierung stellt sich ein konvergierter Zustand ein. Der Graph der Laminat-Regel liegt bei  $60^3$  Elementen etwas oberhalb der Mitte zwischen Voigt- und Reuss-Graph. Auch hier zeigt sich, dass die Laminat-Regel bereits bei viel weniger Elementen ein effektives Verhalten nahe dem konvergierten Zustand liefert.

Aus diesen Betrachtungen folgt, dass für die numerischen Homogenisierungen mittels RVE in dieser Arbeit die Laminat-Regel zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften von Mischvoxeln verwendet wird. Im Falle des mechanischen Problems geht diese Regel zwar mit leicht erhöhtem Rechenaufwand einher, weil der Sprungvektor  $\underline{a}$  zunächst ausiteriert werden muss, aber dieser Aufwand hält sich in Grenzen. Außerdem wird er durch die Möglichkeit, bei deutlich niedrigeren Elementzahlen zuverlässige Ergebnisse zu erhalten, kompensiert.

## 4 Effektive Eigenschaften viskoelastischer Faser-Matrix-Verbunde

Nachdem die Methode der Homogenisierung mittels RVE vorgestellt wurde, soll sie in diesem Kapitel genutzt werden, um effektive Eigenschaften glasfaserverstärkter Thermoplaste zu ermitteln. Von besonderem Interesse sind diejenigen Eigenschaften, auf die sich die Faserorientierungsverteilung unmittelbar auswirkt. Die Erkenntnisse aus diesen Untersuchungen sollen in Kapitel 5 in die Formulierung des zu entwickelnden Stoffgesetzes einfließen.

### 4.1 Linearisierung der Mischregel

Der Einsatz einer Glasfaserverstärkung in einer thermoplastischen Matrix schränkt den Bereich der zulässigen Deformationen, bei denen kein plastisches Fließen oder Versagen eintritt, stark ein. Der typische elastische Bereich solcher Materialien liegt üblicherweise bei Dehnungen unter 5% (vgl. Fu et al. (2000); Ehrenstein (1999)) und weist physikalische Linearität auf. Um bei den zeitintensiven Auswertungen der Homogenisierung in ABAQUS in annehmbarer Zeit bei hinreichend feiner Vernetzung aussagekräftige Ergebnisse zu erzielen, bietet es sich an, das mechanische Feldproblem zu linearisieren.

Dazu wird zum einen von dem linearen Verzerrungsmaß  $\underline{\underline{\varepsilon}} = (\underline{\nabla} \circ \underline{u})^S$  Gebrauch gemacht und zum anderen die Stoffgesetze der einzelnen Phasen durch lineare Varianten ersetzt. Bei einer Vernetzung mit  $50^3$  Elementen sollen so die effektive Steifigkeit, die effektive thermische Deformation, die effektive Relaxation sowie die effektive Wärmeleitung bestimmt werden. Letztere stellt von vornherein ein lineares Problem dar und bedarf keiner weiteren Anpassung.

Wie im Unterabschnitt 3.5.4 gezeigt wird, erlaubt die Verwendung der Laminat-Mischregel bei Mischvoxeln einen deutlichen Genauigkeitsgewinn bei gleicher Vernetzung. Aus diesem Grund wird zunächst eine lineare Mischungsregel für Laminat hergeleitet, die aus einer rein elastischen Phase und einer viskoelastischen Phase bestehen und beide thermische Ausdehnungen berücksichtigen.

### 4.1.1 Allgemeine Laminat-Mischregel für viskoelastische Phasen

Die Ausgangslage der Mischregel bildet das Ersatzlaminat aus Abbildung 3.4, welches die Information über die beiden Konzentrationen  $c_1, c_2$  sowie den mittleren Normalenvektor  $\tilde{n}$  der Grenzschicht enthält. Die Grundannahme, dass sich die Deformationsgradienten  $\underline{\underline{F}}_1, \underline{\underline{F}}_2$  beider Phasen unterscheiden, bleibt wie beim nichtlinearen Fall erhalten. Sie setzen sich wie in Tabelle 3.1 dargestellt aus einem homogenen Anteil  $\underline{\underline{F}}_h$  und einem Sprunganteil zusammen. Mit Hilfe der Definition des linearen Verzerrungsmaßes  $\underline{\underline{\varepsilon}}$  lässt sich diese Sprungbedingung übersetzen mit

$$\underline{\underline{\varepsilon}}_1 = \underline{\underline{\varepsilon}}_h + c_2 \underline{\underline{S}} \quad ; \quad \underline{\underline{\varepsilon}}_2 = \underline{\underline{\varepsilon}}_h - c_1 \underline{\underline{S}} \quad ; \quad \underline{\underline{S}} = \frac{1}{2}(\underline{a} \circ \underline{n} + \underline{n} \circ \underline{a}), \quad (4.1)$$

wobei  $\underline{a}$  den Sprungvektor,  $\underline{\underline{\varepsilon}}_h$  den homogenen Anteil der Dehnung und  $\underline{\underline{S}}$  den Sprunganteil der Dehnung beschreibt. Da sich bei kleinen Deformationen aktuelle Konfiguration und Referenzkonfiguration nicht unterscheiden, wird auf deren Kennzeichnung verzichtet. Der zweiten Phase wird ein Hooke'sches Stoffgesetz mit thermischem Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_2$  zugewiesen, das heißt,

$$\underline{\underline{\sigma}}_2 = \underline{\underline{C}}_2 \cdot [\underline{\underline{\varepsilon}}_2 - \alpha_2 \Delta \vartheta \underline{\underline{I}}]. \quad (4.2)$$

Sie soll die Eigenschaften der Fasern abbilden.

Die erste Phase wird der Matrix zugeordnet und muss zusätzliche rheonome Eigenschaften aufweisen. In Anlehnung an die Arbeiten von Simo (1987) und Lion (2007) folgt für die viskoelastische Phase mit thermischer Ausdehnung

$$\underline{\underline{\sigma}}_1 = \underline{\underline{C}}_1 \cdot \left[ \underline{\underline{\varepsilon}}_1 + f_{\text{MW}} \left\{ e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{\text{rel}}}} \underline{\underline{Z}}(t) + e^{-\frac{\Delta t}{2\tau_{\text{rel}}}} [\underline{\underline{\varepsilon}}_1 - \underline{\underline{\varepsilon}}_1^0] \right\} - (1 + f_{\text{MW}}) \alpha_1 \Delta \vartheta \underline{\underline{I}} \right]. \quad (4.3)$$

Die Spannung hängt also von der aktuellen Dehnung  $\underline{\underline{\varepsilon}}_1 = \underline{\underline{\varepsilon}}_1(t + \Delta t)$ , der alten Dehnung  $\underline{\underline{\varepsilon}}_1^0 = \underline{\underline{\varepsilon}}_1(t)$ , dem Zeitinkrement  $\Delta t$ , der Relaxationszeit  $\tau_{\text{rel}}$ , dem Faktor  $f_{\text{MW}}$ , der den Anteil der viskosen Steifigkeit bezogen auf die Gleichgewichtssteifigkeit beschreibt, der Statusvariable  $\underline{\underline{Z}}(t)$  zum alten Zeitpunkt mit der Anfangsbedingung  $\underline{\underline{Z}}(t = 0) = \underline{\underline{0}}$  und dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_1$  ab. Der unbekannte Sprungvektor  $\underline{a}$  ergibt sich durch Gleichsetzen der Spannungsvektoren an der Grenzschicht

$$\underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}_1 \stackrel{!}{=} \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}_2. \quad (4.4)$$

Einsetzen von (4.1), (4.3) und (4.2) in (4.4) liefert das lineare Gleichungssystem

$$\underline{\underline{M}} \cdot \underline{a} = \underline{b} \quad (4.5)$$

mit den eingeführten Größen

$$\begin{aligned} \underline{\underline{M}} &= \underline{n} \cdot [x_1 c_2 \underline{\underline{C}}_1 + c_1 \underline{\underline{C}}_2] \cdot \underline{n}, \\ x_1 &= 1 + f_{\text{MW}} e^{-\frac{\Delta t}{2\tau_{\text{rel}}}}, \\ \underline{b} &= \underline{n} \cdot \left\{ \underline{\underline{C}}_1 \cdot \left[ f_{\text{MW}} e^{-\frac{\Delta t}{2\tau_{\text{rel}}}} \underline{\underline{\varepsilon}}_1^0 - f_{\text{MW}} e^{-\frac{\Delta t}{\tau_{\text{rel}}}} \underline{\underline{Z}}(t) + (1 + f_{\text{MW}}) \alpha_1 \Delta \vartheta \underline{\underline{I}} \right] - \underline{\underline{C}}_2 \cdot \alpha_2 \Delta \vartheta \underline{\underline{I}} \right\} \\ &\quad + \underline{n} \cdot \left\{ (\underline{\underline{C}}_2 - x_1 \underline{\underline{C}}_1) \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}_h \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Mit  $\underline{a} = \underline{M}^{-1} \cdot \underline{b}$  lässt sich der Sprungvektor explizit ausrechnen und bedarf keiner Iteration im Gegensatz zur allgemeinen nichtlinearen Mischregel (vgl. Tabelle 3.1). Ist der Sprungvektor bekannt, lassen sich die Verzerrungen der einzelnen Phasen und damit deren Spannungen bestimmen. Die effektive Spannung des Mischvoxels folgt schließlich mit

$$\underline{\sigma} = c_1 \underline{\sigma}_1 + c_2 \underline{\sigma}_2. \quad (4.7)$$

Die Materialtangente des Mischvoxels geht aus der Ableitung der effektiven Spannung nach der homogenen Verzerrung  $\underline{\varepsilon}_h$  hervor

$$\underline{\underline{C}} = c_1 \frac{\partial \underline{\sigma}_1}{\partial \underline{\varepsilon}_h} + c_2 \frac{\partial \underline{\sigma}_2}{\partial \underline{\varepsilon}_h}. \quad (4.8)$$

Die darin benötigten partiellen Ableitungen ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\sigma}_1}{\partial \underline{\varepsilon}_h} &= \frac{\partial \underline{\sigma}_1}{\partial \underline{\varepsilon}_1} \cdot \left[ \underline{\underline{J}} + c_2 \frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial \underline{\varepsilon}_h} \right] & ; & \quad \frac{\partial \underline{\sigma}_2}{\partial \underline{\varepsilon}_h} = \frac{\partial \underline{\sigma}_2}{\partial \underline{\varepsilon}_2} \cdot \left[ \underline{\underline{J}} - c_1 \frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial \underline{\varepsilon}_h} \right], \\ \frac{\partial \underline{\sigma}_1}{\partial \underline{\varepsilon}_1} &= x_1 \underline{\underline{C}}_1 & ; & \quad \frac{\partial \underline{\sigma}_2}{\partial \underline{\varepsilon}_2} = \underline{\underline{C}}_2, \\ \frac{\partial \underline{\underline{S}}}{\partial \underline{\varepsilon}_h} &= \underline{\underline{J}} \cdot (\underline{n} \circ \underline{\underline{M}}^{-1} \circ \underline{n}) \cdot [\underline{\underline{C}}_2 - x_1 \underline{\underline{C}}_1] \end{aligned}$$

und führen schließlich zur Bestimmungsgleichung der effektiven Steifigkeit des linearen Laminat-Mischvoxels

$$\underline{\underline{C}} = c_1 x_1 \underline{\underline{C}}_1 + c_2 \underline{\underline{C}}_2 - c_1 c_2 \left\{ x_1 \underline{\underline{C}}_1 - \underline{\underline{C}}_2 \right\} \cdot (\underline{n} \circ \underline{\underline{M}}^{-1} \circ \underline{n}) \cdot \left\{ x_1 \underline{\underline{C}}_1 - \underline{\underline{C}}_2 \right\}. \quad (4.9)$$

Dabei setzen sich die Steifigkeiten beider Phasen unter Verwendung der Lamé-Konstanten  $\mu, \lambda$  wie folgt zusammen

$$\underline{\underline{C}}_i = 2\mu_i \underline{\underline{J}} + \lambda_i \underline{\underline{J}} \quad ; \quad \mu_i = \frac{E_i}{2(1 + \nu_i)} \quad ; \quad \lambda_i = \frac{\nu E_i}{(1 + \nu_i)(1 - 2\nu_i)}, \quad (4.10)$$

wobei sich die Lamé-Konstanten aus dem E-Modul  $E$  und der Querkontraktionszahl  $\nu$  ergeben.

Die Wahl der Materialparameter orientiert sich nicht an einem konkreten Material, sondern an den typischen Größenordnungen von Polypropylen und E-Glas aus Herstellerangaben, da dieses Kapitel der grundsätzlichen Charakterisierung glasfaserverstärkter Polypropylene und nicht der konkreten Parameteridentifikation eines Materialmodells dient. Insbesondere die Parameter  $f_{MW}$  und  $\tau_{rel}$  werden frei gewählt. Die verwendeten Materialparameter werden in Tabelle 4.1 aufgeführt.

Tabelle 4.1: Materialparameter von Matrix und Faser.

|        | $i$ | $E_i$ [GPa] | $\nu_i$ [-] | $\alpha_i$ [K <sup>-1</sup> ] | $f_{MW}$ [-] | $\tau_{rel}$ [s] |
|--------|-----|-------------|-------------|-------------------------------|--------------|------------------|
| Matrix | 1   | 1,55        | 0,39        | $130 \cdot 10^{-6}$           | 3            | 1                |
| Faser  | 2   | 70          | 0,18        | $5 \cdot 10^{-6}$             | -            | -                |

### 4.1.2 Validierung der Mischregel

Zur Validierung der Laminat-Mischregel werden die thermischen Ausdehnungen eines Verbundes aus 80% Matrix und 20% Fasern simuliert. Abbildung 4.1 zeigt die beiden Modelle, die zur Validierung herangezogen werden.

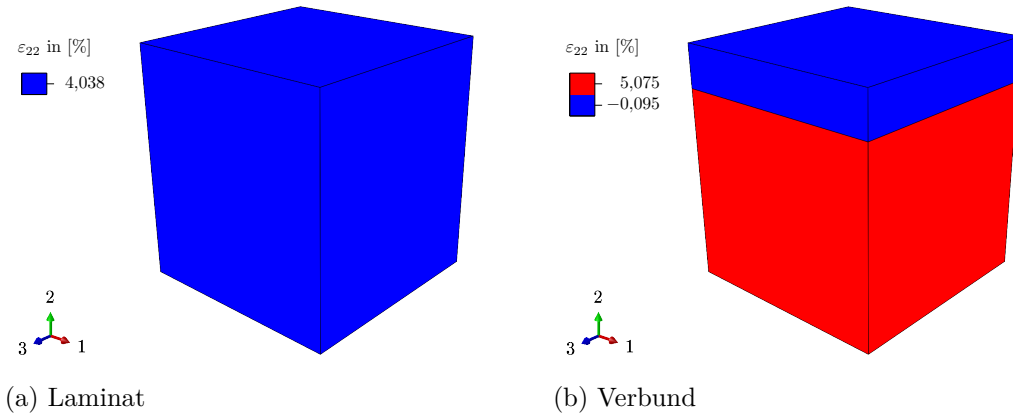


Abbildung 4.1: Dehnung  $\varepsilon_{22}$  des Laminat-Mischvoxels 4.1(a) und des Verbundes 4.1(b) bei der Validierung der Laminat-Mischregel.

Im Laminat-Modell wird die Geometrie eines Würfels durch ein einziges finites Element abgebildet. Als Materialmodell wird die Laminat-Mischregel hinterlegt. Im Verbund-Modell werden beide Phasen mit jeweils einem Element diskretisiert. Jeder Phase wird das entsprechende elastische bzw. viskoelastische Teilstoffgesetz zugewiesen. Die Modelle erfahren eine Temperaturänderung entsprechend Abbildung 4.2(a) und werden an den Rändern mit periodischen Randbedingungen versehen.

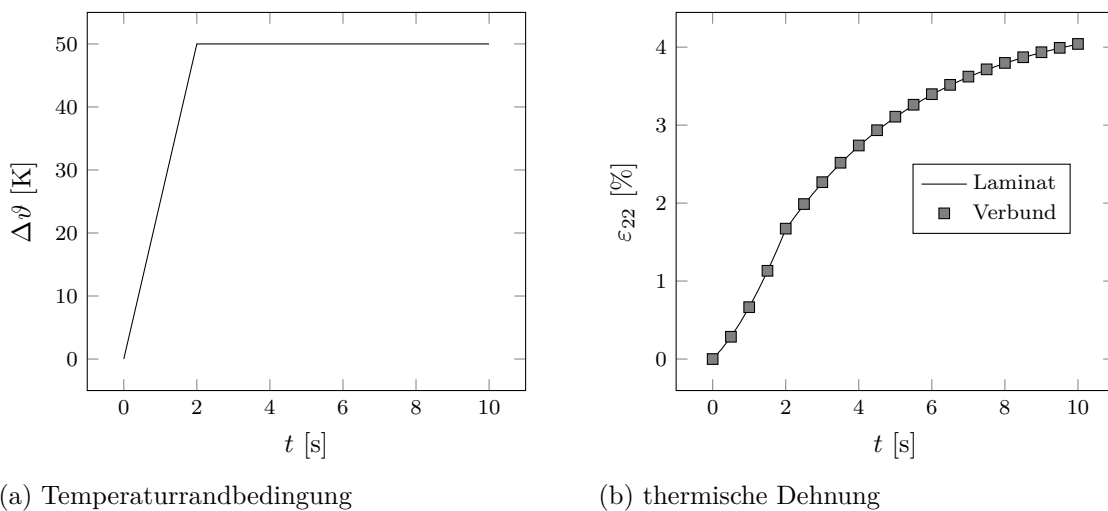


Abbildung 4.2: Temperaturrandbedingung 4.2(a) und thermische Dehnung 4.2(b) bei der Validierung der Laminat-Mischregel.

Dieser Versuch bietet sich zur Validierung an, weil er alle Aspekte der Materialeigenschaften beinhaltet. Die Steifigkeiten und thermischen Ausdehnungskoeffizienten verursachen entsprechend ihrer Verhältnisse eine thermische Dehnung des Materials bei Temperaturänderung. Die viskosen Eigenschaften der Matrix sorgen für ein Kriechen des Materials nach Erreichen des Temperaturmaximums. Abbildung 4.2(b) stellt die Verläufe der  $\varepsilon_{22}$ -Dehnung über der Zeit für beide Modelle dar und zeigt deren Übereinstimmung.

Abbildung 4.1 veranschaulicht die Dehnungsverteilung in beiden Modellen zum letzten Zeitschritt. Während sich bei dem Laminat-Modell ein homogenes Dehnungsfeld einstellt, weisen die einzelnen Phasen des Verbund-Modells unterschiedliche Dehnungen auf. Genau diese Beobachtung entspricht dem Ansatz eines Sprungs  $a$  im Dehnungsfeld entlang der Normalenrichtung  $\underline{n}$ , welcher der Mischregel zu Grunde liegt.

## 4.2 Die effektive Steifigkeit

Die elastischen Eigenschaften 91 verschiedener RVEs mit den FOV aus Abbildung 2.3 sollen mit Hilfe der effektiven Steifigkeit charakterisiert werden. Dazu werden die Steifigkeitstensoren  $\underline{\underline{C}}_{iF}$  entsprechend der Vorgehensweise aus Unterabschnitt 3.5.3 bestimmt. Es sei erwähnt, dass im Folgenden stets Bezug auf die makroskopischen, also die effektiven Größen genommen wird und deshalb der Index „M“ entfällt. Stattdessen wird auf die zugehörige FOV  $iF$  verwiesen. Die Steifigkeiten werden in MPa angegeben. Um die Geschwindigkeitsabhängigkeit sowie die Temperatureausdehnung zu deaktivieren, werden die Parameter  $f_{MW}, \alpha_i$  zu Null gesetzt.

Für die erste FOV ( $iF = 01$ ) mit einem zweiten Moment der FDF von  $[A_{ab}] = \text{diag}(0 \ 0 \ 1)$  ergibt sich ein Steifigkeitstensor mit der Koeffizientenmatrix in Voigt-Notation

$$[C_{01\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 4433,14 & 2454,63 & 2394,76 & -6,04 & -2,92 & -0,51 \\ 2454,63 & 4425,96 & 2410,93 & 7,52 & 1,18 & 1,80 \\ 2394,76 & 2410,93 & 10621,97 & -1,54 & -20,75 & 54,53 \\ -5,08 & 7,53 & -1,54 & 958,50 & 3,40 & -2,94 \\ -1,84 & 1,18 & -20,77 & 3,40 & 1082,78 & 0,79 \\ -0,51 & 2,88 & 54,58 & -2,94 & 0,79 & 1084,67 \end{bmatrix}.$$

Aus dieser Matrix lassen sich mehrere Eigenschaften ablesen. Die Nebendiagonalelemente sind deutlich kleiner als die Hauptdiagonalelemente, was eine gleichmäßige, achsenparallele Ausrichtung der Fasern bestätigt. Die Elemente  $C_{55}$  und  $C_{66}$  liegen in der gleichen Größenordnung und auch  $C_{44}$  weicht davon nicht wesentlich ab. Die Koeffizienten  $C_{11}$  und  $C_{22}$  sind nahezu identisch wohingegen der Koeffizient  $C_{33}$  deutlich höher ausfällt. Da dieser Koeffizient den Zusammenhang von  $\sigma_{33}$  und  $\varepsilon_{33}$  beschreibt und alle Fasern in die 3-Richtung zeigen, zeichnet sich an dieser Stelle eine deutliche Versteifungswirkung der Fasern ab. Die Elemente  $C_{12}, C_{13}, C_{23}$  ähneln sich ebenfalls sehr stark. Mit dieser qualitativen Form kommt der Steifigkeitstensor dem einer klassischen transversalen Isotropie sehr nahe, was so vorher

nicht zu erwarten war. Die klassische transversale Isotropie geht von einer gleichmäßigen Übertragung der Dehnung auf Faser und Matrix aus, was bei einer Endlosfaserverstärkung in der Regel auch gegeben, bei einer diskontinuierlichen Kurzfaserverstärkung aber nicht der Fall ist.

Bei genauer Beobachtung fällt auch auf, dass der Steifigkeitstensor nicht exakt symmetrisch ist. Einige Koeffizienten der Nebendiagonale weisen Abweichungen zu ihren jeweiligen Konterparts auf, das heißt, die Kopplung von Normalen- und Schubrichtung funktioniert nicht zu 100%. Ein Vergleich mit einer alternativ berechneten Steifigkeit

$$\underset{\equiv}{\overset{T}{C}} = \frac{\partial \underset{\equiv}{T}}{\partial \underset{\equiv}{\varepsilon}},$$

die bei kleinen Deformationen das gleiche Ergebnis liefert, gibt Hinweise für die Fehlerursache der fehlenden Symmetrie.

$$[\overset{T}{C}_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 4433,14 & 2457,08 & 2397,16 & -6,04 & -2,92 & -0,51 \\ 2457,08 & 4425,96 & 2413,34 & 7,53 & 1,18 & 1,80 \\ 2397,16 & 2413,34 & 10621,97 & -1,54 & -20,77 & 54,58 \\ -6,04 & 7,53 & -1,54 & 958,49 & 3,40 & -2,94 \\ -2,92 & 1,18 & -20,77 & 3,40 & 1082,80 & 0,79 \\ -0,51 & 1,80 & 54,58 & -2,94 & 0,79 & 1084,62 \end{bmatrix}.$$

Da die Symmetrie bei der alternativen Steifigkeit erhalten bleibt, deutet das auf einen Fehler, der durch die Bestimmungsgleichung (3.12) für  $\underline{\sigma}$  eingebracht wird (vgl. Unterabschnitt 3.3.1), hin. Zusätzliche Fehlerquellen können in der numerischen Behandlung der Gleichungssysteme in ABAQUS liegen. Die Herleitung der Hill-Mandel-Bedingung erfolgt in gemischter Betrachtungsweise über die Spannungsleistung  $\mathcal{P}_{\text{Sp}}$ . ABAQUS bezieht sein mechanisches Feldproblem jedoch auf die Momentankonfiguration unter Verwendung einer Updated-Lagrange-Methode (vgl. Abaqus (2014b)). Wie sich diese Formulierung in Kombination mit numerischen Integrationen auf die resultierenden Größen auswirkt, lässt sich nicht abschätzen. Ohnehin spielt der eingebrachte Fehler in der Symmetrie für die Eigenschaften der effektiven Steifigkeit eine untergeordnete Rolle, weil er nur bei den Nebendiagonalelementen auftritt und diese vernachlässigbar klein sind.

Das Beispiel einer zweiten FOV ( $iF = 91$ ) mit  $[A_{ab}] = \text{diag}(1 \ 0 \ 0)$  zeigt sehr große Ähnlichkeit zum ersten Beispiel. Auch hier lassen sich die gleichen qualitativen Beobachtungen anstellen. Anders als beim ersten Beispiel ist der Koeffizient  $C_{11}$  deutlich größer als  $C_{22}$ ,  $C_{33}$  und  $C_{66}$  weicht leicht von  $C_{44}$ ,  $C_{55}$  ab. Diese Beobachtung lässt sich mit der Ausrichtung der Fasern in 1-Richtung erklären.



$$[C_{91\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 10646,43 & 2406,09 & 2400,49 & -3,49 & -7,85 & -2,45 \\ 2406,09 & 4435,76 & 2449,99 & -2,70 & -1,13 & 3,03 \\ 2400,49 & 2449,99 & 4439,11 & -0,32 & 2,75 & -2,08 \\ -2,40 & -2,71 & -0,32 & 1091,51 & 0,31 & 0,71 \\ -6,77 & -1,13 & 2,75 & 0,31 & 1088,21 & -1,47 \\ -2,45 & 3,98 & -2,08 & 0,71 & -1,47 & 947,93 \end{bmatrix}.$$

Das RVE mit einer zu Grunde liegenden FOV ( $iF = 07$ ) mit  $[A_{ab}] = \text{diag}(0 \ 0.5 \ 0.5)$  zeigt ähnliche Strukturen im effektiven Steifigkeitstensor wie die beiden vorherigen Beispiele.

$$[C_{07\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 4499,94 & 2406,96 & 2404,48 & -1,89 & 1,75 & 0,11 \\ 2406,96 & 6781,14 & 2968,04 & -18,33 & -1,72 & -10,52 \\ 2404,48 & 2968,04 & 6871,00 & 2,86 & -11,68 & -21,25 \\ -0,85 & -18,35 & 2,86 & 1037,43 & 3,10 & -1,38 \\ 2,79 & -1,72 & -11,70 & 3,10 & 1032,83 & -0,13 \\ 0,11 & -8,76 & -21,27 & -1,38 & -0,13 & 1759,46 \end{bmatrix}.$$

Auch hier lässt sich eine Vorzugsrichtung identifizieren, nämlich die 1-Richtung. Anders als zuvor verhält sich das RVE bei dem entsprechenden Eintrag der Normalbelastung sowie der Schubbeanspruchung jedoch weicher als in den anderen Richtungen. Dieser Umstand lässt sich dadurch begründen, dass die versteifenden Fasern alle senkrecht zu dieser Richtung orientiert sind.

Beim Beispiel einer isotropen FOV ( $iF = 51$ ), also einer zufälligen Verteilung der Faserorientierungen, lässt sich keine Vorzugsrichtung aus den Koeffizienten des Steifigkeitstensors ablesen.

$$[C_{51\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 5848,89 & 2747,00 & 2744,37 & 5,17 & -10,08 & 1,18 \\ 2747,00 & 5830,71 & 2743,14 & -0,37 & -7,22 & -4,20 \\ 2744,37 & 2743,14 & 5872,51 & 8,09 & 4,66 & 1,25 \\ 6,62 & -0,37 & 8,10 & 1452,03 & 0,84 & 3,00 \\ -8,62 & -7,23 & 4,67 & 0,84 & 1454,37 & 6,06 \\ 1,18 & -2,75 & 1,25 & 3,00 & 6,06 & 1450,11 \end{bmatrix}.$$

Abbildung 4.3 veranschaulicht den Verlauf zweier Koeffizienten des Steifigkeitstensors über dem Faserorientierungsdreieck. Das Element  $C_{33}$  erreicht sein Maximum, wenn alle Fasern in 3-Richtung orientiert sind und wird minimal für die FOV, bei denen alle Fasern ausschließlich in 1-Richtung bzw. 2-Richtung zeigen. Der Verlauf zwischen diesen Grenzzuständen nimmt eine leicht gekrümmte Form über dem FO-Dreieck an. Der Koeffizient  $C_{66}$  hingegen beschreibt eine stark gewölbte Fläche über dem FO-Dreieck, welche zu den unidirektionalen FOV hin gegen ein Minimum läuft.

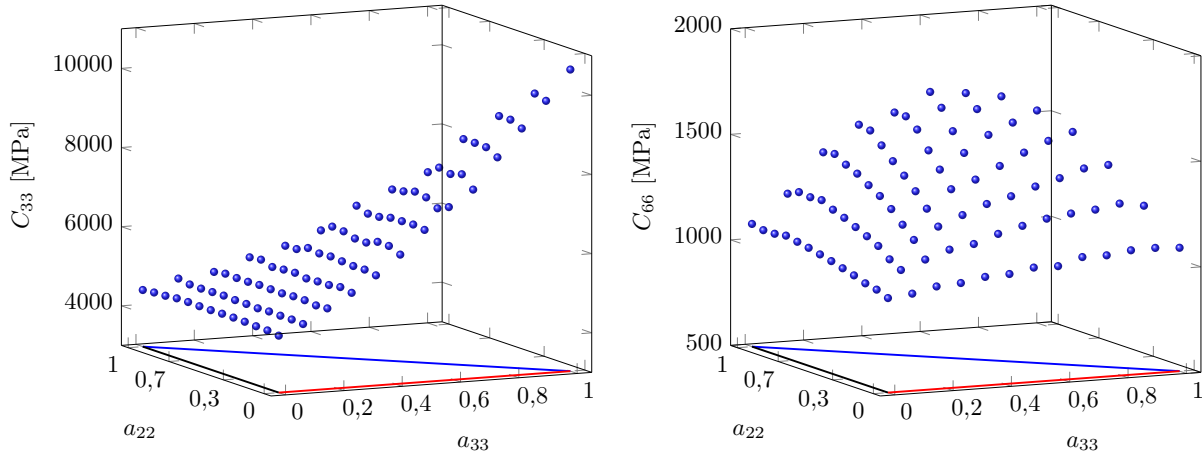


Abbildung 4.3: Verlauf der Koeffizienten  $C_{33}$  und  $C_{66}$  des effektiven Steifigkeitstensors über dem Faserorientierungsdreieck.

Interessanterweise finden sich diese Verläufe in den Koeffizienten des vierten Moments  $\underline{\underline{A}}$  wieder (siehe Abbildung 4.4). Diese Beobachtung unterstreicht die Bedeutung des Moments  $\underline{\underline{A}}$  für die effektive Steifigkeit und motiviert dessen Berücksichtigung bei der Modellierung eines effektiven Materialverhaltens.

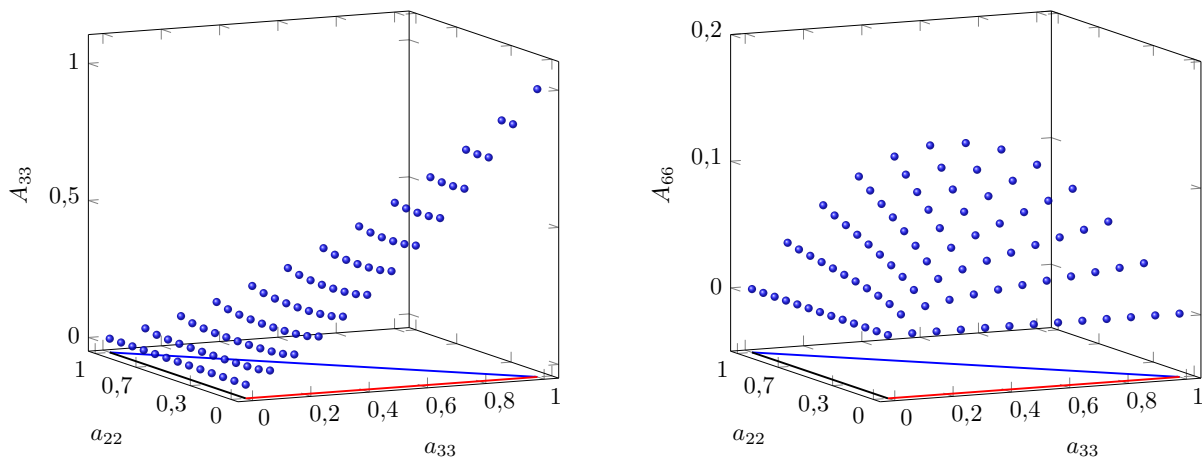


Abbildung 4.4: Verlauf der Koeffizienten  $A_{33}$  (links) und  $A_{66}$  (rechts) des vierten Moments  $\underline{\underline{A}}$  über dem Faserorientierungsdreieck.

### 4.3 Die effektive thermische Deformation

Zur Ermittlung der effektiven thermischen Deformation  $\underline{\underline{U}}_{iF}$  werden die RVEs einer Temperaturänderung  $\Delta\vartheta = 100\text{ K}$  ausgesetzt. Von den Materialparametern aus Tabelle 4.1 wird lediglich  $f_{MW}$  zu Null gesetzt, um den Einfluss der viskosen Anteile auszublenden. Für die unidirektionale FOV ( $iF = 01$ ) mit  $[A_{ab}] = \text{diag}(0\ 0\ 1)$  sowie die isotrope FOV

( $iF = 51$ ) mit  $[A_{ab}] = \text{diag}(1/3 \ 1/3 \ 1/3)$  resultieren die effektiven thermischen Streckungen mit den Koeffizientenmatrizen

$$[U_{01_{ab}}] = \begin{bmatrix} 1,0122 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 1,0122 & -0,0001 \\ 0,0000 & -0,0001 & 1,0028 \end{bmatrix} \quad ; \quad [U_{51_{ab}}] = \begin{bmatrix} 1,0079 & 0,0000 & 0,0000 \\ 0,0000 & 1,0080 & 0,0000 \\ 0,0000 & 0,0000 & 1,0079 \end{bmatrix}.$$

Am Beispiel der unidirektionalen Ausrichtung zeigt sich wieder, dass mit der Faserrichtung eine ausgezeichnete Richtung beschrieben wird. Da sich die Fasern mit  $\alpha_2 = 5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  deutlich weniger ausdehnen als die Matrix mit  $\alpha_1 = 130 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , wirken sie der thermischen Ausdehnung in 3-Richtung entgegen. Die Koeffizienten  $U_{01_{23}} = U_{01_{32}}$  sind zwar nicht exakt Null, was auf kleine Scherungen des RVE hindeutet, fallen aber mit ihrem niedrigen Verhältnis zu den Koeffizienten der Hauptdiagonale nicht ins Gewicht.

Die Koeffizienten der thermischen Streckung  $\underline{U}_{51}$  spiegeln die zu Grunde liegende isotrope Verteilung der Fasern wider, da sie gleich groß ausfallen. Ihr absoluter Wert liegt zwischen den Koeffizienten  $U_{01_{11}}$  und  $U_{01_{33}}$ , was darauf deutet, dass sich Matrix und Faser in alle Richtungen gleichermaßen an der thermischen Ausdehnung beteiligen, während bei der unidirektionalen FOV die Ausdehnung quer zur Faserrichtung ( $U_{01_{11}}$ ) hauptsächlich von der Matrix und in Faserrichtung ( $U_{03_{11}}$ ) maßgeblich von den Fasern beeinflusst wird.

In Abbildung 4.5 ist der Verlauf des Koeffizienten  $U_{33}$  über dem FO-Dreieck zu sehen. Auch hier lässt sich ein stark gekrümmter Verlauf über den einzelnen FOV beobachten, was gegen eine lineare Abhängigkeit der thermischen Streckung vom zweiten Moment  $\underline{A}$  spricht. Ein Vergleich mit Abbildung 4.4 macht klar, dass auch das vierte Moment der FDF nicht unmittelbar in der thermischen Streckung wiederzufinden ist.

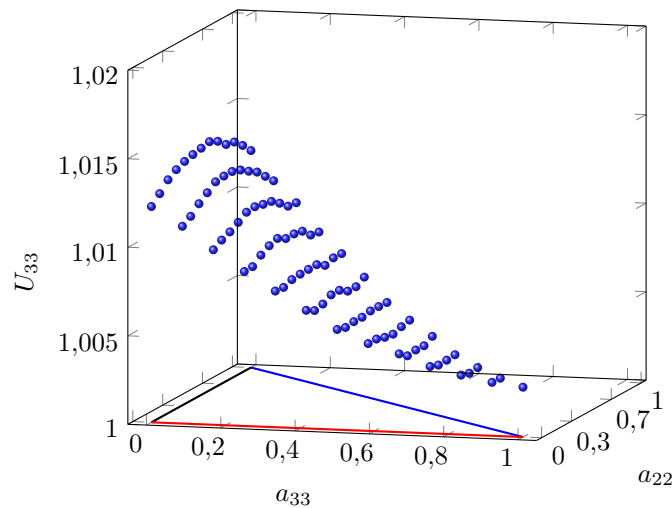


Abbildung 4.5: Verlauf der effektiven thermischen Streckung  $U_{33}$  über dem Faserorientierungsdreieck.

## 4.4 Die effektive Relaxation

Mit einem Relaxationsversuch wird untersucht, wie sich die viskosen Eigenschaften der Matrix auf das gesamte RVE auswirken. Insbesondere ist von Interesse, ob die effektive Relaxationszeit von der FOV abhängt. Zu diesem Zweck wird das RVE einem Zug mit folgenden Randbedingungen ausgesetzt

$$\begin{bmatrix} T_{M_{11}} = 0 & F_{M_{12}} = 0 & F_{M_{13}} = 0 \\ F_{M_{21}} = 0 & T_{M_{22}} = 0 & F_{M_{23}} = 0 \\ F_{M_{31}} = 0 & F_{M_{32}} = 0 & F_{M_{33}} = \lambda \end{bmatrix}, \quad \lambda \in [1,0 \ 1,01].$$

Die Streckung  $\lambda$  wird über einem Zeitraum von 2 s linear erhöht und anschließend bis zu einer Gesamtzeit von 10 s konstant gehalten, sodass die Spannungen im RVE relaxieren können. Die Temperaturänderung  $\Delta\vartheta$  bleibt Null, sodass die thermischen Dehnungen keinen Einfluss ausüben.

Die Ergebnisse der Relaxationsversuche werden in Abbildung 4.6 dargestellt. Der linke Teil der Abbildung zeigt die Spannung  $\sigma_{33}$  nach 2 s über dem FO-Dreieck, also zum Zeitpunkt, wenn die maximale Streckung erstmalig erreicht wird und somit die Spontanantwort der viskosen Bestandteile ihr Maximum erreicht. Der qualitative Verlauf der Datenpunkte lässt den Koeffizienten  $A_{33}$  des vierten Moments der FDF wieder erkennen, was erneut die Rolle dieses Moments für die effektive Steifigkeit unterstreicht.

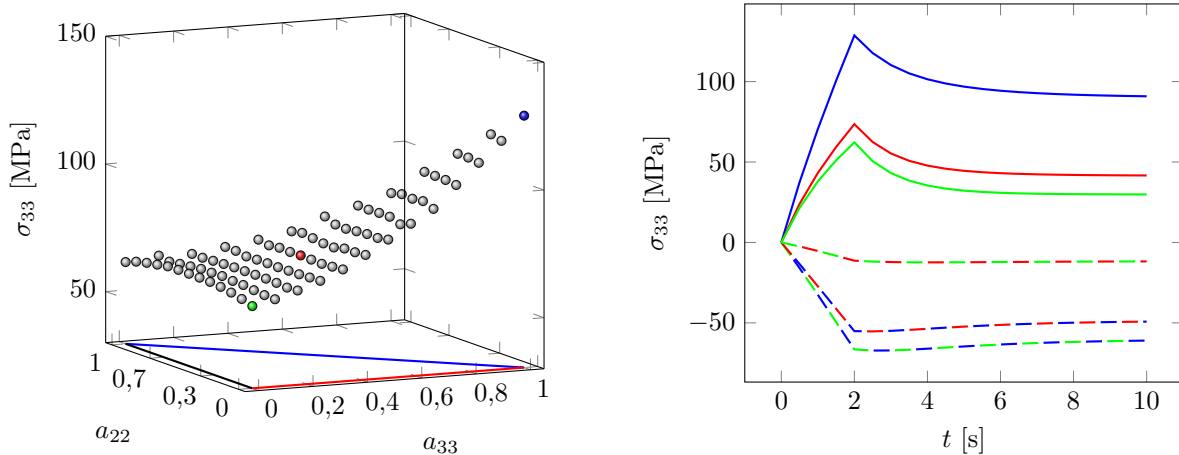


Abbildung 4.6: Verlauf der  $\sigma_{33}$ -Spannung über dem Faserorientierungsdreieck nach 2 s im Relaxationsversuch (links). Spannung-Zeit-Verlauf (rechts) dreier Faserorientierungsverteilungen zu erkennen an ihren Farben im Faserorientierungsdreieck. Die gestrichelten Kurven stellen die Differenzen der entsprechenden Einzelversuche dar.

Aus den 91 verschiedenen FOV wurden drei verschiedene Beispiele ausgesucht, um deren zeitlichen Spannungsverlauf zu studieren. Die drei FOV sind farbig dargestellt und können zwei unidirektionalen Ausrichtungen (blau, grün) und der isotropen FOV (rot) zugeordnet

werden. Im rechten Teil von Abbildung 4.6 sind die zugehörigen zeitlichen Verläufe der Spannung zu sehen. Alle drei Kurven beschreiben einen qualitativ ähnlichen Verlauf. In den ersten zwei Sekunden steigt die Spannung an, bis sie nach zwei Sekunden ihr Maximum erreicht. Die Höhe der Maximalspannung steigt mit zunehmendem Anteil von Fasern, die in die 3-Richtung orientiert sind, also einen größeren Wert  $a_{33}$  besitzen.

Nach Erreichen der Maximalspannung sind Relaxationseffekte bei allen drei Kurven zu beobachten. Die Differenzen von jeweils zwei Kurven sind in dem Diagramm als gestrichelte Linien mit den Farben der beteiligten Kurven dargestellt. Erstaunlicherweise setzt sich der Unterschied der einzelnen Kurven bei  $t = 2$  s nahezu konstant bis zum Ende der Relaxation fort. Diese Beobachtungen deuten stark darauf hin, dass sich die viskosen Eigenschaften unabhängig von der FOV gleichmäßig auf das RVE übertragen.

## 4.5 Die effektive Wärmeleitung

Zur Bestimmung der effektiven Wärmeleitung wird auf ein RVE mit einer Diskretisierung von  $60^3$  Elementen zurückgegriffen. Wegen der Linearität des zu Grunde liegenden Problems sowie der Tatsache, dass jeder Knoten nur einen Freiheitsgrad (die Temperatur) besitzt, lässt sich diese Elementzahl noch in annehmbarer Zeit bewältigen. Den einzelnen Phasen werden die Wärmeleitungskoeffizienten  $\lambda_1 = 0,23 \text{ W}/(\text{m K})$  und  $\lambda_2 = 10 \text{ W}/(\text{m K})$  zugewiesen. Es sei erwähnt, dass sich bei der Wärmeleitung der Matrix an den Werten von Herstellerangaben für Polypropylen orientiert wird. Die Wärmeleitung der Fasern wird bewusst etwas höher als für E-Glas üblich gewählt, um die durch die Fasern eingebrachten Effekte deutlicher herauszustellen. Die gleichen qualitativen Ergebnisse würden auch bei realistischeren Werten der Wärmeleitung der Fasern erzielt werden.

Die Koeffizientenmatrizen der Tensoren  $\underline{\lambda}_{01}$  und  $\underline{\lambda}_{51}$  zeigen auf, wie sich die FOV auf die effektive Wärmeleitung auswirkt.

$$[\lambda_{01_{ab}}] = \begin{bmatrix} 0,4183 & 0,0007 & -0,0072 \\ 0,0007 & 0,4149 & 0,0115 \\ -0,0072 & 0,0115 & 1,5698 \end{bmatrix} \quad ; \quad [\lambda_{51_{ab}}] = \begin{bmatrix} 0,8201 & 0,0014 & 0,0006 \\ 0,0014 & 0,8211 & 0,0008 \\ 0,0006 & 0,0008 & 0,8262 \end{bmatrix} .$$

Die Koeffizienten von  $\underline{\lambda}_{01}$  lassen einen deutlichen Unterschied zwischen  $\lambda_{01_{33}}$  und den anderen beiden Hauptdiagonalelementen erkennen, was mit der Ausrichtung der Fasern korreliert. Da alle Fasern in 3-Richtung zeigen und deren Wärmeleitungskoeffizient deutlich höher als der der Matrix ist, wird die Wärme deutlich schneller in diese Richtung übertragen. Ähnlich den thermischen Deformationen in Abschnitt 4.3 verschwinden die Nebendiagonalelemente nicht komplett, was auf eine Unregelmäßigkeit bei der Verteilung der Fasern im RVE deutet. Die Größenordnung der Nebendiagonalelemente fällt aber deutlich niedriger aus als die der Hauptdiagonalelemente, weswegen sie vernachlässigt werden. Die Koeffizientenmatrix von  $\underline{\lambda}_{51}$  gibt den isotropen Charakter der zugehörigen FOV wieder, da alle drei Hauptdiagonalelemente in guter Näherung gleich sind.

Abbildung 4.7 veranschaulicht den Verlauf des Koeffizienten  $\lambda_{33}$  über dem Faserorientierungsdreieck. Dieser erreicht sein Maximum für die FOV, bei der alle Fasern in 3-Richtung zeigen und sein Minimum bei den beiden anderen unidirektionalen FOV. Dazwischen beschreiben die Datenpunkte in guter Näherung eine Ebene. Dieser lineare Verlauf der Wärmeleitung über dem FO-Dreieck stellt ein starkes Indiz für eine lineare Abhängigkeit des effektiven Wärmeleitungstensors vom zweiten Moment  $\underline{\underline{A}}$  dar.

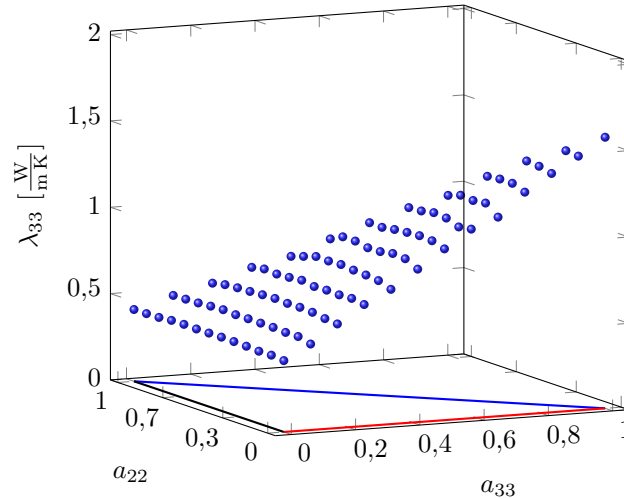


Abbildung 4.7: Koeffizient  $\lambda_{33}$  der effektiven Wärmeleitung über dem Faserorientierungsdreieck.

## 4.6 Abhängigkeit von der Faserdichtefunktion

In Abschnitt 2.4 wurde bereits erwähnt, dass im Allgemeinen keine Eineindeutigkeit zwischen dem zweiten Moment  $\underline{\underline{A}}$  und der Faserdichtefunktion  $\rho$  besteht. Zwar lässt sich das zweite Moment eindeutig über Gleichung (2.81) aus der FDF bestimmen, aber zu jedem zweiten Moment  $\underline{\underline{A}}$  lassen sich unendlich viele Faserdichtefunktionen realisieren. Inwiefern die Wahl von  $\rho$  die effektiven mechanischen Eigenschaften des Faser-Matrix-Verbundes beeinflusst, soll exemplarisch für eine alternative Faserdichtefunktion in diesem Abschnitt demonstriert werden. Sowohl die alternative FDF als auch die ACG-Verteilung besitzen das gleiche zweite Moment  $\underline{\underline{A}}$ .

Die zu vergleichende Faserdichtefunktion  $\rho_{\perp}$  ergibt sich aus einer Linearkombination von drei Dirac-Funktionen  $\delta_i$  in der Form

$$\rho_{\perp}(\underline{p}) = w_1 \delta_1(\underline{p} - \underline{e}_x) + w_2 \delta_1(\underline{p} - \underline{e}_y) + w_3 \delta_1(\underline{p} - \underline{e}_z), \quad (4.11)$$

wobei die Gewichte  $w_1, w_2, w_3$  den Eigenwerten des zweiten Momentes  $\underline{\underline{A}}$  entsprechen. Die Faserdichtefunktion  $\rho_{\perp}$  lässt sich damit als eine orthotrope Verteilung der Orientierungen mit unterschiedlicher Wichtung der Richtungen  $\underline{e}_x$ ,  $\underline{e}_y$  und  $\underline{e}_z$  verstehen. Enthält ein RVE

beispielsweise 210 Fasern mit einem zweiten Moment  $[A_{ab}] = \text{diag}(1/6 \ 1/3 \ 1/2)$ , so zeigen 35 Fasern in X-Richtung, 70 Fasern in Y-Richtung und 140 Fasern in Z-Richtung, wenn die Fasern eine Faserdichtefunktion  $\rho_{\perp}$  mit den Gewichten  $w_1 = 1/6$ ,  $w_2 = 1/3$  und  $w_3 = 1/2$  realisieren.

Zu jedem zweiten Moment des Faserorientierungsdreiecks (vgl. Abbildung 2.3) wird ein RVE mit entsprechender Realisierung der FDF  $\rho_{\perp}$  erstellt und dessen effektive Steifigkeit bestimmt. Die Koeffizienten  $C_{33}$  und  $C_{66}$  des effektiven Steifigkeitstensors sind in Abbildung 4.8 über dem FO-Dreieck als rote Kugeln dargestellt. Die transparenten blauen Kugeln entsprechen den Steifigkeitskoeffizienten aus Abbildung 4.3, die mit einer ACG-Verteilung ermittelt worden.

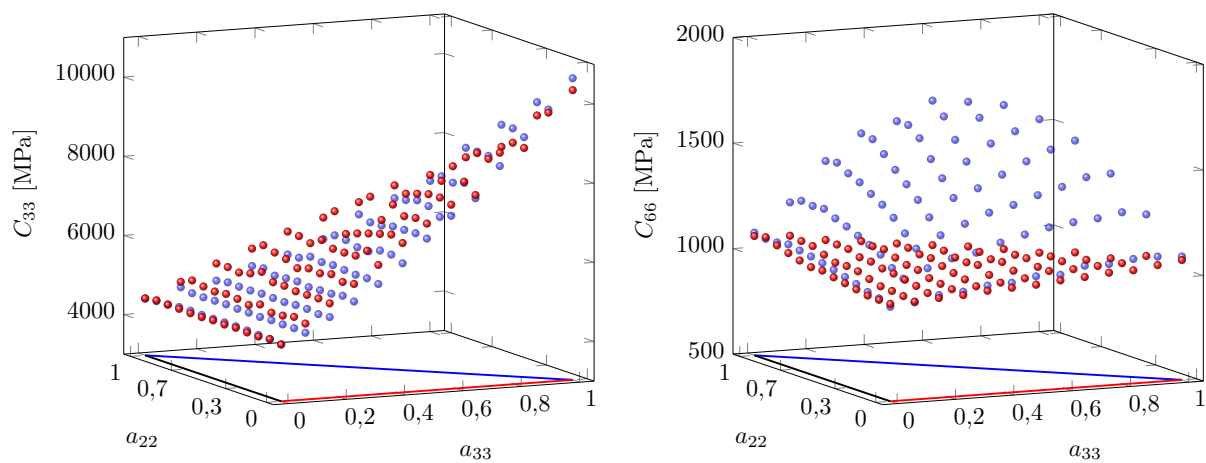


Abbildung 4.8: Vergleich der Koeffizienten  $C_{33}$  und  $C_{66}$  des effektiven Steifigkeitstensors bei unterschiedlichen Faserdichtefunktionen. Den Ergebnissen der blauen Kugeln liegt eine ACG-Verteilung zu Grunde und die roten Kugeln basieren auf einer orthotropen Verteilung mit unterschiedlicher Wichtung der einzelnen Richtungen.

Der Verlauf des  $C_{33}$  Koeffizienten zeigt eine gute Übereinstimmung von  $\rho_{\perp}$  und der ACG-Verteilung mit marginal größeren Werten der orthotropen Verteilung bei Faserorientierungsverteilungen im Inneren des FO-Dreiecks. Der Verlauf der roten Kugeln weist im Gegensatz zu den blauen Kugeln einen stärker ausgeprägten linearen Charakter auf. Für den Sonderfall unidirektionaler FOV sollten die Steifigkeiten beider FDF übereinstimmen, weil die Fasern in die gleichen Richtungen zeigen. Abbildung 4.8 zeigt jedoch eine leichte Abweichung für die unidirektionale Ausrichtung der Fasern in 3-Richtung auf. Diese ist jedoch sehr klein und könnte auf eine nicht ausreichend feine Diskretisierung des RVE deuten.

Deutlich größer fallen die Abweichungen der Schubsteifigkeit  $C_{66}$  aus. Hier ist nicht nur ein quantitativer, sondern auch ein qualitativer Unterschied der Verläufe über dem FO-Dreieck zu erkennen. Während  $C_{66}$  bei der ACG-Verteilung eine große Abhängigkeit vom zweiten

Moment  $\underline{A}$  besitzt, bleibt diese Steifigkeit bei  $\rho_{\perp}$  nahezu konstant für alle zweiten Momente. Die Ursache für dieses Verhalten wird schematisch in Abbildung 4.9 dargestellt.

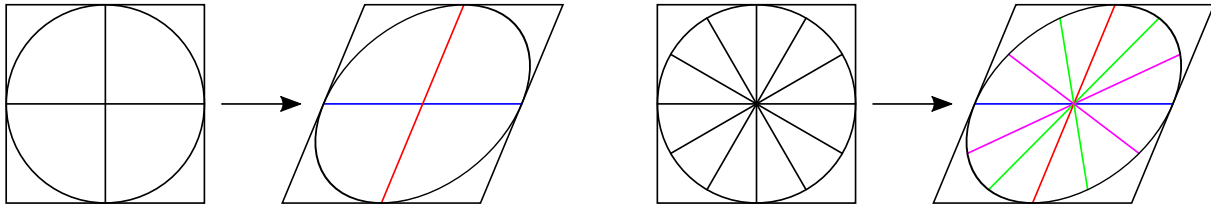


Abbildung 4.9: Unterschied der Faserdehnungen bei Schub für eine ACG-Verteilung (rechts) und eine orthotrope Verteilung (links) mit zweitem Moment  $[A_{ab}] = \text{diag}(0,5 \ 0,5 \ 0)$ .

Ein Großteil der Fasern der orthotropen Verteilung erfährt bei Schub keine (blau) oder nur sehr wenig (rot) Streckung und somit wirkt hauptsächlich die Matrix der Schubdeformation entgegen. Im Gegensatz dazu ist der Anteil der Fasern bei der ACG-Verteilung, der keine Streckung erfährt (blau) viel kleiner. Zusätzlich gibt es schräg liegende Fasern (grün und rosa), die stärker gestreckt bzw. gestaucht werden als die roten Fasern und damit zu einem zusätzlichen Widerstand gegen Schub beitragen. Der Anteil dieser schräg liegenden Fasern hängt von dem zweiten Moment der FDF ab und begründet damit den gekrümmten Verlauf der Schubsteifigkeit über dem FO-Dreieck.

Der Vergleich der Steifigkeiten in Abbildung 4.8 verdeutlicht den Einfluss der zu Grunde liegenden Faserdichtefunktionen auf das effektive mechanische Verhalten des Werkstoffes. Die hier dargelegten Untersuchungen beziehen sich auf kleine Deformationen und weisen bereits dabei signifikante Abweichungen auf. Bei großen Deformationen sind noch stärkere Abweichungen zu erwarten. Eine hinreichend genaue Abbildung der Faserorientierungsverteilung mit der Faserdichtefunktion ist dem zu Folge Grundvoraussetzung für eine sinnvolle Homogenisierung des Materialverhaltens.



## 5 Modellierungsrahmen

In der Literatur werden zahlreiche Materialmodelle für kurzfaserverstärkte Thermoplaste vorgestellt. Die Einleitung dieses Kapitels soll als eine Bestandsaufnahme existierender Ansätze dienen. Da sich das Materialmodell dieser Arbeit auf eine Formulierung für große Deformationen stützt, werden Arbeiten zu geometrisch linearen Theorien von den Betrachtungen ausgeklammert.

Den Ausgangspunkt vieler Materialmodelle für teilkristalline, isotrope Polymerwerkstoffe bildet die Arbeit von Haward & Thackray (1968). Sie geht von einer Zweiteilung des Stoffgesetzes in einen energieelastischen sowie einen entropieelastischen Anteil aus. Ersterer umschreibt die Energieelastizität des Materials, die sich bei Erreichen einer Grenzenergie in viskoplastisches Materialverhalten wandelt. Zweiterer ist der Entropieelastizität der langen Molekülketten zuzuordnen und kommt erst bei großen Deformationen zum Tragen. In ein rheologisches Schaubild lässt sich diese Aufteilung durch eine Parallelschaltung einer hyperelastischen Feder mit einem Maxwell-Element übersetzen. Der Ansatz von Haward wurde mehrfach aufgegriffen und in den Arbeiten von Boyce et al. (1988, 2000); Tervoort et al. (1997); Wu & Buckley (2004); Dupaix & Boyce (2007) und Anand et al. (2009) angewendet. Die Autoren in Reese & Govindjee (1998) und Haupt & Sedlan (2001) verwenden ebenfalls eine Parallelschaltung aus Gleichgewichtsfeder und inelastischem Zweig mit Maxwell-Element oder Reibelement und können so viskoelastische bzw. viskoplastische Effekte abbilden. Im Gegensatz dazu greift die Arbeit von Schapery (1997) auf ein generalisiertes Voigt-Modell zurück und entwickelt das Langzeitverhalten mit Hilfe einer Master-Kriechfunktion.

Die Modellierung durch unidirektionale Faserverstärkung induzierter anisotroper Effekte findet beispielsweise in der Arbeit von Weiss et al. (1996) statt. Darin dient ein generalisiertes Maxwell-Element der rheologischen Umschreibung des Materialverhaltens. Die Anisotropie fließt in die freie Energiedichte der Gleichgewichtsfeder in Form von gemischten Invarianten entsprechend den Grundlagen aus Unterabschnitt 2.2.5 ein. Der von Weiss beschriebene Zugang zur Erfassung einer ausgezeichneten Verstärkungsrichtung wurde unter anderem in den Arbeiten von Holzapfel et al. (2000); Kaliske (2000); Bischoff et al. (2004); Nguyen et al. (2007); Safadi & Rubin (2014) und Mauri et al. (2016) aufgegriffen und bei viskoelastischen Materialien erfolgreich angewendet. Die Modelle in Reese (2003b); Sansour & Bocko (2003); Andriyana et al. (2010) und Weickenmeier & Jabareen (2014) formulieren zusätzlich Gleichungen zur Erfassung viskoplastischer Materialeigenschaften. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die aufgeführten Modelle lediglich eine ausgezeichnete Richtung

berücksichtigen, also der Klasse der transversal isotropen Stoffgesetze zugeordnet werden können. Einen Überblick über Modelle bei beliebigen Faserorientierungsverteilungen bietet Abschnitt 5.1.

Arbeiten zur Betrachtung thermomechanischer Effekte lassen sich in zwei grundlegende Konzepte unterteilen. Den ersten Ansatz vertritt beispielsweise das Modell von Lion (1997), welches auf einer multiplikativen Zerlegung des Deformationsgradienten  $\underline{\underline{F}}$  in eine mechanische Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_m$  und eine thermische Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_\vartheta$  beruht. Die mechanische Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_m$  wiederum lässt sich analog zu den bisher aufgeführten Ansätzen so aufteilen, dass viskoelastische und viskoplastische Effekte einfließen. Die multiplikative Zerlegung des Deformationsgradienten besitzt den Vorteil, dass sich eine rein durch Temperaturänderung bedingte Deformation identifizieren lässt. Auf der Arbeit von Lion (1997) bauen unter anderem die Forschungen von Reese (2003a); Yosibash et al. (2014) und Rothe et al. (2015) auf. Neben der thermischen Deformation kommt die Temperaturabhängigkeit auch in der freien Energiedichte vor. Demgegenüber steht ein Ansatz, bei dem die Gesamtdeformation nicht in einen mechanischen und einen thermischen Anteil zerlegt wird und die Temperaturabhängigkeit lediglich in der freien Energiedichte einbezogen wird. Anwendung fand dieser Ansatz unter anderem in den Arbeiten von Anand et al. (2009); Cho et al. (2013); Ovalle Rodas et al. (2014) und Johlitz et al. (2016).

In den folgenden Abschnitten wird ein Modellierungsrahmen für kurzfaserverstärkte Kunststoffe vorgestellt, der sich an den Arbeiten von Haward & Thackray (1968); Weiss et al. (1996) und Lion (1997) orientiert. In Abgrenzung zu den etablierten Ansätzen zeichnet er sich durch eine zusätzliche Berücksichtigung des Phasenübergangs sowie einer effektiven Strategie zur Auswertung beliebiger Faserorientierungsverteilungen bei großen Deformationen aus. Ausgehend von der Festlegung einer Kinematik werden die thermodynamischen Bilanzgleichungen genutzt, um die notwendigen Bestimmungsgleichungen zu gewinnen. Abschließend erfolgt die Demonstration einiger qualitativer Eigenschaften des Modellierungsrahmens bei großen Deformationen und eine Anpassung an die in Kapitel 4 gewonnenen RVE-Daten.

## 5.1 Einbeziehen der Faserorientierungsverteilung

Die Formulierung effektiver Stoffgesetze für Materialien mit verteilten Faserorientierungen stellt ein weites und immer noch aktuelles Forschungsfeld dar. Den Grundstein für eine analytische Betrachtung der linearen Elastizitätstheorie unter Berücksichtigung der Faserorientierungsverteilung (FOV) legten die Arbeiten von Eshelby (1957, 1959), in denen ein einzelner ellipsoidischer Einschluss in einer homogenen Matrix betrachtet wurde. Darauf aufbauend entstanden über die Jahre zahlreiche Modelle zur Vorhersage des effektiven elastischen Verhaltens bei verteilten Faserorientierungen. Beispielfhaft seien die Arbeiten von Hill (1965); Mori & Tanaka (1973); Benveniste (1987) und Zheng & Du (2001) genannt.

In den Arbeiten von Pierard et al. (2004); Lu (2013) und Tian et al. (2016) wurde die Theorie auf lineare Thermoelastizität erweitert. All diesen Arbeiten ist gemein, dass sie ausgehend von der Geometrie des Einschlusses, dessen Volumengehalt und der räumlichen Orientierungsverteilung eine unmittelbare analytische Formel der effektiven Eigenschaften liefern.

Demgegenüber steht der Ansatz, den erstmalig Lanir (vgl. Lanir (1983)) und später die Autoren in Advani & Tucker (1987) vorstellten. Basierend auf einer Faserdichtefunktion  $\rho(\underline{\tilde{p}})$  (vgl. Abschnitt 2.4) lässt sich die freie Energiedichte als Konvexkombination gewichteter Anteile  $\tilde{\varrho}\psi^p(\underline{\tilde{p}})$  verstehen. Der Index  $p$  verdeutlicht den Bezug bzw. die Abhängigkeit von einer Richtung  $\underline{\tilde{p}}$ . Die gesamte freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  setzt sich wie folgt zusammen

$$\tilde{\varrho}\psi = \langle \tilde{\varrho}\psi^p \rangle = \oint \rho(\underline{\tilde{p}}) \tilde{\varrho}\psi^p dS \quad \text{mit:} \quad \langle \bullet \rangle = \oint \rho(\underline{\tilde{p}}) \bullet dS. \quad (5.1)$$

Mit (5.1) wurde der Mittelungsoperator  $\langle \bullet \rangle$  eingeführt. Es sei darauf hingewiesen, dass die Mittelung der Tensoren  $\underline{\tilde{p}} \circ \underline{\tilde{p}}$  und  $\underline{\tilde{p}} \circ \underline{\tilde{p}} \circ \underline{\tilde{p}} \circ \underline{\tilde{p}}$  das zweite bzw. vierte Moment der FDF liefert (vgl. Abschnitt 2.4). Der Ansatz von Lanir basiert auf einer Parallelschaltung der einzelnen freien Energiedichten  $\tilde{\varrho}\psi^p$ , d.h., jede freie Energiedichte erfährt die gleiche Deformation. Im Umkehrschluss bedeutet dies eine Unabhängigkeit der Gesamtdeformation von der Richtung  $\underline{\tilde{p}}$ . Damit lassen sich lineare Anteile der Gesamtdeformation aus dem Mittelungsoperator ausklammern. Als Beispiel dafür sei das lineare, thermoelastische Stoffgesetz (vgl. Camacho et al. (1990); Gusev et al. (2002)) genannt.

Die additive Zerlegung der freien Energiedichte in gewichtete Anteile wirkt sich ebenfalls auf die Clausius-Duhem-Ungleichung (CDU) aus, da für jeden Anteil  $\tilde{\varrho}\psi^p$  die thermodynamische Konsistenz gewahrt bleiben muss. Folglich bedingt eine konsistente Betrachtung die Mittelung der Dissipationsungleichung (2.53)

$$\langle \tilde{\mathcal{D}}_m^p + \tilde{\mathcal{D}}_Q^p \rangle \geq 0 \quad \text{mit:} \quad \tilde{\mathcal{D}}_m^p = \underline{\tilde{T}}^p \cdot \underline{\dot{\gamma}} - \tilde{\varrho}\dot{\psi}^p - \tilde{\varrho}s^p\dot{\vartheta} \quad ; \quad \tilde{\mathcal{D}}_Q^p = -\frac{1}{\vartheta} \underline{\tilde{q}}^p \cdot \underline{\tilde{\nabla}}(\vartheta). \quad (5.2)$$

Gleichung (5.2) stellt einen allgemeinen Zugang zur thermodynamisch konsistenten Berücksichtigung von FOV dar, der sich problemlos auf große Deformationen übertragen lässt. Die Arbeiten von Lanir et al. (1996); Sacks (2003); Nguyen et al. (2008) und Ateshian et al. (2009) belegen dessen Anwendbarkeit auf reale Probleme, indem sie eine gute Übereinstimmung experimenteller Daten von biologischem Gewebe mit Materialmodellen zeigen, die auf Gleichung (5.2) basieren.

Der Mittelungsansatzes von Lanir zeichnet sich dadurch aus, dass sich Modelle für verteilte Faserorientierungen besonders leicht konstruieren lassen, da lediglich Modelle für eine ausgezeichnete Richtung, also für Unidirektionalität, benötigt werden. Ebenfalls von Vorteil ist die Vererbung von strukturellen Eigenschaften und Symmetrien der freien Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi^p$  auf die gemittelte freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  (vgl. Goldberg et al. (2017)). Diesen positiven Eigenschaften steht die Schwierigkeit beim Lösen der Integrale gegenüber. Diese besitzen in der Regel keine analytische Lösung und bedürfen einer numerischen Integration.

Erkenntnisse zur Integration auf Kugeloberflächen existieren zahlreich in der Literatur (vgl. Lebedev (1976); Bažant & Oh (1986); Gräf (2013) und darin referierte Quellen). Die Wahl der dafür verwendeten Integrationsstellen und -gewichte hängt maßgeblich vom Polynomgrad der zu integrierenden Funktion ab. Für den Fall degenerierter FOV, bei denen ein Eigenwert des zweiten Momentes  $\underline{\underline{\tilde{A}}}$  der FDF gegen Null geht, steigt jedoch der Polynomgrad des Integranden gegen unendlich, was zu einer drastischen Erhöhung der Anzahl der Integrationsstellen führt. Für diese Fälle führt die hohe Zahl der benötigten Funktionsauswertungen dazu, dass eine Anwendung des Materialmodells bei realen Problemen (beispielsweise ein FE-Modell mit  $10^6$  Elementen) ausscheidet.

Um der Problematik der zeitintensiven Integrationen entgegenzuwirken, schlagen die Autoren in Freed et al. (2005) und Gasser et al. (2006) die Verwendung so genannter vorintegrierter bzw. generalisierter Strukturtenoren (GST) vor. Dabei handelt es sich tatsächlich lediglich um die zweiten Momente  $\underline{\underline{\tilde{A}}}$  der FDF. Die Besonderheit des GST-Ansatzes liegt darin, dass der Mittelungsoperator lediglich auf das Argument der zu mittelnden Funktion angewendet wird, d.h.,

$$\langle \tilde{\varrho} \psi^p(\underline{\underline{\tilde{p}}}) \rangle_{\text{GST}} = \tilde{\varrho} \psi^p(\langle \underline{\underline{\tilde{p}}} \rangle). \quad (5.3)$$

Da die freien Energiedichten transversal isotropen Materials in der Regel auf den Tensor  $\underline{\underline{\tilde{P}}}$  zurückgreifen, wird dieser bei der GST-Methode lediglich durch  $\underline{\underline{\tilde{A}}}$  ersetzt. In Gleichung (5.3) werden zwei Funktionen, nämlich der Mittelungsoperator und die freie Energiedichte kommutiert. Dieses Vertauschen der Reihenfolge ist jedoch nur beim Sonderfall einer unidirektionalen FOV oder bei einer freien Energiedichte mit linearen Anteilen von  $\underline{\underline{\tilde{P}}}$  zulässig. In allen anderen Fällen wird ein Fehler eingebracht, der die Anwendbarkeit der GST-Methode stark einschränkt. Die Arbeiten von Federico & Herzog (2008) und Cortes et al. (2010) legen dar, dass die GST-Methode nur für moderat nichtlineare Deformationen und FOV, die leicht von der Unidirektionalität abweichen, zuverlässige Ergebnisse liefert. Mehrere Arbeiten der letzten Jahre (vgl. Pandolfi & Vasta (2012); Vasta et al. (2013); Cortes & Elliott (2014); Gizzi et al. (2016)) versuchen einen Genauigkeitsgewinn durch die Verwendung von Momenten höherer Ordnung zu erzielen. Am Grundproblem, dass zwei nicht kommutierbare Funktionen vertauscht werden, ändern diese Modifikationen jedoch nichts, sodass bei Modellen mit starken Nichtlinearitäten große Abweichungen zur direkten numerischen Integration auftreten.

### 5.1.1 Effektive Integration über die Sphäre

Da bei der in Abbildung 5.2 vorgestellten Kinematik nichtlineare Funktionen des Tensors  $\underline{\underline{\tilde{P}}}$  zu erwarten sind, stellt die Verwendung der GST-Methode keine Option zur Berücksichtigung der FOV dar. Stattdessen soll eine effiziente Alternative zur direkten numerischen Integration zum Einsatz kommen. Den Ausgangspunkt dafür bildet die Festlegung auf die Angular Central Gaussian-Verteilung (ACG) als Faserdichtefunktion (FDF). Abschnitt 2.4

legt die vorteilhaften mathematischen Eigenschaften dieser Funktion dar. Insbesondere die Transformationsvorschrift (2.83) erweist sich als nützliches Hilfsmittel bei der effizienten Integration über die Sphäre, da sie jede beliebige Funktion  $\rho_B(\underline{\tilde{p}})$ , unabhängig vom Tensor  $\underline{B}$ , in eine uniforme FDF überführt. Diese Eigenschaft der ACG-Verteilung wird implizit in den Arbeiten von Tyler (1987); Watson (1983) und Mardia & Jupp (2009) erwähnt. An dieser Stelle sei zusätzlich der analytische Beweis für die Identität

$$\oint \rho_B(\underline{\tilde{p}}) f(\underline{\tilde{p}}) dS = \frac{1}{4\pi} \oint f(\underline{\tilde{a}}) dS \quad (5.4)$$

erbracht. Darin beschreibt  $f(\underline{\tilde{p}})$  eine beliebige Funktion von  $\underline{\tilde{p}}$ . Es sei darauf hingewiesen, dass im Gegensatz zur allgemeinen Betrachtung in Abschnitt 2.4 Vektoren der Referenzkonfiguration betrachtet werden. Der Nachweis basiert auf der Überführung in ein Raumintegral und dem Ausnutzen der Identität

$$\int_0^\infty r^2 e^{-\frac{c}{2}r^2} dr = \frac{1}{c^{\frac{3}{2}}} \frac{\sqrt{2\pi}}{2}. \quad (5.5)$$

Unter Zuhilfenahme von (2.82) und  $c = (\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\tilde{p}})$  folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \oint f(\underline{\tilde{p}}) (\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\tilde{p}})^{-3/2} dS &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \oint f(\underline{\tilde{p}}) \frac{1}{(\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\tilde{p}})^{\frac{3}{2}}} \frac{\sqrt{2\pi}}{2} dS \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \oint f(\underline{\tilde{p}}) \int_0^\infty r^2 \exp\left[-\frac{r^2}{2} (\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\tilde{p}})\right] dr dS \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \int_{\mathbb{R}^3} f\left(\frac{\underline{\tilde{x}}}{|\underline{\tilde{x}}|}\right) \exp\left[-\frac{1}{2} (\underline{\tilde{x}} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\tilde{x}})\right] dV. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Der linke Teil von (5.4) lässt sich als ein räumliches Integral darstellen. Das Einsetzen der Variablentransformation  $\underline{\tilde{x}} = \underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{y}}$  liefert nach Rücküberführung ins Oberflächenintegral

$$\begin{aligned} &\frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \int_{\mathbb{R}^3} f\left(\frac{\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{y}}}{|\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{y}}|}\right) \exp\left[-\frac{1}{2} |\underline{\tilde{y}}|^2\right] dV \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \oint f\left(\frac{\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{p}}}{|\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{p}}|}\right) \int_0^\infty r^2 \exp\left[-\frac{r^2}{2} \frac{(\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B}^{-1} \cdot \underline{\tilde{p}})}{|\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{p}}|^2}\right] dr dS \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \oint f(\underline{\tilde{a}}) \frac{\sqrt{2\pi}}{2} \left[\frac{(\underline{\tilde{p}} \cdot \underline{B}^{-1} \cdot \underline{\tilde{p}})}{|\underline{B}^{-1/2} \cdot \underline{\tilde{p}}|^2}\right]^{-3/2} dS \\ &= \frac{1}{4\pi} \oint f(\underline{\tilde{a}}) dS, \end{aligned} \quad (5.7)$$

womit der Beweis für (5.4) erbracht wird. Diese Transformation der Mittelungsgleichung stellt einen erheblichen Vorteil gegenüber der direkten Mittelung (5.1) dar, weil der Polynomgrad des Integranden ausschließlich von der Funktion  $f(\underline{\tilde{a}})$  bestimmt wird. Damit entfallen vor allem Probleme bei degenerierten FOV. Während beispielsweise für die Mittelung einer unidirektionalen FOV mit Ansatz (5.1) theoretisch unendlich viele

Funktionsauswertungen benötigt werden, erfordert der Ansatz (5.4) lediglich eine einzige Funktionsauswertung.

Gleichung (5.4) ist in der Regel immer noch nicht analytisch lösbar, weswegen die Lösung des Integrals durch eine numerische Integration approximiert wird

$$\frac{1}{4\pi} \oint f(\underline{\tilde{a}}) dS \approx \sum_{i=1}^{N_{IP}} w_i f(\underline{\tilde{a}}_i). \quad (5.8)$$

Dabei wird die Funktion  $f(\underline{\tilde{a}})$  an  $N_{IP}$  verschiedenen Integrationsstellen ausgewertet, mit den Gewichten  $w_i$  skaliert und anschließend aufsummiert. Die Vektoren  $\underline{\tilde{a}}_i$  werden mit Hilfe der Transformationsvorschrift (2.83) aus ursprünglich uniform verteilten Vektoren  $\underline{\tilde{p}}_i$  gewonnen. Letztere lassen sich beispielsweise über einen Abstoßungsalgorithmus auf der Halbkugel gewinnen. Die Gewichte besitzen entweder den Wert  $w_i = 1/N_{IP}$  oder den prozentualen Anteil der umgebenden Voronoi-Zelle (vgl. Freund (2013)). Sollten bei der Transformation (2.83) degenerierte Vektoren  $|\underline{a}_i| \approx 0$  entstehen, werden diese nicht für die numerische Integration verwendet. Zusätzlich werden die Wichtungsfaktoren aller anderen Vektoren so korrigiert, dass ihre Summe wieder Eins ergibt.

Am Beispiel einer fiktiven freien Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi^p(I_4, I_5)$  mit  $I_4 = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{P}}$  und  $I_5 = \underline{\underline{C}}^2 \cdot \underline{\underline{P}}$  sei die effektive Mittelung zur Ermittlung der zweiten Piola-Kirchhoff-Spannung demonstriert. Die Auswertung der gemittelten CDU (vgl. Gl. (5.2)) liefert die Bestimmungsgleichung der Spannung

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\tilde{T}}} &= \langle \underline{\underline{\tilde{T}}}^p \rangle = \left\langle 2 \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle \\ &\approx \sum_{i=1}^{N_{IP}} 2w_i \left[ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial I_{4i}} \underline{\underline{\tilde{A}}}_i + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial I_{5i}} (\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\tilde{A}}}_i + \underline{\underline{\tilde{A}}}_i \cdot \underline{\underline{C}}) \right], \end{aligned} \quad (5.9)$$

mit  $\underline{\underline{\tilde{A}}}_i = \underline{\underline{\tilde{a}}}_i \circ \underline{\underline{\tilde{a}}}_i$ ,  $I_{4i} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\tilde{A}}}_i$  und  $I_{5i} = \underline{\underline{C}}^2 \cdot \underline{\underline{\tilde{A}}}_i$ .

Für einen effektiven Einsatz des Mittelungsoperators unter Zuhilfenahme der numerischen Integration (5.8) sollte die Anzahl der Integrationsstellen  $N_{IP}$  möglichst gering bleiben ohne dabei Genauigkeit zu verlieren. Wie viele Integrationsstellen für eine exakte Integration benötigt werden, wird maßgeblich vom Polynomgrad der zu integrierenden Funktion bestimmt. Dieser lässt sich im Allgemeinen jedoch nicht direkt bestimmen, womit keine pauschale Aussage über die Anzahl der notwendigen Integrationsstellen getroffen werden kann. Einen Ansatz für solch eine Abschätzung bietet die Entwicklung der Funktion  $f(\underline{\tilde{a}})$  als Taylorreihe. Dadurch lässt sich die Funktion  $f(\underline{\tilde{a}})$  ähnlich wie bei den Arbeiten von Pandolfi & Vasta (2012) und Vasta et al. (2013) als Funktion von den Momenten der FDF ausdrücken. Wie viele Integrationsstellen zur korrekten Abbildung der Momente der ACG-Verteilung bei beliebigen Tensoren  $\underline{\underline{B}}$  benötigt werden, lässt sich wiederum einfach bestimmen (vgl. Goldberg & Ihlemann (2017)).

Die Anwendung der effektiven Mittelung wird in den Arbeiten von Goldberg & Ihlemann (2017) und Goldberg et al. (2017) dargestellt. Dabei werden zum einen hochgradig nichtlineare Funktionen mit sehr guter Präzision integriert und zum anderen FEM-Modelle mit

über  $10^6$  Elementen in kurzer Zeit gerechnet. Auf Grund der Vorteile einer hohen Integrationsgenauigkeit bei akzeptabler Rechenzeit wird der Integrationsansatz (5.8) nachfolgend zur Auswertung jeder Mittelung verwendet.

## 5.2 Kinematik

In diesem Abschnitt wird die Kinematik des Materialmodells dargelegt. Ausgehend von den phänomenologischen Eigenschaften des Materials erfolgt zunächst die Formulierung eines rheologischen Schaubilds, mit dem die wichtigsten Effekte abgebildet werden. Darauf aufbauend wird die Zerlegung des Deformationsgradienten aufgezeigt und dessen wichtigste Bestandteile nachvollzogen. Es sei erwähnt, dass die Kinematik für ein transversal isotropes Materialmodell mit genau einer Vorzugsrichtung  $\underline{\tilde{p}}$  in der Referenzkonfiguration ausgelegt wird.

### 5.2.1 Rheologisches Schaubild

Die aus der Literatur bekannten Eigenschaften sowie die aus numerischen Simulationen gewonnenen Erkenntnisse zu den phänomenologischen Charakteristika kurzfaserverstärkter Thermoplaste sollen in diesem Abschnitt in ein rheologisches Schaubild einfließen. Dieses besteht aus mehreren Einzelementen, welche genau definierte mechanische und thermische Eigenschaften aufweisen. Die Verschaltung dieser Einzelemente erlaubt den Zugang zu einem komplexen Gesamtverhalten, welches idealerweise einen Großteil des realen Materialverhaltens wiedergibt. Das rheologische Schaubild in Abbildung 5.1 besteht aus zwei großen Blöcken, die in Reihe geschaltet sind, d.h., die Gesamtdeformation teilt sich auf zwei Teildeformationen auf. Der linke Block enthält lediglich ein Thermoelement, welches sich bei Temperaturänderung ausdehnt oder zusammenzieht. Dieses Element erlaubt einen Zugang zur Berücksichtigung der thermischen Deformationen. Der rechte Block setzt sich aus drei parallelen Strängen zusammen, welche die mechanischen Eigenschaften des Materials widerspiegeln. Jeder dieser Stränge erfährt die mechanische Teildeformation. Die Wahl einer Parallelschaltung begründet sich aus den Erkenntnissen der Untersuchungen in Kapitel 4. Der obere Strang der rheologischen Verschaltung bestehend aus einer Gleichgewichtsfeder wird der Steifigkeit des Materials gegen Volumenänderung zugeordnet. Diese Feder behält ihre Steifigkeit unabhängig von der Temperatur. Der mittlere Strang wird aus einer Reihenschaltung von Dämpfer und Feder gebildet, dem Maxwell-Element. Mit ihm sollen die viskosen Eigenschaften der thermoplastischen Matrix erfasst werden. Der untere Strang setzt sich ebenfalls aus einer Reihenschaltung mit zwei Elementen zusammen. An hinterer Stelle dieser Reihenschaltung befindet sich eine Feder mit Richtungsinformation. Diese erlaubt die Berücksichtigung sowohl weiterer Gleichgewichtsanteile der Steifigkeit als auch der Anisotropie, die durch die Fasern eingebracht wird. Das erste Element des unteren Strangs ist als ein temperaturabhängiger Schalter zu verstehen. Unterhalb einer kritischen

Temperatur schließt die Kupplung zwischen dem oberen und unteren Teil des Elements. Oberhalb dieser Temperatur biegt sich der untere Bimetallstreifen so weit nach unten, dass die Kupplung geöffnet wird. Dadurch fließt keine Kraft mehr durch diesen Strang und die Feder auf der zweiten Position entspannt sich. Wird die kritische Temperatur wieder unterschritten, schließt die Kupplung und die Feder erfährt wieder einen Kraftfluss. Dieser letzte Strang motiviert sich durch die Berücksichtigung des Phasenübergangs beim Durchschreiten der Erstarrungs- bzw. Schmelztemperatur. Liegt eine flüssige Phase des Materials vor, so soll es sich nahezu inkompessibel und viskoelastisch verhalten. Für diesen Fall existieren nahezu keine Gleichgewichtssteifigkeiten gegen Gestaltänderung und die Fasern üben keinen Einfluss auf die Steifigkeit aus. Erstarrt das Material zur festen Phase, so tragen die Fasern zur Gesamtsteifigkeit bei.

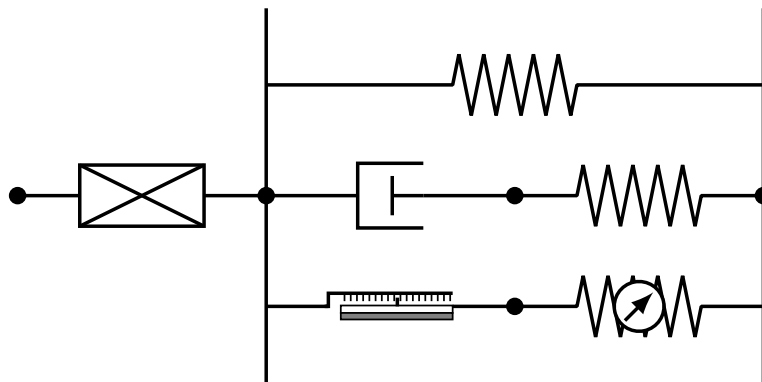


Abbildung 5.1: Rheologische Verschaltung des Materialmodells.

### 5.2.2 Kommutatives Schaubild

Das rheologische Schaubild in Abbildung 5.1 stellt die Grundidee der Kinematik in einfacher, linearer Weise dar. Für einen Übergang zu einer allgemeinen dreidimensionalen Beschreibung erfolgt in diesem Abschnitt die Übersetzung in ein kommutatives Schaubild des Deformationsgradienten.

Abbildung 5.2(a) zeigt die komplette Zerlegung des Deformationsgradienten, wie sie in dieser Arbeit Anwendung findet. Im Sinne eines besseren Verständnisses werden daraus einzelne Bestandteile herausgestellt und in den folgenden Abschnitten näher beleuchtet. So findet sich in Abbildung 5.2(b) die grundlegende Zerlegung der Gesamtdeformation in einen thermischen ( $\underline{\underline{F}}_\vartheta$ ) und einen mechanischen ( $\underline{\underline{F}}_m$ ) Anteil wieder. Der gesamte Deformationsgradient wird also multiplikativ zerlegt in

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}_m \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta. \quad (5.10)$$

Der in Abbildung 5.2(c) dargestellte Ausschnitt der Gesamtdeformation kann dem rechten Block des rheologischen Schaubilds zugeordnet werden. Die einzelnen Stränge in Abbildung 5.2(c) entsprechen ihren Konterparts in Abbildung 5.1. D.h., die Gleichgewichtsfeder



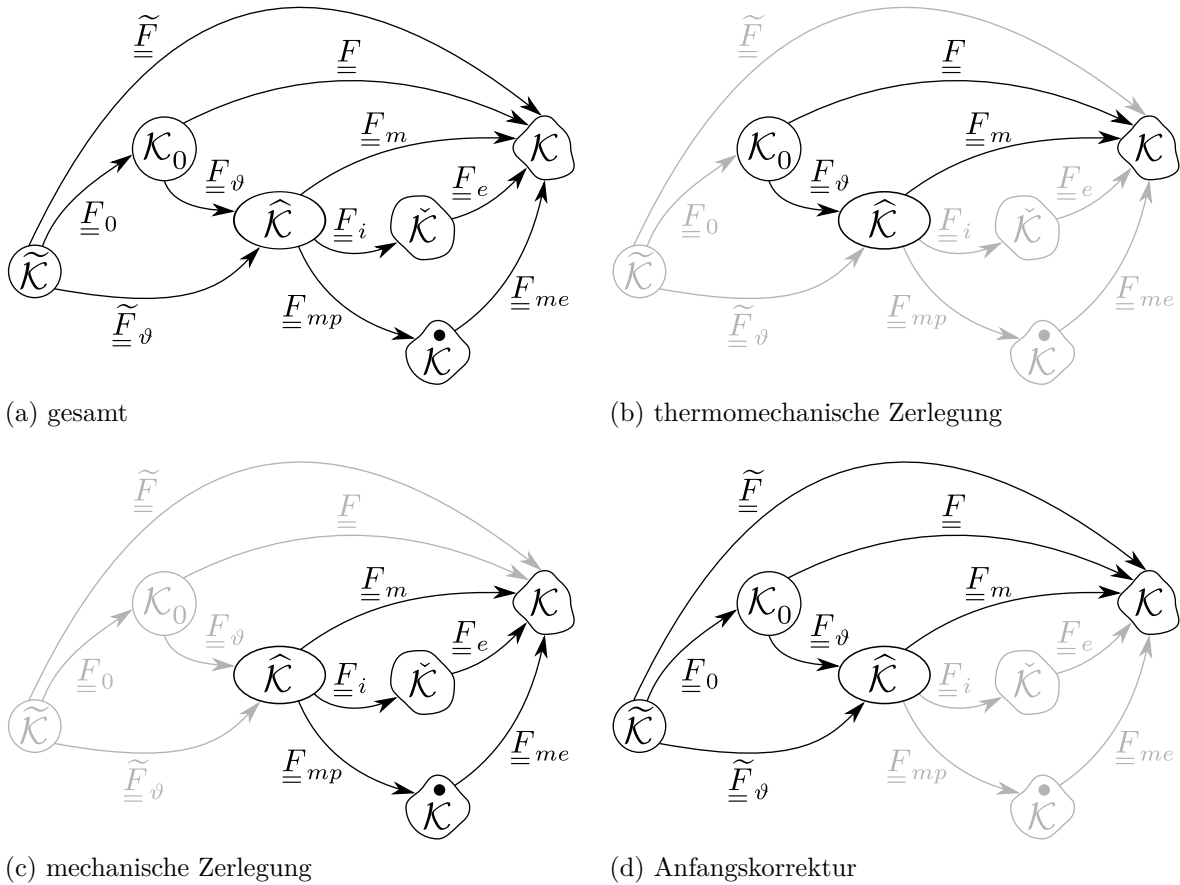


Abbildung 5.2: Kommutatives Schaubild der zu Grunde liegenden Kinematik.

im oberen Strang erfährt die gesamte mechanische Deformation  $\underline{\underline{F}}_m$ , die Deformation im Maxwell-Element teilt sich auf in einen inelastischen ( $\underline{\underline{F}}_i$ ) und einen elastischen ( $\underline{\underline{F}}_e$ ) Anteil und thermisches Schaltelement und Feder des unteren Strangs erfahren die Deformationen  $\underline{\underline{F}}_{mp}$  und  $\underline{\underline{F}}_{me}$  respektive. Es gelten die multiplikativen Zerlegungen

$$\underline{\underline{F}}_m = \underline{\underline{F}}_e \cdot \underline{\underline{F}}_i = \underline{\underline{F}}_{me} \cdot \underline{\underline{F}}_{mp}. \quad (5.11)$$

Der Dämpfer des Maxwell-Elements fließt unter der Annahme von Inkompressibilität, d.h.

$$J_{3i} = \det \underline{\underline{F}}_i \equiv 1. \quad (5.12)$$

In Abbildung 5.2(d) ist eine Erweiterung der Kinematik zur Korrektur anfänglicher thermischer Deformationen zu sehen. Diese Korrektur ist genau dann interessant, wenn zu Beginn der Betrachtung des Materials eine Temperatur vorliegt, die von der Referenztemperatur abweicht.

Den kommutativen Schaubildern in Abbildung 5.2 kann weiterhin entnommen werden, zwischen welchen Konfigurationen die einzelnen Deformationsgradienten Linienelemente abbilden. Am Ende der gesamten Deformation steht die aktuelle Konfiguration  $\mathcal{K}$ . Die Ausgangslage der Betrachtung bildet die Referenzkonfiguration  $\tilde{\mathcal{K}}$ . Die Startkonfiguration

$\mathcal{K}_0$  unterscheidet sich zu letzterer darin, dass Linienelemente bereits eine anfängliche thermische Deformation erfahren haben.  $\widehat{\mathcal{K}}$  gibt die Zwischenkonfiguration der thermomechanischen Zerlegung von  $\underline{\underline{F}}$  an und  $\check{\mathcal{K}}$  und  $\dot{\mathcal{K}}$  sind den Zwischenkonfigurationen des viskoelastischen bzw. des anisotropen Strangs zuzuordnen.

### 5.2.3 Thermische Deformation

Für die auf der Arbeit von Lu & Pister (1975) basierende thermomechanische Zerlegung des Deformationsgradienten finden sich in der Literatur verschiedene Ansätze. Ausgehend von einem isotropen Materialverhalten lässt sich dem thermischen Deformationsgradienten folgende allgemeine Form zuordnen (vgl. Holzapfel & Simo (1996); Lion (2000))

$$\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \varphi(\vartheta, \alpha_{ti}) \underline{\underline{I}}. \quad (5.13)$$

Dabei beschreibt  $\varphi(\vartheta, \alpha_{ti})$  eine skalarwertige Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur und dem thermischen Ausdehnungskoeffizient  $\alpha_{ti}$ . Die thermische Deformation nimmt eine hydrostatische Form an, d.h., das Material deformiert sich gleichmäßig in alle Richtungen. An  $\varphi(\vartheta, \alpha_{ti})$  wird lediglich die Forderung gestellt, dass  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \underline{\underline{I}}$  in der Referenzkonfiguration gilt. Basierend auf den Arbeiten von Lion (2000); Lubarda (2004) lässt sich eine Erweiterung dieses Ansatzes auf transversal isotrope Materialien mit einer ausgezeichneten Richtung formulieren

$$\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \varphi_{\parallel}(\vartheta, \alpha_{\parallel}) \underline{\underline{\tilde{P}}} + \varphi_{\perp}(\vartheta, \alpha_{\perp}) (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{\tilde{P}}}). \quad (5.14)$$

Darin wird zwischen einer Ausdehnungsfunktion  $\varphi_{\parallel}$ , die dem Anteil der thermischen Deformation in Richtung  $\underline{\underline{\tilde{p}}}$  zugeordnet werden kann, und einer Funktion  $\varphi_{\perp}$ , die dem Anteil der thermischen Deformation in der transversal dazu ausgerichteten Ebene entsprechen, unterschieden. Beide Ausdehnungsfunktionen müssen der Bedingung  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \underline{\underline{I}}$  in der Referenzkonfiguration genügen. Aus Gründen der Übersicht entfällt im Folgenden die Abhängigkeit der Ausdehnungsfunktionen von der Temperatur sowie den thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_{\parallel}, \alpha_{\perp}$ . Es sei erwähnt, dass  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta}$  ein symmetrisch positiv definiten Tensor ist und somit dessen Inverse uneingeschränkt existiert. Es gilt allgemein

$$\underline{\underline{X}}^{-1} = \frac{1}{a} \underline{\underline{\tilde{P}}} - \frac{1}{b} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{\tilde{P}}}) \quad \iff \quad \underline{\underline{X}} = a \underline{\underline{\tilde{P}}} + b (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{\tilde{P}}}). \quad (5.15)$$

Umformung (5.15) stellt ein wichtiges Hilfsmittel dieser Arbeit dar und bildet die Grundlage für die Bestimmung von  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$  unter Berücksichtigung einer thermischen Anfangsdeformation.

#### Korrektur der Anfangsdeformation

Wie zuvor bereits erwähnt, bedarf die thermische Deformation einer Korrektur, wenn die Temperatur der Konfiguration  $\mathcal{K}_0$  von der Referenztemperatur  $\tilde{\vartheta}$  abweicht. Anderenfalls

würde (5.14) zu einer Startdeformation ungleich dem Einheitstensor führen. Zur Umgehung dieser Probleme wird ein Ansatz von Landgraf et al. (2014) und Landgraf (2015) aufgegriffen und auf Anisotropie erweitert. Ausgangslage der Korrektur bildet die multiplikative Zerlegung der thermischen Deformation  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta}$  in die konstante Anfangsdeformation  $\underline{\underline{F}}_0$  und die eigentlich gesuchte thermische Deformation  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta}$  (vgl. Abbildung 5.2(d))

$$\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \underline{\underline{F}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_0. \quad (5.16)$$

Diese Unterscheidung wird getroffen, weil es sinnvoll ist, Funktionen auf eine immer gleich bleibende Referenzkonfiguration zu beziehen. Die beiden neuen thermischen Deformationen ähneln der bereits bekannten Form, nur verwenden sie andere skalare Vorfaktoren

$$\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \tilde{\varphi}_{\parallel} \underline{\underline{P}} + \tilde{\varphi}_{\perp} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}) \quad ; \quad \underline{\underline{F}}_0 = \varphi_{0\parallel} \underline{\underline{P}} + \varphi_{0\perp} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}). \quad (5.17)$$

Durch Umstellen von (5.16), Einsetzen von (5.17) und Anwenden von (5.15) folgt für die gesuchte thermische Deformation

$$\underline{\underline{F}}_{\vartheta} = \underline{\underline{F}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_0^{-1} = \frac{\tilde{\varphi}_{\parallel}}{\varphi_{0\parallel}} \underline{\underline{P}} + \frac{\tilde{\varphi}_{\perp}}{\varphi_{0\perp}} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}), \quad (5.18)$$

d.h., die gesuchten skalaren Funktionen  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$  folgen mit

$$\varphi_{\parallel} = \frac{\tilde{\varphi}_{\parallel}}{\varphi_{0\parallel}} \quad ; \quad \varphi_{\perp} = \frac{\tilde{\varphi}_{\perp}}{\varphi_{0\perp}} \quad (5.19)$$

und hängen lediglich von  $\varphi_{0\parallel}, \varphi_{0\perp}, \tilde{\varphi}_{\parallel}, \tilde{\varphi}_{\perp}$  ab. Weil  $\varphi_{0\parallel}, \varphi_{0\perp}$  konstant über der Zeit bleiben, empfiehlt es sich, diese beiden Variablen als Statusvariablen zu speichern.

Mit Blick auf weitere Betrachtungen der thermischen Deformation lohnt sich ein Blick auf den thermischen Geschwindigkeitsgradienten  $\underline{\underline{L}}_{\vartheta}$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{L}}_{\vartheta} &= \dot{\underline{\underline{F}}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1} = (\dot{\underline{\underline{F}}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_0^{-1} + \underline{\underline{F}}_{\vartheta} \cdot \dot{\underline{\underline{F}}}_0) \cdot \underline{\underline{F}}_0 \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1}, \\ &= \dot{\underline{\underline{F}}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_0^{-1} \cdot \underline{\underline{F}}_0 \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1} = \dot{\underline{\underline{F}}}_{\vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1}, \\ &= \underline{\underline{L}}_{\vartheta} \dot{\vartheta} \end{aligned} \quad (5.20)$$

mit

$$\underline{\underline{L}}_{\vartheta} = \frac{\tilde{\varphi}'_{\parallel}}{\tilde{\varphi}_{\parallel}} \underline{\underline{P}} + \frac{\tilde{\varphi}'_{\perp}}{\tilde{\varphi}_{\perp}} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}) \quad ; \quad (\bullet)' = \frac{\partial(\bullet)}{\partial\vartheta}. \quad (5.21)$$

Im Zuge der Berechnung der Materialtangente (s. Unterabschnitt 5.3.4) wird weiterhin die Ableitung der Inversen  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1}$  nach der Temperatur benötigt

$$\frac{\partial \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1}}{\partial\vartheta} = -\frac{\varphi_{0\parallel}}{\tilde{\varphi}_{\parallel}^2} \tilde{\varphi}'_{\parallel} \underline{\underline{P}} - \frac{\varphi_{0\perp}}{\tilde{\varphi}_{\perp}^2} \tilde{\varphi}'_{\perp} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}). \quad (5.22)$$

Für die Ableitung von  $\underline{\underline{L}}_{\vartheta}$  nach der Temperatur gilt

$$\frac{\partial \underline{\underline{L}}_{\vartheta}}{\partial\vartheta} = \frac{\tilde{\varphi}''_{\parallel} \tilde{\varphi}_{\parallel} - \tilde{\varphi}_{\parallel}^2}{\tilde{\varphi}_{\parallel}^2} \underline{\underline{P}} + \frac{\tilde{\varphi}''_{\perp} \tilde{\varphi}_{\perp} - \tilde{\varphi}_{\perp}^2}{\tilde{\varphi}_{\perp}^2} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}). \quad (5.23)$$

### Rotation der Zwischenkonfiguration

Die Berücksichtigung der Anisotropie der Steifigkeit erfolgt auf der mechanischen Deformation  $\underline{\underline{F}}_m$ , welche als zweite Teildeformation nach  $\underline{\underline{F}}_\vartheta$  folgt. In Unterabschnitt 2.2.6 wird dargelegt, dass Anisotropien auf der zweiten Teildeformationen mit Problemen einhergehen, weil sich die Rotation der Zwischenkonfiguration beliebig einstellen kann. Mit der konkreten Wahl von (5.14) wird dieses Problem allerdings umgangen, da die Richtung  $\tilde{\underline{\underline{p}}}$  bis zur Zwischenkonfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$  keine Rotation erfährt. Anschaulich lässt sich  $\underline{\underline{F}}_\vartheta$  so interpretieren, dass die normierte Richtung  $\tilde{\underline{\underline{p}}}$  lediglich entlang ihrer Achse deformiert wird. Eine anschließende Normierung sorgt für die gleiche Richtung wie in der Referenzkonfiguration. Mathematisch stellt sich diese Interpretation wie folgt dar

$$\begin{aligned} \underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}} &= \varphi_{\parallel} \tilde{\underline{\underline{P}}} \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}} + \varphi_{\perp} \underline{\underline{I}} \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}} - \varphi_{\perp} \tilde{\underline{\underline{P}}} \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}} = \varphi_{\parallel} \tilde{\underline{\underline{p}}}, \\ \hat{\underline{\underline{p}}} &= \frac{\underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}}}{\sqrt{(\underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}}) \cdot (\underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}})}} = \frac{\varphi_{\parallel} \tilde{\underline{\underline{p}}}}{\sqrt{\varphi_{\parallel}^2 \tilde{\underline{\underline{p}}} \cdot \tilde{\underline{\underline{p}}}}} = \tilde{\underline{\underline{p}}}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Die gleiche Argumentation greift für die Deformationen  $\underline{\underline{F}}_0$  und  $\tilde{\underline{\underline{F}}}_\vartheta$ , weswegen davon ausgegangen werden kann, dass auf der Konfiguration  $\mathcal{K}_0$  ebenfalls die Richtung  $\tilde{\underline{\underline{p}}}$  vorliegt.

#### 5.2.4 Berücksichtigung des Phasenübergangs

Mit der Zerlegung (5.11)<sub>2</sub> des mechanischen Deformationsgradienten steht die Möglichkeit des temperaturabhängigen Zuschaltens von Steifigkeiten zur Verfügung. Die Grundidee dahinter besteht darin, dass  $\underline{\underline{F}}_{mp}$  oberhalb der Schmelztemperatur  $\vartheta_S$  die komplette Deformation  $\underline{\underline{F}}_m$  erfährt und damit die Feder auf der zweiten Teildeformation (vgl. Abbildung 5.1) entspannt bleibt. Beim Unterschreiten von  $\vartheta_S$  merkt sich das thermische Schaltelement seine aktuelle Deformation  $\underline{\underline{F}}_{ms}$  als Statusvariable und behält diese bei. Dadurch wird für die Feder eine neue Referenzkonfiguration definiert. Zusätzlich wird eine Statusvariable  $\mathcal{S}_{Ph}$ , welche den Zustand der Phase verfolgt, eingeführt. Mathematisch legt sich das kinematische Verhalten wie folgt dar

$$\underline{\underline{F}}_{mp} = \begin{cases} \underline{\underline{F}}_m, & \vartheta - \vartheta_S > 0 \\ \underline{\underline{F}}_{ms}, & \vartheta - \vartheta_S \leq 0 \end{cases}, \quad (5.25)$$

$$\underline{\underline{F}}_{me} = \begin{cases} \underline{\underline{I}}, & \vartheta - \vartheta_S > 0 \\ \underline{\underline{F}}_m \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}^{-1}, & \vartheta - \vartheta_S \leq 0 \end{cases}. \quad (5.26)$$

Liegt zum Zeitpunkt  $t = t_0$  bereits eine feste Phase vor, so bleibt  $\underline{\underline{F}}_{ms}$  gleich Einheitstensor

$$\underline{\underline{F}}_{ms} = \left\{ \underline{\underline{I}}, \quad (\vartheta - \vartheta_S \leq 0) \wedge (t = t_0) \right\}. \quad (5.27)$$

Diese Methode, den Phasenübergang abzubilden, ist sehr einfach zu implementieren und erfordert keine zusätzlichen Rechnungen. Die klare Definition der Zwischenkonfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$

ist ebenfalls von Vorteil, weil damit keine unbestimmten Rotationen die Anisotropien auf der zweiten Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_{me}$  stören. Als Nachteil bleibt festzuhalten, dass der Wechsel von flüssiger zu fester Phase schlagartig erfolgt, was mit Blick auf die Gesamtsteifigkeit des Materialmodells Probleme bereiten kann. Aus diesem Grund findet in Unterabschnitt 5.3.1 eine temperaturabhängige Glättungsfunktion Berücksichtigung.

## 5.3 Auswertung der Bilanzgleichungen

### 5.3.1 Ansatz der freien Energiedichte

Für die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  wird eine Zerlegung in richtungsabhängige Anteile  $\tilde{\varrho}\psi^p$  sowie den richtungsunabhängigen Anteil  $\tilde{\varrho}\psi_\vartheta(\vartheta)$  postuliert

$$\tilde{\varrho}\psi = \langle \tilde{\varrho}\psi^p \rangle + \tilde{\varrho}\psi_\vartheta(\vartheta). \quad (5.28)$$

Letzterer hängt ausschließlich von der Temperatur ab und lässt sich aus dem Mittelungsoperator ausklammern. Die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi^p$  setzt sich wie folgt zusammen

$$\tilde{\varrho}\psi^p = f_{Ph}(\vartheta)\tilde{\varrho}\psi_{me}^p + \tilde{\varrho}\psi_m^p + \tilde{\varrho}\psi_e^p. \quad (5.29)$$

Die Indizes in  $\tilde{\varrho}\psi_{me}^p, \tilde{\varrho}\psi_m^p, \tilde{\varrho}\psi_e^p$  geben an, welchen Teildeformationen in Abbildung 5.2 bzw. Federn im rheologischen Schaubild Abbildung 5.1 die freien Energiedichten zugeordnet werden. Wie bereits in Unterabschnitt 5.2.4 erwähnt, sorgt die Glättungsfunktion  $f_{Ph}$  in Abhängigkeit von der Temperatur für einen stetig differenzierbaren Übergang der Steifigkeiten im Umfeld des Phasenübergangs. Sie ist wie folgt definiert

$$f_{Ph} = \begin{cases} 1, & \vartheta \leq \vartheta_{S0} \\ 1 - \xi_f^3(10 - 15\xi_f + 6\xi_f^2), & \vartheta_{S0} < \vartheta < \vartheta_{S1} \\ 0, & \vartheta_{S1} \leq \vartheta \end{cases} \quad ; \quad \xi_f = \frac{\vartheta - \vartheta_{S0}}{\vartheta_{S1} - \vartheta_{S0}} \quad (5.30)$$

und greift auf die beiden Materialparameter  $\vartheta_{S0}$  und  $\vartheta_{S1}$  zurück. Diese geben den Temperaturbereich an, in dem die Glättungsfunktion wirken soll und werden zweckmäßigerweise so gewählt, dass  $\vartheta_{S0} < \vartheta_S$  und  $\vartheta_{S1} = \vartheta_S$ . So ist gesichert, dass sich das schlagartige Zu- und Abschalten der Deformation  $\underline{\underline{F}}_{me}$  nicht negativ auf die Steifigkeiten auswirkt.

Der freien Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi_{me}^p$  wird der folgende Ansatz zugewiesen

$$\tilde{\varrho}\psi_{me}^p = \frac{G(\vartheta)}{2}(\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{C}}_{me} - 3) + \frac{E_F(\vartheta)}{8}(I_{4me} - 1)^2. \quad (5.31)$$

Dabei entspricht der erste Summand einem Neo-Hooke-Modell (vgl. Holzapfel (2010)) mit temperaturabhängigem Schubmodul  $G(\vartheta)$  und wurde gewählt, weil sich dieser Ansatz bei kleinen Deformationen nahezu linear elastisch verhält. Der zweite Summand verwendet als temperaturabhängigen Materialparameter den E-Modul  $E_F(\vartheta)$  in Faserrichtung sowie die

Invariante  $I_{4me} = \underline{\underline{C}}_{me} \cdot \dot{\underline{\underline{P}}}$  in quadratischer Ordnung. Dieser Ansatz bietet eine besonders leichte Möglichkeit das vierte Moment der FDF in die Steifigkeit einfließen zu lassen, wie folgende allgemeine Umformung zeigt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2(\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{P}} - 1)^2}{\partial \underline{\underline{C}}^2} &= 2\underline{\underline{P}} \circ \underline{\underline{P}}, \\ \left\langle \frac{\partial^2(\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{P}} - 1)^2}{\partial \underline{\underline{C}}^2} \right\rangle &= 2\underline{\underline{A}}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Damit können die Erkenntnisse aus Abschnitt 4.2 umgesetzt werden. Die Temperaturabhängigkeit der beiden Materialparameter basiert auf den Erkenntnissen aus der Literatur (vgl. Ehrenstein (1999)), dass die Steifigkeit von Polypropylen bei steigender Temperatur deutlich abnimmt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit entfällt die Darstellung der Abhängigkeit von  $\vartheta$  im Folgenden. Mit der Definition (5.26) ist gesichert, dass  $\tilde{\varrho}\psi_{me}^p = 0$  bei  $\vartheta > \vartheta_S$ , weswegen sich  $\tilde{\varrho}\psi_{me}$  nachfolgend nur auf die feste Phase bezieht. Unter Berücksichtigung der Zerlegung  $\underline{\underline{F}}_m = \underline{\underline{F}}_{me} \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}$  lässt sich  $\tilde{\varrho}\psi_{me}^p$  in Größen der Konfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$  darstellen. Für den normierten Strukturtenor  $\dot{\underline{\underline{P}}}$  folgt zunächst

$$\dot{\underline{\underline{P}}} = \frac{\underline{\underline{F}}_{ms} \cdot \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}^T}{\underline{\underline{C}}_{ms} \cdot \underline{\underline{P}}} \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{C}}_{ms} = \underline{\underline{F}}_{ms}^T \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}. \quad (5.33)$$

Eingesetzt in die Invariante  $I_{4me}$  zeigt sich ein Zusammenhang zu den Invarianten  $I_{4m}$  und  $I_{4ms}$

$$I_{4me} = \underline{\underline{C}}_{me} \cdot \dot{\underline{\underline{P}}} = \frac{\underline{\underline{F}}_{ms}^T \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{F}}_{ms} \cdot \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{F}}_{ms}^T}{\underline{\underline{C}}_{ms} \cdot \underline{\underline{P}}} = \frac{\underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{P}}}{\underline{\underline{C}}_{ms} \cdot \underline{\underline{P}}} = \frac{I_{4m}}{I_{4ms}}. \quad (5.34)$$

Damit verbleibt der Ausdruck

$$\tilde{\varrho}\psi_{me}^p = \frac{G(\vartheta)}{2} (\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m - 3) + \frac{E_F(\vartheta)}{8} (I_{4ms}^{-1} \underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{C}}_m - 1)^2 \quad (5.35)$$

für die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi_{me}^p$ . An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass allein schon der Term  $I_{4ms}^{-1}$  in (5.35) eine nichtlineare Abhängigkeit von  $\underline{\underline{P}}$  darstellt, die eine effektive Integration im Zuge der Orientierungsmittelung (s. Abschnitt 5.1) bedingt.

Der Ansatz für die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi_m^p$  ergibt sich wie folgt

$$\tilde{\varrho}\psi_m^p = \frac{K(\vartheta)}{2} (J_{3m} - 1)^2 \quad (5.36)$$

und kann unter anderem den Arbeiten von Hartmann & Neff (2003) und Hartmann (2003) entnommen werden. Auch hier wird der Materialparameter (Kompressionsmodul  $K$ ) in Abhängigkeit von der Temperatur eingesetzt. Die Invariante  $J_{3m}$  ergibt sich aus der Determinante der mechanischen Teildeformation, d.h.,  $J_{3m} = \det \underline{\underline{F}}_m$ . Es sei erwähnt, dass der Ansatz (5.36) bei kleinen Deformationen linear elastisches Verhalten aufweist, aber bei starken Kompressionen unphysikalisches Verhalten zeigt, weil sich die Druckspannungen einem endlichen Wert annähern statt ins Unendliche zu divergieren.

Der freien Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi_e^p$  wird eine Parallelschaltung von  $N_{MW}$  Neo-Hooke-Modellen zu Grunde gelegt

$$\tilde{\varrho}\psi_e^p = \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k(\vartheta)}{2} (\underline{I} \cdot \underline{\bar{C}}_{e_k} - 3) = \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k(\vartheta)}{2} (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\bar{C}}_m - 3). \quad (5.37)$$

Diese sind auf ihrer jeweiligen Teildeformation  $\underline{F}_{e_k}$  definiert und verwenden einen temperaturabhängigen Schubmodul  $G_k$ . Unter Beachtung der kinematischen Zerlegung  $\underline{F}_m = \underline{F}_e \cdot \underline{F}_i$  lässt sich die freie Energiedichte auch mit Größen der Konfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$  ausdrücken. Der Ansatz (5.37) bedingt die Einführung einer inneren Variable  $\underline{C}_{i_k}$  für jede der  $N_{MW}$  Teilenergiedichten.

Mit Gleichungen (5.35), (5.36) und (5.37) lässt sich die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho}\psi$  allgemein als Funktion des rechten Cauchy-Green-Tensors  $\underline{C}_m$ , der Temperatur  $\vartheta$  und der inversen inneren Variablen  $\underline{C}_{i_k}^{-1}$  ausdrücken

$$\tilde{\varrho}\psi = \langle \tilde{\varrho}\psi^p(\underline{C}_m, \vartheta, \underline{C}_{i_k}^{-1}) \rangle + \tilde{\varrho}\psi_\vartheta(\vartheta). \quad (5.38)$$

Damit folgt die zeitliche Ableitung der freien Energiedichte mit

$$\tilde{\varrho}\dot{\psi} = \left\langle \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \underline{C}_m} \cdot \dot{\underline{C}}_m + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta} + \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \underline{C}_{i_k}^{-1}} \cdot \dot{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \right\rangle + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_\vartheta}{\partial \vartheta} \dot{\vartheta}. \quad (5.39)$$

Die darin enthaltenen partiellen Ableitungen ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \underline{C}_m} &= f_{Ph} \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial \underline{C}_m} + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_m^p}{\partial \underline{C}_m} + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_e^p}{\partial \underline{C}_m} \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial \underline{C}_m} &= \frac{G}{2} (\underline{\bar{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\bar{C}}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} + \frac{E_F}{4} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \tilde{\mathbf{P}} \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_m^p}{\partial \underline{C}_m} &= K (J_{3m} - 1) \frac{J_{3m}}{2} \underline{C}_m^{-1} \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_e^p}{\partial \underline{C}_m} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k}{2} (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\bar{C}}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} \end{aligned} \quad (5.40)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi^p}{\partial \vartheta} &= f_{Ph} \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_m^p}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_e^p}{\partial \vartheta} + \frac{\partial f_{Ph}}{\partial \vartheta} \tilde{\varrho}\psi_{me}^p \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial \vartheta} &= \frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial \vartheta} (\underline{I} \cdot \underline{\bar{C}}_{me} - 3) + \frac{1}{8} \frac{\partial E_F}{\partial \vartheta} (I_{4me} - 1)^2 \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_m^p}{\partial \vartheta} &= \frac{1}{2} \frac{\partial K}{\partial \vartheta} (J_{3m} - 1)^2 \\ \frac{\partial \tilde{\varrho}\psi_e^p}{\partial \vartheta} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{1}{2} \frac{\partial G_k}{\partial \vartheta} (\underline{I} \cdot \underline{\bar{C}}_{e_k} - 3) \\ \frac{\partial f_{Ph}}{\partial \vartheta} &= \begin{cases} 0, & \vartheta \leq \vartheta_{S0} \\ (-30\xi_f^2 + 60\xi_f^3 - 30\xi_f^4) \frac{1}{\vartheta_{S1} - \vartheta_{S0}}, & \vartheta_{S0} < \vartheta < \vartheta_{S1} \\ 0, & \vartheta_{S1} \leq \vartheta \end{cases} \end{aligned} \quad (5.41)$$

Für den dritten Summanden von (5.39) folgt

$$\sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}} \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} = \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k}{2} \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} = \sum_{k=1}^{N_{MW}} -G_k \underline{\underline{C}}_{e_k} \cdot \underline{\underline{D}}_{i_k}, \quad (5.42)$$

wobei der letzte Term einem Ausdruck auf der Zwischenkonfiguration  $\check{\mathcal{K}}$  entspricht. Auf die Ableitung der freien Energiedichte  $\tilde{\varrho} \psi_\vartheta$  nach der Temperatur wird an dieser Stelle verzichtet, weil Sie nicht in das Stoffgesetz einfließen wird.

Es sei erwähnt, dass die freie Energiedichte  $\tilde{\varrho} \psi$  die Bedingungen der Polykonvexität nach Balzani (vgl. Balzani (2006)) erfüllt, solange die Materialparameter  $G, G_k, E_F$  und  $K$  positiv sind. Die Polykonvexität der einzelnen Terme in Gleichungen (5.31), (5.31), (5.36) und (5.37) wird beispielsweise in der Arbeit von Schröder & Neff (2003) nachgewiesen.

### 5.3.2 Auswertung der Clausius-Duhem-Ungleichung

Das Einsetzen der zeitlichen Ableitung der freien Energiedichte in die Clausius-Duhem-Ungleichung (5.2) erlaubt das Aufstellen der Potenzialgleichungen zur Gewinnung der Spannung, Entropie und Dissipation. Dafür wird die zeitliche Rate von  $\underline{\underline{C}}$  in

$$\dot{\underline{\underline{C}}} = \underline{\underline{F}}_\vartheta^T \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_m \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta + \underline{\underline{F}}_\vartheta^T \cdot 2(\underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_\vartheta)^S \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta \quad (5.43)$$

zerlegt und ergibt damit die Spannungsleistungsdichte

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}^p \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} &= \frac{1}{2} \left[ \underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta^T \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_m + 2 \underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta^T \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_\vartheta \right], \\ &= \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}^p \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_m + \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_\vartheta \dot{\vartheta} \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{T}}^p = \underline{\underline{F}}_\vartheta \cdot \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{F}}_\vartheta^T. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Unter Zuhilfenahme von (5.39) lässt sich die Clausius-Duhem-Ungleichung in folgende Form überführen

$$\left\{ \left\{ \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}^p - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right\} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_m + \left\{ \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_\vartheta - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \vartheta} - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi_\vartheta}{\partial \vartheta} - \tilde{\varrho} s^p \right\} \dot{\vartheta} - \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}} \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} + \mathcal{D}_q^p \right\} \geq 0. \quad (5.45)$$

Gleichung (5.45) muss bei beliebigen  $\dot{\underline{\underline{C}}}_m, \dot{\vartheta}, \dot{\underline{\underline{C}}}_{i_k}^{-1}$  und beliebiger FOV gelten. Die Terme in den geschweiften Klammern beschreiben die Potenzialbeziehungen der Spannung und Entropie (vgl. Haupt (2002); Holzapfel (2010)) und ergeben jeweils Null. Aus diesem Grund lassen sich die Mittelungsoperatoren in die Produkte hineinziehen und es verbleibt

$$\left\{ \left\{ \frac{1}{2} \underline{\underline{T}}^p - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right\} \right\} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_m + \left\{ \left\{ \underline{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_\vartheta - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \vartheta} - \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi_\vartheta}{\partial \vartheta} - \tilde{\varrho} s^p \right\} \right\} \dot{\vartheta} - \underbrace{\left\{ - \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial \tilde{\varrho} \psi^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}} \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \right\}}_{=\tilde{\mathcal{D}}_d^p} + \left\{ \tilde{\mathcal{D}}_Q^p \right\} \geq 0. \quad (5.46)$$



Aus dem dritten Mittelungsterm resultiert der Anteil  $\tilde{\mathcal{D}}_d^p$  der Dissipation, den die inelastischen Deformationen  $\underline{\underline{F}}_{i_k}$  erzeugen. Da die ersten beiden Terme der Gleichung (5.46) Null ergeben, gilt die Identität

$$\tilde{\mathcal{D}}_m^p = \tilde{\mathcal{D}}_d^p. \quad (5.47)$$

### Spannung und Entropie

Durch die Auswertung der ersten Potenzialbeziehung folgt unmittelbar die Bestimmungsgleichung der zweiten Piola-Kirchhoff-Spannung

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\hat{T}}} &= \langle \underline{\underline{\hat{T}}}^p \rangle = \left\langle \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1} \cdot 2 \frac{\partial \tilde{\psi}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-T} \right\rangle = \left\langle \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-1} \cdot \underline{\underline{\hat{T}}}^p \cdot \underline{\underline{F}}_{\vartheta}^{-T} \right\rangle \\ \underline{\underline{\hat{T}}}^p &= f_{Ph} \left[ G(\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1} + \frac{E_F}{2} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \underline{\underline{\hat{P}}} \right] \\ &\quad + K J_{3m} (J_{3m} - 1) \underline{\underline{C}}_m^{-1} + \sum_{k=1}^{N_{MW}} G_k (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1} \end{aligned} \quad (5.48)$$

Die zweite Potenzialbeziehung führt auf eine Gleichung zur Berechnung der Entropiedichte  $\tilde{q}s$

$$\begin{aligned} \tilde{q}s &= \tilde{q}s_m + \tilde{q}s_{\vartheta} \\ \tilde{q}s_m &= \left\langle \underline{\underline{\hat{T}}}^p \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{L}}_{\vartheta} - \frac{\partial f_{Ph}}{\partial \vartheta} \left[ \frac{G}{2} (\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{C}}_{me} - 3) + \frac{E_F}{8} (I_{4me} - 1)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. - f_{Ph} \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial \vartheta} (\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{C}}_{me} - 3) + \frac{1}{8} \frac{\partial E_F}{\partial \vartheta} (I_{4me} - 1)^2 \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial K}{\partial \vartheta} (J_{3m} - 1)^2 - \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{1}{2} \frac{\partial G_k}{\partial \vartheta} (\underline{\underline{I}} \cdot \underline{\underline{C}}_{e_k} - 3) \right\rangle \\ \tilde{q}s_{\vartheta} &= - \frac{\partial \tilde{\psi}^p}{\partial \vartheta} \end{aligned} \quad (5.49)$$

### Evolutionsgleichung der inneren Deformation

In den Gleichungen der Spannung (5.48) sowie der Entropiedichte (5.49) tauchen Abhängigkeiten von den inneren Variablen  $\underline{\underline{C}}_{i_k}$  auf. Für deren Bestimmung wird die Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_d^p$  unter der Forderung der Nichtnegativität ausgewertet. Es muss also gelten

$$\tilde{\mathcal{D}}_d^p = - \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial \tilde{\psi}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}}_{i_k}^{-1} \geq 0 \quad (5.50)$$

bzw. auf der Konfiguration  $\check{\mathcal{K}}$

$$\sum_{k=1}^{N_{MW}} G_k \underline{\underline{C}}_{e_k} \cdot \underline{\underline{D}}_{i_k} \geq 0. \quad (5.51)$$

Gesucht ist ein Ansatz für die Deformationsgeschwindigkeiten  $\underline{\underline{D}}_{i_k}$ , mit dem das doppelte Punktprodukt in Gleichung (5.51) immer positiv ist. Gleichung (5.52)

$$\underline{\underline{D}}_{i_k} = \frac{G_k}{2} \frac{\dot{z}(\vartheta)}{\eta_k} \underline{\underline{C}}'_{e_k} \quad (5.52)$$

liefert solch einen Ansatz. Durch die Verwendung des Deviators ergibt sich nach Gleichungen (2.32) automatisch eine Evolutionsgleichung für eine inkompressible Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_i$ . Mit den Variablen  $\eta_k$  werden Viskositäten als weitere Materialparameter eingeführt. Der Faktor 1/2 in Gleichung (5.52) erlaubt eine Analogie zur linearen Theorie der Viskoelastizität bei kleinen Deformationen. Die Erweiterung um eine prozessabhängige Größe  $\dot{z}$  ändert nichts an der Erfüllung der Ungleichung (5.51), solange  $\dot{z} \geq 0$  gilt. Sie erlaubt jedoch die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit des Relaxationsspektrums. Auf der Konfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$  lautet die Evolutionsgleichung

$$\begin{aligned} \dot{\underline{\underline{C}}}_{i_k} &= \frac{G_k}{\eta_k} \dot{z} \underline{\underline{C}}_{i_k} \cdot (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' , \\ &= \frac{G_k}{\eta_k} \dot{z} (\underline{\underline{C}}_m \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1})' \cdot \underline{\underline{C}}_{i_k} \end{aligned} \quad (5.53)$$

und stellt eine nichtlineare Differentialgleichung zur Bestimmung der inneren Deformationen  $\underline{\underline{C}}_{i_k}$  dar. Deren Lösungen ergeben sich beispielsweise unter Anwendung von iterativen Zeitintegrationsverfahren wie dem Euler-Rückwärts-Verfahren. Die Arbeit von Shutov et al. (2013) bietet jedoch eine explizite Lösung für Gleichung (5.53) mit folgender Gleichung an

$$\boxed{{}^{t+\Delta t}\underline{\underline{C}}_{i_k} = {}^t\underline{\underline{C}}_{i_k} + \Delta t \frac{G_k({}^{t+\Delta t}\vartheta)}{\eta_k} \dot{z}({}^{t+\Delta t}\vartheta) {}^{t+\Delta t}\underline{\underline{C}}_m.} \quad (5.54)$$

Darin werden einmalig alle Abhängigkeiten von der Temperatur sowie die Bezüge zu den jeweiligen Zeitpunkten dargestellt. Im Folgenden beziehen sich, sofern nicht anders erwähnt, alle Größen ohne Index auf den aktuellen Zeitschritt  $t + \Delta t$ . Mit Ansatz (5.52) steht ein Zugang zur Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_d$  zur Verfügung

$$\boxed{\tilde{\mathcal{D}}_d = \langle \tilde{\mathcal{D}}_d^p \rangle \quad \text{mit:} \quad \tilde{\mathcal{D}}_d^p = \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k^2}{2} \frac{\dot{z}}{\eta_k} (\underline{\underline{C}}_{e_k} \cdot \underline{\underline{C}}'_{e_k}),} \quad (5.55)$$

$$= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{G_k^2}{2} \frac{\dot{z}}{\eta_k} (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)'$$

### Ansatz der Wärmeleitung

Als letzter Term der Gleichung (5.46) verbleibt die Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_Q = \langle \tilde{\mathcal{D}}_Q^p \rangle$  deren Forderung nach Nichtnegativität (vgl. Gleichung (2.54)) einen Ansatz für den Wärmestrom  $\tilde{\underline{q}}$  liefert. Einen solchen Ansatz bietet das Fourier-Model

$$\tilde{\underline{q}} = \langle \tilde{\underline{q}}^p \rangle \quad \text{mit:} \quad \tilde{\underline{q}}^p = -\tilde{\underline{\lambda}}^p \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta). \quad (5.56)$$

Darin stellt  $\tilde{\underline{\lambda}}^p$  den Tensor der Wärmeleitung in der Referenzkonfiguration dar (vgl. Holzapfel (2010)) und steht über die Gleichung

$$\tilde{\underline{\lambda}}^p = J_3 \underline{\underline{F}}^{-1} \cdot \underline{\underline{\lambda}}^p \cdot \underline{\underline{F}}^{-T} \quad (5.57)$$

im Zusammenhang mit dem Wärmeleitungstensor  $\underline{\underline{\lambda}}^p$  der Momentankonfiguration. Einen physikalisch plausiblen Ansatz für  $\underline{\underline{\lambda}}^p$  bietet die Gleichung

$$\underline{\underline{\lambda}}^p = \lambda_{\parallel} \underline{\underline{P}} + \lambda_{\perp} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{P}}) \quad \text{mit:} \quad \underline{\underline{P}} = I_4^{-1} \underline{\underline{F}} \cdot \tilde{\underline{\underline{P}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T. \quad (5.58)$$

Deren Übertragung in die Referenzkonfiguration nach Gleichung (5.57) führt auf

$$\tilde{\underline{\underline{\lambda}}}^p = J_3 [\lambda_{\parallel} I_4^{-1} \tilde{\underline{\underline{P}}} + \lambda_{\perp} (\underline{\underline{C}}^{-1} - I_4^{-1} \tilde{\underline{\underline{P}}})]. \quad (5.59)$$

Der Tensor der Wärmeleitung  $\tilde{\underline{\underline{\lambda}}}^p$  setzt sich also aus einem der Richtung  $\tilde{\underline{p}}$  zugeordneten Anteil mit dem Materialparameter  $\lambda_{\parallel}$  und einem der dazu transversalen Ebene zugeordneten Anteil mit dem Materialparameter  $\lambda_{\perp}$  zusammen und ist symmetrisch, positiv definit. Damit lässt sich nunmehr die mittlere thermische Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_Q$  bestimmen

$$\tilde{\mathcal{D}}_Q = \left\langle -\frac{1}{\vartheta} \tilde{\underline{q}}^p \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{\vartheta} \tilde{\underline{\underline{\lambda}}}^p \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \right\rangle = \langle \tilde{\underline{\underline{\lambda}}}^p \rangle \cdot \frac{1}{\vartheta} \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \cdot \tilde{\underline{\nabla}}(\vartheta) \geq 0. \quad (5.60)$$

Da die Temperatur ebenso wie die Gesamtdeformation für alle Richtungen  $\tilde{\underline{p}}$  nach dem Ansatz von Lanir (1983) gleich ist, lässt sich die Mittelung auf den Tensor der Wärmeleitung beschränken und erlaubt die Identifikation des mittleren Wärmeleitungstensors  $\tilde{\underline{\underline{\lambda}}}$

$$\tilde{\underline{\underline{\lambda}}} = \langle \tilde{\underline{\underline{\lambda}}}^p \rangle = J_3 [\lambda_{\parallel} \langle I_4^{-1} \tilde{\underline{\underline{P}}} \rangle + \lambda_{\perp} (\underline{\underline{C}}^{-1} - \langle I_4^{-1} \tilde{\underline{\underline{P}}} \rangle)]. \quad (5.61)$$

Die Übertragung von  $\tilde{\underline{\underline{\lambda}}}$  in die Momentankonfiguration entsprechend Gleichung (5.57)

$$\underline{\underline{\lambda}} = \lambda_{\parallel} \underline{\underline{A}} + \lambda_{\perp} (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{A}}) \quad (5.62)$$

lässt den linearen Charakter der Wärmeleitung bezüglich des zweiten Momentes der FDF erkennen. Die Linearität dieser Beziehung erlaubt nicht nur schnelle und direkte Lösungen der zu Grunde liegenden Gleichungen, sondern sie spiegelt die Erkenntnisse aus Abschnitt 4.5 wider.

### 5.3.3 Auswertung der Energiebilanz

Mit Hilfe der Bestimmungsgleichungen der Entropiedichte (5.49) sowie der Identität (5.47) lässt sich der 1. Hauptsatz der Thermodynamik (2.55) auswerten

$$\vartheta \tilde{\varrho} \dot{s} = - \langle \tilde{\nabla} \cdot \tilde{q}^p \rangle + \tilde{\mathcal{D}}_d. \quad (5.63)$$

Dabei wurde  $\tilde{\varrho} r = 0$  gesetzt, weil von keinen zusätzlichen Wärmequellen im Material ausgegangen wird. Unter Berücksichtigung der Gleichungen (5.56) und (5.61) wird der Mittelungsoperator ausgewertet und es verbleibt

$$\vartheta \tilde{\varrho} \dot{s} = \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\nabla}(\vartheta) \cdot \tilde{\lambda}) + \tilde{\mathcal{D}}_d. \quad (5.64)$$

Mit der Aufteilung (5.49)<sub>1</sub> der Entropiedichte in einen mechanischen und einen thermischen Anteil folgt

$$\vartheta \tilde{\varrho} \dot{s}_\vartheta = \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\nabla}(\vartheta) \cdot \tilde{\lambda}) + \tilde{\mathcal{D}}_d - \vartheta \tilde{\varrho} \dot{s}_m. \quad (5.65)$$

Die Einführung des Dissipationsterms  $\tilde{\mathcal{R}}$  sowie der volumenbezogenen Dichte der Wärmekapazität  $C_\vartheta$  (vgl. Haupt (2002)) mündet in der auswertbaren Formulierung des 1. Hauptsatzes der Thermodynamik.

$$\begin{aligned} C_\vartheta \dot{\vartheta} &= \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\nabla}(\vartheta) \cdot \tilde{\lambda}) + \tilde{\mathcal{R}} \\ \text{mit: } \tilde{\mathcal{R}} &= \tilde{\mathcal{D}}_d - \vartheta \tilde{\varrho} \dot{s}_m \quad ; \quad C_\vartheta = -\vartheta \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_\vartheta}{\partial \vartheta^2} = \vartheta \frac{\partial \tilde{\varrho} s_\vartheta}{\partial \vartheta} = \tilde{\varrho} c_\vartheta \end{aligned} \quad (5.66)$$

Die spezifische Wärmekapazität  $c_\vartheta$  ist hierbei nicht als konstanter Materialparameter, sondern als temperaturabhängige Funktion zu verstehen. Der Term  $\tilde{\mathcal{R}}$  erfordert die Bestimmung der zeitlichen Rate von  $\tilde{\varrho} s_m$ , welche über eine Zeitdiskretisierung mit dem Euler-Rückwärts-Verfahren zur Verfügung steht

$$\tilde{\mathcal{R}} = \tilde{\mathcal{D}}_d - \vartheta \tilde{\varrho} \dot{s}_m = {}^{t+\Delta t} \tilde{\mathcal{D}}_d - {}^{t+\Delta t} \vartheta \frac{\tilde{\varrho} {}^{t+\Delta t} s_m - \tilde{\varrho} {}^t s_m}{\Delta t}. \quad (5.67)$$

Dieser Zugang besitzt den Vorteil, dass lediglich eine skalare Größe ( $\tilde{\varrho} {}^t s_m$ ), die ohnehin berechnet wird, als Statusvariable gespeichert werden muss. Alternativ könnte die Rate der Entropiedichte über die zeitliche Ableitung der Gleichungen (5.49)<sub>2</sub> gewonnen werden. Dies würde allerdings unter anderem zu Termen mit der zeitlichen Ableitung  $\dot{\underline{\underline{C}}}_m$  führen. Deren Zeitdiskretisierung greift auf tensorielle Statusvariablen zurück. Außerdem müssten weitere Gleichungen für die Vorfaktoren der zeitlichen Raten ausgewertet werden.

### 5.3.4 Bestimmung der Materialtangente

Mit Blick auf die Einbindung des Materialmodells in FEM-Umgebungen sollen in diesem Unterabschnitt einige Materialtangente zur Verfügung gestellt werden. Dabei werden vor allem die Ableitungen der Spannung  $\tilde{\underline{\underline{T}}}$  sowie des Dissipationsterms  $\tilde{\mathcal{R}}$  nach der Deformation  $\underline{\underline{C}}$  und der Temperatur  $\vartheta$  betrachtet.

### Ableitung der Spannung nach der Deformation

Der zweite Piola-Kirchhoff-Spannungstensor ergibt sich nach Gleichung (5.48) als Funktion der thermischen Deformation  $\underline{\underline{F}}_\vartheta$  sowie der Deformation  $\underline{\underline{C}}_m$ . Da nur letztere von der Gesamtdeformation  $\underline{\underline{C}}$  abhängt, folgt zunächst der allgemeine Zugang zur Ableitung der Spannung nach der Deformation mit

$$\frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}}}{\partial \underline{\underline{C}}} = \left\langle \frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}^p}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle \quad (5.68)$$

und

$$\frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}^p}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} = (\underline{\underline{F}}_\vartheta^{-1} \circ \underline{\underline{F}}_\vartheta^{-T})^{T_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}^p}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \quad ; \quad \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} = (\underline{\underline{F}}_\vartheta^{-T} \circ \underline{\underline{F}}_\vartheta^{-1})^{T_{24}}. \quad (5.69)$$

Die darin benötigten partiellen Ableitungen werden in den Gleichungen (5.70) zusammengefasst.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}}}{\partial \underline{\underline{C}}} &= \left\langle (\underline{\underline{F}}_\vartheta^{-1} \circ \underline{\underline{F}}_\vartheta^{-T})^{T_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}^p}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot (\underline{\underline{F}}_\vartheta^{-T} \circ \underline{\underline{F}}_\vartheta^{-1})^{T_{24}} \right\rangle \\ \frac{\partial \underline{\underline{\hat{T}}^p}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= 2f_{Ph} \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_{me}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} + 2 \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_m^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} + 2 \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_e^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} \\ \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_{me}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} &= -\frac{G}{6} J_{3m}^{-2/3} \left\{ [(\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1}] \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1} + \underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \right. \\ &\quad \left. - (\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)(\underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1})^{S_{24}} \right\} + \frac{E_F}{4} I_{4ms}^{-2} \tilde{P} \circ \tilde{P} \\ \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_m^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} &= \frac{K}{2} \left\{ \frac{1}{2} J_{3m} (2J_{3m} - 1) \underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1} - (J_{3m}^2 - J_{3m}) (\underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1})^{S_{24}} \right\} \\ \frac{\partial^2 \tilde{\varrho} \psi_e^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m^2} &= \frac{J_{3m}^{-2/3}}{2} \sum_{k=1}^{N_{MW}} G_k \left[ \frac{1}{3} \left\{ (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)(\underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1})^{S_{24}} - \underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - [(\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1}] \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1} \right\} + \left\{ \frac{S}{J} - \frac{1}{3} \underline{\underline{C}}_m^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m \right\} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right] \end{aligned} \quad (5.70)$$

mit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= -(\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1})^{S_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \\ \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= \det^{-1/3}(\underline{\underline{X}}) \left[ \frac{S}{J} - \frac{1}{3} \underline{\underline{X}} \circ \underline{\underline{X}}^{-1} \right] \cdot \Delta t \frac{G_k}{\eta_k} \dot{z} J_{3m}^{-2/3} \left[ \frac{S}{J} - \frac{1}{3} \underline{\underline{C}}_m \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1} \right] \\ \underline{\underline{X}} &= {}^t \underline{\underline{C}}_{i_k} + \Delta t \frac{G_k}{\eta_k} \dot{z} \underline{\underline{C}}_m \end{aligned}$$

### Ableitung der Spannung nach der Temperatur

Für die Ableitung der Spannung nach der Temperatur müssen sowohl die Abhängigkeit von  $\underline{C}_m$  als auch die Abhängigkeit von  $\underline{F}_\vartheta$  von der Temperatur Berücksichtigung finden. Zusätzlich weisen die Glättungsfunktion  $f_{Ph}$ , die Materialparameter sowie die inneren Deformationen  $\underline{C}_{i_k}$  Abhängigkeiten von der Temperatur auf. Gleichungen (5.71) fassen die benötigten Beziehungen zusammen und verweisen auf bereits bekannte Gleichungen.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \underline{\hat{T}}}{\partial \vartheta} &= \left\langle \frac{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1} \cdot \underline{\hat{T}}^p \cdot \underline{F}_\vartheta^{-T}}{\partial \vartheta} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1}} \cdot \frac{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1}}{\partial \vartheta} + (\underline{F}_\vartheta^{-1} \circ \underline{F}_\vartheta^{-T})^{T_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta} \right\rangle \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1}} &= \left( \underline{I} \circ \underline{\hat{T}}^p \cdot \underline{F}_\vartheta^{-T} \right)^{T_{24}} + \left( \underline{F}_\vartheta^{-1} \cdot \underline{\hat{T}}^p \circ \underline{I} \right)^{T_{24}} \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta} &= \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_1} + \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_2} + \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_3} + \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_4} \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_1} &= f_{Ph} \left[ \frac{\partial G}{\partial \vartheta} (\underline{C}_{ms}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} + \frac{1}{2} \frac{\partial E_F}{\partial \vartheta} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \underline{\tilde{P}} \right] \\
&\quad + \frac{\partial K}{\partial \vartheta} J_{3m} (J_{3m} - 1) \underline{C}_m^{-1} + \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{\partial G_k}{\partial \vartheta} (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_2} &= \frac{\partial f_{Ph}}{\partial \vartheta} \left[ G (\underline{C}_{ms}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} + \frac{E_F}{2} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \underline{\tilde{P}} \right] \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_3} &= \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \underline{C}_m} \cdot \frac{\partial \underline{C}_m}{\partial \vartheta} \\
\frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \vartheta_4} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \left\{ G_k J_{3m}^{-2/3} \left[ \underline{J} - \frac{1}{3} \underline{C}_m^{-1} \circ \underline{C}_m \right] \cdot \frac{\partial \underline{C}_{i_k}^{-1}}{\partial \vartheta} \right\} \\
\text{mit:} & \\
\frac{\partial \underline{C}_m}{\partial \vartheta} &= \left[ (\underline{I} \circ \underline{C}_m \cdot \underline{F}_\vartheta^{-1})^{T_{24}} + (\underline{F}_\vartheta^{-T} \cdot \underline{C}_m \circ \underline{I})^{T_{24}} \right] \cdot \frac{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1}}{\partial \vartheta} \\
\frac{\partial \underline{C}_{i_k}^{-1}}{\partial \vartheta} &= -(\underline{C}_{i_k}^{-1} \circ \underline{C}_{i_k}^{-1})^{S_{24}} \cdot \det^{-1/3}(\underline{X}) \left[ \underline{J} - \frac{1}{3} \underline{X} \circ \underline{X}^{-1} \right] \\
&\quad \cdot \frac{\Delta t}{\eta_k} \underline{C}_m \left[ \frac{\partial G_k}{\partial \vartheta} \dot{z} + G_k \frac{\partial \dot{z}}{\partial \vartheta} \right] \\
\frac{\partial \underline{F}_\vartheta^{-1}}{\partial \vartheta} &\rightarrow (5.22) \quad \frac{\partial \underline{\hat{T}}^p}{\partial \underline{C}_m}, \underline{X} \rightarrow (5.70)
\end{aligned} \tag{5.71}$$

### Ableitung der Dissipation nach der Deformation

Für die Ableitung der Dissipation  $\tilde{\mathcal{R}}$  nach der Deformation  $\underline{C}$  werden die Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_d$  der viskosen Anteile sowie das Produkt aus Temperatur und Rate der Entropiedichte  $\vartheta \tilde{q} \dot{s}_m$  getrennt betrachtet. Erstere weist über die Deformationen  $\underline{C}_m$  und  $\underline{C}_{i_k}$  Abhängigkeiten

von der Gesamtdeformation  $\underline{\underline{C}}$  auf. Ähnlich verhält es sich mit der Rate der Entropiedichte, wobei hier die Anwendung des Euler-Rückwärts-Verfahrens (s. (5.67)) lediglich eine Berücksichtigung der Entropiedichte  $\tilde{\varrho}^{t+\Delta t} s_m$  des aktuellen Zeitpunktes erfordert. Gleichungen (5.72) fassen die Formeln zur Bestimmung der Ableitung  $\partial \tilde{\mathcal{R}} / \partial \underline{\underline{C}}$  zusammen.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}}{\partial \underline{\underline{C}}} &= \frac{\partial \tilde{\mathcal{D}}_d}{\partial \underline{\underline{C}}} - \vartheta \frac{\partial \tilde{\varrho} \dot{s}}{\partial \underline{\underline{C}}} \\
\frac{\partial \tilde{\mathcal{D}}_d}{\partial \underline{\underline{C}}} &= \left\langle \frac{\partial \tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle \\
\frac{\partial \tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} G_k^2 \frac{\dot{z}}{\eta_k} (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \frac{\partial (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)'}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} \dot{s}}{\partial \underline{\underline{C}}} &= \left\langle \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \tilde{\varrho}^{t+\Delta t} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle = \frac{1}{\Delta t} \left\langle \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} \right\rangle \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_1}} - \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_2}} - \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_3}} - f_{Ph} \left[ \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_4}} + \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_5}} \right] \\
&\quad - \frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_6}} \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_1}} &= \underline{\underline{L}}_{\vartheta} \cdot \left[ \left( \underline{\underline{T}}^p \circ \underline{\underline{I}} \right)^{S_{24}} + \left( \underline{\underline{I}} \circ \underline{\underline{C}}_m \right)^{S_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{T}}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right] \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_2}} &= \frac{\partial f_{Ph}}{\partial \vartheta} \left[ \frac{G}{2} (\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1} + \frac{E_F}{4} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \tilde{P} \right] \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_3}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial K}{\partial \vartheta} J_{3m} (J_{3m} - 1) \underline{\underline{C}}_m^{-1} \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_4}} &= \frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial \vartheta} (\underline{\underline{C}}_{ms}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1} \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_5}} &= \frac{1}{4} \frac{\partial E_F}{\partial \vartheta} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \tilde{P} \\
\frac{\partial \tilde{\varrho} s^p}{\partial \underline{\underline{C}}_{m_6}} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{1}{2} \frac{\partial G_k}{\partial \vartheta} \left[ (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)' \cdot \underline{\underline{C}}_m^{-1} + \underline{\underline{C}}_m \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right] \\
\text{mit:} & \\
\frac{\partial (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{\underline{C}}_m)'}{\partial \underline{\underline{C}}_m} &= J_{3m}^{-2/3} \left[ (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \circ \underline{\underline{I}})^{T_{24}} - \frac{1}{3} (\underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} \circ \underline{\underline{C}}_m)' \circ \underline{\underline{C}}_m^{-1} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3} \underline{\underline{I}} \circ \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1} - \frac{1}{3} \underline{\underline{I}} \circ \underline{\underline{C}}_m + (\underline{\underline{I}} \circ \underline{\underline{C}}_m)^{T_{24}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m} \right] \\
&\quad \frac{\partial \underline{\underline{C}}_{i_k}^{-1}}{\partial \underline{\underline{C}}_m}, \frac{\partial \underline{\underline{T}}^p}{\partial \underline{\underline{C}}_m}, \frac{\partial \underline{\underline{C}}_m}{\partial \underline{\underline{C}}} \rightarrow (5.70)
\end{aligned} \tag{5.72}$$

### Ableitung der Dissipation nach der Temperatur

Gleichungen (5.73) fassen die Formeln für die Ableitung  $\partial\tilde{\mathcal{R}}/\partial\vartheta$  zusammen.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\tilde{\mathcal{R}}}{\partial\vartheta} &= \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d}{\partial\vartheta} - \tilde{\varrho}\dot{s} - \vartheta\frac{\partial\tilde{\varrho}\dot{s}}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d}{\partial\vartheta} &= \left\langle \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_1} + \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_2} + \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_3} \right\rangle \\
\frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_1} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \frac{1}{2\eta_k} (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \left[ 2G_k \frac{\partial G_k}{\partial\vartheta} \dot{z} + G_k^2 \frac{\partial \dot{z}}{\partial\vartheta} \right] \\
\frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_2} &= \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\underline{C}_m} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\vartheta_3} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} G_k^2 \frac{\dot{z}}{\eta_k} (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{J} \cdot (\underline{I} \circ \underline{C}_m)^{S_{24}} \cdot \frac{\partial\underline{C}_{i_k}^{-1}}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}\dot{s}}{\partial\vartheta} &= \frac{1}{\Delta t} \left\langle \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_1} - \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_2} - \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_3} - f_{Ph} \left[ \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_4} + \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_5} \right] - \frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_6} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial f_{Ph}}{\partial\vartheta} \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial\vartheta} (\underline{I} \cdot \underline{C}_{me} - 3) + \frac{1}{8} \frac{\partial E_F}{\partial\vartheta} (I_{4me} - 1)^2 \right] \right\rangle \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_1} &= \underline{\bar{L}}_{\vartheta} \cdot \left[ (\underline{I} \circ \underline{C}_m)^{S_{24}} \cdot \frac{\partial\hat{T}^p}{\partial\vartheta} + (\hat{T}^p \circ \underline{I})^{S_{24}} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \right] \\
&\quad + \hat{T}^p \cdot \underline{C}_m \cdot \frac{\partial\underline{\bar{L}}_{\vartheta}}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_2} &= \frac{\partial^2 f_{Ph}}{\partial\vartheta^2} \tilde{\varrho}\psi_{me}^p + \frac{\partial f_{Ph}}{\partial\vartheta} \left[ \frac{\partial\tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial\vartheta} + \frac{\partial\tilde{\varrho}\psi_{me}^p}{\partial\underline{C}_m} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \right] \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_3} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 K}{\partial\vartheta^2} (J_{3m} - 1)^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial K}{\partial\vartheta} J_{3m} (J_{3m} - 1) \underline{C}_m^{-1} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_4} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial\vartheta^2} (\underline{I} \cdot \underline{C}_{me} - 3) + \frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial\vartheta} (\underline{C}_{ms}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_5} &= \frac{1}{8} \frac{\partial^2 E_F}{\partial\vartheta^2} (I_{4me} - 1)^2 + \frac{1}{4} \frac{\partial E_F}{\partial\vartheta} (I_{4me} - 1) I_{4ms}^{-1} \tilde{P} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \\
\frac{\partial\tilde{\varrho}s^p}{\partial\vartheta_6} &= \sum_{k=1}^{N_{MW}} \left[ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G_k}{\partial\vartheta^2} (\underline{I} \cdot \underline{C}_{e_k} - 3) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial G_k}{\partial\vartheta} \left( (\underline{C}_{i_k}^{-1} \cdot \underline{C}_m)' \cdot \underline{C}_m^{-1} \cdot \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} + \underline{C}_m \cdot \frac{\partial\underline{C}_{i_k}^{-1}}{\partial\vartheta} \right) \right] \\
\frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\underline{C}} &\rightarrow (5.70) \quad \frac{\partial\underline{C}_{i_k}^{-1}}{\partial\vartheta}, \frac{\partial\underline{C}_m}{\partial\vartheta} \rightarrow (5.71) \quad \frac{\partial\tilde{\mathcal{D}}_d^p}{\partial\underline{C}_m} \rightarrow (5.72) \\
\frac{\partial\underline{\bar{L}}_{\vartheta}}{\partial\vartheta} &\rightarrow (5.23)
\end{aligned} \tag{5.73}$$



Die noch unbekannte zweite Ableitung der Glättungsfunktion  $f_{Ph}$  nach der Temperatur folgt mit

$$\frac{\partial^2 f_{Ph}}{\partial \vartheta^2} = \begin{cases} 0, & \vartheta \leq \vartheta_{S0} \\ (-60\xi_f + 180\xi_f^2 - 120\xi_f^3) \frac{1}{(\vartheta_{S1} - \vartheta_{S0})^2}, & \vartheta_{S0} < \vartheta < \vartheta_{S1} \\ 0, & \vartheta_{S1} \leq \vartheta \end{cases} . \quad (5.74)$$

### 5.3.5 Bestandteile des Materialmodells

Dieser Unterabschnitt dient der Darstellung der wichtigsten Bestandteile des Materialmodells und schafft einen Überblick über die noch zu definierenden Funktionen. Tabelle 5.1 gibt eine Übersicht der verwendeten Materialparameter. Diese sind in Einzelparameter und Funktionen unterteilt. Die Funktionen greifen bei ihren Argumenten sowohl auf die Temperatur als auch auf weitere Materialparameter zurück. Die konkrete Form der Funktionen wird erst bei der Parameteridentifikation festgelegt, weswegen die Darstellung der Argumente in Tabelle 5.1 nur als Skizze zu verstehen ist. In der dritten Spalte der Tabelle finden sich die Gleichungen oder Abschnitte, in denen die Materialparameter erstmals eingeführt werden.

Tabelle 5.1: Übersicht der Materialparameter.

| Bezeichnung                     | Formelzeichen   | Einführung        |
|---------------------------------|---|-------------------|
| <i>Funktionen</i>               |   |                   |
| Schubmodul                      | $G = G(G_1, G_2, \dots, \vartheta)$   | Gl. (5.31)        |
| E-Modul Faser                   | $E_F = E_F(E_{F_1}, E_{F_2}, \dots, \vartheta)$                                 | Gl. (5.31)        |
| Kompressionsmodul               | $K = K(K_1, K_2, \dots, \vartheta)$   | Gl. (5.36)        |
| Schubmodul Maxwell-Element      | $G_k = G_k(G_{k_1}, G_{k_2}, \dots, \vartheta)$                                 | Gl. (5.37)        |
| intrinsische Zeit               | $\dot{z} = \dot{z}(\dot{z}_1, \dot{z}_2, \dots, \vartheta)$                     | Gl. (5.52)        |
| spezifische Wärmekapazität      | $c_\vartheta = c_\vartheta(c_{\vartheta_1}, c_{\vartheta_2}, \dots, \vartheta)$ | Gl. (5.66)        |
| therm. Ausdehnungsfunktionen    | $\varphi_{\parallel}, \varphi_{\perp}$  | Gl. (5.19)        |
| <i>Einzelparameter</i>          |   |                   |
| Viskosität                      | $\eta_k$  | Gl. (5.52)        |
| Anzahl Maxwell-Elemente         | $N_{MW}$  | Gl. (5.37)        |
| Anzahl Integrationsstellen      | $N_{IP}$  | Gl. (5.8)         |
| Referenz- und Schmelztemperatur | $\tilde{\vartheta}, \vartheta_S$  | Abs. 5.2.3, 5.2.3 |
| Grenztemperaturen               | $\vartheta_{S0}, \vartheta_{S1}$  | Gl. (5.30)        |
| therm. Ausdehnungskoeffizienten | $\alpha_{\parallel}, \alpha_{\perp}$  | Gl. (5.14)        |
| Wärmeleitfähigkeiten            | $\lambda_{\parallel}, \lambda_{\perp}$  | Gl. (5.58)        |

Tabelle 5.2 listet die Statusvariablen des Materialmodells und deren erstmalige Erwähnung auf. Während die Ausdehnungsfunktionen  $\varphi_{0\parallel}, \varphi_{0\perp}$  sowie die Zustandsvariable  $\mathcal{S}_{Ph}$  der

Phase nur drei Statusvariablen ausmachen, werden die restlichen Statusvariablen im Zuge der Orientierungsmittelung (5.8) für jede der  $N_{IP}$  Integrationsstellen benötigt. Die inelastische Deformation  ${}^t\underline{\underline{C}}_{i_k}$  wird zusätzlich für  $N_{MW}$  verschiedene Maxwell-Elemente hinterlegt.

Tabelle 5.2: Übersicht der Statusvariablen.

| Bezeichnung                         | Formelzeichen                                       | Einführung         |
|-------------------------------------|---|--------------------|
| Ausdehnungsfunktionen               | $\varphi_{0\parallel}, \varphi_{0\perp}$            | Gl. (5.17)         |
| Zustand der Phase                   | $\mathcal{S}_{Ph}$                                  | Abs. 5.2.4         |
| Deformation bei Phasenübergang      | $\underline{\underline{C}}_{ms}$                    | Gl. (5.33)         |
| alte inelastische Deformation       | ${}^t\underline{\underline{C}}_{i_k} \times N_{MW}$ | Gl. (5.54)         |
| alte Entropiedichte                 | ${}^t\tilde{q}^s$                                   | Gl. (5.67)         |
| transformierte Richtungen, Gewichte | $\tilde{a}_i, w_i$                                  | Gln. (2.83), (5.8) |

Unter Zuhilfenahme der Materialparameter in Tabelle 5.1 und der Statusvariablen in Tabelle 5.2 liefert das Materialmodell folgende Größen

- zweite Piola-Kirchhoff-Spannung  $\tilde{\underline{\underline{T}}}$  (Gl. (5.48))
- Entropiedichte  $\tilde{q}^s$  (Gl. (5.49))
- innere Deformation  ${}^{t+\Delta t}\underline{\underline{C}}_{i_k}$  zum aktuellen Zeitpunkt (Gl. (5.54))
- Dissipationsanteil  $\tilde{\mathcal{D}}_d$  der Maxwell-Elemente (Gl. (5.55))
- Wärmestrom  $\tilde{q}$  (Gl. (5.56))
- Wärmeleitungstensor  $\tilde{\underline{\underline{\lambda}}}$  (Gl. (5.61))

## 5.4 Eigenschaften des Materialmodells

Ziel dieses Abschnittes soll es sein, ausgewählte Aspekte des Materialmodells näher zu beleuchten und das Verhalten bei großen Deformationen zu veranschaulichen. Dazu wird ein einzelner Materialpunkt mit den Eigenschaften des Materialmodells betrachtet und dessen Verhalten bei verschiedenen Randbedingungen untersucht. Die Materialparameter (vgl. Tabelle 5.1) werden so gewählt, dass bestimmte Aspekte des Stoffgesetzes gezielt angesprochen werden. Die Gleichungen des Materialmodells werden zwar in der Lagrange'schen Betrachtungsweise ausgewertet, im Sinne einer physikalischen Interpretierbarkeit erfolgt aber beispielsweise eine Überführung der Spannungen in die Momentankonfiguration.

### 5.4.1 Zug bei Referenztemperatur

In einem ersten Versuch wird die Temperatur konstant bei Referenztemperatur gehalten ( $\vartheta = \tilde{\vartheta}$ ) und folgende Deformations- und Spannungsrandbedingungen vorgegeben

$$\begin{bmatrix} T_{11} = 0 & F_{12} = 0 & F_{13} = 0 \\ F_{21} = 0 & T_{22} = 0 & F_{23} = 0 \\ F_{31} = 0 & T_{23} = 0 & F_{33} = 1.2 \end{bmatrix}. \quad (5.75)$$

Die Randbedingungen entsprechen einem Zug in 3-Richtung, bei dem sich die Querdehnungen und eine Schubdeformation frei einstellen können. Die viskosen Anteile des Stoffgesetzes werden deaktiviert, indem die Schubmoduln  $G_k$  zu Null gesetzt werden. Abbildung 5.3 stellt die Spannungskomponente  $\sigma_{33}$  über dem Faserorientierungsdreieck dar. Für die FOV, bei der alle Fasern in 3-Richtung zeigen, nimmt  $\sigma_{33}$  ihr Maximum ein, während die Spannungswerte hin zu den anderen Ecken des Faserorientierungsdreiecks abnehmen. Der qualitative Verlauf der Spannung lässt wie gewünscht das vierte Moment  $\tilde{\underline{\underline{A}}}$  wiedererkennen.

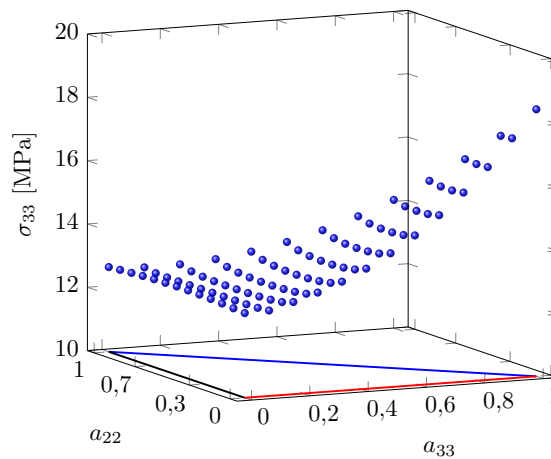


Abbildung 5.3: Zugspannung bei rein elastischem Verhalten für verschiedene Faserorientierungsverteilungen.

### 5.4.2 Spannung bei Erwärmung mit festgehaltener Deformation

In einem zweiten Beispiel wird das Verhalten bei Erwärmung ( $\vartheta \in [\tilde{\vartheta}, 350 \text{ K}]$ ) und festgehaltener Gesamtdeformation  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{I}}$  untersucht. Auch hier gilt  $G_k = 0$ , womit die viskosen Anteile keinen Beitrag leisten. Ein Auftragen der  $\sigma_{33}$ -Spannung über dem Faserorientierungsdreieck in Abbildung 5.4 zeigt einen linearen Verlauf dieser Spannungskomponente über der FOV. Unter Beachtung der Gleichungen (5.15), (5.18) und (5.48) lässt sich die Spannung  $\tilde{\underline{\underline{T}}}$  bei diesem Beispiel in einen allgemeinen Ausdruck der Form  $a\underline{\underline{I}} + b\underline{\underline{\tilde{A}}}$  mit:  $a, b \in \mathbb{R}$  bringen, womit sich die lineare Abhängigkeit der Spannung vom zweiten Moment  $\tilde{\underline{\underline{A}}}$  offenbart.

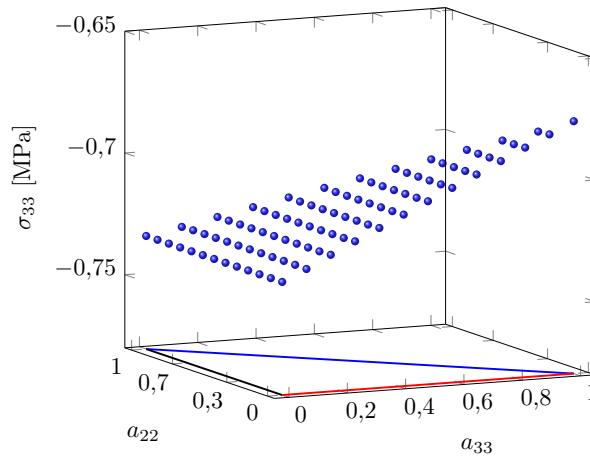


Abbildung 5.4: Spannung bei Erwärmung mit festgehaltener Deformation für verschiedene Faserorientierungsverteilungen.

### 5.4.3 Hysterese bei zyklischer Scherung

Wird der Schubmodul  $G_k$  nicht zu Null gesetzt, weist das Material ratenabhängige Eigenschaften auf. Bei der Vorgabe einer zyklischen, einfachen Scherung  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{I}} + \kappa \underline{\underline{e}}_2 \circ \underline{\underline{e}}_3$ ,  $\kappa \in [-0,5, 0,5]$  zeigt sich beim Auftragen der Spannung über der Deformation in Abbildung 5.5 eine Hysterese.

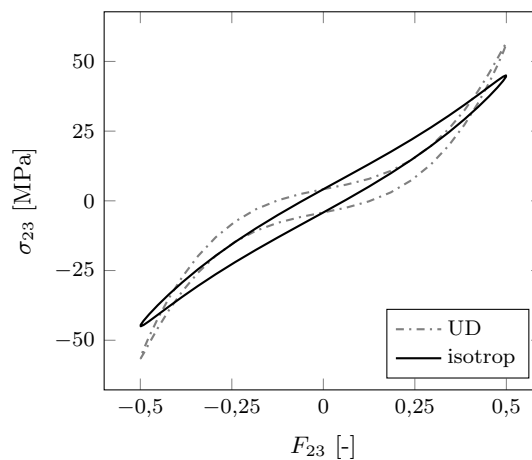


Abbildung 5.5: Hysterese bei zyklischer Scherung für verschiedene Faserorientierungsverteilungen. Dargestellt werden die stationären Kurven.

Der Versuch wurde sowohl für eine unidirektionale FOV, bei der alle Fasern in 3-Richtung zeigen, als auch für eine isotrope FOV durchgeführt. Im Fall der unidirektionalen FOV lassen sich deutlich nichtlineare Effekte auf Grund der Anisotropie beobachten und die Hysterese weicht stark von der elliptischen Form einer Hysterese bei isotropem Material ab. Interessanterweise nimmt auch die Hysterese bei einer isotropen Faserverstärkung nicht die Form einer Ellipse ein. Der Grund dafür ist in der Parallelschaltung der anisotropen Feder zu den Maxwell-Elementen (vgl. Abbildung 5.1) zu finden, weil die geometrischen

Nichtlinearitäten von  $\tilde{\varrho}\psi_{me}$  unabhängig von den viskosen Anteilen zu tragen kommen. Für die Deformation  $F_{23} = 0$  stimmen die Spannungswerte beider FOV überein, weil dort lediglich die Phasenverschiebungen bedingt durch die Viskosität zu beobachten sind. Es sei darauf hingewiesen, dass diese Effekte nur bei sehr großen Deformationen auftreten und bei der Anwendung mit kleinen Deformationen fast nicht zu beobachten sind.

#### 5.4.4 Relaxation mit Phasenübergang

In diesem Versuch soll der Einfluss der Glättungsfunktion  $f_{Ph}$  (s. Gl. (5.30)) sowie der Phasenübergang bei einem Relaxationsversuch zur Geltung kommen. Dazu wird in 0,2s eine einfache Schubdeformation aufgegeben und anschließend bis  $t = 1$  s konstant gehalten. Parallel dazu wird die Temperatur mit zeitlichem Versatz von der Referenztemperatur  $\tilde{\vartheta}$  auf  $\vartheta = 500$  K erhöht und anschließend wieder auf Referenztemperatur abgesenkt. Der Versuch wird einmal für  $\vartheta_{S0} = 380$  K und ein mal für  $\vartheta_{S0} = 350$  K durchgeführt.

Abbildung 5.6 stellt sowohl den Verlauf der Temperatur als auch den Verlauf der Schubspannung  $\sigma_{23}$  über der Zeit dar. In den ersten 0,2s erhöht sich die Schubspannung bis sie ihr Maximum erreicht. Anschließend relaxiert das Material bis die Spannung bei  $t \approx 0,4$ s einen Gleichgewichtszustand erreicht. Übersteigt die Temperatur die Übergangstemperatur 350 K (graue Kurve) bzw. 380 K (schwarze Kurve), sorgt die Übergangsfunktion  $f_{Ph}$  für einen glatten Abfall der Spannung, die von  $\tilde{\varrho}\psi_{me}$  beigesteuert wird, weswegen die Spannung insgesamt auf Null abfällt. Beim anschließenden Unterschreiten der Übergangstemperaturen ändern sich die Spannungen nicht, was auf das Finden einer neuen Referenzkonfiguration für die Teildeformation  $\underline{\underline{F}}_{me}$  schließen lässt.

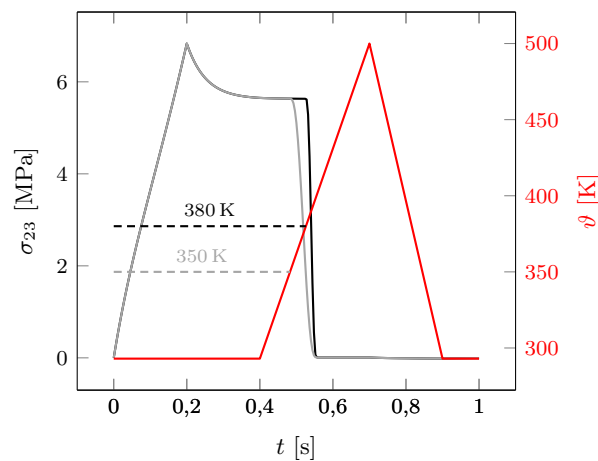


Abbildung 5.6: Relaxation mit Phasenübergang für verschiedene Übergangstemperaturen.

### 5.4.5 Thermomechanische Kopplung bei zyklischer Belastung

Die Energiebilanz (5.66) beschreibt eine Kopplung der Temperatur mit den mechanischen Deformationen. Erfährt ein Materialpunkt eine Deformation, so ändert sich auf Grund dessen die mechanische Entropiedichte  $\tilde{\varrho}s_m$  und beeinflusst damit die Energiebilanz. Weist das Material viskose Eigenschaften auf, wenn die Schubmoduln der Maxwell-Elemente ungleich Null sind, dann fließen zusätzlich Dissipationen  $\tilde{\mathcal{D}}_d$  in die Energiebilanz ein und wirken sich auf die Temperatur aus. Abbildung 5.7 stellt den Verlauf der Temperatur bei

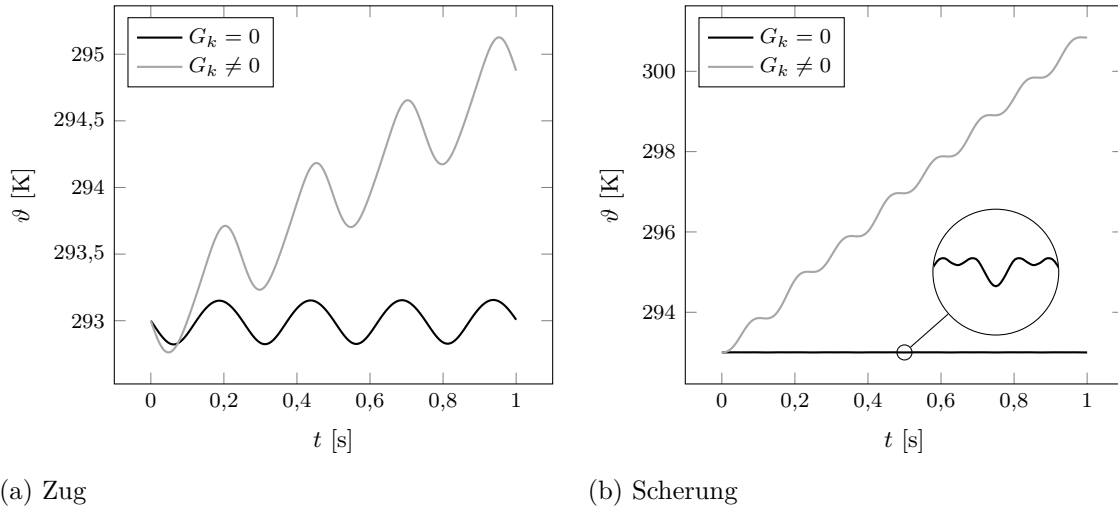


Abbildung 5.7: Thermomechanische Kopplung bei zyklischer Belastung. Die mechanische Beanspruchung führt zu einer Temperaturänderung. Untersucht werden rein elastisches ( $G_k = 0$ ) und viskoelastisches ( $G_k \neq 0$ ) Verhalten.

einem zyklischen Zugversuch mit freier Querkontraktion und einem zyklischen, einfachen Scherversuch dar. Ersterer erlaubt eine Volumenänderung während der Scherversuch isochor abläuft. Beiden Versuchen wird sowohl ein rein elastisches Materialverhalten ( $G_k = 0$ ) als auch ein viskoelastisches Materialverhalten ( $G_k \neq 0$ ) hinterlegt. Die Temperaturantwort des rein elastischen Materials beim Zugversuch entspricht einer harmonischen Kurve über der Zeit. Dieses Verhalten ist auf den thermoelastischen Effekt zurückzuführen, welcher hauptsächlich auf dem Beitrag  $\hat{\underline{T}}^p \cdot \underline{\underline{C}}_m \cdot \bar{\underline{\underline{L}}}_{\vartheta}$  zur Entropiedichte (s. Gl. (5.49)) beruht und vor allem von Volumenänderung geprägt wird. Es sei erwähnt, dass bei diesen Beispielversuchen den Moduln konstante Werte hinterlegt werden. Anderenfalls würden die Ableitungen der Materialparameter nach der Temperatur in die Entropiedichte einfließen und sich ebenfalls auf die Temperatur auswirken. Beim einfachen Scherversuch mit rein elastischem Verhalten lässt sich keine signifikante Temperaturänderung erkennen, was bei der Volumenkonstanz erwartet werden kann. Beim Auflösen des Nahbereichs der Referenztemperatur offenbaren sich jedoch regelmäßige Temperaturschwankungen, welche sich mit den anisotropen Anteilen der Spannung  $\hat{\underline{T}}$  und des Tensors  $\bar{\underline{\underline{L}}}_{\vartheta}$  begründen lassen. Bei den Versuchen mit viskoelastischem Materialverhalten erfährt die Temperatur

neben der harmonischen Schwingung einen kontinuierlichen Anstieg über der Zeit. Die Ursache dafür liegt in der Dissipation  $\tilde{\mathcal{D}}_d$ , welche stets positiv ist und damit nur zu einer Temperaturerhöhung beitragen kann.

### 5.4.6 Temperaturabhängigkeit des Relaxationsspektrums

Abschließend soll der Einfluss der prozessabhängigen Größe  $\dot{z}$  auf das Relaxationsspektrum illustriert werden. Im Zuge dessen wird eine einfache Scherung bei konstanter Temperatur mit Relaxation für verschiedene Werte von  $\dot{z}$  durchgeführt. Da  $\dot{z}$  von der Temperatur abhängt, wird auf diese Weise die Temperaturabhängigkeit der Relaxation untersucht. Abbildung 5.8 stellt die Spannungsverläufe über der Zeit bei verschiedenen Werten für

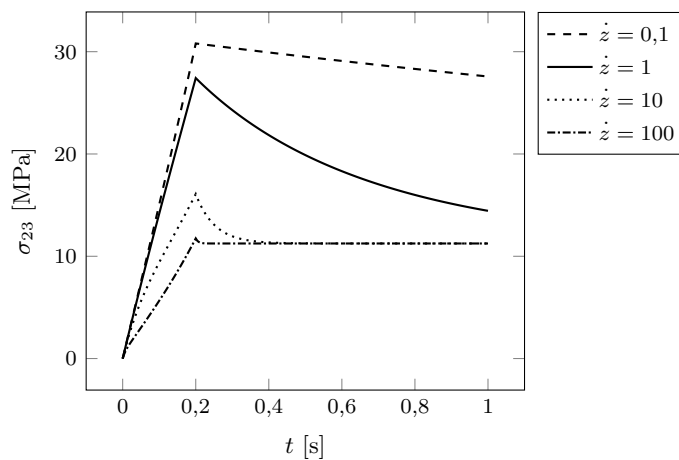


Abbildung 5.8: Temperaturabhängigkeit des Relaxationsspektrums beim Relaxationsversuch.

$\dot{z}$  dar. Das Verhalten bei  $\dot{z} = 1$  beschreibt die unmodifizierte viskoelastische Antwort des Materials. Ein Absenken von  $\dot{z}$  erhöht die Relaxationszeit und lässt das Material zähflüssiger werden. Wird ein unterer Grenzwert von  $\dot{z}$  unterschritten, antwortet das Material nahezu elastisch, weil die Relaxationszeit zu groß für den betrachteten Zeitraum ist. Eine Erhöhung von  $\dot{z}$  führt zu einer Verringerung der Relaxationszeit und lässt das Material flüssiger werden, wodurch es schneller relaxiert. Auch hier ist ein für das Maxwell-Element typischer Grenzwert zu erkennen, ab dem das Material rein elastisch antwortet, weil sich alle viskosen Anteile sofort abbauen. Angewandt bei thermoplastischen Werkstoffen sollte  $\dot{z}$  also mit der Temperatur steigen, weil dann zu erwarten ist, dass sich das Material flüssiger verhält.

## 5.5 Anpassung an synthetische RVE-Daten

Die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells sollen das effektive Verhalten eines kurzfaserverstärkten Thermoplasten abbilden. Zur Überprüfung dieser Zielstellung werden

die Materialparameter  $G, K, E_F$  sowie die Funktionen  $\varphi_{\parallel}, \varphi_{\perp}$  an die in Kapitel 4 gewonnenen synthetischen RVE-Daten angepasst. Dabei soll sich zeigen, wie gut die thermoelastischen Eigenschaften bei verschiedenen Faserorientierungsverteilungen wiedergegeben werden. Auf die Untersuchung der viskosen Eigenschaften wird an dieser Stelle verzichtet, weil sowohl Abbildung 4.6 als auch Abbildung 5.5 aufgezeigt haben, dass die effektiven viskosen Anteile unabhängig von der FOV hinzugefügt werden. Ebenfalls erfolgt keine Anpassung der Wärmeleitung, weil deren linearer Charakter (vgl.: Abschnitt 4.5) von der Gleichung (5.61) bereits erfasst wird.

Die Versuche in Abschnitt 4.2 und Abschnitt 4.3 liefern die effektiven Steifigkeiten  $\underline{\underline{C}}_{\text{RVE},iF}$  und thermischen Streckungen  $\underline{\underline{U}}_{\text{RVE},iF}$  für jede der  $iF \in \{1, \dots, N_{FO}\}$  verschiedenen FOV. Gesucht sind diejenigen Materialparameter  $G, K, E_F$ , bei denen die thermische Deformation des Materialmodells unter einer Temperaturerhöhung von 100 K sowie die Steifigkeit der Referenzkonfiguration (bei Referenztemperatur) mit den Daten der RVE-Rechnungen übereinstimmen. Zusätzlich erfolgt eine Anpassung der Funktionen  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$ . Da lediglich eine einzige Temperaturänderung betrachtet wird, werden keine konkreten Funktionen der Temperatur gesucht, sondern nur die Werte bei  $\Delta\vartheta = 100$  K. Angestrebt werden also die Identitäten

$$\underline{\underline{F}}(\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{0}})_{iF} \equiv \underline{\underline{U}}_{\text{RVE},iF} \quad \wedge \quad 2 \frac{\partial \tilde{\underline{\underline{T}}}}{\partial \underline{\underline{C}}}(\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{I}})_{iF} = \underline{\underline{C}}_{iF} \equiv \underline{\underline{C}}_{\text{RVE},iF}. \quad (5.76)$$

Die thermische Deformation des Materialmodells ergibt sich aus der Forderung einer spannungsfreien Deformation bei Temperaturänderung. Da Spannung und Deformation über Gleichung (5.48) nichtlinear miteinander verknüpft sind, erfordert die Bestimmung der thermischen Deformation bei aktuellem Materialparametersatz ein eigenes Newton-Verfahren. Die Steifigkeit  $\underline{\underline{C}}_{iF}$  des Materialmodells in der Referenzkonfiguration ergibt sich aus der Materialtangente (5.70). Die Forderung (5.76) lässt sich als Minimierungsproblem der Fehlerfunktion  $\mathcal{E}^2$  formulieren

$$\mathcal{E}^2 = \frac{1}{N_{FO}} \sum_{iF=1}^{N_{FO}} \left[ \left\| \underline{\underline{C}}_{iF} - \underline{\underline{C}}_{\text{RVE},iF} \right\|^2 \cdot \left\| \underline{\underline{C}}_{\text{RVE},iF} \right\|^{-2} + \left\| \underline{\underline{F}}_{iF} - \underline{\underline{U}}_{\text{RVE},iF} \right\|^2 \cdot \left\| \underline{\underline{U}}_{\text{RVE},iF} \right\|^{-2} \right]. \quad (5.77)$$

Darin werden die vollen Tensoren der Steifigkeit und thermischen Deformation von RVE und Materialmodell für jede FOV miteinander verglichen und auf ein skalares Maß reduziert. Eine Wichtung der beiden Versuche mit den Normen der RVE-Daten sorgt für eine gleichmäßige Anpassung der Materialparameter an die beiden Versuche.

Zur Berechnung der Materialmodell-Daten werden zunächst  $N_{IP} = 192$  Integrationsstellen herangezogen. Abbildung 5.9 stellt die Ergebnisse der RVE-Versuche (Kugeln) und die Werte des identifizierten Materialmodells (Fläche) beider Versuche gegenüber. Es zeigt sich, dass sowohl die Steifigkeit als auch die thermische Deformation sehr gut abgebildet werden. Der Satz der identifizierten Materialparameter ist Tabelle 5.3 zu entnehmen.



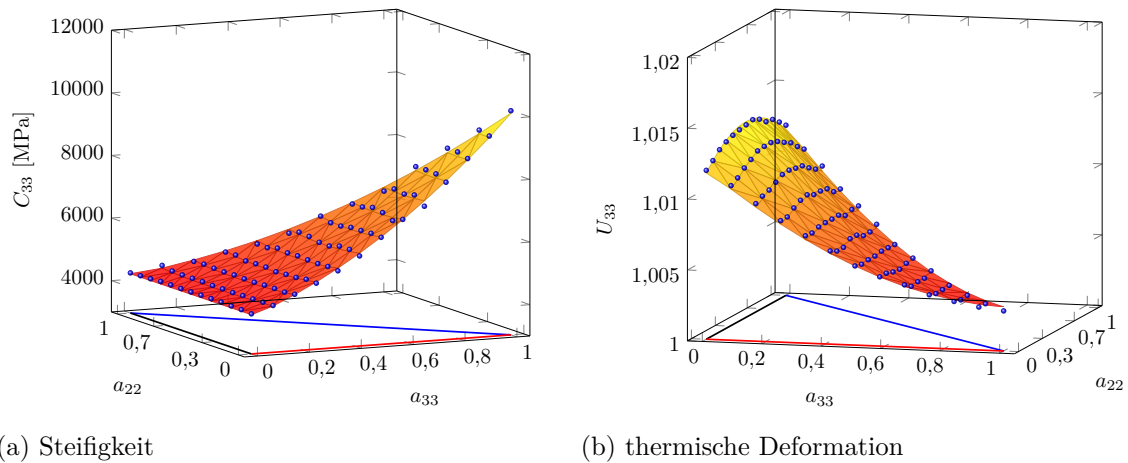


Abbildung 5.9: Vergleich der angepassten Steifigkeit und thermischen Deformation des Materialmodells (Fläche) mit den RVE-Daten (Kugeln).

Tabelle 5.3: Identifizierte Materialparameter bei Anpassung an RVE-Daten.

| $G$ [MPa] | $K$ [MPa] | $E_F$ [MPa] | $\varphi_{\parallel}$ [-] | $\varphi_{\perp}$ [-] |
|-----------|-----------|-------------|---------------------------|-----------------------|
| 935,8     | 3006,6    | 5828,3      | 1,0031                    | 1,0117                |

In weiteren Betrachtungen soll die Zahl  $N_{IP}$  der Integrationsstellen variiert und deren Einfluss auf die Güte der Anpassung untersucht werden. Zu diesem Zweck wird zunächst das Maß

$$\mathcal{E}_{rel} = \sqrt{\mathcal{E}^2} \cdot 100\% \quad (5.78)$$

eingeführt.  $\mathcal{E}_{rel}$  dient als relativer Fehler und kann aus mathematischer Sicht dem quadratischen Mittelwert zugeordnet werden. Des Weiteren wird ein Vergleich mit Identifikationen gezogen, bei denen lediglich die Daten für eine unidirektionale FOV verwendet werden. Bei der Berechnung des relativen Fehlers  $\mathcal{E}_{rel}$  fließen bei diesen Identifikationen jedoch die Daten aller FOV ein. Abbildung 5.10 zeichnet den Verlauf des relativen Fehlers über der Anzahl der Integrationsstellen für beide Methoden. Es ist deutlich zu erkennen, dass der relative Fehler mit steigender Zahl der Stützstellen abfällt und sich schnell einem Grenzwert annähert. Bereits bei  $N_{IP} = 32$  ändert sich der relative Fehler nicht mehr signifikant, weswegen für dieses Beispiel eine weitere Erhöhung der Stützstellenzahl lediglich die Rechenzeit erhöht. Nach einer vollständigen Anpassung mit allen FOV liegt ein relativer Fehler  $\mathcal{E}_{rel} = 1,831\%$  vor, d.h., Materialmodell und RVE-Daten stimmen nicht komplett überein. Kleine Abweichungen sind aber auch zu erwarten, weil einerseits das RVE vielleicht noch nicht hinreichend fein vernetzt wird und somit eventuell nicht an das konvergierte Verhalten angepasst wird. Und andererseits stellt das Stoffgesetz nur ein Modell dar, welches auf Annahmen beruht, die wie bei jedem Modell von der Realität leicht

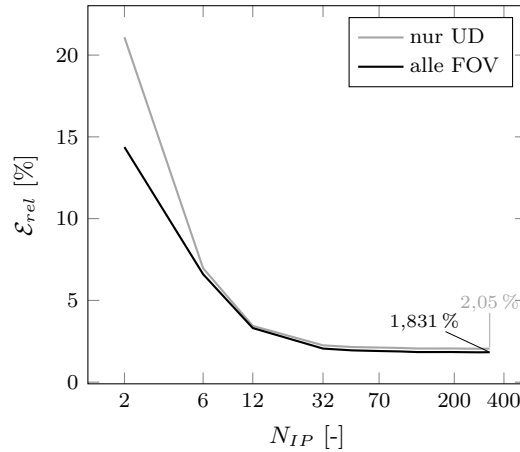


Abbildung 5.10: Relativer Fehler  $\mathcal{E}_{rel}$  über Anzahl der Integrationsstellen.

abweichen. Mit einem Fehler von 1,831 % liegt aber schon eine sehr gute Übereinstimmung vor.

Interessanterweise verhält sich der relative Fehler ganz ähnlich, wenn zur Anpassung der Materialparameter lediglich die Daten eines unidirektionalen Versuchs verwendet werden. Auch hier wird bereits bei  $N_{IP} = 32$  ein Grenzwert erreicht, der mit  $\mathcal{E}_{rel} = 2,05\%$  immer noch sehr klein und nur unwesentlich größer als bei der Anpassung an alle FOV ausfällt. Diese Erkenntnis ist deswegen so bemerkenswert, weil sie eine Identifikation des Materialverhaltens bei nur einer einzigen FOV rechtfertigt. Mit Blick auf reale Experimente erweist sich das als großer Vorteil, weil unidirektionale Proben gefertigt werden können wohingegen die Herstellung von Proben mit beliebiger FOV ein aktuelles Forschungsfeld beschreibt. Dass die Identifikation an einer einzigen unidirektionalen Probe ausreicht, um Aussagen für beliebige FOV treffen zu können, ist sehr stark dem linearen Charakter des Materialmodells bei kleinen Deformationen geschuldet. Aus diesem Grund reicht es ebenfalls aus, die Wärmeleitung an einer unidirektionalen Probe zu identifizieren. Bei großen Deformationen erfordert der nichtlineare Charakter der konstitutiven Gleichungen die Aufnahme weiterer FOV in die Identifikation für eine hinreichend genaue Abbildung synthetischer RVE-Daten wie die Arbeit von Goldberg et al. (2017) aufzeigt.

## 6 Parameteridentifikation

Zur Bestimmung der noch freien Materialparameter in Tabelle 5.1 wurden an den Professuren *Festkörpermechanik* und *Kunststoffe* der *Technischen Universität Chemnitz* verschiedene thermomechanische Experimente durchgeführt. Umfang und Art dieser Experimente wurden derart gewählt, dass mit einer möglichst kleinen Anzahl von Versuchsdurchführungen alle Aspekte des Materialmodells einzeln angesprochen werden. Kapitel 6 legt die Ergebnisse dieser Untersuchungen dar und gibt abschließend einen Überblick aller identifizierten Materialparameter.

### 6.1 Spannungsfreie Ausdehnung

Mit Hilfe einer spannungsfreien Probenausdehnung beim Abfahren einer Temperaturrampe werden in einem ersten Experiment die thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_{\parallel}$  und  $\alpha_{\perp}$  sowie die thermischen Ausdehnungsfunktionen  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$  bestimmt.

#### 6.1.1 Probekörperfertigung

Die Herstellung der Probekörper für die Messung der thermischen Ausdehnung basiert auf dem Wasserstrahlschneiden extrudierter Kunststoffplatten. Das Verfahren der Extrusion erlaubt die Produktion von Platten mit sehr hoher Ausrichtung der Fasern, weswegen es dem Spritzgießen vorgezogen wird. Aus den extrudierten Kunststoffplatten werden in einem zweiten Schritt mittels Wasserstrahlschneidens die Probekörper entsprechend der Geometrie in Abbildung 6.1 ausgeschnitten. Durch die Rotation dieses Schnittmusters relativ zur Extrusionsrichtung der Kunststoffplatten lassen sich Probekörper mit unterschiedlichen Faserwinkeln  $\beta$  erzeugen. Wie die Anpassungen des Materialmodells an synthetische RVE-Daten in Abschnitt 5.5 gezeigt haben, reichen für eine erfolgreiche Identifikation der thermischen Ausdehnungsfunktionen Proben mit Faserwinkeln  $\beta = 0^\circ, 90^\circ$ .

#### 6.1.2 Versuchsaufbau und -durchführung

Als Prüfmaschine für die Durchführung der spannungsfreien Ausdehnung steht der *Professur Festkörpermechanik* eine *Zwick Z020* der *AllroundLine* der Firma *Zwick/Roell* inklusive Temperierkammer und *multiXtens* Extensometer zur Verfügung. Mit Letzterem können Verschiebungen in dem schmalen Mittelbereich der Probekörper (s. Abbildung 6.1)

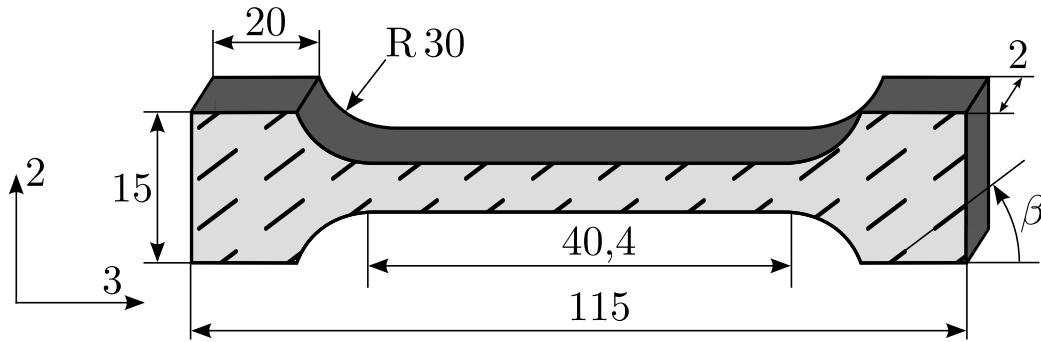


Abbildung 6.1: Abmaße des Zugprobekörpers mit Faserwinkel  $\beta$ .

erfasst und über die Ausgangslänge zu einer Dehnung verrechnet werden. Das Messen der Dehnung im Inneren des Probekörpers bietet den Vorteil der Betrachtung eines homogenen Materialbereichs, weil sich die durch die Einspannung gestörten Bereiche an den Enden der Probe nicht auf die Messung auswirken. Weiterhin fließen keinerlei Maschinennachgiebigkeiten, die beispielsweise der Traversenweg enthält, in die Auswertung ein. Der Ablauf zur Bestimmung der thermischen Deformation gestaltet sich wie folgt:

- Einspannen des Probekörpers an einer Seite bei Referenztemperatur  $\tilde{\vartheta} = 293 \text{ K}$
- Anlegen der Messfühler des Extensometers und Nullen aller Messgrößen
- Aufnahme der Längenänderung während der gleichmäßigen Erhöhung der Temperatur um  $100 \text{ K}$  über einem Zeitraum von  $2 \text{ h}$

Die Messung wird sowohl für Proben mit einem Faserwinkel von  $0^\circ$  als auch von  $90^\circ$  durchgeführt. Da das zweite Ende der Probe frei bleibt, kann sich während der Erwärmung eine spannungsfreie Deformation im Inneren der Probe einstellen.

### 6.1.3 Messdaten

Abbildung 6.2 zeigt die aufbereiteten Messdaten für Proben mit Faserwinkeln von  $0^\circ$  und  $90^\circ$ . Dargestellt wird der Koeffizient  $F_{33}$  des Deformationsgradienten, also derjenige Koeffizient, der die Streckung in Probenlängsrichtung beschreibt. Die Kurven beider Versuche weisen einen Anstieg der thermischen Deformation mit nahezu linearem Charakter bezogen auf die Temperatur auf. Die Messdaten erfahren eine derartige Aufbereitung, dass die thermische Deformation  $\underline{\underline{F}}_{\vartheta}$  bei  $\vartheta = \tilde{\vartheta} = 20^\circ \text{ C}$  zum Einheitstensor wird. Der Vergleich beider Kurven macht einen deutlichen Einfluss der Faserrichtung auf die thermische Deformation sichtbar, da sich die thermischen Deformationen fast um die Hälfte in Faserrichtung im Vergleich quer zur Faserrichtung verringern.

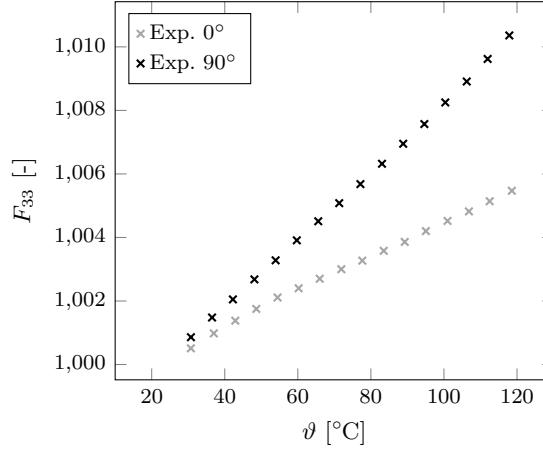


Abbildung 6.2: Messdaten der thermischen Deformation für Proben mit Faserwinkel  $0^\circ$  und  $90^\circ$ .

### 6.1.4 Modellierung und Identifikation der thermischen Ausdehnungsfunktion

Die Messdaten in Abbildung 6.2 und insbesondere deren linearer Charakter motivieren Ansätze für die Funktionen  $\tilde{\varphi}_{\parallel}$  und  $\tilde{\varphi}_{\perp}$ , die sich ebenfalls linear im untersuchten Temperaturbereich verhalten. Die Funktionen  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$  lassen sich anschließend mittels Gleichung (5.19) bestimmen. Einen solchen Ansatz bietet beispielsweise die Funktion  $f = 1 + \alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta})$  mit den Ableitungen nach der Temperatur  $f' = \alpha$  und  $f'' = 0$ . Die für den thermischen Geschwindigkeitsgradienten  $\underline{L}_{\vartheta}$  benötigten Terme folgen mit

$$\frac{f'}{f} = \frac{\alpha}{1 + \alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta})} \quad ; \quad \frac{f''f - f'^2}{f^2} = -\frac{\alpha^2}{(1 + \alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta}))^2}.$$

Der in dieser Arbeit gewählte Ansatz stützt sich auf die Funktion  $f = \exp[\alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta})]$  und deren Ableitungen  $f' = \alpha \exp[\alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta})]$  und  $f'' = \alpha^2 \exp[\alpha(\vartheta - \tilde{\vartheta})]$ . Die für den thermischen Geschwindigkeitsgradienten benötigten Terme folgen daraus mit

$$\frac{f'}{f} = \alpha \quad ; \quad \frac{f''f - f'^2}{f^2} = 0.$$

Da die Identifikation mit beiden Ansätzen keine signifikanten Unterschiede offenbart und der exponentielle Ansatz zu simpleren Termen führt, wird dieser dem linearen Ansatz vorgezogen. Folglich lauten die konkreten thermischen Ausdehnungsfunktionen

$$\tilde{\varphi}_{\parallel} = \exp[\alpha_{\parallel}(\vartheta - \tilde{\vartheta})] \quad ; \quad \tilde{\varphi}_{\perp} = \exp[\alpha_{\perp}(\vartheta - \tilde{\vartheta})] \quad (6.1)$$

und greifen auf die thermischen Ausdehnungskoeffizienten  $\alpha_{\parallel}, \alpha_{\perp}$  zurück. Ein weiterer Vorteil des exponentiellen Ansatzes (6.1) zeigt sich bei der Berechnung von  $\varphi_{\parallel}$  und  $\varphi_{\perp}$  nach Gleichung (5.19), denn es gilt

$$\varphi_{\parallel} = \frac{\tilde{\varphi}_{\parallel}}{\varphi_{0\parallel}} = \frac{\exp[\alpha_{\parallel}(\vartheta - \tilde{\vartheta})]}{\exp[\alpha_{\parallel}(\vartheta_0 - \tilde{\vartheta})]} = \exp[\alpha_{\parallel}(\vartheta - \vartheta_0)] \quad ; \quad \varphi_{\perp} = \exp[\alpha_{\perp}(\vartheta - \vartheta_0)]. \quad (6.2)$$

Somit entfällt eine Abhängigkeit der thermischen Deformation von der Referenzkonfiguration und lediglich die Temperaturdifferenz zwischen der Zwischenkonfiguration  $\hat{\mathcal{K}}$  und der Startkonfiguration  $\mathcal{K}_0$  fließt ein.

Eine Identifikation der Materialparameter liefert die Werte

$$\begin{aligned} \alpha_{\parallel} &= 5,623 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1} \\ \alpha_{\perp} &= 1,015 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \end{aligned}$$

Abbildung 6.3 stellt den Vergleich des identifizierten Materialmodells mit den experimentell ermittelten Messdaten dar. Bei beiden Faserwinkeln weisen die Kurven des Materialmodells eine sehr hohe Übereinstimmung mit denen der Experimente auf.

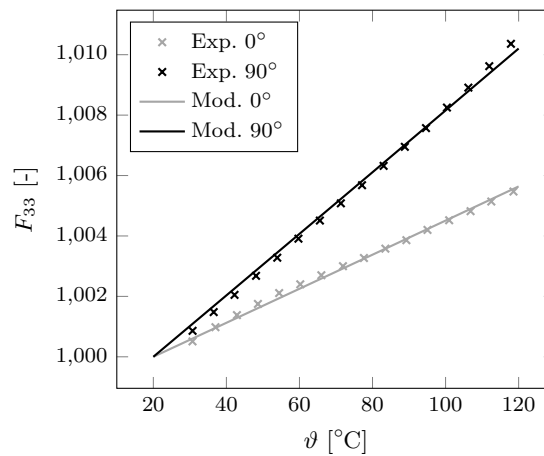


Abbildung 6.3: Vergleich der experimentell ermittelten Messdaten der thermischen Deformation mit dem identifizierten Materialmodell.

## 6.2 Relaxationsversuche bei unterschiedlichen Temperaturen

Die Spannungsantwort des Materials wird maßgeblich von seinen viskoelastischen Eigenschaften bestimmt. Dabei sind unter anderem Abhängigkeiten von der Belastungsgeschwindigkeit, der Belastungsrichtung sowie der Temperatur zu erwarten. Mit Hilfe von Relaxationsversuchen bei unterschiedlichen Umgebungstemperaturen sollen diese Abhängigkeiten gezielt erfasst und mittels geeigneter Materialparameterfunktionen abgebildet werden.

### 6.2.1 Versuchsdurchführung

Die Versuche werden an Probekörpern mit der gleichen Geometrie wie bei der spannungsfreien Ausdehnung (s. Abschnitt 6.1) durchgeführt. Für die Faserwinkel werden ebenfalls die Werte  $\beta = 0^\circ, 90^\circ$  gewählt. Die Relaxationsversuche finden bei den Temperaturen  $\vartheta = 20^\circ\text{C}, 70^\circ\text{C}, 120^\circ\text{C}$  statt und laufen wie folgt ab

- Einspannen der Probe an einem Ende und Positionierung in der Temperaturkammer
- Einstellen der Versuchstemperatur mit anschließender Wartezeit von 10 min
- Einspannen des zweiten Probenendes
- gleichmäßiges Aufbringen einer Dehnung von 1 % im Messbereich über 4 min
- Halten der Dehnung über 12 h

Thermoplaste sind bekannt für ihr lang andauerndes Relaxationsverhalten. Aus diesem Grund wird eine Haltezeit von 12 h gewählt, um möglichst viele der Relaxationsspektren zu erfassen. Die zehn minütige Durchwärmphase bei freier Ausdehnung schließt Spannungen auf Grund thermischer Ausdehnungen aus. Vor Durchführung der Experimente werden die Querschnitte der Referenzkonfiguration bestimmt, sodass über die gemessene Kraft der Verlauf der ersten Piola-Kirchhoff-Spannung bestimmt werden kann. Da die Zugrichtung in 3-Richtung zeigt (vgl. Abbildung 6.1), erfolgt die Auswertung der Spannung in der 33-Komponente.

### 6.2.2 Messdaten

Abbildung 6.4 stellt den Spannungsverlauf bei einem Relaxationsversuch mit Faserwinkel  $\beta = 0^\circ$  und einer Temperatur von  $\vartheta = 20^\circ\text{C}$  über der Prüfzeit dar.

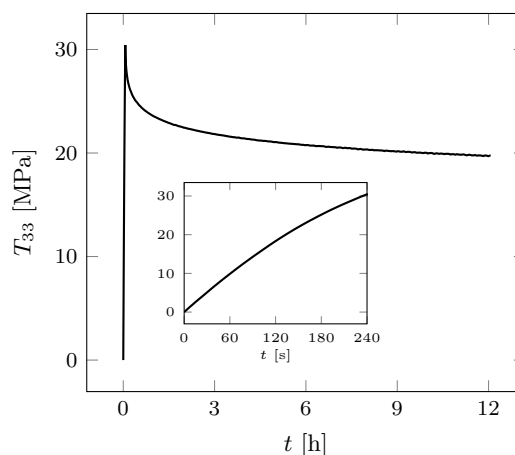


Abbildung 6.4: Verlauf der 1. Piola-Kirchhoff-Spannung über der Zeit beim Relaxationsversuch in Faserrichtung bei Raumtemperatur.

Die Spannung steigt in den ersten 4 min nichtlinear an und erreicht nach dieser Zeit ihr Maximum. Eine genaue Betrachtung dieses Zeitraumes bietet die Detaildarstellung in Abbildung 6.4. Darin wird der nichtlineare Charakter des Spannungszuwachses sichtbar. Nach Erreichen des Spannungsmaximums und mit Beginn der Dehnungs-Haltephase baut sich die Spannung über der Zeit ab; sie relaxiert. Der Anstieg des Graphen zum Ende des Versuches lässt darauf schließen, dass der Relaxationsvorgang noch nicht komplett abgeschlossen ist.

Abbildung 6.5 stellt die Messdaten aller sechs Versuche (drei Temperaturen mit je zwei Faserwinkeln) gegenüber. Diese Gegenüberstellung bildet einen wichtigen Ausgangspunkt bei der Formulierung der beschreibenden Materialparameter, weil sich anhand dieser Experimente entscheidende Eigenschaften ablesen lassen. Es zeigt sich, dass sowohl die Spontanantwort (nach Erreichen des Spannungsmaximums) als auch die Gleichgewichtsspannung eine starke Abhängigkeit von der Temperatur und dem Faserwinkel besitzen. Mit steigender Temperatur verhält sich das Material weicher und reagiert entsprechend mit kleineren Spannungen. Dabei lässt sich bereits in der Darstellung von Abbildung 6.5 ein nichtlinearer Charakter dieser Temperaturabhängigkeit erkennen. Auch das Relaxationsspektrum verändert sich mit steigender Temperatur. Weisen die Spannungsverläufe bei  $\vartheta = 20^\circ\text{C}$  noch einen signifikanten Abfall zum Ende des Versuchs auf, können die Versuche bei  $\vartheta = 120^\circ\text{C}$  bereits nach der Hälfte der Zeit beendet werden, weil die Spannungen ausrelaxiert sind.

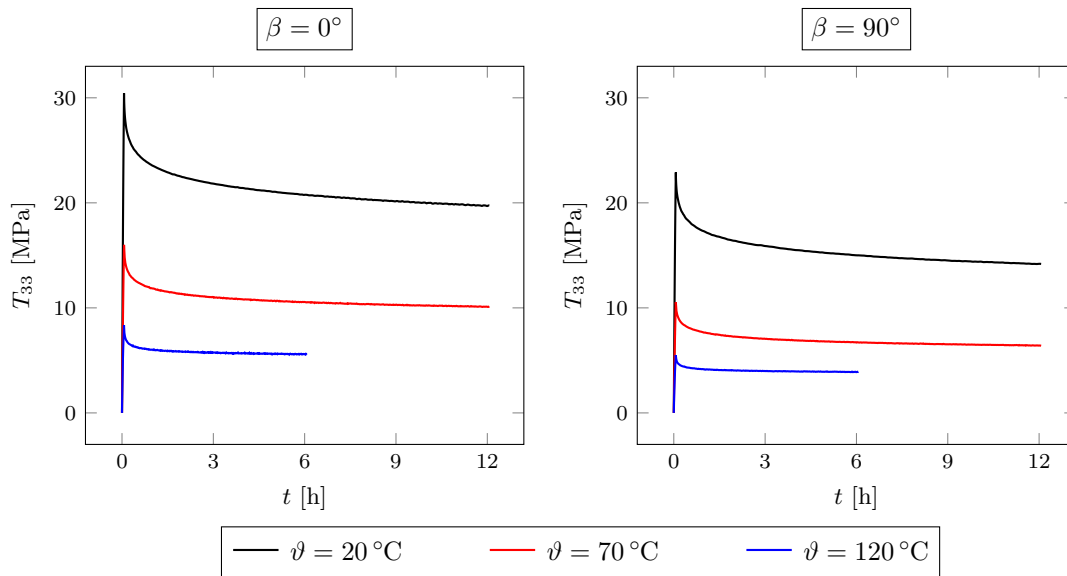


Abbildung 6.5: Verlauf der 1. Piola-Kirchhoff-Spannung über der Zeit beim Relaxationsversuch mit verschiedenen Temperaturen und Faserwinkeln  $\beta$ .

Beim Vergleich zweier Versuche mit gleicher Temperatur aber unterschiedlichem Faserwinkel zeigt sich, dass sowohl die Gleichgewichtsspannung als auch die Spontanantwort mit dem Faserwinkel variieren und bei Versuchen quer zur Faserrichtung kleiner ausfallen als längs zur Faserrichtung. Eine Darstellung der Spannungsdifferenz  $\Delta T_{33} = \Delta T_{33_{\parallel}} - \Delta T_{33_{\perp}}$  in



Abbildung 6.6 von Versuchen bei gleicher Temperatur aber unterschiedlichen Faserwinkeln legt zum einen offen, dass diese Differenz anders als in Abschnitt 4.4 nicht nahezu konstant bleibt und zum anderen, dass sie mit steigender Temperatur abfällt.

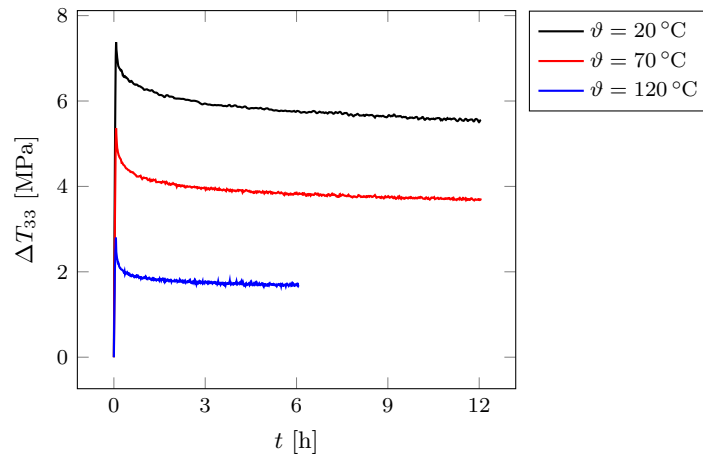


Abbildung 6.6: Differenz der 1. Piola-Kirchhoff-Spannung zwischen Relaxationsversuchen in und quer zur Faserrichtung bei verschiedenen Temperaturen.

### 6.2.3 Modellierung

Die bei der Auswertung der Messdaten gewonnenen Erkenntnisse finden in der Formulierung der Materialparameter Berücksichtigung. Einen Ansatz für die starke Temperaturabhängigkeit der Schubmoduln  $G$  und  $G_k$  liefert die der Arbeit von Landgraf (2015) entnommene Arkustangens-Funktion  $f_\vartheta$

$$f_\vartheta = \left( \frac{1}{f_{\vartheta 0}} \left[ \arctan(f_{\vartheta 1}(\vartheta - \vartheta_{G1})) + \frac{\pi}{2} \right] \right)^{f_{\vartheta 2}} \quad (6.3)$$

mit den Materialparametern  $f_{\vartheta 1} < 0$  und  $f_{\vartheta 2}$  sowie der Glasübergangstemperatur  $\vartheta_{G1}$ . Letztere wird mit dem für Polypropylen üblichen Wert von  $\vartheta_{G1} = 0^\circ\text{C}$  belegt (vgl. Ehrenstein (1999)). Die Variation der Parameter  $f_{\vartheta 1}, f_{\vartheta 2}$  beeinflusst, wie stark der Funktionswert von  $f_\vartheta$  bei steigender Temperatur abfällt. Der Parameter  $f_{\vartheta 0}$  dient einer Normierung von  $f_\vartheta$  bei Referenztemperatur und lässt sich deshalb unabhängig von der aktuellen Temperatur bestimmen

$$f_{\vartheta 0} = \arctan(f_{\vartheta 1}(\tilde{\vartheta} - \vartheta_{G1})) + \frac{\pi}{2} \quad .$$

Die Materialparameter  $G$  und  $G_k$  folgen mit

$$G = G_1 f_\vartheta \quad ; \quad G_k = G_{k1} f_\vartheta \quad (6.4)$$

Damit unterscheiden sich die einzelnen Schubmoduln lediglich um einen skalaren Vorfaktor, was sich physikalisch dadurch motivieren lässt, dass diese Steifigkeiten dem Matrixmaterial zugeordnet werden und dessen Temperaturabhängigkeit gleich bleibt. Die für die

Auswertung der Bilanzgleichungen benötigten Ableitungen nach der Temperatur folgen mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\vartheta}}{\partial \vartheta} &= \frac{f_{\vartheta 1} f_{\vartheta 2}}{f_{\vartheta 0}} \left( \frac{1}{f_{\vartheta 0}} \left[ \arctan(f_{\vartheta 1}(\vartheta - \vartheta_{G1})) + \frac{\pi}{2} \right] \right)^{f_{\vartheta 2}-1} (1 + f_{\vartheta 1}^2(\vartheta - \vartheta_{G1})^2)^{-1}, \\ \frac{\partial^2 f_{\vartheta}}{\partial \vartheta^2} &= \frac{f_{\vartheta 1} f_{\vartheta 2}}{f_{\vartheta 0}} (1 + f_{\vartheta 1}^2(\vartheta - \vartheta_{G1})^2)^{-2} \left\{ \right. \\ &\quad \frac{f_{\vartheta 1}(f_{\vartheta 2} - 1)}{f_{\vartheta 0}} \left( \frac{1}{f_{\vartheta 0}} \left[ \arctan(f_{\vartheta 1}(\vartheta - \vartheta_{G1})) + \frac{\pi}{2} \right] \right)^{f_{\vartheta 2}-2} \\ &\quad \left. - 2(\vartheta - \vartheta_{G1}) f_{\vartheta 1}^2 \left( \frac{1}{f_{\vartheta 0}} \left[ \arctan(f_{\vartheta 1}(\vartheta - \vartheta_{G1})) + \frac{\pi}{2} \right] \right)^{f_{\vartheta 2}-1} \right\}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Mit steigender Temperatur ändern sich nicht nur die Steifigkeiten des Matrixmaterials, sondern auch die viskosen Eigenschaften. Aus diesem Grund wird ein Potenzansatz für die prozessabhängige Größe  $\dot{z}$  gewählt

$$\dot{z} = \dot{z}_1^{(\vartheta - \tilde{\vartheta})/\dot{z}_0} \quad ; \quad \frac{\partial \dot{z}}{\partial \vartheta} = \frac{1}{\dot{z}_0} \ln(\dot{z}) \dot{z}_1^{(\vartheta - \tilde{\vartheta})/\dot{z}_0} \quad \text{mit: } \dot{z}_0 = 1 \text{ K}. \quad (6.6)$$

Dieser greift auf den Materialparameter  $\dot{z}_1$  zurück und sorgt dafür, dass sich das Materialverhalten bei steigender Temperatur immer mehr dem Verhalten eines Fluids nähert. Der Parameter  $\dot{z}_0$  dient lediglich der Entdimensionierung. Mit den Gleichungen (6.4) und (6.6) fließen die Temperaturabhängigkeiten der isotropen Spannungsanteile in das Materialmodell ein. Der anisotrope Spannungsanteil benötigt allerdings auch eine von der Temperatur abhängige Formulierung, weil sonst die Spannungsdifferenz von Relaxationsversuchen bei gleicher Temperatur aber unterschiedlichen Faserwinkeln bei jeder Temperatur gleich bliebe. Aus diesem Grund wird die Steifigkeit  $E_F$  mit einem linearen Ansatz unter Verwendung der Parameter  $E_{F1}, E_{F2}$  formuliert

$$E_F = E_{F1} - E_{F2}(\vartheta - \tilde{\vartheta}) \quad ; \quad \frac{\partial E_F}{\partial \vartheta} = -E_{F2} \quad ; \quad \frac{\partial^2 E_F}{\partial \vartheta^2} = 0. \quad (6.7)$$

Zur Klärung der Frage nach der Anzahl  $N_{MW}$  der zu verwendenden Maxwell-Elemente wird auf eine gängige Technik zurückgegriffen, die sich in der Arbeit von Landgraf (2015) findet. Formal zieht die Wahl von  $N_{MW}$  Maxwell-Elementen die Einführung von  $2N_{MW}$  Materialparametern mit sich, denn jedes Maxwell-Element besitzt einen Schubmodul  $G_k$  sowie eine Viskosität  $\eta_k$  bei der zu Grunde liegenden Modellierung aus Kapitel 5. Die Identifikation einer solch hohen Anzahl von Materialparametern bedingt jedoch in der Regel eine hohe Anzahl von Experimenten. Diesem Problem lässt sich mit folgenden Annahmen begegnen

- die Steifigkeiten aller Maxwell-Elemente sind gleich
- das Relaxationsspektrum verteilt sich äquidistant auf einer logarithmischen Zeitskala

Für die erste Annahme gilt folglich  $G_1 = G_2 = \dots = G_{N_{MW}} = \frac{G_{MW}}{N_{MW}}$  (nicht zu verwechseln mit den Materialparametern aus Gleichung (6.4)<sub>1</sub>). Mit dem Parameter  $G_{MW}$  wird ein Schubmodul eingeführt, der der Summe aller Schubmoduln  $G_k$  entspricht. Die Umsetzung der zweiten Annahme erfordert zunächst die Festlegung eines Relaxationsbereichs, also einer minimalen ( $\tau_{rel,min}$ ) und einer maximalen ( $\tau_{rel,max}$ ) Relaxationszeit. Da die Relaxationsversuche über eine Zeitdauer von 12 h durchgeführt werden und auch am Ende dieser Versuche noch Relaxationen zu erkennen sind, wird als maximale Relaxationszeit  $\tau_{rel,max} = 1 \cdot 10^5$  s gewählt. Um auch kurzzeitige Geschwindigkeitsabhängigkeiten zu erfassen, wird für die minimale Relaxationszeit die Wahl  $\tau_{rel,min} = 1 \cdot 10^{-1}$  s getroffen. Damit liegen zwischen der minimalen und der maximalen Relaxationszeit sechs Größenordnungen, was wiederum eine Empfehlung für die Anzahl der zu verwendenden Maxwell-Elemente gibt. Nach der Faustregel 2,5 Maxwell-Elemente pro Größenordnung des abzubildenden Relaxationsspektrums ergibt sich somit eine Anzahl von  $N_{MW} = 15$  Maxwell-Elementen. Die einzelnen Relaxationszeiten  $\tau_{rel,k}$  folgen mit

$$\tau_{rel,k} = \tau_{rel,min} \left( \frac{\tau_{rel,max}}{\tau_{rel,min}} \right)^{\frac{k-1}{N_{MW}-1}}. \quad (6.8)$$

Über den Zusammenhang

$$\eta_k = G_k \tau_{rel,k}$$

lassen sich die Viskositäten der einzelnen Maxwell-Elemente direkt ausrechnen. Dank der beiden Annahmen für die Verteilung der Steifigkeiten und der Relaxationszeiten lässt sich die Anzahl der Materialparameter von  $2N_{MW}$  auf Eins reduzieren, denn lediglich der Schubmodul  $G_{MW}$  muss identifiziert werden.

### 6.2.4 Identifikation

Mit den konstitutiven Annahmen des letzten Abschnittes steht eine vollständige Beschreibung des viskoelastischen Materialverhaltens bei unterschiedlichen Temperaturen zur Verfügung. Die noch zu identifizierenden Materialparameter werden durch Anpassungen an die Versuchsdaten aus Abbildung 6.5 gewonnen. Hierbei sei erwähnt, dass die Parameteridentifikation einer Auswertung der Spannungsgleichung (5.48) bedarf. In diese fließt neben dem im Relaxationsversuch zu identifizierenden Materialparametern auch der unbekannte Kompressionsmodul  $K$  ein.

Empfehlungen für die Identifikation des Kompressionsmoduls sind unter anderem der Arbeit von Goldberg et al. (2015) zu entnehmen. Da für diese Arbeit keine geeigneten Experimente zur Verfügung stehen, wird der Kompressionsmodul mit Hilfe von RVE-Homogenisierungen abgeschätzt. Solch eine Abschätzung wird in Abschnitt 5.5 dargestellt und liefert einen geschätzten Kompressionsmodul von  $K \approx 3000$  MPa.

Eine Fehlerquadratminimierung der vom Materialmodell vorhergesagten Spannungswerte abzüglich der Messdaten aus den Relaxationsversuchen führt zu den Parametern in Tabelle 6.1.

Tabelle 6.1: Mit Relaxationsversuchen identifizierte Materialparameter.

| Parameter         | Wert                  | Einheit                |
|-------------------|-----------------------|------------------------|
| $G_1$             | 379,24                | [MPa]                  |
| $G_{MW}$          | 1067,80               | [MPa]                  |
| $E_{F_1}$         | 686,01                | [MPa]                  |
| $E_{F_2}$         | 4,70                  | [MPa K <sup>-1</sup> ] |
| $\dot{z}_1$       | 1,05                  | [-]                    |
| $f_{\vartheta 1}$ | $-2,14 \cdot 10^{-2}$ | [-]                    |
| $f_{\vartheta 2}$ | $9,88 \cdot 10^{-1}$  | [-]                    |

Die Parameter  $\dot{z}_1$  und  $f_{\vartheta 2}$  weichen nur schwach von ihren Werten in der Referenzkonfiguration (jeweils Eins) ab. Ihr Einfluss auf die Temperaturabhängigkeit fällt daher klein aus. Der Wert des Parameters  $E_{F_2}$  hingegen lässt eine starke Temperaturabhängigkeit des anisotropen Spannungsanteils erkennen, da eine Erhöhung der Temperatur auf 120 °C die zugehörige Steifigkeit  $E_F$  von 686 MPa auf 216 MPa sinken lässt. Mit Betrachtung der Anforderungen an die Polykonvexität der Energiedichte (5.35),  $E_F > 0$ , bedarf es einer Prüfung, bei welcher Temperatur  $\vartheta_{E_F}$  die Steifigkeit  $E_F$  negativ wird. Diese Temperatur lässt sich über die Beziehung  $\vartheta_{E_F} = E_{F_1}/E_{F_2}$  ermitteln und liegt mit einem Wert von  $\vartheta_{E_F} = 145$  °C bereits im Wirkungsbereich der Glättungsfunktion mit  $f_{Ph} = 0$ .

Abbildung 6.7 stellt die Messdaten der Relaxationsversuche mit den zugehörigen Kurven des identifizierten Materialmodells gegenüber. Bei allen Temperaturen und Faserwinkeln ist das Materialmodell in der Lage die Messdaten sehr gut abzubilden. Sowohl die Temperaturabhängigkeit der Schubmoduln als auch die der Steifigkeit  $E_F$  werden korrekt erfasst. Kleine Abweichungen der Kurven aus Experiment und Modell sind lediglich bei den ersten Stunden der Versuche mit Faserwinkel  $\beta = 90^\circ$  zu erkennen. Ob die Ursachen dafür in einer fehlerhaften Modellierung oder aber in unbekanntem Messfehlern liegt, bleibt zu untersuchen.

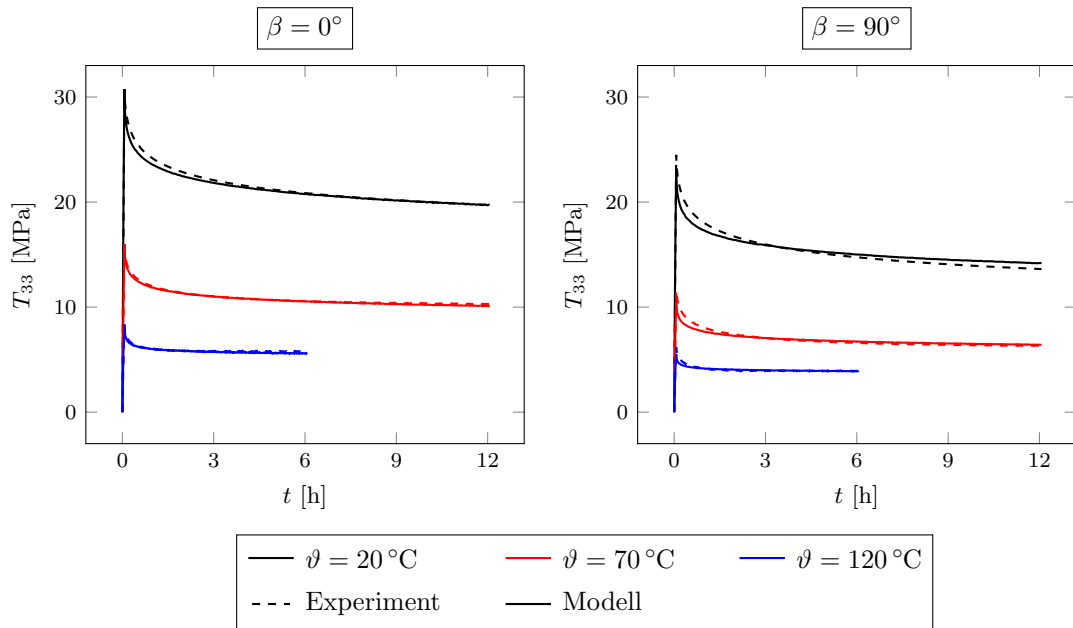


Abbildung 6.7: Vergleich des identifizierten Materialmodells mit den Messdaten des Experiments beim Relaxationsversuch für verschiedene Temperaturen und Faserwinkel.

### 6.3 Bestimmung der kalorischen Eigenschaften

Mit Hilfe von DSC-Versuchen (engl. *Differential Scanning Calorimetry*) an der Professur *Kunststoffe* der *TU Chemnitz* sollen die kalorischen Eigenschaften des Materials bestimmt werden. DSC-Versuche erfassen die Wärmemenge, die bei der thermischen oder chemischen Umwandlung eines Stoffes entsteht oder abgegeben wird. Grundlagen des Verfahrens werden unter anderem in der Arbeit von Ehrenstein (2004) erklärt. Mit Hilfe der DSC lassen sich charakteristische Temperaturen wie die Schmelztemperatur oder die Glasübergangstemperatur detektieren sowie Informationen über die spezifische Wärmekapazität des Materials gewinnen. Für diese Arbeit werden DSC-Versuche bei drei unterschiedlichen Temperaturraten ( $\dot{\vartheta} = 5\text{ K/min}$ ,  $10\text{ K/min}$ ,  $20\text{ K/min}$ ) durchgeführt. Jeder Versuch besteht aus zwei Heizphasen und einer Abkühlphase und zeichnet die zu- oder abgeführten spezifischen Wärmeströme  $\mathcal{P}_{\text{DSC}}/m$  auf. Die für die Identifikation relevanten Daten werden erst nach der ersten Heizphase verwendet, weil sich vorher durch die Fertigung eingebrachte zusätzliche Energien abbauen können und erst danach die reine Materialantwort beobachtet wird.

### 6.3.1 Messdaten und deren Aufarbeitung

Abbildung 6.8 illustriert die bei den DSC-Versuchen gemessenen Wärmeströme über dem Temperaturverlauf. Die Pfeile veranschaulichen den zeitlichen Ablauf des Versuches, das heißt, die Proben werden zunächst abgekühlt und geben dabei Energie ab.

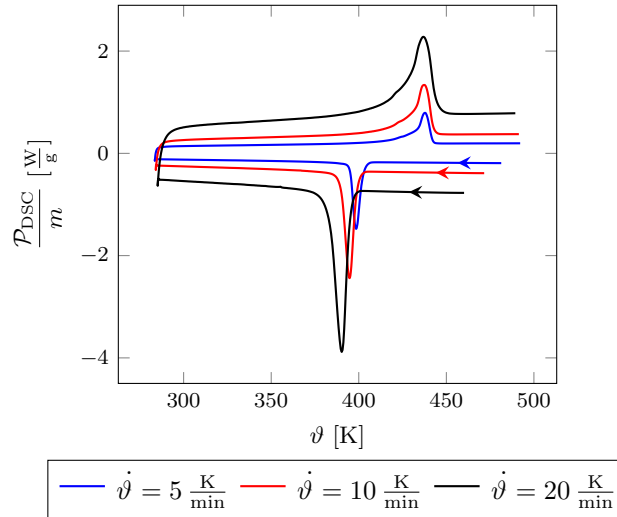


Abbildung 6.8: Gemessene Wärmeströme bei DSC-Versuchen mit drei unterschiedlichen Temperaturraten.

Bei circa 293 K erfolgt der Wechsel zum Aufheizen der Probe und somit muss der Probe Wärme zugeführt werden, um die Temperatur zu erhöhen. Die Kurven in Abbildung 6.8 zeigen mehrere Abhängigkeiten von der Temperaturrate auf. Es lässt sich feststellen, dass der Betrag des Wärmestroms mit dem Betrag von  $\dot{\vartheta}$  steigt. Qualitativ lassen sich die Verläufe beim Erstarren und beim Aufschmelzen in nahezu konstante Bereiche und in Ausschläge (engl. Peak) aufteilen. Die Peaks sind typische Indikatoren von Phasenübergängen, bei denen die Auflösung bzw. Bildung der Molekülstrukturen eine zusätzliche Energie benötigt. Der Verlauf der Abkühlung unterscheidet sich sowohl in der Form als auch in der Position des Peaks vom Aufschmelzen.

Die Ursachen dafür finden sich im Kristallisationsprozess des teilkristallinen Polypropylens. Das Aufbrechen einer Kristallstruktur benötigt im wesentlichen nur eine zusätzliche Energie. Die Geschwindigkeit, mit der diese Energie zugeführt wird spielt dabei keine Rolle. Aus diesem Grund zeigen die Messdaten auch keinen horizontalen Versatz der Aufschmelzkurve bei unterschiedlichen Heizraten. Beim Erstarren hingegen sammeln sich die Molekülketten des Polypropylens und bilden kristalline Strukturen aus. Diesen Vorgang machen drei wichtige Prozesse aus - die Keimbildung, das Wachstum sowie die Sekundärkristallisation (vgl. Nakamura et al. (1972)). Insbesondere die Keimbildung sowie das Wachstum der Kristalle hängen jedoch stark von der Abkühlgeschwindigkeit ab. Aus diesem Grund sinkt die Peak-Temperatur mit zunehmender Abkühlgeschwindigkeit.

### 6.3.2 Modellierung der spezifischen inneren thermischen Energie

#### Kristallisationsgrad

Die Messdaten der DSC-Versuche weisen einen großen Einfluss der Kristallisationskinematik auf die kalorischen Eigenschaften des Materials nach. Aus diesem Grund ist der Kristallisationsgrad  $\gamma$ , der das Volumenverhältnis von kristalliner Phase zu Gesamtvolumen angibt, für eine realitätsnahe Abbildung des Materialverhaltens unentbehrlich. Einen ersten Ansatz zur Modellierung des Kristallisationsgrades  $\gamma$  liefert die Arbeit von Avrami (1940) mit der Gleichung

$$\gamma = 1 - \exp[-k(\vartheta)t^n]$$

und den darin enthaltenen Parametern  $k$  und  $n$ . Die Avrami-Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung des Kristallisationsgrades bei konstanter Temperatur. Sie ist jedoch so ausgelegt, dass sich mit ihr nur Erstarrungsprozesse ohne Erfassung von Kristallisationsenergien abbilden lassen. Die Arbeit von Patel & Spruiell (1991) gibt eine Übersicht verschiedener Abwandlungen der Avrami-Gleichung und deren Anwendung. Mit der Arbeit von Malkin et al. (1984b,a) erfolgt erstmals eine Beschreibung des Kristallisationsgrades über eine Differentialgleichung der Form

$$\dot{\gamma} = F(\gamma, \vartheta).$$

Die homogene Lösung dieser Differentialgleichung liefert den Gleichgewichtskristallisationsgrad  $\gamma_{\text{eq}}$  bei konstanter Temperatur. Im Gegensatz zur Avrami-Gleichung erlaubt dieser Ansatz die Abbildung des Erstarrungs- und des Schmelzprozesses. Die Autoren in Piccarolo et al. (1992) greifen das Modellierungskonzept auf und beschreiben die Entwicklung des Kristallisationsgrades mit

$$\dot{\gamma} = f(\vartheta)(\gamma_{\text{eq}}(\vartheta) - \gamma) \quad \text{mit:} \quad \gamma_{\text{eq}}(\vartheta) = \xi \frac{\vartheta_m - \vartheta}{\vartheta_1 - \vartheta}. \quad (6.9)$$

Die Wahl der einzelnen Funktionen und Parameter kann der Arbeit entnommen werden. Gleichung (6.9) ermöglicht einen einfachen Zugang zu einer Evolutionsgleichung des Kristallisationsgrades. Solange der aktuelle Kristallisationsgrad  $\gamma$  vom Gleichgewichtskristallisationsgrad abweicht, verändert er sich über der Zeit. Die Änderung kann sowohl in positive als auch in negative Richtung stattfinden, wodurch der Ansatz zur Abbildung von Erstarrung und Aufschmelzen geeignet ist. Da  $\gamma_{\text{eq}}$  in der Arbeit von Piccarolo et al. (1992) jedoch nur von der Temperatur abhängt, unterscheiden sich die resultierenden Wärmeströme beim Modellieren der Erstarrung und des Aufschmelzens lediglich um das Vorzeichen.

Die Autoren in Lion & Johlitz (2016) wählen einen abweichenden Ansatz zur Modellierung der kalorischen Eigenschaften. Ausgehend von einer Aufteilung des Materials in drei Phasen (vgl. Wunderlich (2003)) werden zwei innere Variablen zur Beschreibung des

Kristallisationsgrades sowie der amorphen Phase eingeführt. Nach Vorgabe der spezifischen Wärmekapazität der einzelnen Phasen, anschließender Integration zur Gewinnung der freien Gibbs'schen Energien und Einsetzen in die CDU ergeben sich so die Evolutionsgleichungen zur Bestimmung der inneren Variablen. Dieser Ansatz bildet beispielsweise die Tatsache ab, dass der Kristallisationsgrad bei sehr hohen Abkühlraten einen deutlich kleineren Wert annimmt als bei niedrigen Abkühlraten. Allerdings wird auch hier keine Unterscheidung zwischen Erstarrung und Aufschmelzen getroffen.

Der in dieser Arbeit gewählte Ansatz wird sich an dem Grundprinzip der Gleichung (6.9) orientieren und eine zusätzliche Fallunterscheidung zwischen dem Erstarren und dem Aufschmelzen einführen.

### Aufarbeitung der Messdaten

Zunächst erfolgt jedoch eine weitere Aufarbeitung und Einordnung der experimentell gewonnenen Daten. Mit Blick auf den 1. Hauptsatz der Thermodynamik in lokaler Form unter Annahme konstanten Druckes ( $p \equiv 0$ ) und keiner Wärmequellen lässt sich der DSC-Versuch mit der Differentialgleichung

$$\tilde{\rho} \dot{e}_\vartheta = -\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{q}}$$

beschreiben. Eine Überführung in die globale Form des Hauptsatzes führt in Analogie zur Arbeit von Lion & Johlitz (2016) auf den Zusammenhang

$$\dot{e}_\vartheta = \frac{\mathcal{P}_{\text{DSC}}}{m}. \quad (6.10)$$

Gleichung (6.10) legt dar, dass der während des DSC-Versuches gemessene Wärmestrom der spezifischen inneren Energierate entspricht. Die daraus resultierende spezifische innere Energie lässt sich durch Integration über der Zeit gewinnen

$$e_\vartheta = \int \dot{e}_\vartheta dt$$

und wird in Abbildung 6.9 für die Abkühlphase dargestellt. Die darin kenntlich gemachten Energiesprünge  $\Delta e_\gamma$  entsprechen der während der Kristallisation freigesetzten Energie und weisen eine nichtlineare Abhängigkeit von der Abkühlgeschwindigkeit auf. Es sei erwähnt, dass sich die folgenden Betrachtungen auch beim Aufschmelzen anstellen lassen, aber aus Gründen der Übersichtlichkeit auf deren explizite Darstellung verzichtet wird.



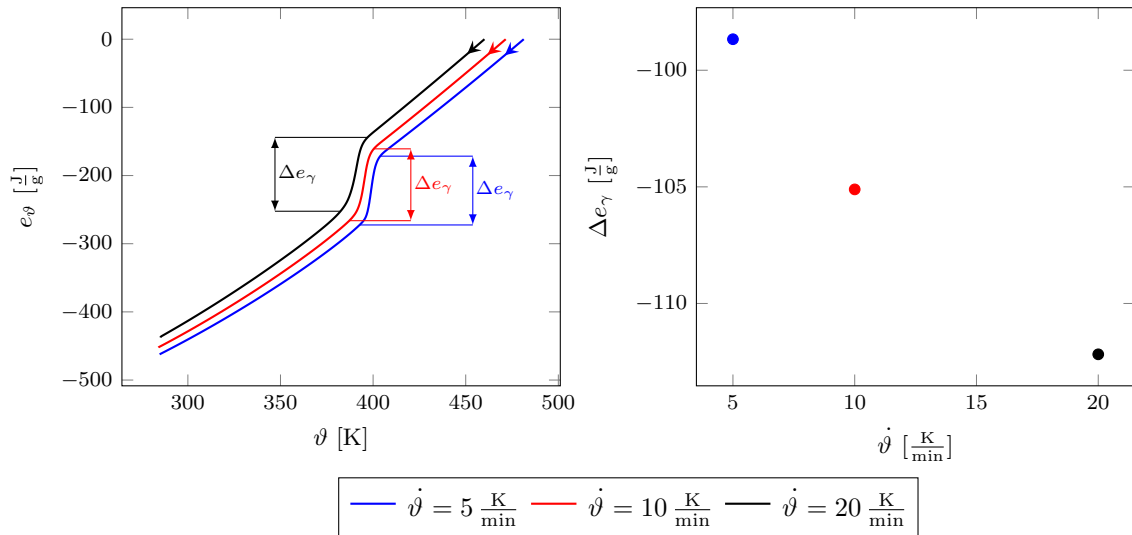


Abbildung 6.9: Durch Integration gewonnene spezifische innere thermische Energie beim Erstarrungsprozess (links) sowie Abhängigkeit der Kristallisationsenergie von der Temperaturrate (rechts).

### Ansatz der inneren thermischen Energie

Das Grundgerüst der konstitutiven Beschreibung der kalorischen Eigenschaften liefert der Ansatz der inneren thermischen Energie

$$e_\vartheta = e_{\vartheta_0} + \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}} \cdot \gamma + \left( c_{\vartheta_{1S}}\vartheta + c_{\vartheta_{2S}}\frac{\vartheta^2}{2} \right) \cdot \gamma + \left( c_{\vartheta_{1F}}\vartheta + c_{\vartheta_{2F}}\frac{\vartheta^2}{2} \right) \cdot (\gamma_{\max} - \gamma). \quad (6.11)$$

Die darin enthaltene konstante Energie  $e_{\vartheta_0}$  entfällt bei der zeitlichen Ableitung der inneren thermischen Energie und wird zweckmäßigerweise zu Null gewählt. Der maximal erreichbare Kristallisationsgrad  $\gamma_{\max}$  wird zu Eins gesetzt. Es sei erwähnt, dass es sich dabei um eine zweckmäßige Modellannahme handelt, die von den tatsächlichen maximalen Kristallisationsgraden teilkristalliner Thermoplaste abweicht. Das hier formulierte Modell für die kalorischen Eigenschaften wird nicht berücksichtigen, dass bei großen Abkühlgeschwindigkeiten Kristallisationsgrade unterhalb des maximal möglichen Kristallisationsgrades resultieren.

Die Ausdrücke in den Klammern lassen sich den Phasen vor und nach der Kristallisation zuordnen. Die Indizes der Koeffizienten  $c_{\vartheta\dots}$  beziehen sich auf den Polynomgrad des zugehörigen Temperaturterms sowie die solide oder flüssige Phase. Der Energiebetrag  $\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}}$  wird eingeführt, um den nichtlinearen Charakter der Kristallisationsenergie  $\Delta e_\gamma$  bezogen auf die Abkühlgeschwindigkeit abzubilden.

Die Ableitung von Gleichung (6.11) nach der Zeit liefert die spezifische innere Energierate

$$\begin{aligned} \dot{e}_\vartheta = & \Delta \dot{e}_{\gamma\dot{\vartheta}} \cdot \gamma + \left[ \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}} + (c_{\vartheta_{1S}} - c_{\vartheta_{1F}})\vartheta + (c_{\vartheta_{2S}} - c_{\vartheta_{2F}})\frac{\vartheta^2}{2} \right] \cdot \dot{\gamma} \\ & + \left[ (c_{\vartheta_{1S}} + c_{\vartheta_{2S}}\vartheta) \cdot \gamma + (c_{\vartheta_{1F}} + c_{\vartheta_{2F}}\vartheta) \cdot (1 - \gamma) \right] \cdot \dot{\vartheta}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Der dritte Summand dieser Gleichung lässt sich in Abbildung 6.8 den nahezu konstanten Bereichen zuordnen während der zweite Summand den Wärmestrom der Peaks abzüglich des konstanten Bereichs beschreibt. Der erste Summand der Gleichung (6.12) spielt im Vergleich zu den anderen Termen eine untergeordnete Rolle.

Für den Energiebetrag  $\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}}$  wird ein exponentieller Ansatz der Form

$$\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}} = \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_0} \exp[-\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_1} \cdot |\dot{\vartheta}|] + \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_2} \quad (6.13)$$

mit den Parametern  $\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_1}, \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_2}, \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_3}$  gewählt. Die exponentielle Abhängigkeit von  $\dot{\vartheta}$  gewährleistet sinnvolle obere und untere Schranken für den Fall sehr langsamer bzw. sehr schneller Temperaturänderungen. Die Ableitung von Gleichung (6.13) ergibt sich zu

$$\Delta \dot{e}_{\gamma\dot{\vartheta}} = -\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_0} \Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_1} \exp[-\Delta e_{\gamma\dot{\vartheta}_1} \cdot |\dot{\vartheta}|] \cdot \frac{\dot{\vartheta}}{|\dot{\vartheta}|} \cdot \ddot{\vartheta} \quad (6.14)$$

und ist wegen der Betragsfunktion für isotherme Prozesse nicht definiert. Da die Rate  $\Delta \dot{e}_{\gamma\dot{\vartheta}}$  aber ohnehin keinen signifikanten Beitrag zur Rate der spezifische inneren thermischen Energie leistet, wird sie bei der Modellierung außen vor gelassen.

### Modellierung des Kristallisationsgrades

Weil sich die während der Kristallisation umgesetzte Energie aus dem Produkt von  $\Delta e_{\gamma}$  und  $\gamma$  zusammensetzt und der Wertebereich des Kristallisationsgrades zweckmäßigerweise auf das Intervall  $\gamma \in [0,1]$  gelegt wird, lassen sich die Verläufe des Kristallisationsgrades  $\gamma_{\text{DSC}}$  während der DSC-Versuche rekonstruieren. Abbildung 6.10 stellt die Verläufe von  $\gamma_{\text{DSC}}$  über der Temperatur für die unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeiten dar (links).

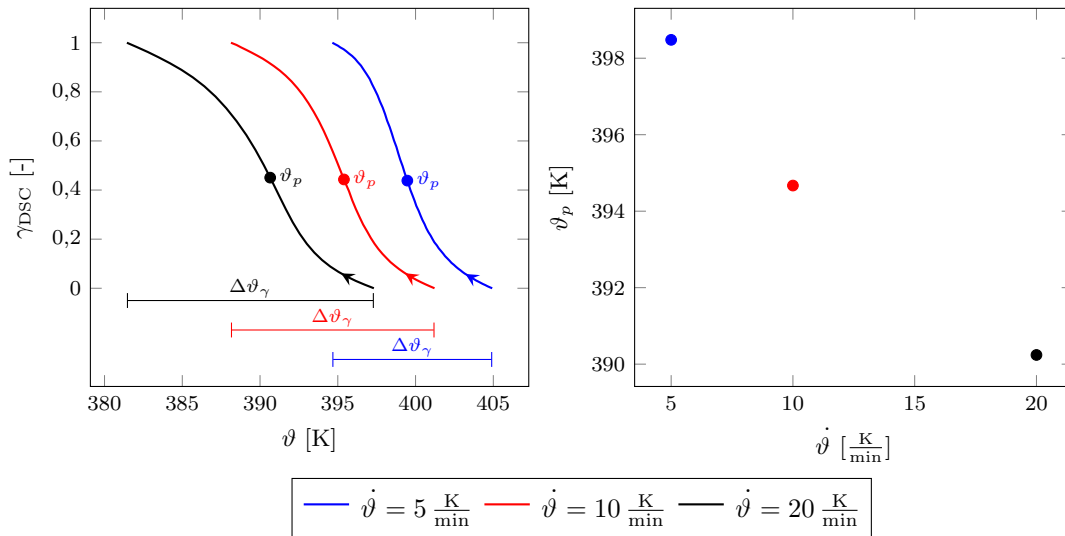


Abbildung 6.10: Im Experiment ermittelter Verlauf des Kristallisationsgrades (links) sowie Abhängigkeit der Peak-Temperatur von der Temperaturrate (rechts).

Bei hohen Temperaturen, also im flüssigen Bereich, existieren keine Kristalle und dementsprechend ist  $\gamma_{\text{DSC}} = 0$ . In der festen Phase hingegen erreicht  $\gamma_{\text{DSC}}$  sein Maximum von Eins. Die Kristallisation findet über einem Temperaturbereich  $\Delta\vartheta_\gamma$  statt, der mit steigender Abkühlgeschwindigkeit zunimmt. Der steilste Anstieg des Kristallisationsgrades lässt sich bei der Peak-Temperatur  $\vartheta_p$  beobachten. Das rechte Diagramm in Abbildung 6.10 lässt eine nichtlineare Abhängigkeit der Peak-Temperatur von der Temperaturrate erkennen. Im Gegensatz zur Erstarrung weisen  $\Delta\vartheta_\gamma$  und  $\vartheta_p$  keine Abhängigkeit von der Heizrate beim Aufschmelzen auf.

Diese Erkenntnisse motivieren eine exponentielle Ansatzfunktion für die Peak-Temperatur

$$\vartheta_p = \vartheta_{p0} - \vartheta_{p1}(1 - \exp[-\vartheta_{p2}|\dot{\vartheta}|]) - \vartheta_{p3} \quad (6.15)$$

mit den Parametern  $\vartheta_{p1}, \vartheta_{p2}, \vartheta_{p3}$  und der Temperatur  $\vartheta_{p0}$ , welche der Peak-Temperatur beim Aufschmelzen entspricht. Weiterhin wird eine Unterscheidung der Temperaturbereiche  $\Delta\vartheta_{\gamma_S}$  für die solide Phase und  $\Delta\vartheta_{\gamma_F}$  für die flüssige Phase getroffen, wobei letztere eine lineare Abhängigkeit von  $\dot{\vartheta}$  besitzt

$$\Delta\vartheta_{\gamma_F} = \Delta\vartheta_{\gamma_{F0}} + \Delta\vartheta_{\gamma_{F1}} \cdot |\dot{\vartheta}| \quad (6.16)$$

und auf die Parameter  $\Delta\vartheta_{\gamma_{F0}}$  und  $\Delta\vartheta_{\gamma_{F1}}$  zurückgreift.

Für die Evolutionsgleichung des Kristallisationsgrades wird ein der Arbeit von Piccarolo et al. (1992) entnommener Ansatz eingeführt

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{\tau} (\gamma_{\text{eq}}(\vartheta) - \gamma) . \quad (6.17)$$

Der darin enthaltene Parameter  $\tau$  fungiert als Dämpfung und wird für Erstarrung ( $\tau_F$ ) und Aufschmelzen ( $\tau_S$ ) unterschiedlich bestimmt. Der Ansatz (6.17) ist so zu verstehen, dass der Kristallisationsgrad  $\gamma$  einem temperaturabhängigen Gleichgewichtskristallisationsgrad  $\gamma_{\text{eq}}$  folgt. Mit der Festlegung der Identität

$$\gamma_{\text{eq}} \equiv \gamma_{\text{DSC}}$$

reduziert sich die Wahl von  $\gamma_{\text{eq}}$  auf eine Funktion, die die experimentell ermittelten Verläufe von  $\gamma_{\text{DSC}}$  abbildet. Abbildung 6.11 illustriert das Zusammenspiel der in Gleichung (6.17) enthaltenen Terme an charakteristischen Punkten während eines DSC-Versuches. Die Evolutionsgleichung bleibt konsistent bei kompletten Durchläufen des DSC-Versuches. Da sich  $\gamma_{\text{eq}}$  bei ein und derselben Temperatur aber unterschiedlichen Phasen unterscheidet, wird sowohl fürs Erstarren als auch fürs Aufheizen ein Ansatz formuliert. Für eine korrekte Zuordnung der Phase erfolgt ein Vergleich mit der Statusvariable  $\mathcal{S}_{Ph}$  (vgl. Tabelle 5.2).

Es verbleibt die Aufgabe, Funktionen für  $\gamma_{\text{eq}}$  zu finden. Die Kurven des experimentell ermittelten Kristallisationsgrades in Abbildung 6.10 lassen einen Verlauf erkennen, der denen von Sigmoid-Funktionen ähnelt. Als Vertreter solcher Funktionen sind beispielsweise

$$f_1(x) = \tanh x \quad ; \quad f_2(x) = \frac{2}{\pi} \arctan \frac{\pi}{2} x \quad ; \quad f_3(x) = \frac{x}{1 + |x|}$$

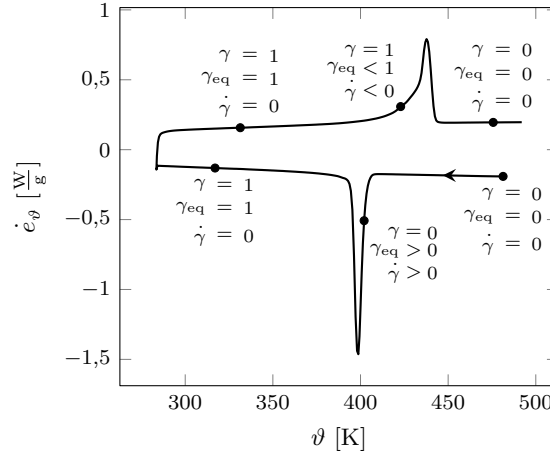


Abbildung 6.11: Darstellung charakteristischer Konstellationen der Parameter  $\gamma, \gamma_{eq}, \dot{\gamma}$ .

zu nennen. Ihnen gemein ist der typische S-Schlag zwischen den Funktionswerten  $-1$  und  $1$  mit mehr oder weniger steilen Anstiegen. Für die Abbildung von  $\gamma_{eq}$  taugen sie allerdings nur bedingt, weil der Übergang von minimalem zu maximalem Funktionswert auf dem Temperaturbereich  $\Delta\vartheta_\gamma$  erfolgen muss; sich der zugehörige Definitionsbereich bei den Sigmoid-Funktionen aber nicht genau einstellen lässt. Eine Alternative dazu bietet die für  $f_{Ph}$  bereits eingeführte Smooth-Step-Funktion

$$\gamma_{eq} = \begin{cases} 1, & \xi \leq 0 \\ 1 - \xi^3(10 - 15\xi + 6\xi^2), & 0 < \xi < 1 \\ 0, & \xi \geq 1 \end{cases} \quad ; \quad \xi = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}. \quad (6.18)$$

Die darin enthaltene Koordinate  $x$  folgt aus der Temperatur über die Beziehung

$$x = \frac{2(\vartheta - \vartheta_p)}{\Delta\vartheta_\gamma} \quad (6.19)$$

und setzt die relative Position der Temperatur  $\vartheta$  im Intervall  $\Delta\vartheta_\gamma$  um die Peak-Temperatur  $\vartheta_p$  in Beziehung zu dem Intervall  $[x_0, x_1]$ . Mit der Wahl  $x_0 = -1$  und  $x_1 = 1$  für die flüssige Phase bewegt sich  $\xi$  im Bereich von Null bis Eins während der Kristallisation. Beim Prozess des Aufschmelzens bedarf es weiterer Modifikationen der Smooth-Step-Funktion, weil sich die Peak-Temperatur außermittig von  $\Delta\vartheta_\gamma$  befindet. Ausgehend von zwei weiteren zu bestimmenden Koordinaten  $x_{00}$  und  $x_{10}$  sowie dem Parameter  $m$  folgen die angepassten Koordinaten  $x_0$  und  $x_1$  über die Beziehungen

$$x_0 = \max\left(x_{00}, x - m \cdot \frac{x - x_{00}}{x_{10} - x_{00}}\right) \quad ; \quad x_1 = \max(x, x_{10}). \quad (6.20)$$

Alle anderen Koordinaten werden wie gewohnt bestimmt. Abbildung 6.12 veranschaulicht den Einfluss der Parameter  $m$ ,  $x_{00}$  und  $x_{10}$  auf die resultierende Funktion für  $\gamma_{eq}$ . Mit den Werten  $m \geq 2$  und  $x_{00/10} = -1.0/1.0$  lassen sich die gleichen Verläufe erzielen wie für die Erstarrungskurve.

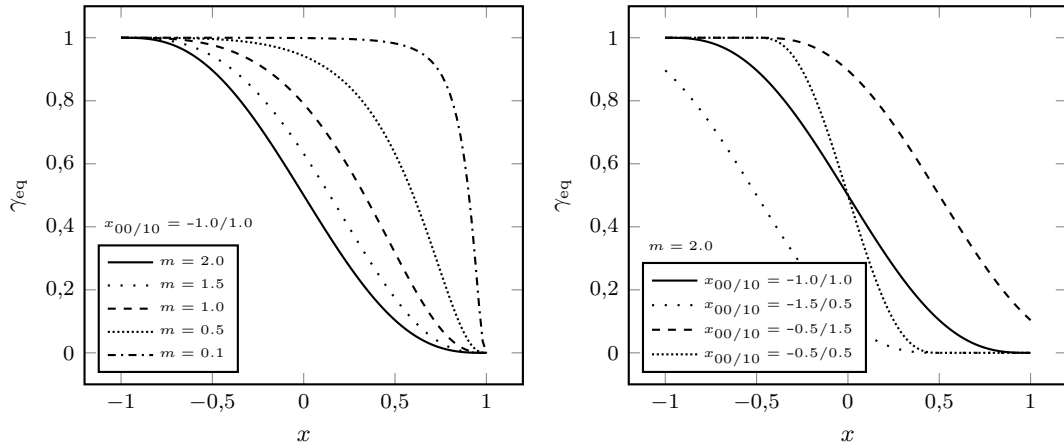


Abbildung 6.12: Einfluss der Smooth-Step-Parameter auf den Gleichgewichtskristallisationsgrad.

### 6.3.3 Identifikation der Materialparameter

Für die Identifikation der eingeführten Materialparameter wird eine Fehlerquadratminimierung unter Zuhilfenahme der *FORTRAN*-Bibliothek *MINPACK* durchgeführt. Die dafür zu minimierende Zielfunktion erfasst die Abweichungen der gemessenen Wärmeströme von den spezifischen inneren Energieraten des Materialmodells so wie die Unterschiede zwischen der durch Integration gewonnenen spezifischen inneren Energie aus dem Experiment von der des Materialmodells. Tabelle 6.2 führt die identifizierten Materialparameter auf.

Tabelle 6.2: Mit DSC-Versuchen identifizierte Materialparameter.

| Parameter                      | Wert    | Einheit              | Parameter                      | Wert    | Einheit                              |
|--------------------------------|---------|----------------------|--------------------------------|---------|--------------------------------------|
| $\vartheta_{p0}$               | 441,135 | [K]                  | $x_{00}$                       | -15,293 | [-]                                  |
| $\vartheta_{p1}$               | 16,119  | [K]                  | $x_{10}$                       | 0,001   | [-]                                  |
| $\vartheta_{p2}$               | 4,658   | [s K <sup>-1</sup> ] | $m$                            | 0,186   | [-]                                  |
| $\vartheta_{p3}$               | 36,393  | [K]                  | $c_{\vartheta_{1S}}$           | -1,108  | [J g <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ] |
| $\Delta\vartheta_{\gamma S}$   | 84,093  | [K]                  | $c_{\vartheta_{2S}}$           | 0,009   | [J g <sup>-1</sup> K <sup>-2</sup> ] |
| $\Delta\vartheta_{\gamma F_0}$ | 7,386   | [K]                  | $c_{\vartheta_{1F}}$           | 2,902   | [J g <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ] |
| $\Delta\vartheta_{\gamma F_1}$ | 6,599   | [s]                  | $c_{\vartheta_{2F}}$           | -0,001  | [J g <sup>-1</sup> K <sup>-2</sup> ] |
| $\tau_S$                       | 5,817   | [s]                  | $\Delta e_{\gamma\vartheta_0}$ | 356,587 | [J g <sup>-1</sup> ]                 |
| $\tau_F$                       | 8,088   | [s]                  | $\Delta e_{\gamma\vartheta_1}$ | 0,053   | [s K <sup>-1</sup> ]                 |
|                                |         |                      | $\Delta e_{\gamma\vartheta_2}$ | 373,942 | [J g <sup>-1</sup> ]                 |

Es sei erwähnt, dass einige dieser Parameter auch durch bloßes Ablesen aus den Messdaten gewonnen werden könnten (beispielsweise die Peak-Temperaturen), aber die Identifikation für alle Parameter gleichzeitig erfolgt. Dass dabei trotzdem ein Minimum gefunden

wird, unterstreicht den robusten Charakter des Materialmodells und deutet auf wenig Korrelationen der Parameter untereinander hin.

Die Grafen der beiden Diagramme in Abbildung 6.13 stellen das identifizierte Materialmodell den Messdaten gegenüber. Sowohl der Vergleich der spezifischen inneren Energierate (links) als auch der spezifischen inneren Energie (rechts) zeigen eine sehr gute Übereinstimmung des Materialmodells mit den Messdaten auf. Sowohl die Bereiche außerhalb der Kristallisation als auch die Phasen der Kristallisation werden korrekt beschrieben. Die Positionen der Peaks sowie deren Höhen stimmen sehr gut mit denen der Messdaten überein. Einzig bei den spezifischen inneren Energien lässt sich nach Ablauf des Versuches ein Versatz erkennen. Dieser ist aber auch auf den unterschiedlichen Temperaturverlauf bei Experiment und Simulation zurückzuführen. Während die Temperaturrate beim Experiment kontinuierlich verändert wird, erfolgt der Wechsel bei der Simulation schlagartig.

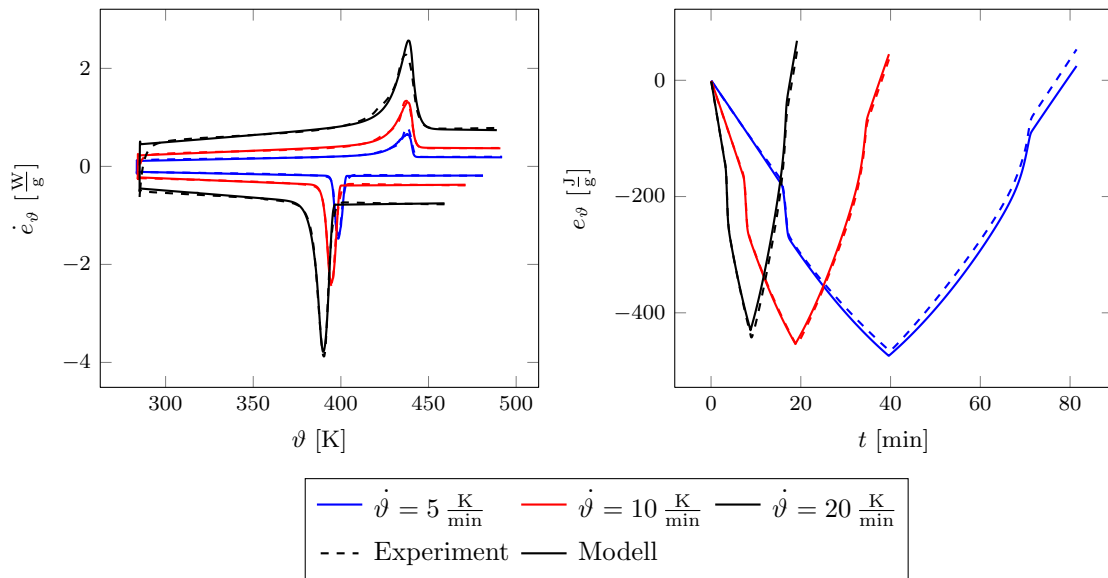


Abbildung 6.13: Vergleich des identifizierten Materialmodells mit den Messdaten der DSC-Versuche anhand der spezifischen inneren thermischen Energierate (links) und Energie (rechts).

Da die Identifikation der Materialparameter in Tabelle 6.2 auf den Messdaten von DSC-Versuchen mit nur drei Temperaturraten basiert, erfolgt eine Prüfung des Materialverhaltens außerhalb dieses Temperaturratenbereiches. Aus diesem Grund werden in Abbildung 6.14 die spezifischen inneren Energieraten für  $\dot{\vartheta} \in \{1,15,60\}$  K/min mit denen der experimentellen Basis (graue Fläche) verglichen. Sowohl die Kurve für  $\dot{\vartheta} = 15$  K/min als auch die für  $\dot{\vartheta} = 1$  K/min liegen innerhalb der grauen Fläche. Mit sinkender Temperaturrate nehmen die Wärmeströme ab und der Peak der Kristallisation verschiebt sich nach rechts. Der Peak beim Aufschmelzen behält wie erwartet seine Position. Eine Erhöhung der Temperaturrate auf  $\dot{\vartheta} = 60$  K/min zieht eine Erhöhung der spezifischen inneren Energieraten sowie eine Verschiebung der Peak-Temperatur der Kristallisation

nach links nach sich. Simulationen bei  $\dot{\vartheta} = 300 \text{ K/min}$  zeigen einen ähnlichen Trend<sup>1</sup> mit dem Unterschied, dass sich die Peak-Temperaturen nicht mehr wesentlich ändern. Dieses Verhalten lässt sich dem exponentiellen Charakter der Gleichung (6.15) zuordnen und verhindert ein Abfallen der Peak-Temperaturen in Bereiche, die sich physikalisch nicht mehr plausibel erklären lassen.

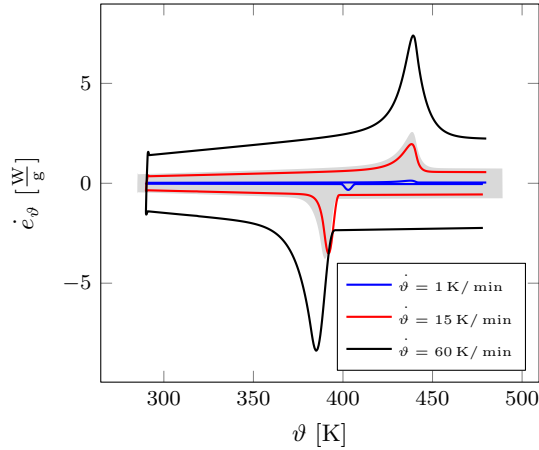


Abbildung 6.14: Vergleich des identifizierten Materialmodells für variierende Temperaturraten (Kurven) mit experimenteller Basis (graue Fläche).

### 6.3.4 Ableitung nach der Temperatur

Mit Blick auf die Implementierung der kalorischen Materialeigenschaften in die FE-Umgebung wird die Ableitung der spezifischen inneren thermischen Energie nach der Temperatur benötigt. Die Ableitung von Gleichung (6.11) liefert zunächst

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_{\vartheta}}{\partial \vartheta} = & \left[ \Delta e_{\gamma \dot{\vartheta}} + \left( c_{\vartheta_{1S}} \vartheta + c_{\vartheta_{2S}} \frac{\vartheta^2}{2} \right) - \left( c_{\vartheta_{1F}} \vartheta + c_{\vartheta_{2F}} \frac{\vartheta^2}{2} \right) \right] \cdot \frac{\partial \gamma}{\partial \vartheta} \\ & + \gamma \cdot (c_{\vartheta_{1S}} + c_{\vartheta_{2S}} \vartheta) + (1 - \gamma) \cdot (c_{\vartheta_{1F}} + c_{\vartheta_{2F}} \vartheta) \end{aligned}$$

und benötigt die partielle Ableitung des Kristallisationsgrades nach der Temperatur. Es sei erwähnt, dass auf die Ableitung des Terms  $\Delta e_{\gamma \dot{\vartheta}}$  nach der Temperatur verzichtet wird, weil dieser vernachlässigbar klein ist. Einen Zugang zur Ableitung  $\partial \gamma / \partial \vartheta$  bietet die Differentialgleichung (6.17). Unter Verwendung des Euler-Rückwärts-Verfahrens folgt eine explizite Formel zur Bestimmung des Kristallisationsgrades zum neuen Zeitpunkt  $t + \Delta t$

$${}^{t+\Delta t} \gamma = \frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{\tau}} \left[ \frac{\Delta t}{\tau} {}^{t+\Delta t} \gamma_{\text{eq}} + {}^t \gamma \right]$$

und somit gilt für die Ableitung nach der Temperatur

$$\frac{\partial {}^{t+\Delta t} \gamma}{\partial {}^{t+\Delta t} \vartheta} = \frac{1}{1 + \frac{\tau}{\Delta t}} \cdot \frac{\partial {}^{t+\Delta t} \gamma_{\text{eq}}}{\partial {}^{t+\Delta t} \vartheta}.$$

<sup>1</sup>Aus Gründen der Übersicht entfällt deren Darstellung in Abbildung 6.14.

Nachfolgend entfallen aus Gründen der Übersichtlichkeit die Indizes des Zeitpunktes sofern dadurch keine Missverständnisse entstehen. Die Ableitung des Gleichgewichtskristallisationsgrades nach der Temperatur geschieht über die Kettenregel und die Ableitung der relativen Koordinate  $\xi$  nach der Temperatur

$$\frac{\partial \gamma_{\text{eq}}}{\partial \vartheta} = \begin{cases} 0, & \xi \leq 0 \\ [-30\xi^2 + 60\xi^3 - 30\xi^4] \cdot \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta}, & 0 < \xi < 1 \\ 0, & \xi \geq 1 \end{cases} .$$

Von hier an bedarf die weitere Ableitung einer Unterscheidung zwischen dem Prozess des Erstarrens und des Aufschmelzens, weil sowohl die Werte von  $x_0$  und  $x_1$  als auch  $\vartheta_p$  und  $\Delta\vartheta_\gamma$  für beide Prozesse unterschiedlich definiert sind.

### Erstarren

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta} &= \frac{1}{x_1 - x_0} \cdot \frac{dx}{d\vartheta} \\ \frac{dx}{d\vartheta} &= \frac{\partial x}{\partial \vartheta} - \frac{2}{\Delta\vartheta_{\gamma F}} \cdot \frac{\partial \vartheta_p}{\partial \vartheta} + \frac{2(\vartheta_p - \vartheta)}{\Delta\vartheta_{\gamma F}^2} \cdot \frac{\partial \Delta\vartheta_{\gamma F}}{\partial \vartheta} \\ \frac{\partial x}{\partial \vartheta} &= \frac{2}{\Delta\vartheta_{\gamma F}} \\ \frac{\partial \vartheta_p}{\partial \vartheta} &= -\vartheta_{p1} \cdot \vartheta_{p2} \cdot \exp[-\vartheta_{p2}|\dot{\vartheta}|] \cdot \frac{\dot{\vartheta}}{|\dot{\vartheta}|} \cdot \frac{1}{\Delta t}, \dot{\vartheta} \neq 0 \\ \frac{\partial \Delta\vartheta_{\gamma F}}{\partial \vartheta} &= \Delta\vartheta_{\gamma F1} \cdot \frac{\dot{\vartheta}}{|\dot{\vartheta}|} \cdot \frac{1}{\Delta t}, \dot{\vartheta} \neq 0 \end{aligned}$$

### Aufschmelzen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta} &= \frac{1}{x_1 - x_0} \cdot \frac{\partial x}{\partial \vartheta} + \frac{x - x_1}{(x_1 - x_0)^2} \cdot \frac{\partial x_0}{\partial \vartheta} + \frac{x_0 - x}{(x_1 - x_0)^2} \cdot \frac{\partial x_1}{\partial \vartheta} \\ \frac{\partial x_0}{\partial \vartheta} &= \begin{cases} 0, & x_{00} \geq x - m \frac{x - x_{00}}{x_{10} - x_{00}} \\ \left[1 - \frac{m}{x_{10} - x_{00}}\right] \cdot \frac{dx}{d\vartheta}, & \text{sonst.} \end{cases} \\ \frac{\partial x_1}{\partial \vartheta} &= \begin{cases} \frac{dx}{d\vartheta}, & x \geq x_{10} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \\ \frac{dx}{d\vartheta} &= \frac{2}{\Delta\vartheta_{\gamma S}} \end{aligned}$$

Damit stehen alle Terme zur Ableitung der spezifischen inneren Energie nach der Temperatur zur Verfügung. Es sei darauf hingewiesen, dass isotherme Vorgänge mit  $\dot{\vartheta} = 0$  gesonderte Behandlungen der Terme mit  $\dot{\vartheta}/|\dot{\vartheta}|$  erfordern. Eine Möglichkeit dafür bietet die Verwendung einer  $\epsilon$ -Umgebung, innerhalb derer die Ableitungen von  $\xi$  nach der Temperatur gleich sind

$$\left. \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta} \right|_{|\dot{\vartheta}| < |\epsilon|} = \left. \frac{\partial \xi}{\partial \vartheta} \right|_{|\dot{\vartheta}| = |\epsilon|} \quad \text{mit: } |\epsilon| \ll 1 \text{ K s}^{-1}, \quad \text{sign}(\epsilon) = \text{sign}(\dot{\vartheta}).$$



## 6.4 Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

In Ermangelung geeigneter Experimente wird für die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit auf die in Abschnitt 4.5 beschriebene RVE-Homogenisierung zurückgegriffen. Das vom RVE beschriebene Volumen wird mit Hilfe von  $60^3$  Elementen diskretisiert und die zu Grunde liegende FOV entspricht einem zweiten Moment der FDF mit den Koeffizienten  $[A_{ab}] = \text{diag}(0 \ 0 \ 1)$ , also einer unidirektionalen FOV. Den beiden Phasen des RVE werden entsprechend der Herstellerangaben die beiden Wärmeleitfähigkeiten  $\lambda_1 = 0,11723 \text{ W}/(\text{mK})$  und  $\lambda_2 = 1,0 \text{ W}/(\text{mK})$  zugewiesen. Eine Auswertung der effektiven Wärmeströme und Temperaturgradienten entsprechend Gleichung (3.55) liefert die Koeffizientenmatrix

$$[\lambda_{ab}] = \begin{bmatrix} 0,1710 & 0,0001 & -0,0006 \\ 0,0001 & 0,1704 & 0,0009 \\ -0,0006 & 0,0009 & 0,2723 \end{bmatrix}.$$

An Hand dieser Koeffizientenmatrix lassen sich die Materialparameter  $\lambda_{\parallel}$  und  $\lambda_{\perp}$  (vgl. (5.61)) direkt ablesen

$$\begin{aligned} \lambda_{\parallel} &= 0,272 \frac{\text{W}}{\text{mK}} \\ \lambda_{\perp} &= 0,171 \frac{\text{W}}{\text{mK}} \end{aligned}.$$

Die RVE-Homogenisierungen zeigen demnach, dass Wärmeströme bei unidirektionaler FOV in Faserrichtung ungefähr 1,6-mal schneller geleitet werden als senkrecht dazu. Es sei darauf hingewiesen, dass Gleichung (5.61) zwar den Wärmeleitungstensor in der Referenzkonfiguration beschreibt, bei den RVE-Homogenisierungen zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit jedoch keine Deformationen auftreten und somit Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration übereinstimmen.

Abbildung 6.15 stellt den Betrag des Wärmestroms dar, wenn ein Temperaturgradient in 3-Richtung aufgebracht wird.

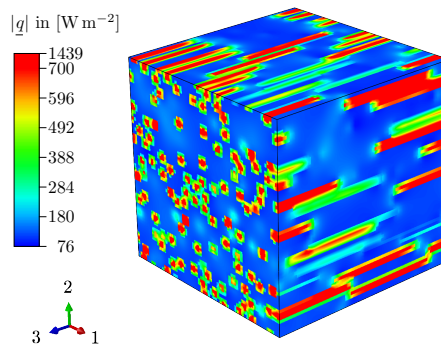


Abbildung 6.15: Betrag des Wärmestromvektors bei Aufgabe eines Temperaturgradienten in 3-Richtung.

Obwohl die Fasern nur auf Ebene der Gaußpunkte zugewiesen werden, lassen sich deren Lage und Geometrie deutlich erkennen, weil sie höhere Wärmeströme aufweisen als das Matrixmaterial.

## 6.5 Messung der Referenzdichte

Für die Bestimmung der Referenzdichte  $\tilde{\varrho}$  wird eine Ringprobe mit klar definierter Geometrie gewogen. Das Verhältnis von gemessener Masse zu Volumen der Ringprobe liefert die gesuchte Dichte  $\tilde{\varrho}$  in der Referenzkonfiguration bei  $\tilde{\vartheta} = 20^\circ\text{C}$ . Abbildung 6.16 stellt die Maße der Ringprobe dar.

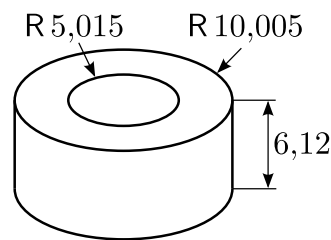


Abbildung 6.16: Maße der zur Dichtebestimmung herangezogenen Ringprobe.

Sowohl die beiden Radien als auch die Höhe wurden mit Hilfe eines Messschiebers bestimmt. Durch Multiplikation der Grundfläche mit der Höhe lässt sich das Volumen  $V_o$  der Ringprobe ausrechnen

$$V_o = \pi \cdot h \cdot (R_a^2 - R_i^2) = 1441,026 \text{ mm}^3.$$

Dabei sind  $R_a$  der Außenradius,  $R_i$  der Innenradius und  $h$  die Höhe. Das Wiegen der Ringprobe ergibt eine Masse  $m_o = 1,486 \text{ g}$ . Damit lässt sich die Dichte über  $\tilde{\varrho} = m_o/V_o$  ausrechnen

$$\tilde{\varrho} = 1,0312 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}.$$

## 6.6 Übersicht der identifizierten Materialparameter

Folgend werden alle identifizierten und eingeführten Materialparameter aufgelistet.

**Thermische Deformation**

Ausdehnungsfunktion

$$\varphi_{\parallel} = \exp[\alpha_{\parallel}(\vartheta - \vartheta_0)]$$

$$\varphi_{\perp} = \exp[\alpha_{\perp}(\vartheta - \vartheta_0)]$$

Ausdehnungskoeffizient

$$\alpha_{\parallel} = 5,623 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$$

$$\alpha_{\perp} = 1,015 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

**Steifigkeiten**

Kompressionsmodul

$$K = 3000 \text{ MPa}$$

Schubmodul, s. Gl. (6.4)

$$G_1 = 379,24 \text{ MPa}$$

Schubmodul Maxwell-Elemente

$$G_{MW} = 1067,80 \text{ MPa}$$

E-Modul, s. Gl. (6.7)

$$E_{F_1} = 686,01 \text{ MPa}$$

$$E_{F_2} = 4,70 \text{ MPa K}^{-1}$$

Temperaturfunktion, s. Gl. (6.3)

$$f_{\vartheta_1} = -2,14 \cdot 10^{-2}$$

$$f_{\vartheta_2} = 0,988$$

**Viskosität**

Prozessgröße, s. Gl. (6.6)

$$\dot{z}_1 = 1,05$$

**Wärmeleitfähigkeit**

Koeffizienten

$$\lambda_{\parallel} = 0,272 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

$$\lambda_{\perp} = 0,171 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

**Dichte**

Dichte

$$\tilde{\varrho} = 1,0312 \text{ g cm}^{-3}$$

---

**Kalorische Eigenschaften**


---

|  |  |
|--|--|
| Peak-Temperatur, s. Gl. (6.15)                       | $\vartheta_{p0} = 440,236 \text{ K}$<br>$\vartheta_{p1} = 16,119 \text{ K}$<br>$\vartheta_{p2} = 4,658 \text{ s K}^{-1}$<br>$\vartheta_{p3} = 35,494 \text{ K}$  |
| Temperaturbereich Kristallisation, s. Gl. (6.16)     | $\Delta\vartheta_{\gamma S} = 50,573 \text{ K}$<br>$\Delta\vartheta_{\gamma F_0} = 3,693 \text{ K}$<br>$\Delta\vartheta_{\gamma F_1} = 3,299 \text{ s}$  |
| Dämpfung   | $\tau_S = 5,817 \text{ s}$<br>$\tau_F = 8,088 \text{ s}$   |
| Parameter Smooth-Step-Funktion beim Aufschmelzen     | $x_{00} = -12,701$<br>$x_{10} = 0,018$<br>$m = 0,155$  |
| Wärmekapazitäten                                     | $c_{\vartheta_{1S}} = -1,108 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$<br>$c_{\vartheta_{2S}} = 0,009 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-2}$<br>$c_{\vartheta_{1F}} = 2,902 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$<br>$c_{\vartheta_{2F}} = -0,001 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-2}$ |
| ratenabhängige Kristallisationsenergie s. Gl. (6.14) | $\Delta e_{\gamma\vartheta_0} = 400,743 \text{ J g}^{-1}$<br>$\Delta e_{\gamma\vartheta_1} = 0,047 \text{ s K}^{-1}$<br>$\Delta e_{\gamma\vartheta_2} = 329,782 \text{ J g}^{-1}$  |

---

**Temperaturen**


---

|                         |  |
|-------------------------|--|
| Referenztemperatur      | $\tilde{\vartheta} = 293 \text{ K}$  |
| Schmelztemperatur       | $\vartheta_S = \vartheta_p$  |
| Grenztemperaturen       | $\vartheta_{S1} = \vartheta_S$<br>$\vartheta_{S0} = \vartheta_{S1} - 20 \text{ K}$ |
| Glasübergangstemperatur | $\vartheta_{GI} = 273 \text{ K}$   |

---

## 7 Anwendung in einer FE-Umgebung

Dieses Kapitel widmet sich der numerischen Umsetzung des Stoffgesetzes innerhalb der FE-Umgebung ABAQUS sowie der Simulation eines Kettenglieds, welches im Spritzguss hergestellt wird. Zunächst wird die Übertragung der konstitutiven Gleichungen von der Referenzkonfiguration auf die für ABAQUS benötigte Momentankonfiguration erläutert. Am Beispiel einer rotierenden Platte werden anschließend Aspekte der Anisotropie auf korrekte Umsetzung geprüft.

Die Simulation der Abkühlung eines Kettenglieds dient der Veranschaulichung der Eigenschaften des Materialmodells bei einem realen Anwendungsfall. Insbesondere soll untersucht werden, inwiefern sich eine Variation des Einspritzpunktes auf die Eigenschaften des Kettenglieds auswirkt.

Abschließend wird das Verhalten des Kettenglieds bei großen zyklischen Deformationen dargestellt. Letzteres Beispiel besitzt keinen Anspruch, eine reale Betriebslast wiederzugeben. Vielmehr dient es dazu, den Effekt der Selbsterwärmung und den Einfluss der Faserorientierungsverteilung herauszustellen.

### 7.1 Numerische Umsetzung des Stoffgesetzes

Die numerische Umsetzung des Stoffgesetzes innerhalb der Simulationsumgebung ABAQUS erfolgt mit Hilfe der Nutzerschnittstellen *SDVINI*, *UMAT* und *UMATHHT*. Die Routine *SDVINI* dient der Bereitstellung und Initialisierung der Statusvariablen aus Tabelle 5.2. Die Spannung, dissipative Anteile in Folge mechanischer Deformation sowie deren Ableitungen nach der Verzerrung und Temperatur werden in der Schnittstelle *UMAT* definiert. Der Routine *UMATHHT* schließlich obliegt die Entwicklung der inneren thermischen Energie sowie des Wärmestroms in Folge von Wärmeleitung. Da ABAQUS das thermomechanische Feldproblem in der aktuellen Konfiguration mit Hilfe eines Updated-Lagrange-Algorithmus (vgl. Abaqus (2014b)) löst, bedarf es einer Übertragung der konstitutiven Gleichungen.

### 7.1.1 Größen der Schnittstelle *UMAT*

Die Nutzerschnittstelle *UMAT* verlangt eine Aktualisierung der Spannungen im Feld<sup>2</sup> *STRESS* sowie der dissipativen Anteile im Feld *RPL*. Als Spannungsmaß wird die Cauchy-Spannung  $\underline{\underline{\sigma}}$  erwartet, welche aus der zweiten Piola-Kirchhoff-Spannung mit Hilfe der Push-forward-Operation

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{1}{J_3} \underline{\underline{F}} \cdot \underline{\underline{\tilde{T}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T \quad (7.1)$$

folgt. Die dissipativen Anteile lassen sich der Übertragung des Terms  $\tilde{\mathcal{R}}$  in die Momentan-konfiguration zuordnen. Die integrale Betrachtung der Definitionsgleichung (5.66) von  $\tilde{\mathcal{R}}$  unter Beachtung des Zusammenhanges (2.24)

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\mathcal{R}} \, d\tilde{V} &= \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \tilde{\mathcal{D}}_d \, d\tilde{V} - \int_{\tilde{\mathcal{G}}} \vartheta \tilde{\varrho} \dot{s} \, d\tilde{V}, \\ \int_{\mathcal{G}} \frac{1}{J_3} \tilde{\mathcal{R}} \, dV &= \int_{\mathcal{G}} \frac{1}{J_3} \tilde{\mathcal{D}}_d \, dV - \int_{\mathcal{G}} \frac{1}{J_3} \vartheta \tilde{\varrho} \dot{s} \, dV \end{aligned} \quad (7.2)$$

erlaubt die Identifikation des gesuchten Terms

$$\mathcal{R} = \frac{1}{J_3} \tilde{\mathcal{R}}. \quad (7.3)$$

Die Ableitung  $\underline{\underline{k}}$  der Spannung nach der Verzerrung wird dem Feld *dsSddE* übergeben. Sie resultiert aus der Übertragung der Materialtangente  $\frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}}{\partial \underline{\underline{C}}}$  und wird in der Arbeit von Ihlemann (2014) wie folgt beschrieben

$$\underline{\underline{k}} = 2 \left\{ (\underline{\underline{F}} \circ \underline{\underline{F}}^T)^{S_{24}} \cdot \frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}}{\partial \underline{\underline{C}}} \cdot (\underline{\underline{F}}^T \circ \underline{\underline{F}})^{S_{24}} + (\underline{\underline{\tau}} \circ \underline{\underline{I}})^{S_{24}} \right\}. \quad (7.4)$$

Den Zugang zu dieser Gleichung verschaffen die Betrachtung der zeitlichen Ableitung der Lagrange'schen Größe sowie der Zusammenhang (2.30) zwischen der Rate des rechten Cauchy-Green-Tensors und dem Tensor der Formänderungsgeschwindigkeiten. In ähnlicher Weise lässt sich die Ableitung von  $\mathcal{R}$  nach der Verzerrung  $\underline{\underline{\chi}}$  herleiten

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{R}} &= \frac{1}{J_3} \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}}{\partial \underline{\underline{C}}} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} - \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{J_3^2} \frac{J_3}{2} \underline{\underline{C}}^{-1} \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} \\ &= \frac{1}{J_3} \left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}}{\partial \underline{\underline{C}}} - \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{2} \underline{\underline{C}}^{-1} \right] \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} \\ &= \frac{2}{J_3} \underline{\underline{F}} \cdot \underbrace{\left[ \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}}{\partial \underline{\underline{C}}} - \frac{\tilde{\mathcal{R}}}{2} \underline{\underline{C}}^{-1} \right]}_{=\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \underline{\underline{\chi}}}} \cdot \underline{\underline{F}}^T \cdot \dot{\underline{\underline{C}}} \end{aligned} \quad (7.5)$$

und in das Feld *dRPLdE* übergeben.

<sup>2</sup>Im Zusammenhang mit Nutzerschnittstellen von ABAQUS ist der Begriff „Feld“ als Array-Variable vom Typ REAL mit doppelter Maschinengenauigkeit zu verstehen.

Die Ableitungen der Spannung ( $ddSddT$ ) sowie der dissipativen Anteile ( $dRPLdT$ ) nach der Temperatur folgen mit den Gleichungen

$$\frac{\partial \underline{\underline{\sigma}}}{\partial \vartheta} = \frac{1}{J_3 \underline{\underline{F}}} \cdot \frac{\partial \underline{\underline{\tilde{T}}}}{\partial \vartheta} \cdot \underline{\underline{F}}^T \quad ; \quad \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \vartheta} = \frac{1}{J_3} \frac{\partial \tilde{\mathcal{R}}}{\partial \vartheta}. \quad (7.6)$$

### 7.1.2 Größen der Schnittstelle *UMATHHT*

Die Nutzerschnittstelle *UMATHHT* aktualisiert die spezifische innere thermische Energie im Feld  $U$  sowie den Vektor des Wärmestroms in Folge von Wärmeleitung im Feld  $FLUX$ . Weiterhin verlangt sie die Übergabe der Ableitungen nach der Temperatur ( $dUdT$ ,  $dFdT$ ) sowie nach dem Temperaturgradienten ( $dUdG$ ,  $dFdG$ ). Die Modellierung der spezifischen inneren thermischen Energie wird von Gleichung (6.11) beschrieben. Sie besitzt keine Abhängigkeit vom Temperaturgradienten, weswegen die Ableitung nach  $\underline{\nabla}(\vartheta)$  zu Null gesetzt wird. Die Ableitung nach der Temperatur wird in Unterabschnitt 6.3.4 dargelegt.

Der Wärmestrom  $\underline{q}$  in der Momentankonfiguration folgt nach dem Fourier-Modell (vgl. Holzapfel (2010)) mit

$$\underline{q} = -\underline{\underline{\lambda}} \cdot \underline{\nabla}(\vartheta). \quad (7.7)$$

Die Bestimmungsgleichung für den Tensor  $\underline{\underline{\lambda}}$  der Wärmeleitung in der Momentankonfiguration findet sich in Gleichung (5.62). Der lineare Zusammenhang zwischen  $\underline{q}$  und  $\underline{\nabla}(\vartheta)$  begründet die Übergabe von  $-\underline{\underline{\lambda}}$  als Materialtangente an das Feld  $dFdG$ . Da  $\underline{q}$  keine Abhängigkeit von der Temperatur besitzt, entfällt die Ableitung nach der Temperatur.

### 7.1.3 Verhalten bei großen Rotationen

Am Beispiel einer rotierenden Platte soll die korrekte Erfassung der anisotropen Wärmeleitung sowie der anisotropen thermischen Ausdehnung demonstriert werden. Die Platte (vgl. Abbildung 7.1) setzt sich aus zwei Teilbereichen zusammen und erfährt während der Simulation eine Rotation  $\underline{R}$

$$[R_{ab}] = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{mit: } \varphi \in [0^\circ, 90^\circ] \quad (7.8)$$

um die 3-Achse.

#### Wärmeleitung einer rotierenden Platte

Für das Beispiel der Wärmeleitung wird der Winkel  $\varphi$  über eine Zeit von 1000 s linear von  $0^\circ$  auf  $90^\circ$  erhöht. Den Teilbereichen werden die Anfangstemperaturen  $\vartheta_1 = 350 \text{ K}$  und  $\vartheta_2 = 293 \text{ K}$  zugewiesen, sodass sich ein Wärmefluss von Innen nach Außen einstellt. An den äußeren Rändern der Platte kann keine Wärme abfließen, weswegen sich die

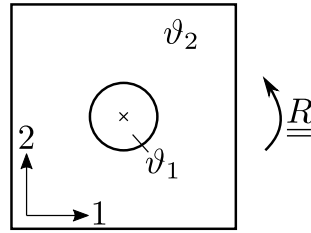


Abbildung 7.1: Anfangs- und Randbedingungen der rotierenden Platte.

Temperaturen beider Teilbereiche annähern. Jedem Materialpunkt wird ein zweites Moment  $[\tilde{A}_{ab}] = \text{diag}(1 \ 0 \ 0)$  der Faserdichtefunktion hinterlegt, so dass in der Referenzkonfiguration alle Fasern parallel zur 1-Achse orientiert sind. Die Platte wird lediglich rotiert, aber in jeglicher Ausdehnung behindert.

Abbildung 7.2 stellt das Temperaturfeld der rotierenden Platte nach 500 s und 1000 s dar, also bei einem Drehwinkel von  $45^\circ$  und  $90^\circ$ . Während nach der Hälfte der Zeit der Kern noch immer nahezu seine Anfangstemperatur besitzt, wurde ihm zum Ende der Simulation deutlich Wärme entzogen. Das Temperaturfeld im Inneren der Platte nimmt eine elliptische Form ein, was auf die Anisotropie der Wärmeleitfähigkeit zurückzuführen ist. Die große Hauptachse der Ellipse liegt zu jedem Zeitpunkt parallel zu der Kante der Platte, die ursprünglich in die 1-Richtung zeigte. Sie erfährt also die Rotation  $\underline{R}$  und zeigt somit, dass die anisotropen Eigenschaften der Wärmeleitfähigkeit bei großen Rotationen korrekt erfasst werden.

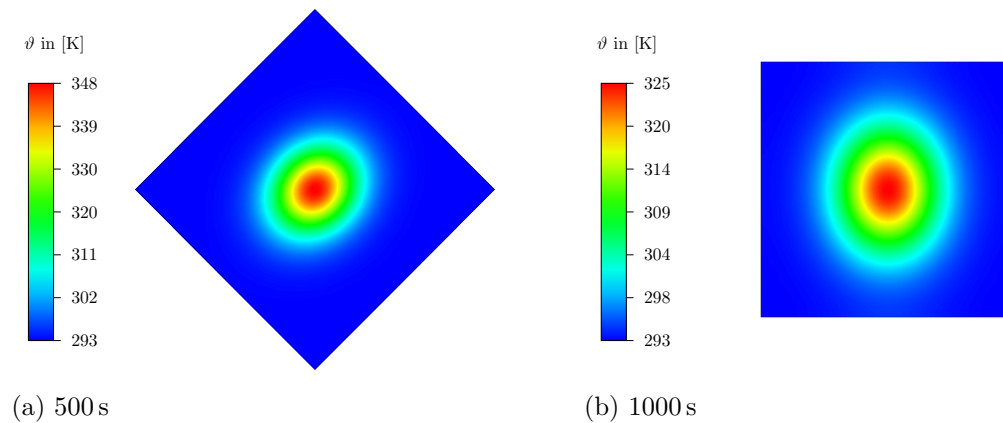


Abbildung 7.2: Temperaturfeld der rotierenden Platte in Kelvin nach 500 s und 1000 s.

### Thermische Dehnung einer rotierenden Platte

In einem zweiten Beispiel soll die Anisotropie der thermischen Dehnung herausgestellt werden. Zu diesem Zweck werden die Anfangstemperaturen zu  $\vartheta_1 = \vartheta_2 = 293 \text{ K}$  gewählt. Über einem Zeitraum von 10 s wird der Drehwinkel linear von  $0^\circ$  auf  $90^\circ$  und die Temperatur in der gesamten Platte auf 350 K erhöht. Die Platte folgt der Rotation  $\underline{R}$ , darf sich aber zusätzlich ausdehnen, sodass die Forderung nach Spannungsfreiheit bei Tempera-



turänderung erfüllt wird. Als Faserorientierungsverteilung in der Referenzkonfiguration wird sowohl eine unidirektionale Ausrichtung aller Fasern in die 1-Richtung als auch eine isotrope Verteilung gewählt.

Abbildung 7.3 zeigt die Koeffizienten des Verschiebungsgradienten über dem Drehwinkel für beide FOV.

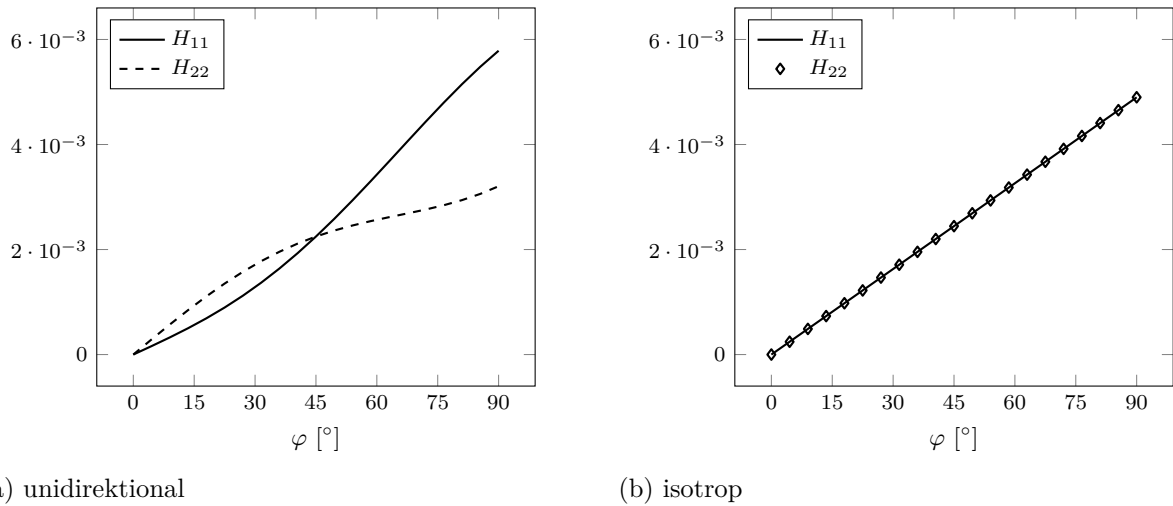


Abbildung 7.3: Spannungsfreie Dehnung der rotierenden Platte für eine unidirektionale und eine isotrope Faserorientierungsverteilung. Dargestellt werden die Komponenten  $H_{11}$  und  $H_{22}$  des Verschiebungsgradienten.

Die thermische Normaldehnung in 1-Richtung bleibt bis zu einem Drehwinkel von  $45^\circ$  unter der in 2-Richtung bevor sie die Normaldehnung in 2-Richtung übersteigt. Die Endwerte der Koeffizienten des Verschiebungsgradienten betragen

$$H_{11} = 5,7855 \cdot 10^{-3} \quad ; \quad H_{22} = 3,2051 \cdot 10^{-3} .$$

Der Verlauf beider Kurven lässt sich damit erklären, dass sich das Material in Faserrichtung weniger ausdehnt als quer dazu. Bis zu einem Drehwinkel von  $45^\circ$  zeigen die Fasern mehr in 1-Richtung als in 2-Richtung, was zur Folge hat, dass  $H_{11} < H_{22}$  gilt. Danach kehrt sich das Verhältnis immer mehr um bis schließlich die Fasern komplett in die 2-Richtung orientiert sind. Aus diesem Grund fällt der Koeffizient  $H_{22}$  hinter  $H_{11}$  ab. Für den Sonderfall der unidirektionalen FOV lassen sich die thermischen Dehnungen unmittelbar aus Gleichung (6.2) bestimmen und ergeben sich zu

$$\varphi_{\parallel} - 1 = 3,21 \cdot 10^{-3} \quad ; \quad \varphi_{\perp} - 1 = 5,802 \cdot 10^{-3} .$$

Diese Werte entsprechen den jeweiligen Koeffizienten des Verschiebungsgradienten und bestätigen das Konzept der mitrotierenden Faserrichtungen. Für den Fall einer isotropen FOV dehnt sich die Platte in alle Richtungen gleich aus. Der Endwert der thermischen Dehnung liegt zwischen den beiden Endwerten der Platte mit unidirektionaler FOV. Damit zeigt sich eine hemmende Wirkung der Fasern gegen thermische Ausdehnung, ohne dass eine Vorzugsrichtung ins Material eingebracht wird.

## 7.2 Simulation eines Kettenglieds

Das Stoffgesetz und dessen Umsetzung in ABAQUS wird in diesem Abschnitt genutzt, um den Abkühlvorgang eines Kettenglieds zu untersuchen. Das Kettenglied in Abbildung 7.4 wird an der Professur *Fördertechnik* der *TU Chemnitz* entwickelt und besitzt die Maße  $53 \times 20,5 \times 58$  mm in  $1 \times 2 \times 3$ -Richtung sowie eine maximale Wandstärke von 6 mm. Die Herstellung des Kettenglieds erfolgt im Spritzguss mit einer Füllzeit von 1,22 s. Das Kettenglied verbleibt 46,5 s in der Kavität zum Abkühlen und wird anschließend ausgestoßen. Während es sich in der Kavität befindet, wird ein zeitlich variabler Nachdruck über den Einspritzpunkt aufgebracht. Die Intervalle des Nachdrucks sind in Tabelle 7.1 zu sehen.

Tabelle 7.1: Verlauf des Nachdrucks über der Zeit.

| $t$ [s]   | 0 | 1   | 11  | 16  | 16,5 | 46,5 |
|-----------|---|-----|-----|-----|------|------|
| $p$ [bar] | 0 | 150 | 350 | 260 | 110  | 0    |

Ziel dieses Abschnittes ist die Entwicklung des Temperaturfeldes sowie die Entstehung von Eigenspannungen und Verzug zu verfolgen. Durch Variation des Einspritzpunktes soll untersucht werden, inwiefern er sich auf die Eigenschaften des fertigen Bauteils auswirkt. Die Position der beiden Einspritzpunkte ① und ② wird in Abbildung 7.4 dargestellt.

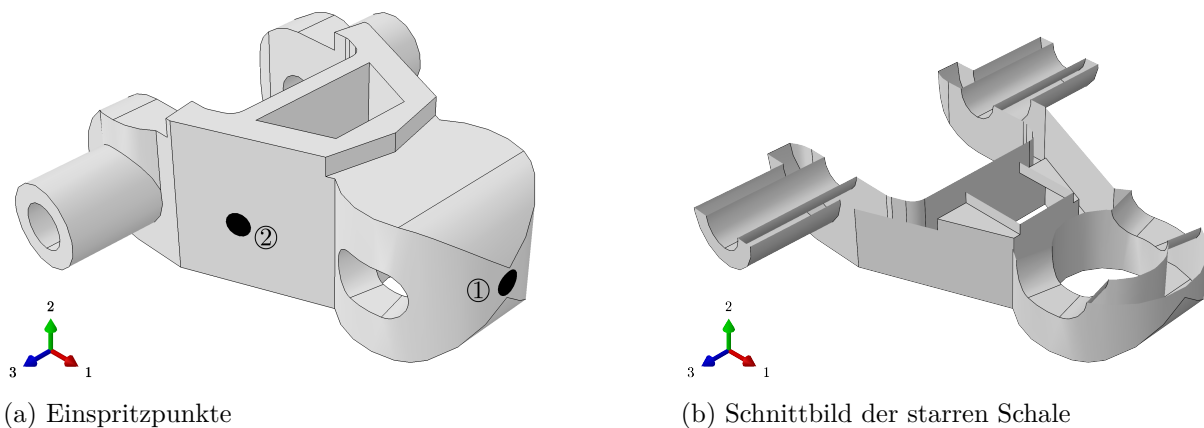


Abbildung 7.4: Geometrie des Kettenglieds mit zwei unterschiedlichen Einspritzpunkten (links). Das Kettenglied wird von einer starren Schale umgeben (rechts).

### 7.2.1 Anfangsbedingungen

Den Ausgangspunkt der Simulationen bildet die Definition der Anfangsbedingungen. Diese enthalten vor Allem Informationen über die Faserorientierungsverteilung in Form des zweiten Momentes  $\underline{\underline{\tilde{A}}}$  sowie die Temperaturverteilung im Bauteil. Beide Informationen

werden aus einer Simulation des Füllvorgangs gewonnen. Die dabei verwendete Software basiert auf OpenFOAM (vgl. Ospald (2014)). Da das Netz der Strömungssimulation und das Netz der FE-Simulation voneinander abweichen, werden die Temperatur bzw. der Tensor  $\underline{\tilde{A}}$  mittels Interpolation auf die Knoten bzw. Gaußpunkte des FE-Netzes übertragen. Letzteres besteht aus circa 87 000 Tetraeder-Elementen mit linearer Ansatzfunktion für Verschiebung und Temperatur.

Abbildung 7.5 stellt den Orientierungsgrad sowie die Projektion der Eigenvektoren von  $\underline{\tilde{A}}$  mit den größten Eigenwerten für beide Einspritzpunkte in Schnittbildern gegenüber.

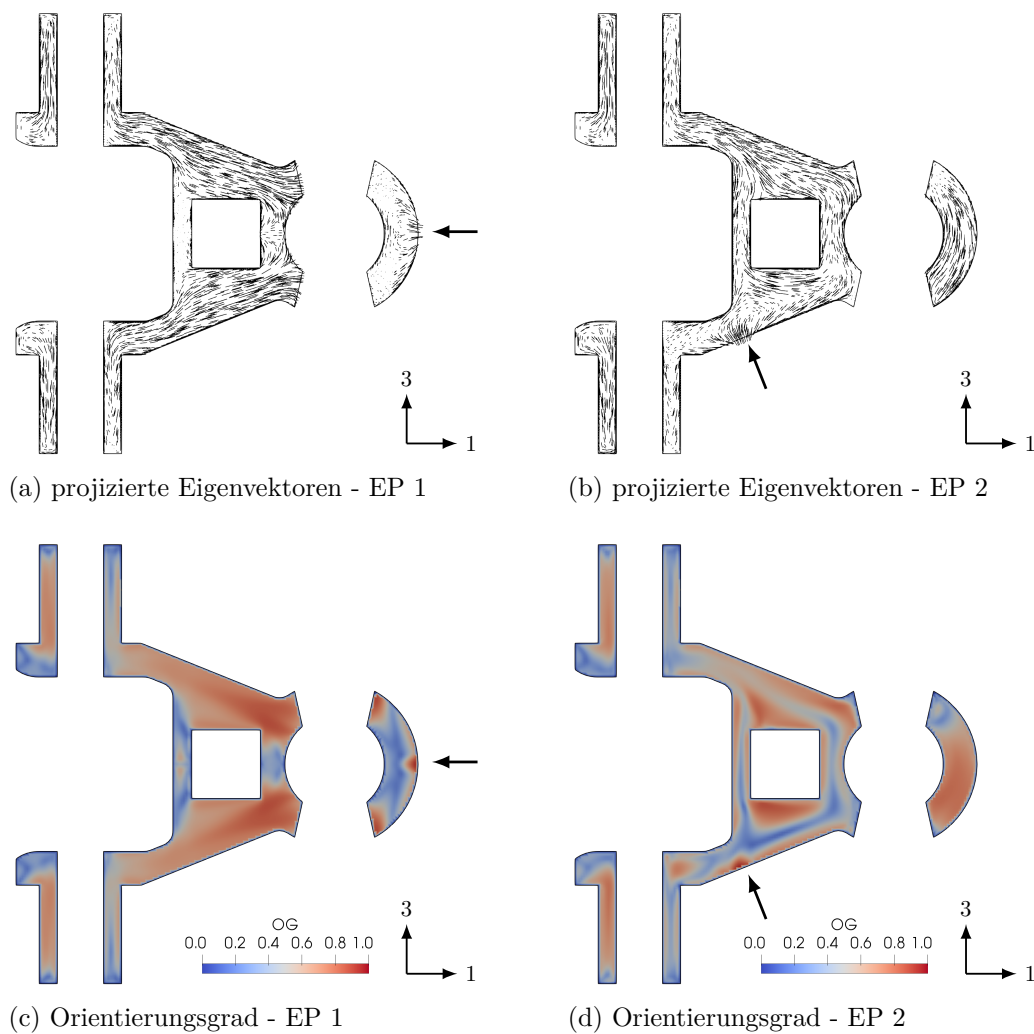


Abbildung 7.5: Schnittbilder nach der Spritzgussimulation mit dem Orientierungsgrad sowie den auf die Schnittebene projizierten Eigenvektoren mit den größten Eigenwerten des zweiten Momentes der Faserdichtefunktion. Der Schnitt erfolgt normal zur 2-Richtung und verläuft durch den Einspritzpunkt, welcher durch einen Pfeil symbolisiert wird.

Die Schnitte werden normal zur 2-Achse durch den Einspritzpunkt gelegt. Die Ausrichtung der Eigenvektoren mit den größten Eigenwerten von  $\underline{\tilde{A}}$ , also die Haupttrichtung der Fasern,

ähnelt sich in Bereichen des Kettenglieds, die weit entfernt vom Einspritzpunkt liegen und weist dort eine hohe Parallelität auf. Die Nahbereiche der Einspritzpunkte unterscheiden sich jedoch stark bei der Hauptrichtung der Fasern. Während der untere Mittelbereich bei dem Kettenglied mit Einspritzpunkt ① eine hohe Ausrichtung der Fasern in 1-Richtung zeigt, wird dieser Bereich beim Kettenglied mit Einspritzpunkt ② von den Unregelmäßigkeiten im Nahfeld des Einspritzpunktes geprägt.

Ob die FOV sich stark um eine Richtung konzentriert oder eher isotrop ausfällt, beschreibt der Orientierungsgrad  $OG$ , welcher wie folgt definiert ist

$$OG = \frac{3}{2}\lambda_{\max} - \frac{1}{2} \in [0,1]. \quad (7.9)$$

Darin ist  $\lambda_{\max}$  der maximale Eigenwert von  $\underline{\underline{\tilde{A}}}$ . Für  $OG = 1$  liegt also eine unidirektionale FOV vor und für  $OG = 0$  eine isotrope FOV. Die zugehörigen Schnittbilder in Abbildung 7.5 veranschaulichen demnach, dass die Fasern im Kettenglied keinesfalls überwiegend unidirektional ausgerichtet sind. Sowohl beim Kettenglied mit Einspritzpunkt ① als auch beim Kettenglied mit Einspritzpunkt ② sind Bereiche mit nahezu isotroper FOV zu erkennen. In letzterem fällt der Orientierungsgrad insgesamt niedriger aus, was auf den unregelmäßigeren Verlauf der Schmelze zurückgeführt werden kann.

### Wärmeleitung unterschiedlicher Wanddicken

Die bei der Abkühlung dominierenden Prozesse sind die der Wärmeabfuhr an die Kavität und der Wärmeleitung innerhalb des Kettenglieds. Die Geschwindigkeit beider Prozesse wird von den kalorischen Eigenschaften des Materials beeinflusst. In einem einfachen Beispiel soll der Einfluss der Wanddicke auf den Temperaturverlauf bei der Abkühlung in der Kavität untersucht werden. Zu diesem Zweck werden Streifen unterschiedlicher Länge (1-3 mm) mit einer Anfangstemperatur von 488 K versehen. Anschließend wird die Temperatur eines Endes auf 323 K herabgesetzt und festgehalten, sodass ein Wärmefluss hin zu diesem Ende entsteht. Die Ränder der Streifen werden als adiabat angenommen, sodass kein Wärmeaustausch mit der Umgebung stattfindet. Von Interesse bei diesem Versuch ist zum einen, ob die Versuchszeit von 46,5 s ausreicht, um den Streifen über die komplette Länge abzukühlen und zum anderen, ob sich die Kristallisation beim Temperaturverlauf bemerkbar macht.

In Abbildung 7.6 werden sowohl die Temperaturfelder der kompletten Streifen als auch die Temperaturverläufe an den Enden der Streifen, deren Temperatur nicht vorgegeben wird, dargestellt. Es zeigt sich, dass bei einer Streifenlänge von 1 und 2 mm nahezu der komplette Streifen abkühlt, wohingegen bei einer Streifenlänge von 3 mm das freie Ende noch fast 380 K warm ist. Übertragen auf das Kettenglied lässt sich dieses Erkenntnis wie folgt formulieren. Bereiche mit Wanddicken bis 4 mm werden nach der Abkühlphase in der Kavität einen nahezu abgekühlten Kern besitzen, wohingegen der Kern bei Wanddicken bis 6 mm noch eine deutlich höhere Temperatur aufweist und sogar noch flüssig sein

kann. Weiterhin lässt sich feststellen, dass die zusätzlich benötigte Kristallisationsenergie als Ausschlag im Temperaturverlauf zu erkennen ist (vgl. Abbildung 7.6 (unten)). Eine maßgebliche zeitliche Verzögerung des Temperaturabfalls stellt sich deswegen jedoch nicht ein.

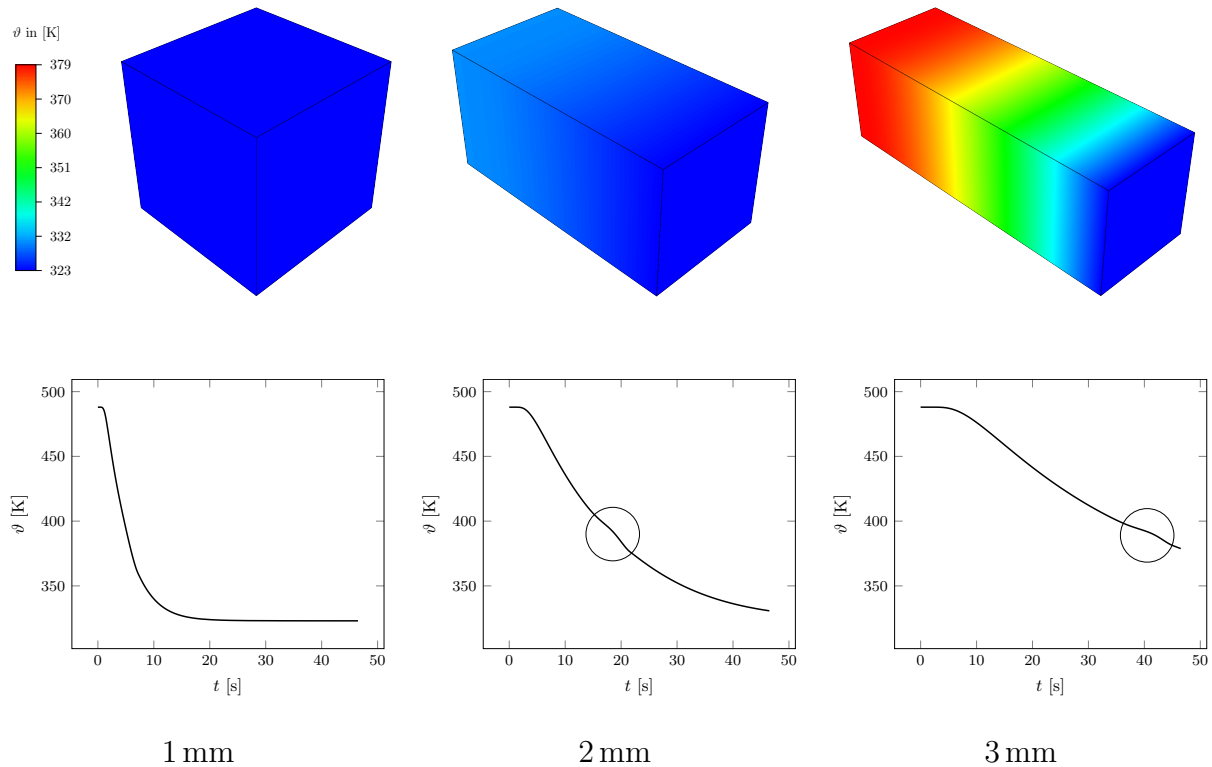


Abbildung 7.6: Temperaturfeld (oben) von Streifen unterschiedlicher Länge nach 46,5 s. Temperaturverlauf (unten) über der Zeit an den freien Enden. Die Kreise markieren den Temperaturbereich, in dem die Kristallisation stattfindet.

## 7.2.2 Abkühlung in der Kavität

Ob der Kern des Kettenglieds nach 46,5 s tatsächlich nicht richtig abkühlt, wird in diesem Abschnitt überprüft. Zu diesem Zweck wird die Temperatur der Oberflächen des Kettenglieds über einem Zeitraum von 1 s der Temperatur der Kavität von 323 K gleichgesetzt. Der Randbedingung liegt die Annahme zu Grunde, dass das Kühlsystem in der Lage ist, die Wärme so schnell von der Oberfläche der Kavität abzuführen, dass es zu keiner Erwärmung kommt.

Die Verschiebungen des Kettenglieds werden lediglich durch eine Kontaktrandbedingung beschränkt. Um das Schrumpfverhalten der Schmelze in der Kavität abzubilden, wird das Kettenglied von einer starren Schale (vgl. Abbildung 7.4) umgeben. Die Position der Schale wird für die Dauer der Simulation fixiert. Die Kontaktrandbedingung zwischen der Oberfläche des Kettenglieds und der starren Schale erlaubt ein Zusammenziehen des

Kettenglieds bei gleichzeitiger Verhinderung ungewollter Starrkörperbewegungen. Die Geometrie des Kettenglieds im Bereich des Einspritzpunktes enthält eine Partitionierung, sodass eine Oberflächennormalspannung beim Einspritzpunkt aufgebracht werden kann. Damit lässt sich der Nachdruck in einfacher Form berücksichtigen.

Die Temperaturfelder des Kettenglieds nach den 46,5 s sind in einem Schnittbild in Abbildung

quantitativ als auch qualitativ sehr gut überein, was darauf schließen lässt, dass der Einspritzpunkt in diesem Fall keinen signifikanten Einfluss auf die Abkühlung besitzt. Die Ergebnisse aus den Vorbetrachtungen zum Einfluss der Wanddicke auf die Temperaturentwicklung werden von beiden Simulationen bestätigt. Während die dünnwandigen Bereiche auf 323 K abkühlen, besitzt der Kern des Kettenglieds in den dickwandigen Bereichen noch eine Resttemperatur bis zu 385 K. Demzufolge liegt an den Randbereichen und an Stellen dünner Wanddicke eine deutlich festere Phase als in den wärmeren Kernbereichen vor.

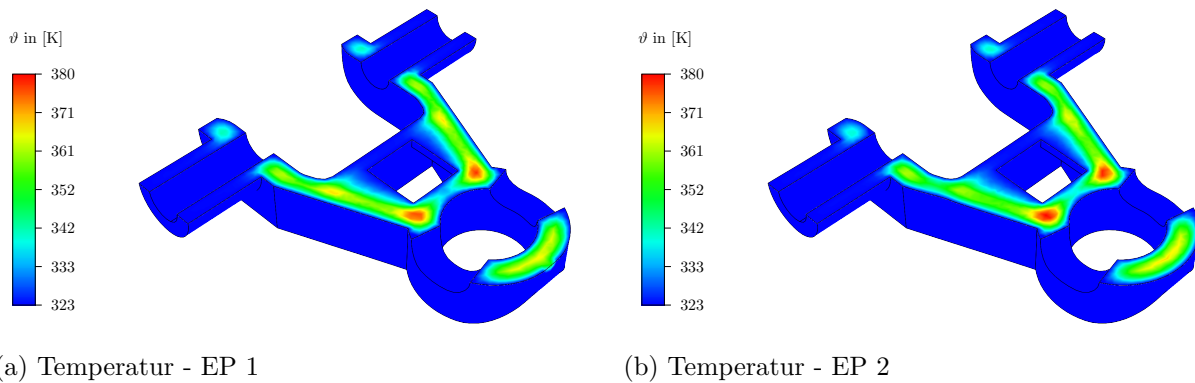


Abbildung 7.7: Temperaturfeld im Kettenglied für beide Einspritzpunkte. Dargestellt wird ein Schnitt durch die Mittelebene, wenn sich das Kettenglied noch in der Kavität befindet.

### 7.2.3 Abkühlung und Verzug nach Auswurf

In einem nächsten Schritt wird das Kettenglied aus der Kavität ausgestoßen und der Umgebungstemperatur 293 K über einen Zeitraum von 60 s ausgesetzt. Die Temperaturrandbedingung in der Simulation wird derart gewählt, dass die Temperatur jedes Randknotens innerhalb der ersten 10 s auf 293 K herabgesetzt wird. Die Verschiebungen der Knoten können sich frei einstellen, da die Kontaktrandbedingungen mit der Schale deaktiviert werden. Einzig Starrkörperbewegungen müssen durch geeignete Randbedingungen unterbunden bleiben.

Das Temperaturfeld in Abbildung 7.8 verdeutlicht, dass das Kettenglied nahezu komplett abgekühlt ist. Lediglich einige Kernbereiche in besonders dickwandigen Abschnitten sind

circa 7 K wärmer als der Rest. Genau wie bei der Abkühlung in der Kavität lässt sich kein Einfluss des Einspritzpunktes auf das resultierende Temperaturfeld erkennen.

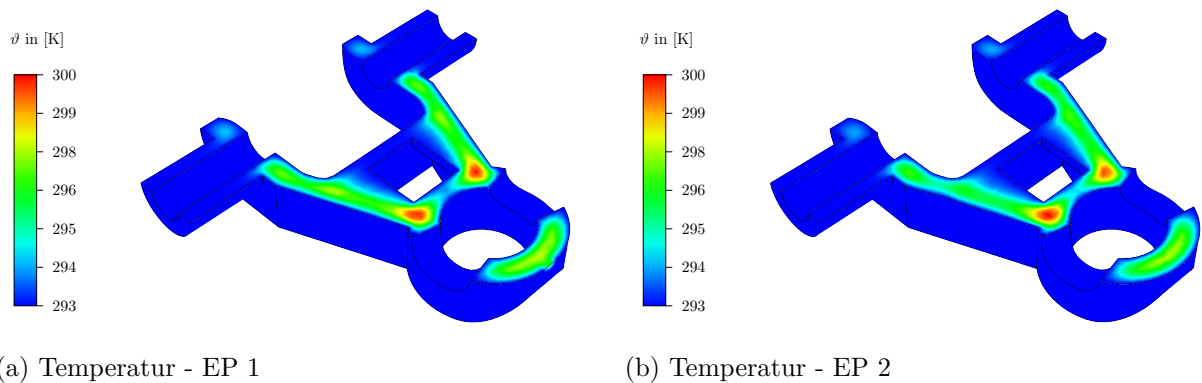


Abbildung 7.8: Temperaturfeld im Kettenglied für beide Einspritzpunkte. Dargestellt wird ein Schnitt durch die Mittelebene, wenn das Kettenglied an der Umgebung abgekühlt ist.

Abbildung 7.9 illustriert die Felder der von Mises-Spannung sowie der minimalen Hauptdehnung des Kettenglieds nach der Abkühlung an der Umgebung.

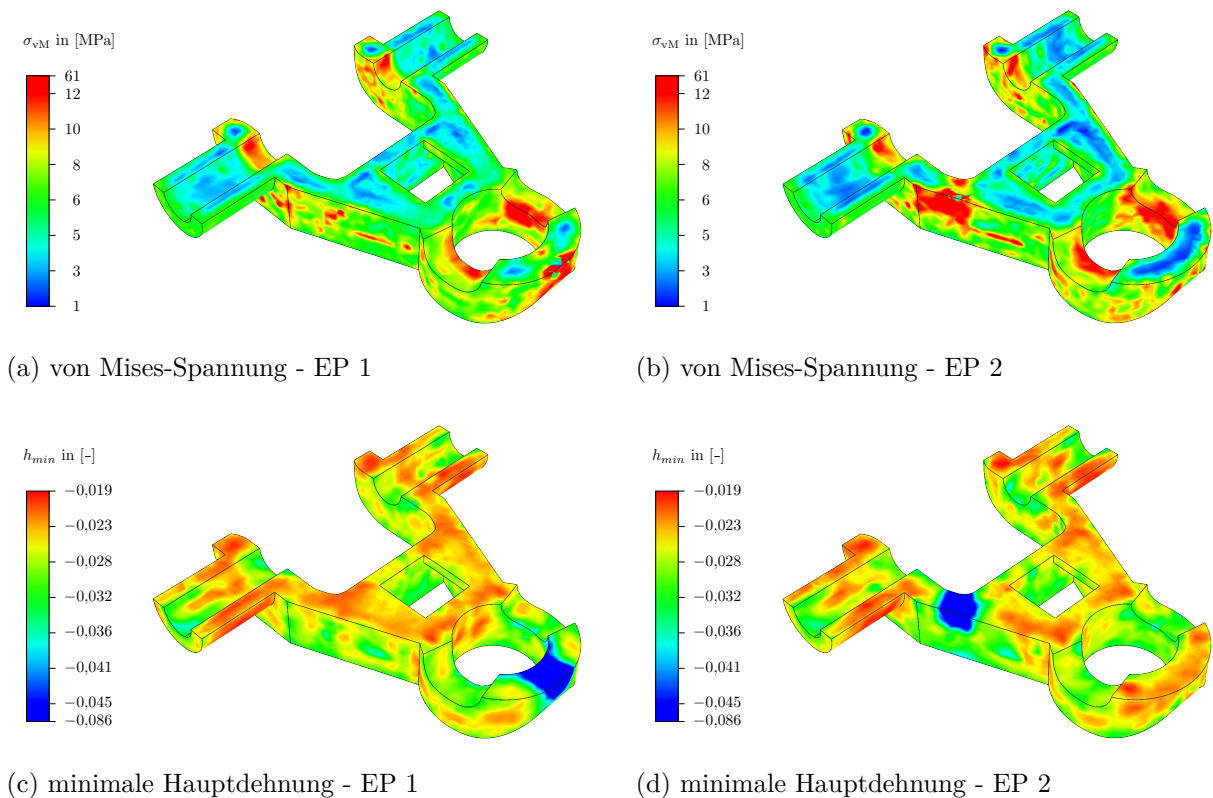


Abbildung 7.9: Von Mises-Spannung und minimale Hauptdehnung im Kettenglied für beide Einspritzpunkte. Dargestellt wird ein Schnitt durch die Mittelebene, wenn das Kettenglied an der Umgebung abgekühlt ist.

Die von Mises-Spannungen im Kettenglied ähneln sich bei beiden Einspritzpunkten. In beiden Fällen ist die gleiche qualitative Verteilung mit marginalen quantitativen Abweichungen zu erkennen. Lediglich die Nahbereiche der Einspritzpunkte weichen deutlich voneinander ab, weil dort zusätzlich der Nachdruck wirkt. Allgemein lässt sich eine Abnahme der Spannung vom Rand hin zum Inneren des Kettenglieds erkennen. Dieser Spannungsgradient ist mit der lokal unterschiedlichen Abkühlung zu erklären. Während der Rand seine Wärme bereits abgegeben und sich zusammengezogen hat, besitzt der warme Kern eine niedrigere Steifigkeit und kann Spannungen über Relaxation abbauen.

Die minimale Hauptdehnung beschreibt wie stark sich das Kettenglied zusammenzieht ohne eine Aussage über die Richtung dieser Dehnung zu treffen. Auch hier lassen sich keine signifikanten Unterschiede bei beiden Einspritzpunkten feststellen. Lediglich die Nahbereiche der Einspritzpunkte weisen große Unterschiede auf, weil das Material der Belastung des Nachdruckes nachgegeben hat. Beiden Kettengliedern gemein ist, dass sich die Kerne weniger zusammenziehen als die Ränder, was ähnlich wie beim Spannungsfeld auf die lokal unterschiedliche Abkühlung zurückzuführen ist.

### 7.2.4 Verhalten bei zyklischer Deformation

In folgendem Beispiel erfährt das Kettenglied eine zyklische Deformation mit den in Abbildung 7.10 dargestellten Randbedingungen.

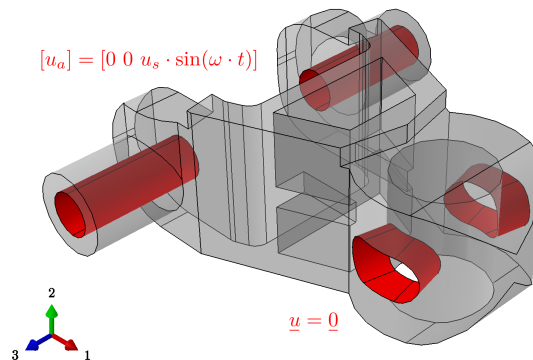


Abbildung 7.10: Randbedingungen am Kettenglied bei der zyklischen Deformation.

Die Amplitude  $u_s$  der Auslenkung in 3-Richtung beträgt 2 mm und wird über eine Sinus-Funktion mit einer Kreisfrequenz von  $\omega = \pi \text{ s}^{-1}$  vorgegeben. Bei einem Simulationszeitraum von 10 s ergeben sich damit fünf komplette Deformationszyklen. Als Faserorientierungsverteilungen werden die Daten aus der Spritzgussimulation mit dem Einspritzpunkt ① hinterlegt. Anders als bei den vorherigen Beispielen wird jedoch jedem Knoten eine Starttemperatur  $\vartheta_0 = 293 \text{ K}$  vorgegeben. Das Kettenglied dieser Simulation hat noch keine Vorgeschichte erfahren, sodass keine Eigenspannungen und -dehnungen vorliegen. Die Oberfläche des Kettenglieds kann während der Simulation keine Wärme mit der Umgebung austauschen. Die aufgebrachten Anfangs- und Randbedingungen entsprechen



keiner realen Betriebslast eines Kettenglieds. Vielmehr dienen sie der Veranschaulichung ausgewählter Materialeigenschaften. Ziel der Simulation ist es, die Selbsterwärmung bei zyklischer Beanspruchung mit großen Deformationen zu untersuchen und den Einfluss der Faserorientierungsverteilung aufzuzeigen.

Abbildung 7.11 stellt das Temperaturfeld im Kettenglied nach Ablauf der Simulation dar.

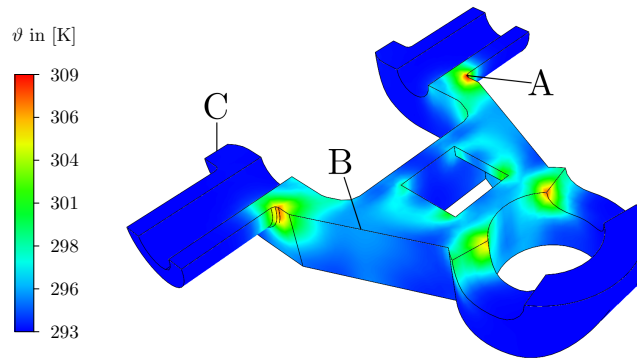


Abbildung 7.11: Temperaturfeld im Kettenglied nach fünf Deformationszyklen. Die Temperaturverläufe der Knoten A,B,C sind in Abbildung 7.12 zu sehen.

Vor Allem im mittleren Bereich des Kettenglieds ist ein Anstieg der Temperatur zu verzeichnen. Dieser fällt in den Radien der Schäfte sowie im Bereich der festen Einspannung mit bis zu 16 K besonders hoch aus. Dass sich das Kettenglied bereits nach dieser kurzen Zeit so stark erwärmt, ist jedoch auch der Tatsache geschuldet, dass die Wärme in der Simulation an den Rändern nicht abfließen kann. Weiterhin kommt es in diesen Bereichen zu numerisch bedingten Spannungserhöhungen, welche zu einem starken Anstieg der spezifischen Entropiedichte führen. Die hinteren Hälften der Schäfte sowie die vordere Hälfte der Pfanne ändern ihre Temperatur nur unmerklich, was daran liegt, dass diese Bereiche kaum Deformation erfahren.

Der zeitliche Temperaturverlauf der drei in Abbildung 7.11 markierten Knoten ist in Abbildung 7.12 zu sehen.

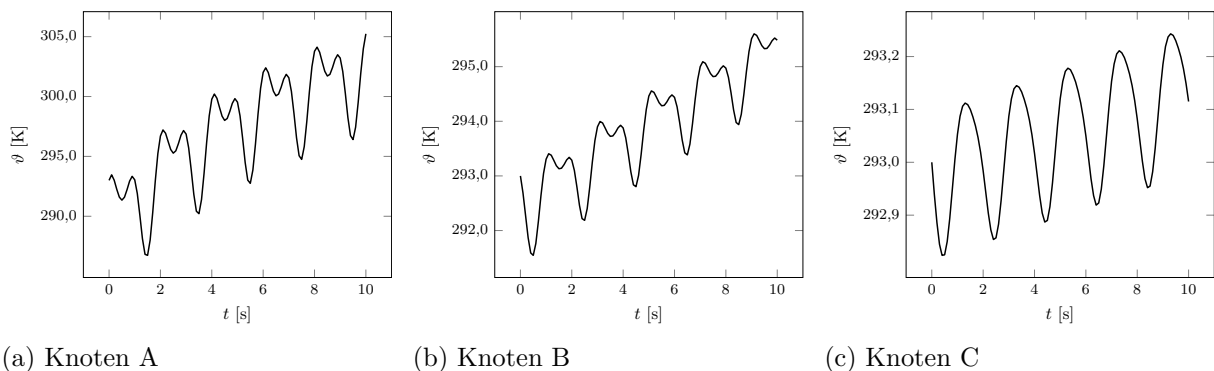


Abbildung 7.12: Temperaturverläufe einzelner Knoten im Kettenglied (vgl. Abbildung 7.11) über fünf Deformationszyklen.

Knoten A liegt genau im Radius eines Schaftes und erfährt an dieser Stelle die größten Spannungen im Kettenglied. Knoten B befindet sich an der schrägen Flanke des Mittelteils und damit ebenfalls im Kraftfluss. Der Bereich des Kettenglieds, in dem der Knoten C liegt, wird hingegen kaum deformiert. Die unterschiedlichen Deformationen und Spannungen der einzelnen Bereiche schlagen sich in den Temperaturen der Knoten nieder. Während Knoten A seine Temperatur um 12 K ändert, weicht die des Knotens C lediglich um  $\approx 0,1$  K von der Starttemperatur ab. Allen drei Kurven gemein ist, dass sich die Temperatur innerhalb eines 2s-Intervalls zyklisch ändert und dieser Temperaturzyklus mit einem Temperaturanstieg über der Zeit überlagert wird. Der Anstieg der Temperatur über der Zeit ist den Dissipationen  $\mathcal{D}_d$  der Maxwell-Elemente zuzuordnen, wohingegen die einzelnen Temperaturzyklen von den Beiträgen der spezifischen Entropierate  $\dot{s}_m$  zur Energiebilanz geprägt werden. Die Form dieser Zyklen bei den Knoten A und B ähnelt sehr den Kurven in Abbildung 5.7 bei Scherung und zeigt einen großen Einfluss der Anisotropie auf die Temperatur auf. Der Temperaturzyklus am Knoten C ähnelt mehr einer einfachen harmonischen Funktion und weist keine Doppelausschläge wie bei den Knoten A und B vor. Die starke Orientierung der Fasern in 2-Richtung (vgl. Abbildung 7.5) verhindert hier eine Auswirkung der anisotropen Anteile.

Um den Einfluss der Faserorientierungsverteilung auf das mechanische Verhalten des Kettenglieds aufzuzeigen, wird die Simulation mit angepassten Faserorientierungsinformationen wiederholt. Zu diesem Zweck wird an jedem Gaußpunkt im Modell derjenige Eigenvektor  $\tilde{\underline{a}}$  des zweiten Momentes  $\tilde{\underline{\underline{A}}}$  ermittelt, der zu dem größten Eigenwert gehört. Anschließend wird jedes  $\tilde{\underline{\underline{A}}}$  durch seinen zugehörigen Rank-1-Strukturtenor  $\tilde{\underline{a}} \circ \tilde{\underline{a}}$  ersetzt. Dieses Vorgehen reduziert das mechanische Verhalten des Materialmodells auf transversale Isotropie. Die Ergebnisse dieser Simulationen werden mit denen verglichen, die unter Verwendung des kompletten zweiten Momentes  $\tilde{\underline{\underline{A}}}$  entstehen. Als Vergleichsmaß dient die externe Arbeit  $W_{\text{ext}}$  des gesamten Kettenglieds, welche für die aufgebrachte Deformation benötigt wird. Abbildung 7.13 stellt die Ergebnisse beider Versuche gegenüber.

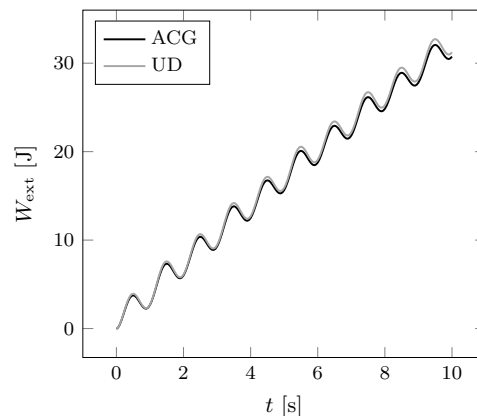


Abbildung 7.13: Externe Arbeit über der Zeit für eine Rechnung mit der vollen ACG-Verteilung als Faserorientierungsverteilung und für eine Rechnung mit unidirektionaler Ausrichtung der Fasern an jedem Gaußpunkt.

Die von außen eingebrachte Arbeit steigt bei beiden Simulationen mit der Zeit an. Die beiden Kurven sind nahezu identisch und unterscheiden sich am Ende der Simulation lediglich um  $\approx 0,5$  J. Die gesonderte Berücksichtigung der vollen Faserorientierungsverteilung bringt demnach bei dieser Simulation keinen signifikanten Mehrwert gegenüber der Simulation mit transversal isotropem Materialverhalten, obwohl das Kettenglied stark deformiert wird. Die Ursache dafür kann in dem hohen Orientierungsgrad derjenigen Fasern (vgl. Abbildung 7.5), die sich im Kraftfluss befinden, liegen. Eine andere Erklärung bietet die schwache Ausprägung der anisotropen Komponente  $E_F$  im Vergleich zu den isotropen Anteilen  $G$  und  $G_{MW}$  der Steifigkeit.

Deswegen wird die Simulation für eine ACG-Verteilung und eine unidirektionale Verteilung der Faserrichtungen mit angepassten Materialparametern wiederholt. Im Gegensatz zu den bisherigen Simulationen werden die beiden Materialparameter  $G$  und  $G_{MW}$  um den Faktor zehn reduziert, um so den Einfluss von  $E_F$  zu verstärken. Abbildung 7.14 stellt die Kurven der externen Arbeit beider Simulationen gegenüber.

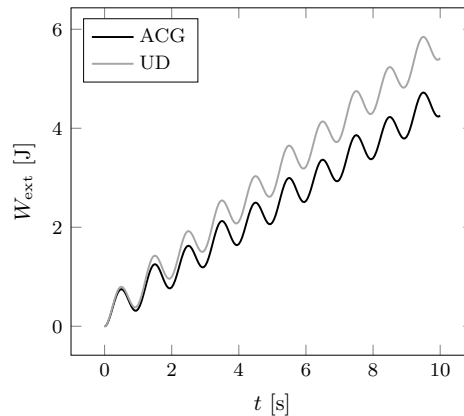


Abbildung 7.14: Externe Arbeit über der Zeit für eine Rechnung mit der vollen ACG-Verteilung als Faserorientierungsverteilung und für eine Rechnung mit unidirektionaler Ausrichtung der Fasern an jedem Gaußpunkt. Die isotropen Anteile der Steifigkeit im Materialmodell wurden um Faktor zehn verkleinert.

Der qualitative Verlauf der externen Arbeit über der Zeit ist der gleiche wie in Abbildung 7.13. Allerdings ist nach Reduktion der Steifigkeiten  $G$  und  $G_{MW}$  ein deutlicher Einfluss der Faserorientierungsverteilung zu erkennen. Das Kettenglied mit unidirektionaler Faserausrichtung an den Gaußpunkten verhält sich steifer als das Kettenglied mit verteilten Faserrichtungen. Der Unterschied beider Kurven beträgt zum Ende der Simulation  $\approx 1,2$  J, was relativ zu den absoluten Werten beider Versuche eine Abweichung von 20 % bedeutet.



## 8 Zusammenfassung und Ausblick

### 8.1 Ergebnisse der Arbeit

Die Herstellung kurzfaserverstärkter Bauteile im Thermoplast-Spritzgießen ermöglicht eine großserientaugliche Fertigung, weil sich große Stückzahlen bei kurzen Produktionszeiten realisieren lassen. Das Fertigungsverfahren zeichnet sich dadurch aus, dass eine Schmelze unter hohem Druck in eine Kavität gespritzt wird, darin abkühlt und erstarrt und schließlich aus der Kavität ausgestoßen wird. Während dieses Prozesses durchläuft das Material verschiedene physikalische Vorgänge wie den Phasenübergang, eine lokal unterschiedlich schnell fortschreitende Abkühlung, Wärmetransport im Bauteil und hin zur Kavität sowie den Aufbau von Eigenspannungen, die zu einem Verzug des Bauteils nach dem Ausstoßen aus der Kavität führen. Wie sich eine Änderung der Prozessgrößen beim Spritzgießen auf die resultierenden Bauteileigenschaften auswirkt, wird üblicherweise in teuren und aufwendigen Experimenten mit Prototypen erprobt. Eine kostengünstige Alternative dazu bietet die Simulation der kompletten Prozesskette.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Materialmodell zur Beschreibung des Materialverhaltens kurzfaserverstärkter Thermoplaste entwickelt. Als Zugang zur Beschreibung des Materialverhaltens diente ein phänomenologischer Ansatz. Das heißt die Beobachtungen der effektiven Eigenschaften eines kurzfaserverstärkten Materials fließen in die konstitutiven Gleichungen des Materialmodells ein.

Den Zugang zu den effektiven Eigenschaften verschaffte die Homogenisierung des Materialverhaltens repräsentativer Volumenelemente (RVE). Dabei wurde ein statistisch repräsentativer Materialausschnitt mit hinreichend vielen Fasern modelliert und dessen effektive Materialantwort extrahiert. Da ein großer Einfluss der Faserorientierungsverteilung auf das Materialverhalten zu erwarten war, wurden repräsentative Volumenelemente mit einem möglichst breiten Spektrum von Faserorientierungsverteilungen untersucht. Mit Blick auf die Rechenzeit solcher RVE-Homogenisierungen erwies sich die räumliche Diskretisierung des RVE als wichtige Größe. Die gleichmäßige Unterteilung des RVE in Voxel mit Materialzuweisung auf Ebene der Integrationsstellen bietet einen intuitiven Zugang zur Umsetzung der RVE-Homogenisierung innerhalb einer Finite-Elemente-Umgebung. Unter Verwendung von Mischvoxeln, die auf einer Laminat-Mischregel basieren, lassen sich deutliche Genauigkeitsgewinne gegenüber Mischvoxeln mit einer Voigt-Mischregel erzielen. Auf diese Weise konnte der Einfluss der Faserorientierungsverteilung auf die effektive Steifigkeit, auf die effektive Relaxation, die effektive thermische Deformation

sowie die effektive Wärmeleitfähigkeit in annehmbarer Rechenzeit auf einem Desktop-PC herausgestellt werden. Des Weiteren zeigte ein Vergleich der effektiven Steifigkeiten von RVEs mit einer alternativen Faserorientierungsverteilung aber gleichen zweiten Moment der Faserdichtefunktion, welche qualitativen Unterschiede die Wahl der Faserdichtefunktion ausmachen kann.

Die Ergebnisse der RVE-Homogenisierung dienten als Ausgangspunkt bei der Formulierung eines phänomenologischen Materialmodells. Darin finden die Faserorientierungsverteilungen durch einen Mittelungsansatz nach der Arbeit von Lanir (1983) Berücksichtigung. Die dabei zu lösenden Integrale besitzen in der Regel keine analytische Lösung und bedürfen einer numerischen Integration. Etablierte numerische Integrationsverfahren versagen allerdings bei nahezu planaren Faserorientierungsverteilungen, weil die Anzahl der benötigten Integrationsstellen gegen Unendlich geht. Erst die Entwicklung einer effektiven Integrationsmethode unter Ausnutzung einer Variablentransformation entsprechend der Faserorientierungsverteilung erlaubte die Anwendung des Ansatzes von Lanir bei akzeptablen Rechenzeiten in dieser Arbeit. Das Materialmodell berücksichtigt Anisotropie in der Steifigkeit sowie der thermischen Deformation und der Wärmeleitfähigkeit, weist eine starke Temperaturabhängigkeit auf und realisiert eine thermodynamisch konsistente Kopplung von Dehnung und Temperatur. Für den Phasenübergang wurde eine Kinematik mit Wechsel der Referenzkonfiguration in Kombination mit einer Glättungsfunktion gewählt. Anfangstemperaturen, die von der Referenztemperatur abweichen, werden ebenfalls mit Hilfe eines Wechsels der Referenzkonfiguration erfasst. Die Materialtangente wurden analytisch hergeleitet und liegen genau wie die anderen Bestimmungsgleichungen in Lagrange'scher Form vor. Eine Anpassung des Materialmodells an mit der RVE-Homogenisierung gewonnene Daten erbrachte die Erkenntnis, dass zur Identifikation der freien Materialparameter lediglich Proben mit unidirektionalen Faserorientierungsverteilungen notwendig sind, so lange die Deformationen im Material klein bleiben.

Als experimentelle Basis der Parameteridentifikation dienten Versuche mit spannungsfreier Ausdehnung bei Temperaturänderung, Relaxationsversuche bei unterschiedlichen konstanten Temperaturen sowie DSC-Versuche bei unterschiedlichen Heizraten. In Ermangelung eines geeigneten Experiments wurde die Wärmeleitfähigkeit des Materials mit Hilfe einer RVE-Homogenisierung gewonnen. Der Vergleich des identifizierten Materialmodells mit den experimentellen Messdaten zeigte bei allen Versuchen eine hohe Übereinstimmung.

Anwendung fand das Materialmodell schließlich bei der Simulation eines Kettenglieds in der kommerziellen FE-Umgebung ABAQUS. Das Kettenglied wurde mit ca. 87000 Elementen mit linearer Ansatzfunktion für Verschiebung und Temperatur diskretisiert. Die Übertragung der konstitutiven Gleichungen von der Referenzkonfiguration zu der von ABAQUS verlangten Momentankonfiguration wurde dargelegt. Als Anfangsbedingungen wurden der Simulation Informationen über die Faserorientierungsverteilung aus zwei vorgeschalteten Spritzgussimulationen mit unterschiedlichen Einspritzpunkten übergeben. Die Simulation der Bauteilabkühlung offenbarte die Entstehung von Eigenspannungen, die

an den Randschichten des Kettenglieds höher ausfallen als im Kern sowie den Einfluss der Wanddicke auf die Entwicklung der Temperatur im Bauteil. Ein Einfluss der Position des Einspritzpunktes war außer im Nahbereich des Einspritzpunktes nicht zu erkennen.

Abschließend wurde das Kettenglied mit einer Starttemperatur von 293 K einer zyklischen Deformation mit großen Dehnungen ausgesetzt, um die Selbsterwärmung in Folge dissipativer Vorgänge darzustellen. Bereits nach fünf Zyklen und einem Zeitraum von zehn Sekunden stellte sich an manchen Stellen im Kettenglied eine Erwärmung um bis zu 16 K ein. Ein Vergleich der extern auf das Kettenglied aufgebrachten Arbeit für ein Modell, bei dem die Faserorientierungsverteilung auf die Hauptrichtung des zweiten Momentes des Faserdichtefunktion reduziert wird, zeigte nur marginale Abweichungen zu dem Modell mit der vollständigen Faserorientierungsverteilung. Erst nachdem die Materialparameter der isotropen Steifigkeitsanteile des Materialmodells reduziert wurden, ließen sich deutliche Unterschiede zwischen den Modellen mit voller und reduzierter Faserorientierungsverteilung erkennen.

Die Ergebnisse des Anwendungsbeispiels zeigen, dass die aufwendige Berücksichtigung der Faserorientierungsverteilung bei großen Deformationen und hohen Steifigkeitsunterschieden ihre Berechtigung besitzt. Das in dieser Arbeit untersuchte Polypropylen mit E-Glas-Kurzfaserverstärkung ist jedoch nicht in der Lage diese Vorteile zur Geltung zu bringen, weil die verstärkende Wirkung der Kurzfasern im typischen Belastungsspektrum bei kleinen Deformationen nicht groß genug ist.

## 8.2 Weitere Forschungsansätze

Im Laufe dieser Arbeit haben sich Fragestellungen aufgetan, die weitere Forschungsarbeiten motivieren. Den Hauptansatzpunkt dafür stellt die Betrachtung großer Deformationen dar. Das Materialmodell greift in seiner jetzigen Form zwar auf eine Formulierung für große Deformationen zurück, findet aber nur bei Untersuchungen im Bereich kleiner Deformationen Anwendung. Aus diesem Grund macht eine Aufnahme plastischen Materialverhaltens zur Erweiterung des zulässigen Deformationsbereiches Sinn. Weiterhin ist mit einer teilweisen Ablösung der Fasern von der Matrix bei starker Beanspruchung zu rechnen. Dem könnte mit Schädigungsmodellen Rechnung getragen werden. Eine gute Möglichkeit zur Anwendung des Materialmodell bei großen Deformationen ohne Berücksichtigung plastischer Effekte bieten andere Materialien wie beispielsweise faserverstärkte Elastomere.

Mit dem Übergang zu großen Deformationen erweitert sich die experimentelle Basis für die Parameteridentifikationen auf Proben mit Fasern, die nicht nur unidirektional ausgerichtet sind (vgl. Goldberg et al. (2017)). Dafür muss jedoch ein Verfahren zur Herstellung von Probekörpern mit einer genau definierten Faserorientierungsverteilung entwickelt werden.

Des Weiteren benötigt eine umfassende Validierung des Materialmodells einen Abgleich mit Experimenten an Bauteilen oder bauteilnahen Probekörpern, um lokal veränderliche Faserorientierungsverteilungen zu berücksichtigen.

Mit Hinblick auf die RVE-Homogenisierung sind die Grenzen des Desktop-PC, in denen Ergebnisse bei akzeptablen Rechenzeiten und Genauigkeiten erzielt werden, nahezu ausgereizt. Hier könnte ein Wechsel zu FFT-basierten Homogenisierungen nach der Arbeit von Moulinec & Suquet ([1998](#)) neue Möglichkeiten eröffnen.



# Literatur

- Abaqus (2014a). *Abaqus Analysis User's Manual*.
- Abaqus (2014b). *Abaqus Theory Guide*.
- Advani, S.G.; Tucker, C.L. (1987). *The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites*. Journal of Rheology, 31(8), S. 751–784.
- Anand, L.; Ames, N.M.; Srivastava, V.; Chester, S.A. (2009). *A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation*. International Journal of Plasticity, 25(8), S. 1474–1494.
- Andriyana, A.; Billon, N.; Silva, L. (2010). *Mechanical response of a short fiber-reinforced thermoplastic: Experimental investigation and continuum mechanical modeling*. European Journal of Mechanics - A/Solids, 29(6), S. 1065–1077.
- Ateshian, G.A.; Rajan, V.; Chahine, N.O.; Canal, C.E.; Hung, C.T. (2009). *Modeling the matrix of articular cartilage using a continuous fiber angular distribution predicts many observed phenomena*. Journal of biomechanical engineering, 131(6).
- Avrami, M. (1940). *Kinetics of Phase Change. II Transformation–Time Relations for Random Distribution of Nuclei*. The Journal of Chemical Physics, 8(2), S. 212–224.
- Baker, M.; Ericksen, J.L. (1954). *Inequalities restricting the form of the stress-deformation relations for isotropic elastic solids and Reiner-Rivlin fluids*. Journal of the Washington Academy of Sciences, 44(2), S. 33–35.
- Ball, J.M. (1976). *Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 63(4), S. 337–403.
- Balzani, D. (2006). *Polyconvex anisotropic energies and modeling of damage applied to arterial walls*, Band 2 von Bericht / Universität Duisburg-Essen, Institut für Mechanik, Fachbereich Bauwissenschaften. VGE, Verl. Glückauf, Essen.
- Bathe, K.J. (2002). *Finite-Elemente-Methoden*. Springer, Berlin, 2. Auflage.
- Bayreuther, C. (2005). *Mehrskalennmodelle in der Festkörpermechanik und Kopplung von Mehrgittermethoden mit Homogenisierungsverfahren*. Inst. für Mechanik (Bauwesen), Stuttgart.
- Bažant, P.; Oh, B.H. (1986). *Efficient Numerical Integration on the Surface of a Sphere*. ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 66(1), S. 37–49.
- Benveniste, Y. (1987). *A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials*. Mechanics of Materials, 6(2), S. 147–157.

- Bischoff, J.E.; Arruda, E.M.; Gosh, K. (2004). *A rheological network model for the continuum anisotropic and viscoelastic behavior of soft tissue*. Biomechanics and modeling in mechanobiology, 3(1), S. 56–65.
- Boehler, J.P. (1987). *Introduction to the Invariant Formulation of Anisotropic Constitutive Equations*. J.P. Boehler, Hrsg., *Applications of Tensor Functions in Solid Mechanics*, S. 13–30. Springer Vienna, Vienna.
- Böhm, H.J., Hrsg. (2004). *Mechanics of Microstructured Materials*. Springer Vienna, Vienna.
- Boyce, M.C.; Parks, D.M.; Argon, A.S. (1988). *Large inelastic deformation of glassy polymers. part I: rate dependent constitutive model*. Mechanics of Materials, 7(1), S. 15–33.
- Boyce, M.C.; Socrate, S.; Llana, P.G. (2000). *Constitutive model for the finite deformation stress–strain behavior of poly(ethylene terephthalate) above the glass transition*. Polymer, 41(6), S. 2183–2201.
- Camacho, C.W.; Tucker, C.L.; Yalvaç, S.; McGee, R.L. (1990). *Stiffness and thermal expansion predictions for hybrid short fiber composites*. Polymer Composites, 11(4), S. 229–239.
- Cho, H.; Bartyczak, S.; Mock, W.; Boyce, M.C. (2013). *Dissipation and resilience of elastomeric segmented copolymers under extreme strain rates*. Polymer, 54(21), S. 5952–5964.
- Ciarlet, P.G. (1993). *Mathematical elasticity*, Band 20 von *Studies in mathematics and its applications*. Elsevier Science Publishers, Amsterdam.
- Cortes, D.H.; Elliott, D.M. (2014). *Accurate Prediction of Stress in Fibers with Distributed Orientations Using Generalized High-Order Structure Tensors*. Mechanics of Materials, 75, S. 73–83.
- Cortes, D.H.; Lake, S.P.; Kadlowec, J.A.; Soslowsky, L.J.; Elliott, D.M. (2010). *Characterizing the mechanical contribution of fiber angular distribution in connective tissue: comparison of two modeling approaches*. Biomechanics and modeling in mechanobiology, 9(5), S. 651–658.
- Cox, H.L. (1952). *The elasticity and strength of paper and other fibrous materials*. British Journal of Applied Physics, 3(3), S. 72–79.
- Dacorogna, B. (2007). *Direct Methods in the Calculus of Variations*, Band 78. Springer New York, New York, NY.
- Dong, M.; Schmauder, S. (1996). *Transverse mechanical behaviour of fiber reinforced composites - FE modelling with embedded cell models*. Computational Materials Science, 5(1-3), S. 53–66.

- Dupaix, R.B.; Boyce, M.C. (2007). *Constitutive modeling of the finite strain behavior of amorphous polymers in and above the glass transition*. *Mechanics of Materials*, 39(1), S. 39–52.
- Ehrenstein, G.W. (1999). *Polymer-Werkstoffe: Struktur - Eigenschaften - Anwendung ; mit 22 Tabellen*. Studentexte Kunststofftechnik. Hanser, München and Wien, 2. Auflage.
- Ehrenstein, G.W. (2004). *Handbuch Kunststoff-Verbindungstechnik*. Hanser, München.
- Eshelby, J.D. (1957). *The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems*. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241(1226), S. 376–396.
- Eshelby, J.D. (1959). *The Elastic Field Outside an Ellipsoidal Inclusion*. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 252(1271), S. 561–569.
- Feder, J. (1980). *Random sequential adsorption*. *Journal of Theoretical Biology*, 87(2), S. 237–254.
- Federico, S.; Herzog, W. (2008). *Towards an analytical model of soft biological tissues*. *Journal of Biomechanics*, 41(16), S. 3309–3313.
- Flory, P.J. (1961). *Thermodynamic relations for high elastic materials*. *Transactions of the Faraday Society*, 57, S. 829.
- Freed, A.D.; Einstein, D.R.; Vesely, I. (2005). *Invariant formulation for dispersed transverse isotropy in aortic heart valves: an efficient means for modeling fiber splay*. *Biomechanics and modeling in mechanobiology*, 4(2-3), S. 100–117.
- Freund, M. (2013). *Verallgemeinerung eindimensionaler Materialmodelle für die Finite-Elemente-Methode*. VDI, Düsseldorf.
- Fu, S.Y.; Lauke, B.; Mäder, E.; Yue, C.Y.; Hu, X. (2000). *Tensile properties of short-glass-fiber- and short-carbon-fiber-reinforced polypropylene composites*. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 31(10), S. 1117–1125.
- Gasser, T.C.; Ogden, R.W.; Holzapfel, G.A. (2006). *Hyperelastic modelling of arterial layers with distributed collagen fibre orientations*. *Journal of the Royal Society, Interface*, 3(6), S. 15–35.
- Gizzi, A.; Pandolfi, A.; Vasta, M. (2016). *Statistical characterization of the anisotropic strain energy in soft materials with distributed fibers*. *Mechanics of Materials*, 92, S. 119–138.
- Glüge, R.; Weber, M.; Bertram, A. (2012). *Comparison of spherical and cubical statistical volume elements with respect to convergence, anisotropy, and localization behavior*. *Computational Materials Science*, 63, S. 91–104.

- Goldberg, N.; Donner, H.; Ihlemann, J. (2015). *Evaluation of hyperelastic models for unidirectional short fibre reinforced materials using a representative volume element with refined boundary conditions*. Technische Mechanik, 35(2), S. 80–90.
- Goldberg, N.; Ihlemann, J. (2017). *On an alternative modelling of distributed fibre directions*. International Journal of Solids and Structures, 126-127, S. 140–149.
- Goldberg, N.; Ospald, F.; Schneider, M. (2017). *A fiber orientation-adapted integration scheme for computing the hyperelastic Tucker average for short fiber reinforced composites*. Computational Mechanics, 60(4), S. 595–611.
- Gräf, M. (2013). *Efficient algorithms for the computation of optimal quadrature points on riemannian manifolds*. Universitätsverlag Chemnitz, Chemnitz.
- Gross, D.; Seelig, T. (2001). *Bruchmechanik: Mit einer Einführung in die Mikromechanik*. Springer, Berlin.
- Gusev, A.; Heggli, M.; Lusti, H.R.; Hine, P.J. (2002). *Orientation Averaging for Stiffness and Thermal Expansion of Short Fiber Composites*. Advanced Engineering Materials, 4(12), S. 931–933.
- Halpin, J.C.; Kardos, J.L. (1976). *The Halpin-Tsai equations: A review*. Polymer Engineering and Science, 16(5), S. 344–352.
- Hartmann, S. (2003). *Finite-Elemente Berechnung inelastischer Kontinua: Interpretation als Algebro-Differentialgleichungssysteme*. Inst. für Mechanik, Kassel.
- Hartmann, S.; Neff, P. (2003). *Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility*. International Journal of Solids and Structures, 40(11), S. 2767–2791.
- Hashin, Z.; Shtrikman, S. (1962a). *A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 10(4), S. 343–352.
- Hashin, Z.; Shtrikman, S. (1962b). *On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 10(4), S. 335–342.
- Hashin, Z.; Shtrikman, S. (1963). *A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 11(2), S. 127–140.
- Haupt, P. (2002). *Continuum Mechanics and Theory of Materials*. Springer, Berlin.
- Haupt, P.; Sedlan, K. (2001). *Viscoplasticity of elastomeric materials: experimental facts and constitutive modelling*. Archive of Applied Mechanics (Ingenieur Archiv), 71(2-3), S. 89–109.

- Haward, R.N.; Thackray, G. (1968). *The Use of a Mathematical Model to Describe Isothermal Stress-Strain Curves in Glassy Thermoplastics*. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 302(1471), S. 453–472.
- Hill, R. (1963). *Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 11(5), S. 357–372.
- Hill, R. (1965). *A self-consistent mechanics of composite materials*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 13(4), S. 213–222.
- Holzapfel, G.A. (2010). *Nonlinear solid mechanics: A continuum approach for engineering*. Wiley, Chichester.
- Holzapfel, G.A.; Gasser, T.C.; Ogden, R.W. (2000). *A New Constitutive Framework for Arterial Wall Mechanics and a Comparative Study of Material Models*. Journal of Elasticity, 61(1/3), S. 1–48.
- Holzapfel, G.A.; Simo, J.C. (1996). *Entropy elasticity of isotropic rubber-like solids at finite strains*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 132(1-2), S. 17–44.
- Ihlemann, J. (2003). *Kontinuumsmechanische Nachbildung hochbelasteter technischer Gummiwerkstoffe*, Band 288 von *Berichte aus dem Institut für Mechanik, Universität Hannover*. VDI, Düsseldorf.
- Ihlemann, J. (2014). *Beobachterkonzepte und Darstellungsformen der nichtlinearen Kontinuumsmechanik*, Band 340 von *Fortschritt-Berichte VDI, Reihe 18, Mechanik/Bruchmechanik*. VDI, Düsseldorf.
- Johannaber, F.; Michaeli, W. (2002). *Handbuch Spritzgiessen*. Hanser, München.
- Johlitz, M.; Dippel, B.; Lion, A. (2016). *Dissipative heating of elastomers: a new modelling approach based on finite and coupled thermomechanics*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 28(4), S. 1111–1125.
- Kabel, M.; Ospald, F.; Schneider, M. (2016). *A model order reduction method for computational homogenization at finite strains on regular grids using hyperelastic laminates to approximate interfaces*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 309, S. 476–496.
- Kaliske, M. (2000). *A formulation of elasticity and viscoelasticity for fibre reinforced material at small and finite strains*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 185(2-4), S. 225–243.
- Krawietz, A. (1986). *Materialtheorie*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- Kröner, E. (1959). *Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 4(1), S. 273–334.
- Landgraf, R. (2015). *Modellierung und Simulation der Aushärtung polymerer Werkstoffe*. TU Chemnitz, Chemnitz.

- Landgraf, R.; Rudolph, M.; Scherzer, R.; Ihlemann, J. (2014). *Modelling and simulation of adhesive curing processes in bonded piezo metal composites*. Computational Mechanics, 54(2), S. 547–565.
- Lanir, Y. (1983). *Constitutive equations for fibrous connective tissues*. Journal of Biomechanics, 16(1), S. 1–12.
- Lanir, Y.; Lichtenstein, O.; Imanuel, O. (1996). *Optimal design of biaxial tests for structural material characterization of flat tissues*. Journal of biomechanical engineering, 118(1), S. 41–47.
- Lebedev, V.I. (1976). *Quadratures on a sphere*. USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, 16(2), S. 10–24.
- Li, S. (1999). *On the unit cell for micromechanical analysis of fibre-reinforced composites*. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 455(1983), S. 815–838.
- Lion, A. (1997). *On the large deformation behaviour of reinforced rubber at different temperatures*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 45(11-12), S. 1805–1834.
- Lion, A. (2000). *Thermomechanik von Elastomeren: Experimente und Materialtheorie*. Inst. für Mechanik, Kassel.
- Lion, A. (2007). *Einführung in die Lineare Viskoelastizität*.
- Lion, A.; Johlitz, M. (2016). *A thermodynamic approach to model the caloric properties of semicrystalline polymers*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 28(3), S. 799–819.
- Lu, P. (2013). *Further studies on Mori–Tanaka models for thermal expansion coefficients of composites*. Polymer, 54(6), S. 1691–1699.
- Lu, S.; Pister, K.S. (1975). *Decomposition of deformation and representation of the free energy function for isotropic thermoelastic solids*. International Journal of Solids and Structures, 11(7-8), S. 927–934.
- Lubarda, V.A. (2004). *Constitutive theories based on the multiplicative decomposition of deformation gradient: Thermoelasticity, elastoplasticity, and biomechanics*. Applied Mechanics Reviews, 57(2), S. 95.
- Lubliner, J. (1985). *A model of rubber viscoelasticity*. Mechanics Research Communications, 12(2), S. 93–99.
- Malkin, A.Y.; Beghishev, V.P.; Keapin, I.A.; Andrianova, Z.S. (1984a). *General treatment of polymer crystallization kinetics -Part 2. The kinetics of nonisothermal crystallization*. Polymer Engineering and Science, 24(18), S. 1402–1408.
- Malkin, A.Y.; Beghishev, V.P.; Keapin, I.A.; Bolgov, S.A. (1984b). *General treatment of polymer crystallization kinetics - Part 1. A new macrokinetic equation and its experimental verification*. Polymer Engineering and Science, 24(18), S. 1396–1401.

- Mardia, K.V.; Jupp, P.E. (2009). *Directional statistics*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Mauri, A.; Ehret, A.E.; De Focatiis, Davide S A; Mazza, E. (2016). *A model for the compressible, viscoelastic behavior of human amnion addressing tissue variability through a single parameter*. Biomechanics and modeling in mechanobiology, 15(4), S. 1005–1017.
- Mishnaevsky, L.L. (2007). *Computational Mesomechanics of Composites: Numerical Analysis of the Effect of Microstructures of Composites of Strength and Damage Resistance*. John Wiley & Sons, Chichester.
- Montgomery-Smith, S.; He, W.E.; Jack, D.A.; Smith, D.E. (2011a). *Exact tensor closures for the three-dimensional Jeffery's equation*. Journal of Fluid Mechanics, 680, S. 321–335.
- Montgomery-Smith, S.; Jack, D.; Smith, D.E. (2011b). *The Fast Exact Closure for Jeffery's equation with diffusion*. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 166(7-8), S. 343–353.
- Mori, T.; Tanaka, K. (1973). *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*. Acta Metallurgica, 21(5), S. 571–574.
- Morrey, C.B. (1952). *Quasi-convexity and the lower semicontinuity of multiple integrals*. Pacific Journal of Mathematics, 2(1), S. 25–53.
- Moulinec, H.; Suquet, P. (1998). *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 157(1-2), S. 69–94.
- Nakamura, K.; Watanabe, T.; Katayama, K.; Amano, T. (1972). *Some aspects of nonisothermal crystallization of polymers. I. Relationship between crystallization temperature, crystallinity, and cooling conditions*. Journal of Applied Polymer Science, 16(5), S. 1077–1091.
- Nemat-Nasser, S. (1999). *Averaging theorems in finite deformation plasticity*. Mechanics of Materials, 31(8), S. 493–523.
- Nemat-Nasser, S.; Hori, M. (1993). *Micromechanics: Overall properties of heterogeneous materials*. North-Holland, Amsterdam.
- Nguyen, T.D.; Jones, R.E.; Boyce, B.L. (2007). *Modeling the anisotropic finite-deformation viscoelastic behavior of soft fiber-reinforced composites*. International Journal of Solids and Structures, 44(25-26), S. 8366–8389.
- Nguyen, T.D.; Jones, R.E.; Boyce, B.L. (2008). *A nonlinear anisotropic viscoelastic model for the tensile behavior of the corneal stroma*. Journal of biomechanical engineering, 130(4).
- Ospald, F. (2014). *Numerical Simulation of Injection Molding using OpenFOAM*. PAMM, 14(1), S. 673–674.
- Ostojca-Starzewski, M. (2002). *Towards Stochastic Continuum Thermodynamics*. Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, 27(4).

- Ovalle Rodas, C.; Zairi, F.; Nait-Abdelaziz, M. (2014). *A finite strain thermo-viscoelastic constitutive model to describe the self-heating in elastomeric materials during low-cycle fatigue*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 64, S. 396–410.
- Özdemir, I.; Brekelmans, W.; Geers, M. (2008a). *Computational homogenization for the thermo-mechanical analysis of heterogeneous solids*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 198(3-4), S. 602–613.
- Özdemir, I.; Brekelmans, W. A. M.; Geers, M. G. D. (2008b). *Computational homogenization for heat conduction in heterogeneous solids*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 73(2), S. 185–204.
- Pandolfi, A.; Vasta, M. (2012). *Fiber distributed hyperelastic modeling of biological tissues*. Mechanics of Materials, 44, S. 151–162.
- Parisch, H. (2003). *Festkörper-Kontinuumsmechanik*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden.
- Patel, R.M.; Spruiell, J.E. (1991). *Crystallization kinetics during polymer processing - Analysis of available approaches for process modeling*. Polymer Engineering and Science, 31(10), S. 730–738.
- Piccarolo, S.; Saiu, M.; Brucato, V.; Titomanlio, G. (1992). *Crystallization of polymer melts under fast cooling. II. High-purity iPP*. Journal of Applied Polymer Science, 46(4), S. 625–634.
- Pierard, O.; Friebel, C.; Doghri, I. (2004). *Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: a general framework and its validation*. Composites Science and Technology, 64(10-11), S. 1587–1603.
- Reese, S. (2003a). *A micromechanically motivated material model for the thermo-viscoelastic material behaviour of rubber-like polymers*. International Journal of Plasticity, 19(7), S. 909–940.
- Reese, S. (2003b). *Meso-macro modelling of fibre-reinforced rubber-like composites exhibiting large elastoplastic deformation*. International Journal of Solids and Structures, 40(4), S. 951–980.
- Reese, S.; Govindjee, S. (1998). *A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects*. International Journal of Solids and Structures, 35(26-27), S. 3455–3482.
- Reuss, A. (1929). *Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle*. ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 9(1), S. 49–58.
- Richter, M. (2005). *Entwicklung mechanischer Modelle zur analytischen Beschreibung der Materialeigenschaften von textilbewehrtem Feinbeton*. Doktorarbeit, Technische Universität Dresden, Dresden.
- Rieger, S. (2004). *Temperaturabhängige Beschreibung visko-elasto-plastischer Deformationen kurzglasfaserverstärkter Thermoplaste*, Band Nr. I-13 von Bericht / Institut für Mechanik (Bauwesen), Lehrstuhl I. Inst. für Mechanik (Bauwesen), Stuttgart.



- Rothe, S.; Erbts, P.; Düster, A.; Hartmann, S. (2015). *Monolithic and partitioned coupling schemes for thermo-viscoplasticity*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 293, S. 375–410.
- Sacks, M.S. (2003). *Incorporation of experimentally-derived fiber orientation into a structural constitutive model for planar collagenous tissues*. Journal of biomechanical engineering, 125(2), S. 280–287.
- Safadi, M.M.; Rubin, M.B. (2014). *Modeling rate-independent hysteresis in large deformations of preconditioned soft tissues*. International Journal of Solids and Structures, 51(18), S. 3265–3272.
- Sansour, C.; Bocko, J. (2003). *On the numerical implications of multiplicative inelasticity with an anisotropic elastic constitutive law*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 58(14), S. 2131–2160.
- Schapery, R.A. (1997). *Nonlinear Viscoelastic and Viscoplastic Constitutive Equations Based on Thermodynamics*. Mechanics of Time-Dependent Materials, 1(2), S. 209–240.
- Schröder, J.; Neff, P. (2003). *Invariant formulation of hyperelastic transverse isotropy based on polyconvex free energy functions*. International Journal of Solids and Structures, 40(2), S. 401–445.
- Shutov, A.V.; Landgraf, R.; Ihlemann, J. (2013). *An explicit solution for implicit time stepping in multiplicative finite strain viscoelasticity*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 265, S. 213–225.
- Simo, J.C. (1987). *On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: Formulation and computational aspects*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 60(2), S. 153–173.
- Smith, G.F. (1965). *On isotropic integrity bases*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 18(4), S. 282–292.
- Spencer, A. (1961). *The invariants of six symmetric  $3 \times 3$  matrices*. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 7(1), S. 64–77.
- Stitz, S.; Keller, W. (2001). *Spritzgiesstechnik: Verarbeitung, Maschine, Peripherie*. Hanser, München.
- Tandon, G.P.; Weng, G.J. (1984). *The effect of aspect ratio of inclusions on the elastic properties of unidirectionally aligned composites*. Polymer Composites, 5(4), S. 327–333.
- Tervoort, T.A.; Smit, R.; Brekelmans, W.; Govaert, L.E. (1997). *A Constitutive Equation for the Elasto-Viscoplastic Deformation of Glassy Polymers*. Mechanics of Time-Dependent Materials, 1(3), S. 269–291.
- Tian, W.; Qi, L.; Su, C.; Zhou, J. (2016). *Mean-field homogenization based approach to evaluate macroscopic coefficients of thermal expansion of composite materials*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 102, S. 1321–1333.

- Truesdell, C.; Noll, W. (2004). *The non-linear field theories of mechanics*. Springer, Berlin.
- Tyler, D.E. (1987). *Statistical Analysis for the Angular Central Gaussian Distribution on the Sphere*. *Biometrika*, 74(3), S. 579.
- Vasta, M.; Pandolfi, A.; Gizzi, A. (2013). *A Fiber Distributed Model of Biological Tissues*. *Procedia IUTAM*, 6, S. 79–86.
- VDI (2014). *Werkstoffinnovationen für nachhaltige Mobilität und Energieversorgung*.
- Vogt, M. (2015). *Bestandsaufnahme Leichtbau in Deutschland*.
- Voigt, W. (1887). *Theoretische Studien über die Elasticitätsverhältnisse der Krystalle II*. *Abhandlungen der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften in Göttingen*, 34, S. 53–100.
- Walpole, L.J. (1966a). *On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems— I*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 14(3), S. 151–162.
- Walpole, L.J. (1966b). *On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems - II*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 14(5), S. 289–301.
- Walpole, L.J. (1969). *On the overall elastic moduli of composite materials*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 17(4), S. 235–251.
- Watson, G.S. (1983). *Statistics on spheres*. Wiley, New York.
- Weickenmeier, J.; Jabareen, M. (2014). *Elastic-viscoplastic modeling of soft biological tissues using a mixed finite element formulation based on the relative deformation gradient*. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 30(11), S. 1238–1262.
- Weiss, J.A.; Maker, B.N.; Govindjee, S. (1996). *Finite element implementation of incompressible, transversely isotropic hyperelasticity*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 135(1-2), S. 107–128.
- Wilmers, J.; Lenhof, B. (2013). *Comparison of Different FE-Approaches for Modelling of Short Fibre Composites*. *Technische Mechanik*, 34(2), S. 90–103.
- Wriggers, P. (2001). *Nichtlineare Finite-Element-Methoden*. Springer, Berlin.
- Wu, J.J.; Buckley, C.P. (2004). *Plastic deformation of glassy polystyrene: A unified model of yield and the role of chain length*. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 42(11), S. 2027–2040.
- Wunderlich, B. (2003). *Reversible crystallization and the rigid–amorphous phase in semicrystalline macromolecules*. *Progress in Polymer Science*, 28(3), S. 383–450.
- Xiao, H.; Bruhns, O.T.; Meyers, A. (2006). *Elastoplasticity beyond small deformations*. *Acta Mechanica*, 182(1-2), S. 31–111.
- Yosibash, Z.; Weiss, D.; Hartmann, S. (2014). *High-order FEMs for thermo-hyperelasticity at finite strains*. *Computers & Mathematics with Applications*, 67(3), S. 477–496.

- Zheng, Q.S.; Du, D.X. (2001). *An explicit and universally applicable estimate for the effective properties of multiphase composites which accounts for inclusion distribution*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 49(11), S. 2765–2788.
- Zienkiewicz, O.C. (1987). *Methode der finiten Elemente*. Fachbuchverlag, Leipzig.