

**TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DRESDEN**

**Beitrag zur Multiskalensimulation
kurzfaserverstärkter Kunststoffe**

von der Fakultät Maschinenwesen
der Technischen Universität Dresden
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

angenommene

Dissertation

von

Kevin Breuer

Tag der Einreichung: 20.12.2022

Tag der Verteidigung: 18.10.2023

Vorsitz: Prof. Dr.-Ing. habil. T. Wallmersperger

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. M. Stommel

Prof. Dr.-Ing. habil. M. Kästner

Prüfer: Prof. Dr.-Ing. S. Wießner

Weiters Mitglied: Dr.-Ing. S. Heitkam

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand sowohl während meiner Tätigkeit am Lehrstuhl für Kunststofftechnologie (LKT) der TU Dortmund als auch während meiner Tätigkeit am Institut für Polymerforschung e.V. Dresden (IPF).

Prof. Dr.-Ing. Markus Stommel danke ich für die Möglichkeit der Promotion, für die intensive Betreuung und das Engagement während meiner gesamten Zeit am LKT und am IPF. Ebenso danke ich Prof. Dr.-Ing. habil. Markus Kästner für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Der DFG bin ich für die Förderung des Projektes „Spritzgusssimulation und effiziente numerische Verfahren zur Bestimmung der Faserorientierung durch direkte Berechnung oder Rekonstruktion der Wahrscheinlichkeitsdichte“ dankbar. Durch die Förderung des Projektes sind viele der hier gezeigten Untersuchungen erst möglich geworden.

Während meiner Doktorandenzeit schätzte ich besonders die kreative Zusammenarbeit, die angenehme Arbeitsatmosphäre sowie das kollegiale und freundschaftliche Verhältnis aller Angehörigen des LKTs und IPFs.

Zu guter Letzt möchte ich meiner Familie und meiner Partnerin aufs herzlichste danken. Sie ermöglichten, unterstützten und begleiteten mich durch mein Studium und meine Promotionszeit. Ohne sie wäre nichts davon möglich gewesen.

Inhaltsverzeichnis

I.	Symbole und Variablen	iv
1	Einleitung	1
2	Kurzfaserverstärkte Kunststoffe	3
3	Integrative Simulation	7
3.1	Prozesssimulation	7
3.2	Modellierung der Compositeigenschaften	12
4	Experimentelle Methoden zur Charakterisierung der Mikrostruktur	19
4.1	Phaseneigenschaften	19
4.2	Faserorientierung	23
4.3	Faserlänge	29
5	Analyse der Faserorientierung	32
5.1	Probegeometrien zur gezielten Steuerung der Faserorientierung	32
5.2	Ergebnisse der Faserorientierungsanalyse	37
6	Modellierung der Faserorientierungsdichtewahrscheinlichkeit	41
6.1	Rekonstruktionsmethoden	41
6.1.1	Methode der maximalen Entropie	42
6.1.2	Kugelflächenfunktionen	44
6.2	Evaluierung der Rekonstruktionsmethoden	46
6.2.1	Vergleich der Rekonstruktionen mit Bingham Verteilungen	49
6.2.2	Vergleich der Rekonstruktionen mit Messdaten	55
6.2.3	Vergleich der Rekonstruktionen aus Spritzguss Simulationsdaten	61
7	Finite-Elemente Modellierung der Mikrostruktur	68
7.1	Periodische Randbedingungen	72
7.2	Definition der RVE-Abmessungen	78
7.3	Fasergeometrie und Faseranbindung	82
8	Statistische Betrachtung des Composites	86
8.1	Faserensemble	86
8.2	Faserorientierungsverteilung	93
8.3	Faserlängenverteilung	98
8.4	Einfluss des betrachteten Volumens der Finite-Elemente Modelle	101
8.5	Einfluss des Faservolumenanteils	104
8.6	Phasenkontrast	105
8.7	Nicht-lineare Materialmodellierung	109
8.7.1	Lineare-Viskoelastizität	109
8.7.2	Plastizität	113
8.8	Konsequenz auf Bauteilebene	117
8.9	Ableitung eines Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium	124

9	Homogenisierung mittels neuronaler Netzwerke	131
9.1	Datenerstellung	132
9.2	Definition neuronaler Netzwerke	136
9.3	Optimales neuronales Netzwerk	138
9.4	Vergleich mit klassischen Methoden	140
9.5	Beispielbauteil	144
10	Zusammenfassung und Ausblick	156
	Literaturverzeichnis	160
	Anhang	173
A 1	Verschiebungsfaktoren	173
A 2	Spritzgusssimulationen	174
A 3	Positionen der Faserorientierungsanalyse	176
A 4	Ergebnisse der Faserorientierungsanalyse	177
A 5	Vergleich der Rekonstruktionsmethoden	189
A 6	Einfluss der Rekonstruktion auf die Compositesteifigkeit	193
A 7	Faserplatzierungsalgorithmen	197
A 8	Rechenzeitbetrachtungen	201
A 9	Modellverhalten Faserensembles	206
A 10	Simulationsübersicht	207
A 11	Experimentelle Untersuchung der Streuung der Compositesteifigkeit	209
A 12	Von-Mises Vergleichsspannung Beispielbauteil	210

I. Symbole und Variablen

Symbol	Bedeutung
A	Konzentrationstensor, Vektor
<i>A</i>	Fläche, Anteil
a	Faserorientierungstensor
<i>a_R</i>	Aspektverhältnis
<i>a_t</i>	Verschiebungsfaktor
B	Konzentrationstensor, Vektor
<i>B</i>	Punkt
<i>b</i>	Faktor
C	Steifigkeitstensor, Vektor
<i>C</i>	Punkt
<i>C_i</i>	Faserinteraktionskoeffizient
<i>c₁, c₂</i>	Faktoren
<i>D</i>	Kullback-Leibler-Divergenz
<i>D₂</i>	Kullback-Leibler-Distanz
<i>D_r</i>	Diffusionsanteil
<i>D⁽¹⁾</i>	Driftanteil in Fokker-Planck-Gleichung
<i>D⁽²⁾</i>	Diffusionsanteil in Fokker-Planck-Gleichung
<i>d</i>	Durchmesser, Variable, Distanz
dMat	Tabelle für Verschiebungsrandbedingungen
<i>E</i>	Elastizitätsmodul, Fehlervariable
<i>E_{rel}</i>	Relativer Fehler
<i>E*</i>	Komplexer Elastizitätsmodul
<i>E'</i>	Speichermodul
<i>E''</i>	Verlustmodul
F	Fehler
<i>F</i>	Faser
f	Kraftvektor
<i>f</i>	Frequenz, Funktion, Faktor
<i>G</i>	Schubmodul
<i>J</i>	Flächengewicht
K	Steifigkeitsmatrix
<i>L</i>	Länge
<i>l</i>	Länge
<i>n</i>	Zählvariable, Anzahl
<i>v</i>	Querkontraktionszahl
<i>P</i>	Variable, Legendre-Polynom
p	Richtungsvektor
<i>p</i>	Wahrscheinlichkeit
R	Rotationsmatrix

r	Zufallsvariable
\mathbb{S}	Oberfläche der Einheitskugel
\mathbf{S}	Eshelby-Tensor
S	Entropie
T	Temperatur
t	Koordinatenvariable
\mathbf{u}	Geschwindigkeit, Verschiebung
V	Volumen
W	Verteilungsfunktion
w	Gewichtungsfaktor
\mathbf{X}	Dimension, Koordinaten
x	Variable, Koordinaten, Abmessung, Inputdaten
y	Koordinaten, Abmessung, Outputdaten
z	Koordinaten
α	Moment einer Spektralzerlegung
β	Variable
β_1, β_2	Konstante des NAdam-Algorithmus
δ	Verlustfaktor
ε	Dehnung
θ	Raumwinkel
λ	Wärmeleitfähigkeit
λ	Konstante
ξ	Zustandsgröße
ζ	Natürliche Dreieckskoordinaten
σ	Spannung
ϕ	Raumwinkel
ψ	Orientierungsdichtefunktion
ω	Wirbeltensor

1 Einleitung

Der menschengemachte Klimawandel [1] und immer knapper werdende Ressourcen [2] sind essenzielle Problemstellungen der heutigen Zeit. Neben der Entwicklung technologischer Alternativen zur Energieerzeugung kann die Ausschöpfung bestehender technologischer Möglichkeiten zur Reduktion des Energie- und Ressourcenbedarfs beitragen. In diesem Zusammenhang ist der Leichtbau unerlässlich [3].

Im Kontext einzelner Bauteile bedeutet Leichtbau, dass die Masse so gering wie möglich sein sollte. Folglich können durch den Leichtbau auch die eingesetzten Ressourcen zur Herstellung eines Bauteils reduziert werden. Dies hat nicht nur den direkten Vorteil bei der Herstellung, sondern im Falle von bewegten Bauteilen eine Einsparung von Energie im Laufe des Produktlebenszyklus. Klassische Beispiele sind hier die Luft- und Raumfahrt sowie der Automobilsektor. Eine geringere bewegte Masse führt zu einer geringeren benötigten Antriebsleistung. So kann der Energieverbrauch und damit auch die Betriebskosten gesenkt werden.

Für den Leichtbau geeignete Werkstoffe sind insbesondere faserverstärkte Kunststoffe. Hierbei werden die Vorteile einer hochbelastbaren Faser und einer leichten Kunststoffmatrix in einem Werkstoff vereint. Eine Vielzahl unterschiedlicher Faser-Matrix Kombinationen sind dabei bekannt und im technischen Einsatz, so zum Beispiel Lamine aus kohlefaserverstärktem Kunststoff [4]. Das Gewichteinsparpotenzial dieses Beispiels ist gegenüber klassischen Metallkonstruktionen besonders hoch, aber auch besonders kostenintensiv und weniger geeignet für die Massenproduktion von Bauteilen. Hierfür eignen sich kurzfaserverstärkte Kunststoffe besser, die mittels Spritzgussverfahren verarbeitet werden können [5].

Durch das Spritzgießen kurzfaserverstärkter Kunststoffe entsteht eine Kopplung von Werkstoffeigenschaften und Prozessführung [6]. Das bedeutet, dass der Werkstoff unterschiedliche Eigenschaften aufweisen kann, in Abhängigkeit des Herstellungsprozesses und des Bauteils. Die Verknüpfung zwischen Werkstoffeigenschaften und Herstellungsprozess ist dabei begründet in der Mikrostruktur des Werkstoffs, welche durch das Spritzgießen maßgeblich beeinflusst wird.

Im Kontext des Leichtbaus müssen Bauteile unter Berücksichtigung der prozessabhängigen Werkstoffeigenschaften ausgelegt werden, um das volle Potenzial des Werkstoffs ausnutzen zu können. Das bedeutet, dass bei kurzfaserverstärkten Kunststoffen zunächst die aus dem Spritzgießen resultierenden Mikrostrukturen bestimmt werden müssen. Aus den Mikrostrukturen wiederum werden die Werkstoffeigenschaften berechnet und mit diesen kann dann schließlich ein Bauteil hinsichtlich einer anwendungsbezogenen Zielgröße ausgelegt und optimiert werden.

Bei der Entwicklung von Bauteilen wird dieser Ablauf im aktuellen Stand der Technik computergestützt durchgeführt und als Integrative Simulation bezeichnet. Hierbei wird zur Bestimmung der Mikrostruktur eine Prozesssimulation des Spritzgießvorgangs durchgeführt. Das Ergebnis dieser Prozesssimulation wird in einer Werkstoffmodellierung verwendet, um die effektiven Werkstoffeigenschaften zu berechnen. Diese wiederum werden anschließend in einer Struktursimulation des auszulegenden Bauteils verwendet. Alle Bestandteile der Integrativen Simulation unterliegen dabei Modellannahmen und Idealisierungen. Diese sind notwendig, da eine genauere Modellierung in der Regel zu einem höheren Berechnungsaufwand führt. Gerade im industriellen Umfeld ist ein Gleichgewicht zwischen Genauigkeit und Berechnungszeit aufgrund des Kosten zu Nutzen-Verhältnisses zu wahren.

In der Forschung ist es jedoch möglich, aufgrund steigender verfügbarer Rechenleistung, die Modellannahmen und Idealisierungen kritisch zu hinterfragen. Die vorliegende Arbeit liefert genau hierzu einen Beitrag. Es werden die Modellannahmen und Idealisierungen von kurzfaserverstärkten Kunststoffen untersucht und bewertet. Hierfür werden eigene Modellierungen der Mikrostruktur unter veränderlichen Annahmen erstellt und miteinander verglichen. Der Fokus liegt hier insbesondere darauf, wie Informationen von der Prozesssimulation verarbeitet werden und wie sie in der Modellierung verwendet werden. Darüber hinaus wird ein Weg aufgezeigt, wie eine steigende Modellierungsgüte zu besseren Vorhersagemöglichkeiten führen kann, ohne jedoch das für den industriellen Einsatz wichtige Kosten zu Nutzen-Verhältnis negativ zu beeinflussen. Abschließend werden anhand eines Bauteils die in dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse auf ein praxisnahes Beispiel angewendet und analysiert.

2 Kurzfaserverstärkte Kunststoffe

Die Mikrostruktur kurzfaserverstärkter Kunststoffe setzt sich aus Verstärkungsfasern und polymerer Matrix zusammen. Die Bezeichnung der Kurzfaser basiert dabei auf der Länge l der Verstärkungsfasern. Weitere Typen von Verstärkungsfasern sind Lang- und Endlosfasern. Die Tabelle 2-1 fasst die Einteilung von Verstärkungsfasern nach ihrer Länge zusammen [5]. Weiter wird zur Beschreibung der Fasern das Aspektverhältnis

$$a_R = \frac{l}{d} \quad (\text{Gl.2-1})$$

eingeführt als Verhältnis der Faserlänge l zu dem Faserdurchmesser d . Typische Werte für das Aspektverhältnis sind ebenfalls in der Tabelle 2-1 angegeben.

Tabelle 2-1: Einteilung der Verstärkungsfasern nach ihrer Länge [5]

Verstärkungsfasern	Längenbereich	Aspektverhältnis
Kurzfasern	0,1 bis 1 mm	10
Langfasern	1 bis 50 mm	100
Endlosfasern	Über 50 mm	∞

Häufig eingesetzte Materialien für die Verstärkungsfasern sind Kohlenstoff, Glas, Aramid oder Naturfasern wie Hanf, Jute oder Flachs. Die Auswahl eines bestimmten Fasermaterials richtet sich dabei nach den Anforderungen der späteren Verwendung, wie zum Beispiel der mechanischen Eigenschaften, der Kosten, der Nachhaltigkeit oder der biologische Verträglichkeit [5].

Die mechanischen Eigenschaften des Verbundwerkstoffes sind im Allgemeinen Abhängig von der vorliegenden Mikrostruktur und den verwendeten Materialien für Verstärkungsfasern und Matrix. Hierzu sind einachsige Zugversuche von kurzfaserverstärktem Polybutylenterephthalat (PBT) [7–10] mit unterschiedlichem Faseranteil aus Glas in Abbildung 2-1 dargestellt. Verwendet werden dafür Zugstäbe nach DIN EN ISO 527-2 der Ausführung 1BA, die aus rechteckigen spritzgegossenen Platten ausgefräst werden. Dabei werden Zugstäbe einmal in Fließrichtung der Platte (Teilbild a) und einmal quer (Teilbild b) dazu entnommen. Als Ergänzung wird ebenfalls unverstärktes Matrixmaterial [10] verwendet. Die Spannungs-Dehnungsverläufe aller Versuche sind bis zur minimalen Bruchdehnung der Proben dargestellt. Ebenfalls eingezeichnet sind die einfache und die doppelte Standardabweichung als Bereich um den Mittelwertverlauf. Innerhalb dieser Bereiche liegen entsprechend 68 % beziehungsweise 95 % aller Versuche. Die Darstellung der Standardabweichung ist für alle Abbildungen in dieser Arbeit gleich, wenn nicht anders explizit erwähnt.

In Fließrichtung ist der Einfluss des Faseranteils, welcher 0, 10, 20 beziehungsweise 30 Gewichtsprozent beträgt, deutlich zu erkennen. Je höher der Faseranteil ist, desto steifer und

fester ist das Composite. Weiterhin fließt der Werkstoff weniger aus, je höher der Faseranteil ist. Quer zur Fließrichtung ist die Steifigkeits- und Festigkeitssteigerung gegenüber der Steigerung in Fließrichtung deutlich weniger ausgeprägt. Eine Festigkeitssteigerung kann dabei zwar gegenüber dem nicht verstärkten PBT festgestellt werden, jedoch ist der Unterschied zwischen 10, 20 und 30% Faseranteil gering. Entsprechend der Ergebnisse der Zugversuche wird das Werkstoffverhalten als anisotrop bezeichnet.

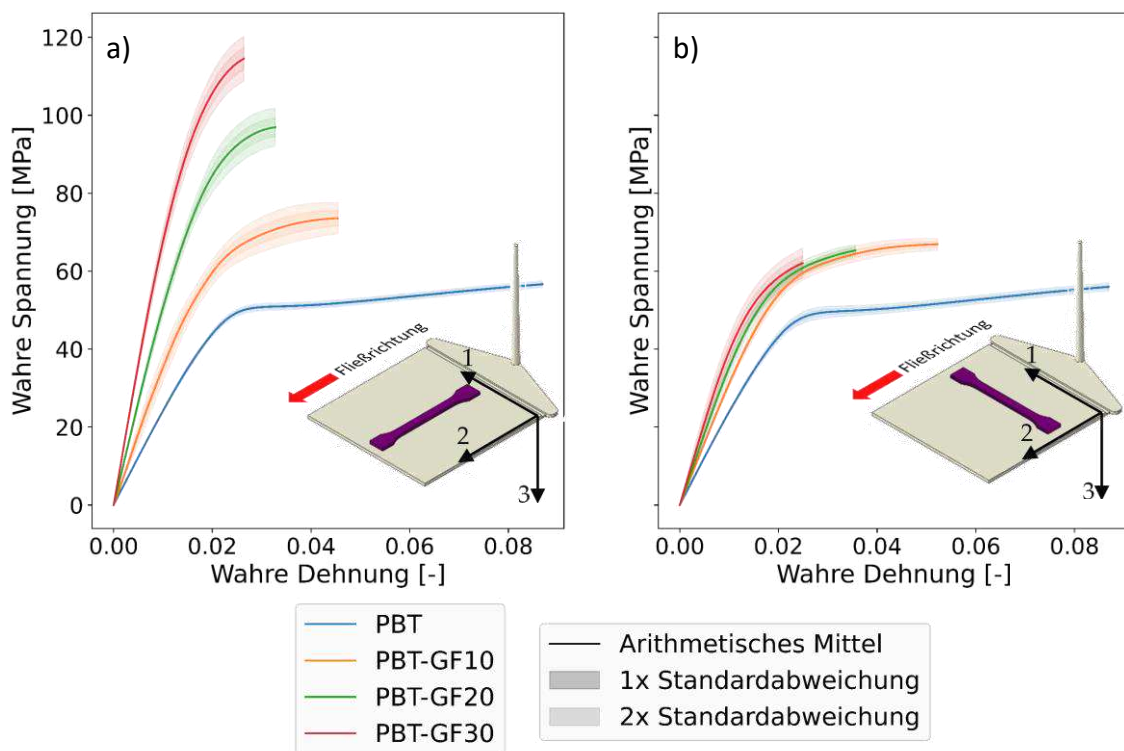


Abbildung 2-1: Uniaxiale Zugversuche kurzfaserverstärkter Kunststoffe mit unterschiedlichen Faservolumenanteilen von Zugstäben nach DIN EN ISO 527-2, 1BA. a) Zugstab längs der Spritzgussrichtung herausgeschnitten, b) Zugstab quer zu der Spritzgussrichtung herausgeschnitten.

Die Anisotropie lässt sich dadurch erklären, dass die Fasern nicht isotrop ausgerichtet sind. Vielmehr weisen die Fasern einen charakteristischen Schichtaufbau auf, bestehend aus 2 äußeren Randschichten und einer Mittelschicht. Dieser Aufbau lässt sich mittels einer quer zur Fließrichtung entnommenen Schliiffprobe mit einem Lichtmikroskop darstellen (vgl. Abbildung 2-2). Im Schliiffbild zu erkennen ist, dass die Fasern in den Randschichten in Fließrichtung zeigen und in der Mittelschicht quer dazu. Ergänzend in der Abbildung 2-2 ist eine 3D-Illustration der 3 Schichten abgebildet. In der Literatur wird über das 3 Schichtmodell [5] hinaus ein bis zu 7 Schichten [11] umfassendes Modell beschrieben. Hier werden weitere Schichten als Übergang zwischen Mittel- und Randschicht sowie eine Oberflächenschicht als Teil des Schichtmodells definiert.

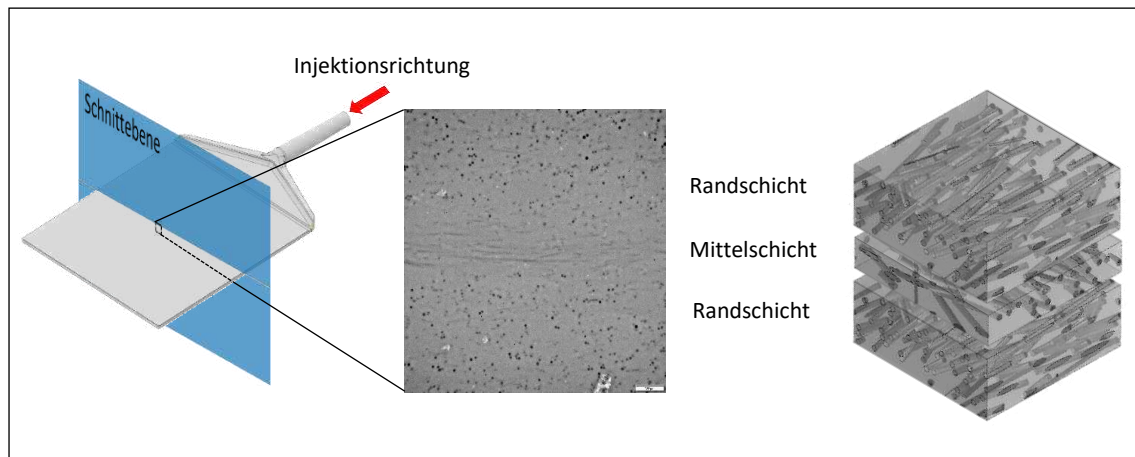


Abbildung 2-2: Lichtmikroskopische Aufnahme aus einer Schnittebene quer zur Injektionsrichtung sowie schematische Darstellung des Schichtaufbaus als 3-Schichtmodell.

Der Schichtaufbau kann durch den Fließvorgang beim Spritzgießen erklärt werden, welcher in [11] anschaulich beschrieben wird: Es werden drei unterschiedliche Mechanismen genannt, die zu dem Schichtaufbau führen. Der erste Mechanismus, im englischsprachigen „fountain flow effekt“ genannt, geht zurück auf die Reibung zwischen Schmelze und Kavitätswand. Durch den Einfluss der Reibung eilt die Schmelze in der Mitte der Kavität vor, wie in Abbildung 2-3 dargestellt. Durch das Voreilen fließt die Schmelze aus der Mitte an den Rand und erstarrt dort bei Kontakt mit der Wand sofort. Die nachfolgende Schmelze erzeugt eine hohe Scherrate in der Nähe der erstarrten Schicht. Bedingt durch die hohe Scherrate werden die Fasern in Fließrichtung ausgerichtet [6]. Der zweite Mechanismus beschreibt die Strömung in der Fließkanalmitte, die die Fasern quer zur Fließrichtung ausrichtet [11]. Der dritte Mechanismus beschreibt die Ausrichtung durch das Fließen in der Nachdruckphase des Spritzgussprozesses [11].

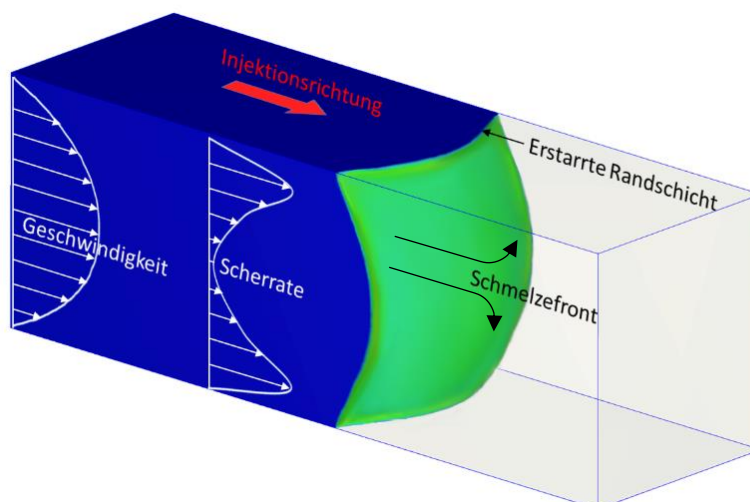


Abbildung 2-3: Darstellung des Fließvorgangs einer Kunststoffschmelze im Schmelzkanal während des Spritzgussprozesses, nach [6].

Neben der Faserorientierung hat die Faserlänge ebenfalls einen entscheidenden Einfluss auf die effektiven Compositeeigenschaften kurzfaserverstärkter Kunststoffe. Dabei unterliegt die Faserlänge typischerweise einer charakteristischen Verteilungsfunktion, welche zum Beispiel in [12–15] beschrieben werden. Häufig werden Faserlängenverteilungen als Burr- oder Weibullverteilungen charakterisiert [6], in neueren Arbeiten werden modifizierte Weibullverteilungen verwendet [14, 15]. Zu diesen charakteristischen Faserlängenverteilungen kommt es, da die ursprünglich identisch lang geschnittenen Fasern bei der Compoundierung und dem Spritzgießen brechen. Die Ursache kann auf vier unterschiedliche Mechanismen zurückgeführt werden [11]. Dazu zählt das Abbrechen der Fasern während des Aufschmelzprozesses in der Schnecke [16] sowie durch eine Faser-Faser Interaktion [6]. Weiter brechen Fasern aufgrund von Faser-Schmelze Interaktion und von Faser-Wand Kollisionen [6].

Die Festigkeit kurzfaserverstärkter Composite wird durch mehrere Faktoren beeinflusst. Zum einen durch die Festigkeit der Fasern, der Festigkeit des Matrixwerkstoffes, sowie der Festigkeit der Matrix-Faser Grenzfläche. Eine Überschreitung der aufgezählten Festigkeiten führt dabei zu mikromechanischen Schädigungsmechanismen. Diese können Faserbruch, Deformation und Bruch der Matrix, Abgleiten der Fasern oder Faser pull-out sein. [17]

Um Faser pull-out zu verringern, werden Fasern in kommerziell eingesetzten Compositen in der Regel beschichtet. Die Beschichtung, die sogenannte Schlichte, wird dabei auf die noch endlosen Fasern kurz nach dem Spinnprozess aufgetragen. Sie besteht zum Beispiel aus Silanen und dient unter anderem der besseren Haftung zwischen Matrix und Faser [18].

3 Integrative Simulation

Für eine werkstoffgerechte Auslegung technischer Bauteile aus kurzfaserverstärkten Kunststoffen muss die Mikrostruktur, welche durch den Spritzgussprozess beeinflusst wird, berücksichtigt werden. Im Rahmen einer computergestützten Auslegung werden dabei zunächst mittels Prozesssimulation die lokalen Mikrostruktureigenschaften berechnet. Diese wiederum werden in einer Struktursimulation des Bauteils verwendet, um die lokalen Werkstoffeigenschaften zu bestimmen. Notwendig hierfür ist eine Modellierung der Compositeigenschaften auf Basis der Mikrostruktur. Diese Modellierung kann je nach Annahmen und Idealisierungen abhängig oder unabhängig von der lokalen Belastung sein. Entsprechend kann die Modellierung vorab stattfinden oder muss im Rahmen der Struktursimulation durchgeführt werden. Das gesamte Vorgehen wird als Integrative Simulation bezeichnet und wird in Abbildung 3-1 illustriert.

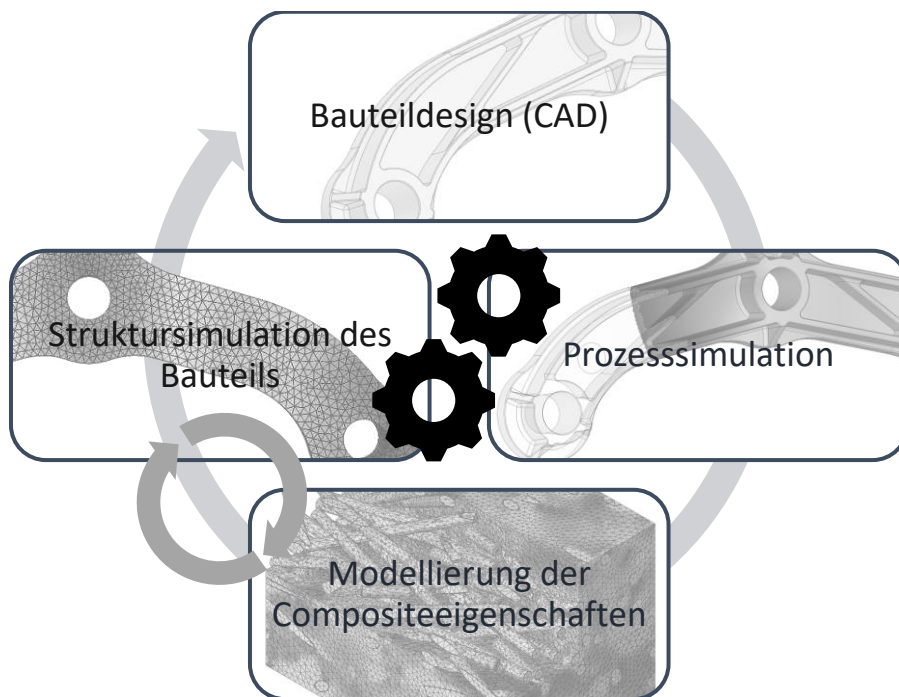


Abbildung 3-1: Prinzipieller Ablauf der simulationsgestützten Auslegung eines spritzgegossenen Bauteils aus kurzfaserverstärktem Kunststoff als Integrative Simulation.

3.1 Prozesssimulation

Die effektiven Eigenschaften kurzfaserverstärkter Kunststoffe sind abhängig von der Mikrostruktur. Diese wird durch die Verarbeitung im Spritzgussprozess maßgeblich beeinflusst. Mittels Prozesssimulation können die lokalen Mikrostruktureigenschaften numerisch berechnet werden. Zu diesen Eigenschaften zählt vor allem die Faserorientierung, die Faserlänge und die Faserkonzentration. In diesem Abschnitt werden die Grundlagen zur Berechnung der Faserorientierung im Rahmen einer Prozesssimulation vorgestellt.

Die Orientierung einer einzelnen Faser im Raum kann als Richtungsvektor \mathbf{p} in Kugelkoordinaten auf der Einheitskugel \mathbb{S} (vgl. Abbildung 3-2) angegeben werden. Der Winkel θ ist dabei definiert zwischen 0 und π , ϕ zwischen $-\pi$ und π .

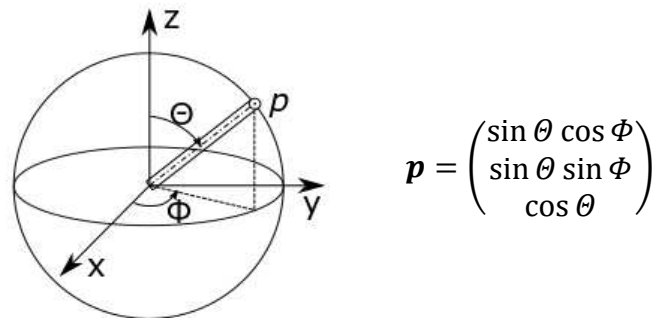


Abbildung 3-2: Darstellung und mathematische Beschreibung in Kugelkoordinaten der Orientierung einer einzelnen Faser.

Die Änderung der Orientierung \mathbf{p} einer einzelnen Faser in einer Fluid-Faser-Suspension mit der Geschwindigkeit \mathbf{u} kann mit Jeffrey's Gleichung [19] berechnet werden. Jeffrey beschreibt die Bewegung eines ellipsoiden Partikels in einem viskosen Fluid unter der Annahme einer laminaren Strömung. Für ein Newtonsches Fluid ohne extern aufgebrachte Momente kann die Änderung der Orientierung \mathbf{p} mit

$$\dot{\mathbf{p}} = -\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{p} + \lambda[\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} - \boldsymbol{\varepsilon} : (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) \mathbf{p}]. \quad (\text{Gl.3-1})$$

bestimmt werden. Der Wirbeltensor $\boldsymbol{\omega}$ wird mit

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^T - \nabla \mathbf{u}) \quad (\text{Gl.3-2})$$

berechnet und der Dehnratentensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ mit

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u}^T + \nabla \mathbf{u}). \quad (\text{Gl.3-3})$$

Die Konstante

$$\lambda = \frac{a_r^2 - 1}{a_r^2 + 1} \quad (\text{Gl.3-4})$$

ist ein Geometriefaktor der Faser, welche durch das Aspektverhältnis a_r der Faser bestimmt ist. In einer einfachen Scherströmung ist die Lösung der Jeffrey Gleichung periodisch für die Zeit. Das bedeutet, dass eine einzelne Faser rotiert, bis dass sie wieder in ihrer Ausgangsposition ankommt. Die Jeffrey Gleichung ist ein sinnvolles Modell, um die Faserorientierung in einer dünnen Suspension zu berechnen [20]. Dünn heißt in diesem Fall, dass die Faser sich ungestört von anderen Fasern um sich selbst drehen kann. Eine Einteilung der Suspensionen

nach einer Kombination von ihrem Faservolumengehalt und Aspektverhältnis ist in Tabelle 3-1 aufgelistet.

Tabelle 3-1: Einteilung der Fasersuspensionen [20]

Einteilung	Faservolumenanteil: v_F
Dilute	$v_F < \frac{1}{a_r^2}$
Semi-Dilute	$\frac{1}{a_r^2} < v_F < \frac{1}{a_r}$
Concentrated	$\frac{1}{a_r} > v_F$

Für Suspensionen mit höherem Faservolumengehalt, welche für technische Anwendungen eher typisch sind, spielt eine gegenseitige Faserinteraktion eine wesentliche Rolle. Daher ist die Jeffrey Gleichung in dieser Form nicht sinnvoll anwendbar. Gut 2000 bis 20000 Fasern pro Kubikmillimeter, abhängig vom Faservolumengehalt, können in technisch eingesetzten kurzfaserverstärkten Kunststoffen vorkommen. Eine deterministische Betrachtung der Faserorientierung, das heißt für jede Faser einzeln ist aufgrund des dafür benötigten Rechenaufwandes nicht praktikabel. Daher wird eine statistische Betrachtung der Faserorientierung verwendet. Die Orientierungsdichtefunktion (ODF) $\psi(\mathbf{p})$ wird daher auf der Einheitskugel \mathbb{S} definiert, als die Wahrscheinlichkeit mit der eine Faser in die Richtung $\mathbf{p}(\theta, \Phi)$ zeigt. Dabei muss die ODF periodisch sein, mit

$$\psi(\theta, \Phi) = \psi(\theta + n\pi, \Phi + n\pi), n \in \mathbb{N} \quad (\text{Gl.3-5})$$

sowie in normierter Form mit

$$\psi = \oint_{\mathbb{S}} \psi(\theta, \Phi) d\mathbb{S} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \psi(\theta, \Phi) \sin \theta d\theta d\Phi = 1. \quad (\text{Gl.3-6})$$

Die statistische Betrachtungsweise der Faserorientierung erlaubt es, die Fokker-Planck Gleichung für die Entwicklung von Wahrscheinlichkeiten fluktuierender makroskopischer Werte zu verwenden [21]. Beispielsweise verwendet Einstein die Fokker-Planck Gleichung zur Beschreibung der Brownschen Mikrobewegung [22]. In ihrer einfachsten, eindimensionalen Form ist die Fokker-Planck Gleichung gegeben mit

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x) \right] W \quad (\text{Gl.3-7})$$

[21]. W bezeichnet dabei die Verteilungsfunktion, abhängig von der Variablen x . Die Variable $D^{(1)}$ wird als Driftanteil und $D^{(2)}$ als Diffusionsanteil bezeichnet. Beide Anteile können auf der

Basis des zugrunde liegenden mikroskopischen Verhaltens oder vom statistischen makroskopischen Verhalten abgeleitet werden. Bei der Beschreibung der Faserorientierung entspricht der Drift-Anteil dem Anteil, der durch hydrodynamische Kräfte bedingt ist und der Diffusions-Anteil dem Anteil, der durch Faserinteraktion entsteht. Entsprechend kann für den Drift-Anteil Jeffrey's Gleichung eingesetzt werden. Für den Diffusionsanteil wird ein Ansatz eingeführt mit

$$D_r = C_i |2\boldsymbol{\varepsilon}|, \quad (\text{Gl.3-8})$$

der die Faserinteraktion berücksichtigen soll [23]. C_i ist dabei eine materialabhängige Konstante. Mit Drift- und Diffusions-Anteil im dreidimensionalen Fall kann die Fokker-Planck Gleichung für die Faserorientierung mit

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\nabla \cdot (\dot{\mathbf{p}}\psi) + D_r \nabla^2 \psi \quad (\text{Gl.3-9})$$

angegeben werden. Bisher ist das Lösen der Fokker-Planck Gleichung für Spritzgussimulationen von komplexen Bauteilen numerisch zu aufwendig, da die Differentialgleichung im 3-dimensionalen Raum und für jeden Gitterpunkt auf der Einheitskugel \mathbb{S} gelöst werden muss. Eine Möglichkeit den Berechnungsaufwand zu reduzieren ist es, die ODF mithilfe von Momenten aus Kugelflächenfunktionen (SH von *spherical harmonics*) in eine generalisierte Fourierreihe zu zerlegen [24]. Diese Momente werden im Kontext der Faserorientierung auch als Faserorientierungstensoren bezeichnet:

$$\mathbf{a}_N = a_{ijklmn\dots} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi p_i p_j p_k p_l p_m p_n p_{\dots} \psi(\theta, \Phi) \sin \theta \, d\theta d\Phi. \quad (\text{Gl.3-10})$$

Dabei gibt N die Stufe des Momentes an. Der Faserorientierungstensor zweiter Stufe wird folglich mit

$$\mathbf{a}_2 = a_{ij} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi p_i p_j \psi(\theta, \Phi) \sin \theta \, d\theta d\Phi \quad (\text{Gl.3-11})$$

berechnet. Die Evolutionsgleichung der Faserorientierungstensoren zeigen erstmals Folgar und Tucker in [25]. Die Fourierreihe wird dabei lediglich bis zum Faserorientierungstensor zweiter Stufe entwickelt. Die Gleichung, auch Folgar-Tucker Modell genannt, ist angegeben mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{ij}}{\partial t} = & -\frac{1}{2} (\omega_{ik} a_{kj} - a_{ik} \omega_{kj}) + \frac{\lambda}{2} [\varepsilon_{ik} a_{kj} + a_{ik} \varepsilon_{kj} - 2\varepsilon_{kl} a_{ijkl}] \\ & + 2D_r (\delta_{ij} - 3a_{ij}). \end{aligned} \quad (\text{Gl.3-12})$$

In Gleichung 3-12 wird ersichtlich, dass die Berechnung des Faserorientierungstensors zweiter Stufe a_{ij} die Kenntnis des Faserorientierungstensors vierter Stufe a_{ijkl} voraussetzt. Analog könnte dieser mit

$$\begin{aligned} \frac{\partial a_{ijkl}}{\partial t} = & -(\omega_{im}a_{mjkl} - a_{ijkm}\omega_{ml}) + \lambda[\varepsilon_{im}a_{mjkl} + a_{ijkm}\varepsilon_{ml} - 2\varepsilon_{mnl}a_{ijklmn}] \\ & + D_r(-20a_{ijkl} + 2(a_{ij}\delta_{kl} + a_{ik}\delta_{jl} + a_{il}\delta_{jk} + a_{jk}\delta_{il} + a_{ji}\delta_{ik} \\ & + a_{kl}\delta_{ij})) \end{aligned} \quad (\text{Gl.3-13})$$

berechnet werden. Jedoch ist auch hier die Kenntnis vom nächsten höheren, geraden Tensor a_{ijklmn} notwendig. Um entsprechend das Folgar-Tucker Modell zu verwenden, muss der nächsthöhere gerade Tensor durch einen Ansatz bestimmt werden. Sogenannte *Closures* können dafür verwendet werden. Im Prinzip beinhaltet ein Tensor höherer Ordnung jedoch mehr Informationen als ein Tensor niedrigerer Ordnung. Während Tensoren niedrigerer Stufe aus Tensoren höherer Stufe mit

$$a_{ij\dots kk} = a_{ij\dots} \quad (\text{Gl.3-14})$$

berechnet werden kann, ist der umgekehrte Fall nicht möglich. Eine Closure kann daher nur ein auf Annahmen basiertes Modell sein. Eine Liste mit in der Literatur bekannten Closures ist in Tabelle 3-2 für die vierte und sechste Stufe angegeben.

Tabelle 3-2: Liste mit Closures für den Tensor vierter und sechster Stufe

Name der Closure	Referenz
Linear	[26, 27]
Quadratic	[27–30]
Hybrid	[27, 31]
Exact	[32]
Fast Exact (FEC)	[33, 34]
Bingham	[35]
Orthotropic	[31, 36]
Natural	[37]
Neural Network (NNET)	[38]
Neural Network Orthotropic (NNORT)	[39]
Quad R	[40]
Hinch and Leal W1 (isotropic)	[41]
Hinch and Leal S2 (strong flow)	[41]
Hinch and Leal HL1	[40]
Hinch and Leal HL2	[40]
Hinch and Leal HL1Q	[40]
Invariant Based Optimal Fitting (IBOF)	[42]

Invariant Based

[43]

Die große Anzahl der in der Literatur entwickelten und diskutierten Closures zeigt, dass es nicht einfach ist, eine sowohl numerisch effizient als auch zufriedenstellend genaue Closure zu entwickeln. Kommerzielle Spritzgießsimulationsprogramme verwenden in der Regel die Hybrid-, die Orthotropic- oder die IBOF Closure für den Tensor vierter Ordnung [44, 45].

Neben den Closures sind viele Verbesserungsvorschläge in der Literatur zu dem Folgar-Tucker Modell vorgestellt und diskutiert. Eine Zusammenfassung und Diskussion vieler dieser Verbesserungen ist in dem Buch [6] zu finden. So unter anderem das RSC, das ARD-RSC, iARD und das iARD-RPR Modell.

Neben der Berechnung der Faserorientierung kann in kommerziellen Spritzgießsimulationsprogrammen ebenfalls die Faserlänge berechnet werden [44]. So zum Beispiel mit dem in [46] entwickelten Modell für den Faserlängenabbau [44]. Bei diesem Modell wird eine Population von Fasern betrachtet und die durch hydrodynamische Kräfte verursachte Bruchrate der Fasern berechnet. Dabei wird sichergestellt, dass die Summe aller Faserlängen konstant bleibt.

3.2 Modellierung der Compositeeigenschaften

Die Mikrostruktur kurzfaserverstärkter Kunststoffe hat einen großen Einfluss auf die Compositeigenschaften. Daher ist es für Struktursimulationen von Bauteilen aus kurzfaserverstärkten Kunststoffen notwendig die lokale Mikrostruktur mit einzubeziehen. Die Modellierung eines Bauteils mit der vollständigen Mikrostruktur ist aufgrund des enormen Aufwandes praktisch nicht möglich beziehungsweise nicht sinnvoll. Vielmehr ist eine kontinuumsmechanische Betrachtung des Composites zweckmäßig, bei dem das Composite als ein lokal homogener Werkstoff betrachtet wird. Dabei sind die effektiven Eigenschaften abhängig von der lokalen Mikrostruktur.

Die Berechnung effektiver Compositeigenschaften auf Basis der Mikrostruktur wird dabei im Allgemeinen Homogenisierung genannt. In der Literatur werden einige Arbeiten dazu vorgestellt und diskutiert. Unterschiedlichste Annahmen und Vereinfachungen werden hierzu getroffen.

Die ersten Arbeiten mit den einfachsten Modellen sind die von Voigt [47] und Reuss [48], welche beide mittels einer Mischungsregel die effektiven Compositeigenschaften bestimmen. Voigt geht hierbei von einer lokal konstanten Dehnung innerhalb des Werkstoffs und Reuss von einer lokal konstanten Spannung aus. Beide Theorien sind zwar für Mischkristalle entwickelt und somit unabhängig der Fasergeometrie, aber Hill [49] zeigt, dass mit beiden Ansätzen auch Composite betrachtet werden können. Die effektive Verbundsteifigkeit C^* kann mit den Gleichungen

$$\mathbf{C}_{Voigt}^* = v_F \mathbf{C}_F + (1 - v_F) \mathbf{C}_M \quad (\text{Gl.3-15})$$

und

$$\mathbf{C}_{Reuss}^* = (v_F \mathbf{C}_F^{-1} + (1 - v_F) \mathbf{C}_M^{-1})^{-1} \quad (\text{Gl.3-16})$$

berechnet werden [50]. \mathbf{C}_F bezeichnet dabei die Steifigkeit der Fasern, \mathbf{C}_M die Steifigkeit der Fasern und v_F den Faservolumenanteil. Das Voigt Modell entspricht damit einer Parallelschaltung von \mathbf{C}_F und \mathbf{C}_M , das Reuss Modell einer Reihenschaltung.

Die Mischungsregeln von Reuss und Voigt liefern jeweils eine obere und eine untere Grenze für die effektiven Compositeigenschaften. Engere Grenzen können mit dem Hashin-Shtrikman Variationsprinzip definiert werden [51]. Die untere Grenze kann mit

$$\mathbf{C}_{HS-}^* = \mathbf{C}_M + v_F ((\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M)^{-1} + v_M \mathbf{S}_M : \mathbf{C}_M^{-1})^{-1} \quad (\text{Gl.3-17})$$

und die obere mit

$$\mathbf{C}_{HS+}^* = \mathbf{C}_F + v_M ((\mathbf{C}_M - \mathbf{C}_F)^{-1} + v_F \mathbf{S}_F : \mathbf{C}_F^{-1})^{-1} \quad (\text{Gl.3-18})$$

berechnet werden [50]. v_M bezeichnet dabei den Matrixvolumenanteil und \mathbf{S} den isotropen Eshelby-Tensor [52]. Der Eshelby-Tensor beschreibt die Dehnung innerhalb eines ellipsoiden Einschlusses, der in einer ausgedehnten Matrix mit denselben mechanischen Eigenschaften eine Eigendehnung erfährt. Die Lösung des Eshelby-Tensors ist nicht immer trivial, sodass viele Spezialfälle und numerische Methoden beschrieben werden in [50, 53–55].

Die Arbeit von Eshelby gilt als eine der wichtigsten und meist zitierten im Bereich der angewandten Mechanik und dient als Grundlage weiterer wichtiger Arbeiten [55]. So auch für die Methode von Mori-Tanaka (MT) [56], mit der die effektiven Compositeigenschaften in Abhängigkeit des Eshelby-Tensors und somit in Abhängigkeit der Fasergeometrie bestimmt werden können. Die ellipsoide Geometrie stellt dabei für kurzfaserverstärkte Kunststoffe weiterhin eine große Annahme dar, da die Fasern eine zylindrische Form aufweisen. Die effektive Steifigkeit kann mit

$$\mathbf{C}_{MT}^* = \mathbf{C}_M + v_F (\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M) : \mathbf{A}_{F(MT)} \quad (\text{Gl.3-19})$$

berechnet werden, wobei $\mathbf{A}_{F(MT)}$ als Konzentrationstensor bezeichnet wird und mit

$$\mathbf{A}_{F(MT)} = (\mathbf{1} + v_M \mathbf{S}_M : \mathbf{C}_M^{-1} : (\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M))^{-1} \quad (\text{Gl.3-20})$$

berechnet wird [50].

Eine Erweiterung der Methode von Mori-Tanaka ist das Selbst-Konsistente Modell. Hierbei wird die Matrixsteifigkeit, zur Bestimmung des Konzentrationstensors, ersetzt durch die Steifigkeit des Composites. Die Gleichungen

$$\mathbf{C}_{SK}^* = \mathbf{C}_M + v_F(\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M) : \mathbf{A}_F^\infty(\mathbf{C}_{SK}^*) \quad (\text{Gl.3-21})$$

sowie

$$\mathbf{A}_{F(SK)} = \mathbf{A}_F^\infty(\mathbf{C}_M = \mathbf{C}^*) = (\mathbf{1} + \mathbf{S}^* : \mathbf{C}^{*-1} : (\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M))^{-1} \quad (\text{Gl.3-22})$$

müssen daher iterativ gelöst werden [50].

Einen Vergleich der aufgelisteten Methoden ist in [57] zu finden. Für ein Aspektverhältnis von 10 sind die Ergebnisse der hier genannten Methoden in Abbildung 3-3 im Teilbild a) dargestellt. Abgebildet ist der berechnete effektive E-Modul des Composites in Richtung der Faserverstärkung in Abhängigkeit des Faservolumenanteils. Die obere und untere Grenze durch das Voigt Modell beziehungsweise durch das Reuss Modell sind gut zu erkennen. Die obere Hashin-Shtrikman Grenze ist fast identisch mit dem Voigt Modell, die untere Hashin-Shtrikman Grenze ist identisch mit dem Mori-Tanaka Modell.

Der Einfluss des Aspektverhältnisses ist in Teilbild b) der Abbildung 3-3 dargestellt. Verwendet wird hierfür ein Faservolumenanteil von 10%. Die invarianten Modelle bezüglich der Fasergeometrie liefern hierbei einen konstanten Wert. Die Werte der Modelle auf Basis des Eshelby-Tensors sind, in dem hier verwendeten Intervall, streng monoton steigend. Dabei sind die Verläufe degressiv. Weitere Analysen und detailliertere Diskussionen bezüglich des Einflusses des Eshelby-Tensors auf die homogenisierten Compositeigenschaften können in [58–64] gefunden werden.

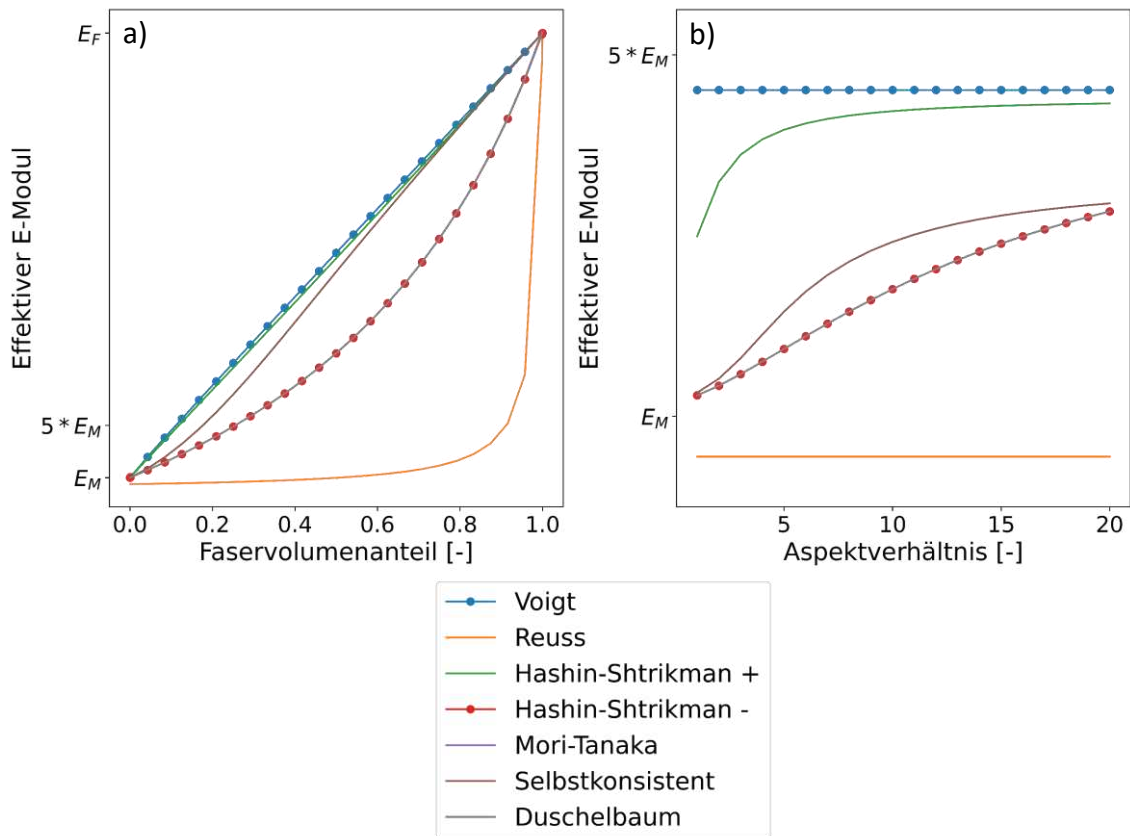


Abbildung 3-3. Teilbild a) Effektiver E-Modul in Richtung der Faserverstärkung eines Composites in Abhängigkeit des Faservolumenanteils für die unterschiedlichen Homogenisierungsansätze. Teilbild b) Effektiver E-Modul in Richtung der Faserverstärkung eines Composites in Abhängigkeit des Aspektverhältnisses.

Composite mit mehrphasigen Verstärkungseinschlüssen werden ebenfalls in der Literatur diskutiert. So entwickeln Hori et al. ein Double-Inclusion-Modell (DI-Modell) in [65] für Fasern mit einer Beschichtung. Ein weiteres Modell für mehrphasige Einschlüsse ist das RDI-Modell [66, 67], welches auf dem DI-Modell basiert.

Für die Berechnung der Festigkeit werden ebenfalls einige Modellierungsansätze diskutiert. Gandhi et al. stellen in [6] viele der bekannten Ansätze vor und vergleichen einige von diesen miteinander. Unter anderem auch das laut Gandhi et al. viel eingesetzte Tsai-Wu Modell [68]. Das Tsai-Wu Modell ist dabei ein phänomenologischer Ansatz, mit dem ein richtungsabhängiges Schädigungskriterium berechnet werden kann. Dabei werden die zugrundeliegenden mikromechanischen Schädigungsmechanismen kurzfaserverstärkter Kunststoffe nicht berücksichtigt. Neuere Modellierungen, wie beispielsweise von Puck und Schürmann [69], versuchen eine verbesserte Vorhersage der Festigkeit zu erzielen, indem Festigkeitsvorhersagen für Faserbruch und Zwischenfaserbruch getrennt vorgenommen werden. Osswald und Osswald [70] entwickeln eine Modellierung, die die Interaktion von Spannungen berücksichtigt.

Werden mehrere Einschlüsse betrachtet, so zeigen Benevise et al. [71], dass diese die gleiche Geometrie und gleiche Orientierung aufweisen müssen. Andernfalls lassen sich mit der Methode von Mori-Tanaka die effektiven Compositeigenschaften nicht direkt bestimmen. Abhilfe schafft in diesem Fall eine zweistufige Homogenisierung, die auf Camacho et al. [72] zurückgeht. Bei der zweistufigen Homogenisierung werden die Einschlüsse zunächst in Klassen (i) hinsichtlich Geometrie, mechanischer Eigenschaften und Orientierung unterteilt. Anschließend wird eine Homogenisierung für jede Klasse durchgeführt, das heißt \mathbf{C}_i wird mit einem Modell der Wahl bestimmt. Als zweiten Homogenisierungsschritt können mehrere Modelle verwendet werden, wie zum Beispiel der Voigt-Ansatz

$$\mathbf{C}_{\psi_i} = \int \mathbf{C}_i(\mathbf{p})\psi_i(\mathbf{p})d\mathbf{p} \quad (\text{Gl.3-23})$$

oder der Reuss-Ansatz

$$1/\mathbf{C}_{\psi_i} = \int 1/\mathbf{C}_i(\mathbf{p})\psi_i(\mathbf{p})d\mathbf{p}. \quad (\text{Gl.3-24})$$

Die zweistufige Homogenisierung auf Basis des Voigt-Modells wird auch als Pseudo-Grain (PG) bezeichnet.

Trotz der Einschränkung von Benevise, dass alle Einschlüsse die gleiche Geometrie und Orientierung aufweisen müssen, um die Methode von Mori-Tanaka verwenden zu können, kann die Methode von Mori-Tanaka als zweiter Homogenisierungsschritt verwendet werden. Hierzu wird der Konzentrationstensor $(\mathbf{A}_{F(MT)})_i$ für jede Klasse bestimmt und anschließend mit

$$(\mathbf{A}_{F(MT)})_{\psi_i} = \int (\mathbf{A}_{F(MT)})_i(\mathbf{p})\psi_i(\mathbf{p})d\mathbf{p} \quad (\text{Gl.3-25})$$

und

$$\mathbf{C}_{\psi_i} = \mathbf{C}_M + \nu_F(\mathbf{C}_F - \mathbf{C}_M): (\mathbf{A}_{F(MT)})_{\psi_i} \quad (\text{Gl.3-26})$$

die effektive Steifigkeit berechnet. Dieses Vorgehen wird in der Literatur auch als Full-Mori-Tanaka (FMT) Modell bezeichnet, jedoch wird kontrovers diskutiert ob die Ergebnisse physikalisch sinnvoll sind. So raten Pierard et al. von der Verwendung des Full-Mori Tanaka Ansatzes ab [73]. An einem Beispiel zeigen Pierard et al., dass die Ergebnisse mit dem Full-Mori Tanaka Ansatz teilweise oberhalb von Voigt- und unterhalb von Reuss-Grenzen liegen. Dies wird als unphysikalisches Modellergebnis gewertet. Jain et al. hingegen empfehlen den Full-Mori Tanaka Ansatz, da dieser in ihren Untersuchungen die bessere Approximation darstellt [74].

Die hier aufgezeigten Methoden zur Berechnung effektiver Compositesteifigkeit eint, dass die effektiven Compositeigenschaften aufgrund von Informationen über den mikrostrukturellen Aufbau berechnet werden. Hierbei kann von den ersten Ansätzen von Voigt und Reuss bis hin zur zweistufigen Homogenisierungsmethode festgestellt werden, dass der Informationsgehalt über die Mikrostruktur, der mit in die Berechnung der effektiven Compositeigenschaften einfließt, steigt. Dieser steigende Informationsgehalt ist die Grundlage für die steigende Prognosegüte der effektiven Compositeigenschaften. Entsprechend sind Bestrebungen naheliegend die Prognosegüte weiter zu steigern, indem der Informationsgehalt weiter gesteigert wird, der in die Berechnung der effektiven Compositeigenschaften einfließt. In diesem Zusammenhang ist der Begriff des Repräsentativen Volumen Elementes (RVE) geprägt.

Hill [75] verwendet den Begriff der RVE für Ausschnitte, die zum einen statistisch betrachtet typisch sind für das gesamte Composite und zum anderen eine ausreichende Anzahl von Einschlüssen aufweisen, sodass die homogenisierten Compositeigenschaften unabhängig von Randeffekten sind. Weitere Autoren definieren den Begriff des RVEs jedoch unterschiedlich. Drugan und Willis definieren in [76] ein RVE als das kleinste Volumen einer Mikrostruktur, mit dem die effektiven Compositeigenschaften berechnet werden können. Laut der Definition von Hill ist eine Forderung für ein RVE, dass es genügend Einschlüsse enthält. Wie viele es genau sein sollen ist immer wieder Gegenstand von Untersuchungen. Bargmann et al. liefern dazu eine Übersicht in [77]. Klar ist jedoch, dass die Wahl von Länge, Ausrichtung und Position einer endlichen Anzahl an Fasern eine Art Stichprobe darstellt. Durch den Stichprobencharakter können die effektiven Compositeigenschaften schwanken [78]. Aus diesem Grund müssen zwangsläufig immer mehrere Ensembles untersucht werden. Dabei können statt wenigen großen RVEs auch mehrere kleine verwendet werden [79–82]. Die Streuung der effektiven Compositeigenschaften ist bei größeren Stichproben geringer. Entsprechend der unterschiedlichen Definitionen von Hill [75] und Drugan und Willis [76] müssen beide Varianten den gleichen Mittelwert der effektiven Compositeigenschaften liefern, aber unterschiedliche Streuungen.

Durch die immer weiter steigende verfügbare Rechenleistung werden RVEs immer häufiger für Studien und Untersuchungen verwendet, auch für andere Materialklassen als kurzfaserverstärkte Kunststoffe. Eine Übersicht der Verwendungsmöglichkeiten und der Geometrie Erstellung ist in dem umfassenden Review von Bargmann et al. zu finden [77].

Zur Berechnung effektiver Compositeigenschaften mithilfe von RVEs findet die Finite Elemente Methode (FEM) Anwendung. Hierbei wird das RVE mit Finiten Elementen diskretisiert, Randbedingungen aufgebracht und das entstehende Randwertproblem gelöst. Dabei können Randeffekte minimiert werden, indem periodische Randbedingungen verwendet werden [83,

84]. Ein Homogenisierungsschema liefert auf Basis des Ergebnisses des Anfangswertproblems die effektiven Compositeigenschaften.

Die Kombination von RVEs mit der FEM bietet den großen Vorteil, dass der Informationsgehalt zur Bestimmung der effektiven Compositeigenschaften nahezu beliebig erhöht werden kann. In der Regel geht jedoch ein erhöhter Informationsgehalt mit einem erhöhten Rechenaufwand einher. Daher ist eine Balance zwischen Informationsgehalt und Rechenaufwand zu wahren.

Eine Alternative zur FEM wird von Moulinec und Suquet in [85–87] vorgestellt. Dabei werden auf Basis einer Fast Fourier Transformation die effektiven Compositeigenschaften eines RVEs im Vergleich zur FEM relativ schnell berechnet [88]. Verbesserungen zum ursprünglichen Algorithmus der Methode werden unter anderem in [89–93] vorgestellt. Im Vergleich zur FEM ist jedoch die geringere Verbreitung und der geringere Modellierungsumfang kommerzieller- und frei verfügbarer Software nachteilig.

4 Experimentelle Methoden zur Charakterisierung der Mikrostruktur

In diesem Abschnitt werden die experimentellen Methoden zur Charakterisierung eines kurzfaserverstärkten Kunststoffes vorgestellt. Dabei wird insbesondere der Fokus auf die Methoden gelegt, die für eine Modellierung der kurzfaserverstärkten Kunststoffe mittels RVEs benötigt werden. Die Bestimmung der mechanischen Eigenschaften der einzelnen Phasen gehört ebenso dazu wie die Untersuchung der Faserorientierung und Faserlänge.

4.1 Phaseneigenschaften

Generell sind zwei unterschiedliche Vorgehensweisen zur Bestimmung der Phaseneigenschaften kurzfaserverstärkter Kunststoffe möglich. Zum einen die direkte Messung der Eigenschaften auf Mikroebene, für die Steifigkeit zum Beispiel mit Nanoindentation oder mittels Rasterkraftmikroskop. Der Vorteil dieser Methode ist, dass die Phaseneigenschaften auf der Längenskala, auf der sie für die Modellierung verwendet werden, gemessen werden. Daher muss keine Annahme getroffen werden, ob die Eigenschaften Längenskalen-unabhängig sind. Der Nachteil dieser Methode ist jedoch der erhöhte experimentelle und apparative Aufwand. Die zweite Methode besteht in der Herstellung und Messung homogener Werkstoffproben auf der Makroebene. So kann zum Beispiel für die Matrix die Steifigkeit anhand von Zugversuchen bestimmt werden. Der Vorteil ist der geringere Aufwand gegenüber den direkten Messungen auf der Mikroebene. Aus diesem Grund werden die Phaseneigenschaften in dieser Arbeit auf der Makroebene anhand homogener Werkstoffproben ermittelt.

Für das in dieser Arbeit verwendete PBT sind Zugversuche in der Abbildung 4-1 dargestellt. Verwendet werden Zugstäbe nach DIN EN ISO 527-2, Typ 1-BA, aus unverstärktem PBT [10], die aus einer spritzgegossenen Platte herausgefräst werden. Die Zugstäbe werden dabei einmal in Fließrichtung und einmal 90° quer dazu entnommen. Zur Bestimmung einer Dehnratenabhängigkeit wird der Zugversuch mit einer Traversengeschwindigkeit von 1 mm/min sowie mit 10 mm/min ausgeführt. Dabei werden jeweils sieben Wiederholungen je Ausrichtung und Geschwindigkeit durchgeführt.

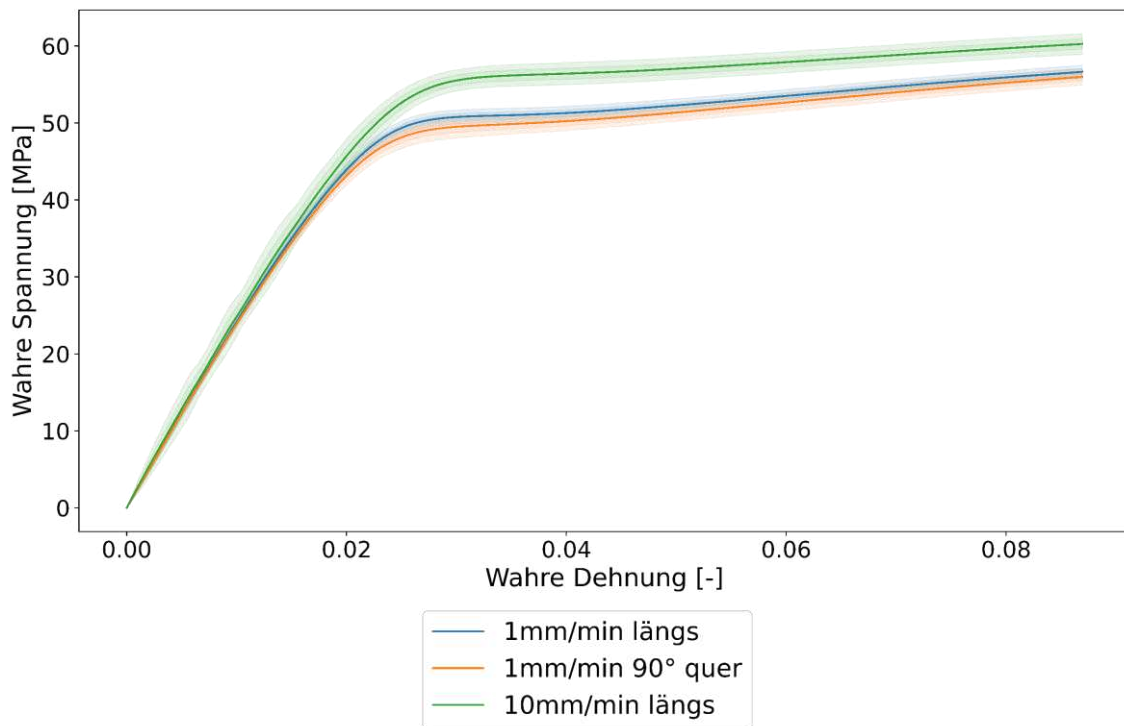


Abbildung 4-1: Uniaxiale Zugversuche nach DIN EN ISO 527-2 aus unverstärkten PBT. Die Zugstäbe werden in unterschiedlichen Orientierungen aus spritzgegossenen Platten herausgefräst.

Anhand des Spannungs-Dehnungsverlaufs der längs und quer entnommenen Zugstäbe ist ersichtlich, dass das unverstärkte Matrixmaterial keine ausgeprägte Richtungsabhängigkeit aufweist. Es wird ein E-Modul zwischen 0,005 % und 0,25 % Dehnung mit 2420 ± 95 MPa und eine Fließgrenze mit $48 \pm 0,3$ MPa bestimmt. Der Spannungs-Dehnungsverlauf mit 10mm/min weist eine etwas höhere Fließspannung mit $52 \pm 0,5$ MPa auf, der E-Modul ist geringfügig höher mit 2440 ± 148 MPa.

Der Einfluss einer höheren Dehngeschwindigkeit auf die Steifigkeit kann mittels einer dynamisch-mechanischen Analyse (DMA) genauer untersucht werden als mit einem uniaxialen Zugversuch. Bei der DMA wird ein Probekörper mit einer zyklischen Deformation im linear-(visko)elastischen Bereich belastet und die Spannungsantwort gemessen. Das Prinzip ist in der Abbildung 4-2 dargestellt. Bei einem rein elastischen Werkstoff ist die Spannung bei der DMA direkt proportional zur Dehnung. Ist jedoch ein Phasenversatz δ , das heißt ein zeitlicher Abstand zwischen den Nulldurchgängen der Spannung und Dehnung vorhanden, ist das Werkstoffverhalten viskoelastisch. Im Grenzfall eines Phasenversatzes von $\pi/2$ ist das Werkstoffverhalten rein viskos [94].

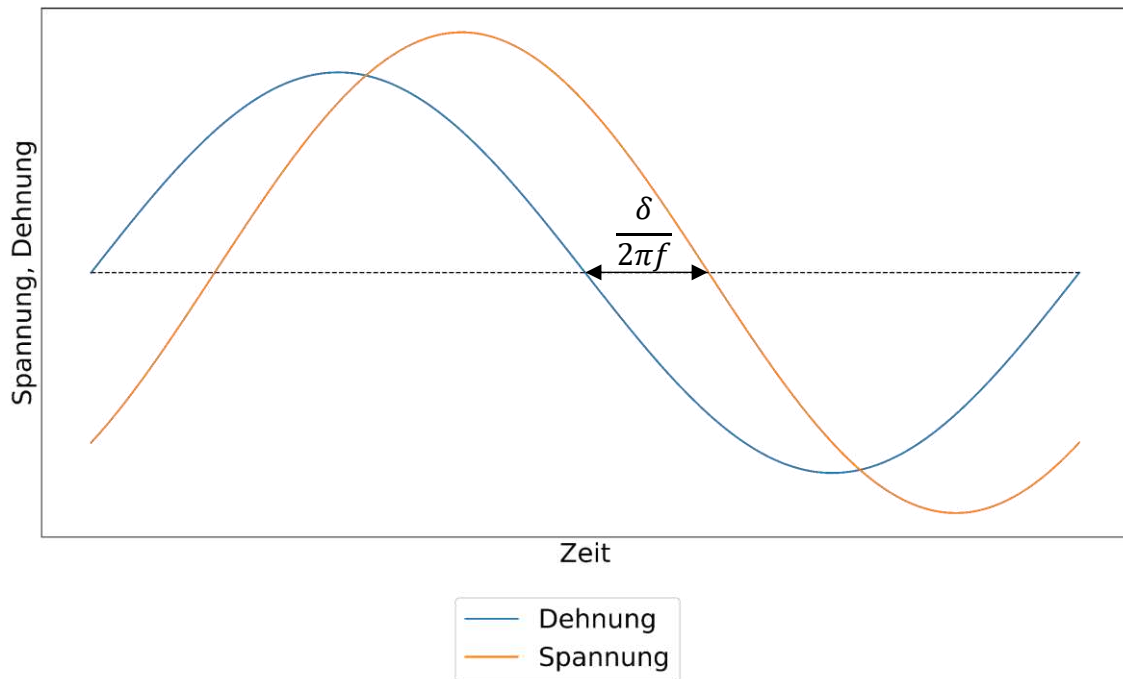


Abbildung 4-2: Prinzipschaubild einer dynamisch-mechanischen Analyse mit periodischem Verlauf der Dehnung und Spannung mit Phasenverschiebung, nach [95].

Mit den Amplituden von Spannung und Dehnung kann der komplexe Modul E^* zur Beschreibung des viskoelastischen Werkstoffverhaltens berechnet werden mit

$$|E^*| = \frac{\sigma_A}{\varepsilon_A} \quad (\text{Gl.4-1})$$

Der komplexe Modul kann dabei aufgeteilt werden in einen Speicheranteil E' und einen Verlustanteil E'' mit

$$(E^*)^2 = (E')^2 + (E'')^2 \quad (\text{Gl.4-2})$$

und

$$\tan \delta = \frac{E''}{E'} \quad (\text{Gl.4-3})$$

Der Speicheranteil beschreibt dabei den Anteil der Deformation, der elastisch im Werkstoff gespeichert wird und der Verlustanteil den Anteil, der durch Dissipation in Wärme umgewandelt wird.

Die Dehnratenabhängigkeit kann in der DMA über eine Variation der verwendeten Frequenz untersucht werden. Dabei stellt in der Regel die verwendete Messeinrichtung aufgrund von Eigenresonanzen eine obere Grenze an die verwendbare Frequenz. Die Gesamtmessdauer beschränkt praktisch die Frequenz nach unten, denn je geringer die Frequenz ist, desto länger

dauert eine Messung. Diese Einschränkung kann mit dem Zeit-Temperatur Verschiebungsprinzip (ZTV) umgangen werden. Bei rheologisch einfachem Werkstoffverhalten ist eine erhöhte Temperatur äquivalent zu einer niedrigeren Dehnrates und andersherum [96]. Entsprechend können die Grenzen der DMA Messung erweitert werden, indem sie für unterschiedliche Temperaturen durchgeführt werden und anschließend das ZTV angewendet wird. Hierbei kann über Verschiebungsfaktoren und der Gleichung

$$f_s = f \cdot a_t \quad (\text{Gl.4-4})$$

eine Masterkurve berechnet werden, die für die Referenztemperatur gilt. In der Regel besteht die Schwierigkeit darin, die Verschiebungsfaktoren so zu bestimmen, dass die entstehende Masterkurve möglichst glatt ist. Gerade beim Glasübergangsbereich und anderen Phasenumwandlungen ist die Anwendung des ZTVs nicht möglich [5].

Ein Bewertungskriterium für die Anwendbarkeit des ZTVs ist die doppelt logarithmische Darstellung des Verlustfaktors über dem Speichermodul als sogenannter Wicket-Plot [97]. Alternativ kann der Verlustmodul über dem Speichermodul in doppelt logarithmischer Darstellung verwendet werden (Cole-Cole-Plot).

In der Abbildung 4-3 ist der Wicket-Plot für das in dieser Arbeit verwendete unverstärkte PBT dargestellt. Die Werte sind entsprechend der vorherrschenden Temperatur während der Messung eingefärbt. Es ist zu erkennen, dass das PBT bei Temperaturen von weniger als -10°C nicht mehr als rheologisch einfacher Werkstoff gewertet werden kann. Das ZTV ist entsprechend unterhalb dieser Temperatur nicht anwendbar.

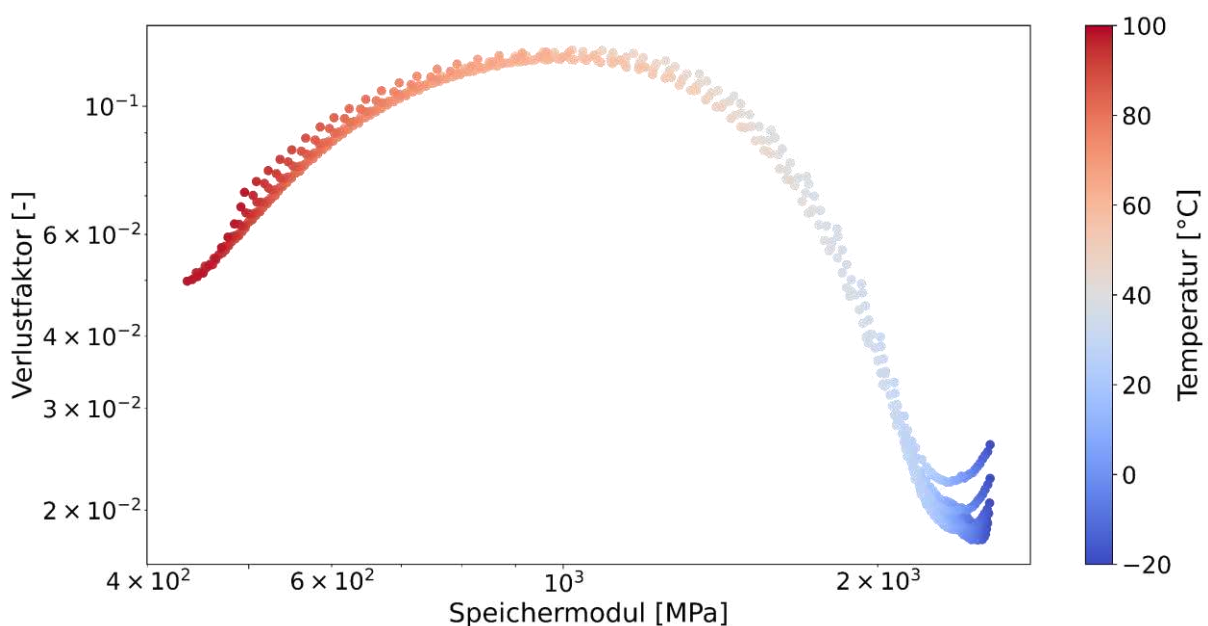


Abbildung 4-3: Mittels DMA gemessener Verlustmodul und Speichermodul von unverstärktem PBT in Abhängigkeit von Frequenz und Temperatur.

In der Abbildung 4-4 ist die gemessene komplexe Steifigkeit E^* des PBTs für den gültigen Bereich des ZTVs dargestellt. Weiter dargestellt sind die mittels Gleichung 4-4 verschobenen Steifigkeiten. Die Verschiebungsfaktoren sind dabei so gewählt, dass die verschobenen Steifigkeiten möglichst glatt ineinander übergehen. Die Verschiebungsfaktoren sind in der Tabelle A-1 im Anhang aufgeführt.

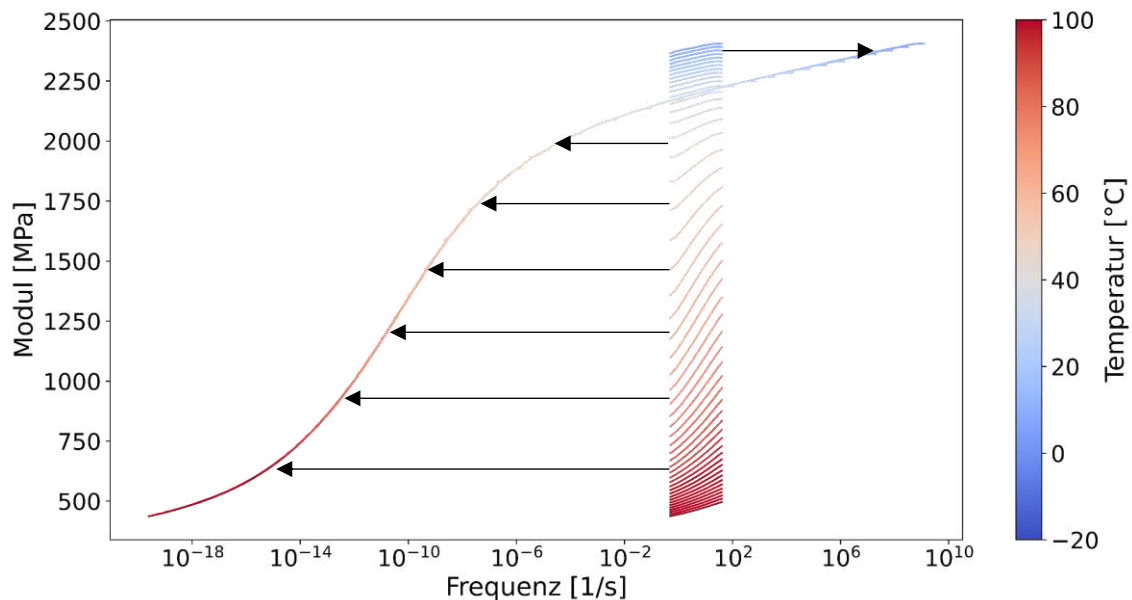


Abbildung 4-4: Mittels DMA gemessene Steifigkeit von unverstärktem PBT in Abhängigkeit von Frequenz und Temperatur sowie der mittels ZTV verschobenen Steifigkeiten.

Die Phaseneigenschaften der Fasern werden im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter experimentell untersucht, da sie in der Literatur hinreichend genau beschrieben sind [98, 99]. Falls nicht explizit anders genannt, wird für die Modellierung von Glasfasern in dieser Arbeit eine isotrope, linear-elastische Faser mit einem E-Modul von 72 000 MPa und einer Querkontraktionszahl von 0,2 verwendet.

4.2 Faserorientierung

Die Faserorientierung lässt sich durch zwei unterschiedliche Methoden bestimmen. Eine Methode besteht darin Schliffbilder des Composites optisch mittels eines Mikroskops zu untersuchen. Dabei lässt die Kontur einer geschnittenen Faser an der Oberfläche des Schliffes Rückschlüsse auf ihre Orientierung zu. Wird eine zylindrische Faser in einem Winkel zwischen 0° und 90° geschnitten, entspricht die Kontur des Schnittes einer Ellipse wie Abbildung 4-5 verdeutlicht. Anhand der Ellipse können zwei mögliche Orientierungswinkel berechnet werden. Für eine eindeutige Auswertung kann das Matrixmaterial an der Oberfläche geätzt werden, sodass die Fasern herausstehen und durch einen Schattenwurf der Fasern der Winkel eindeutig bestimmt werden kann.

Diese Methode zur Bestimmung der Faserorientierung hat den Vorteil, dass keine speziellen Messgeräte vorhanden sein müssen, außer einem einfachen Lichtmikroskop und der Möglichkeit Proben schleifen, polieren und ätzen zu können. Nachteilig ist jedoch der hohe manuelle Arbeitsaufwand insbesondere wenn viele Proben untersucht werden sollen [6].

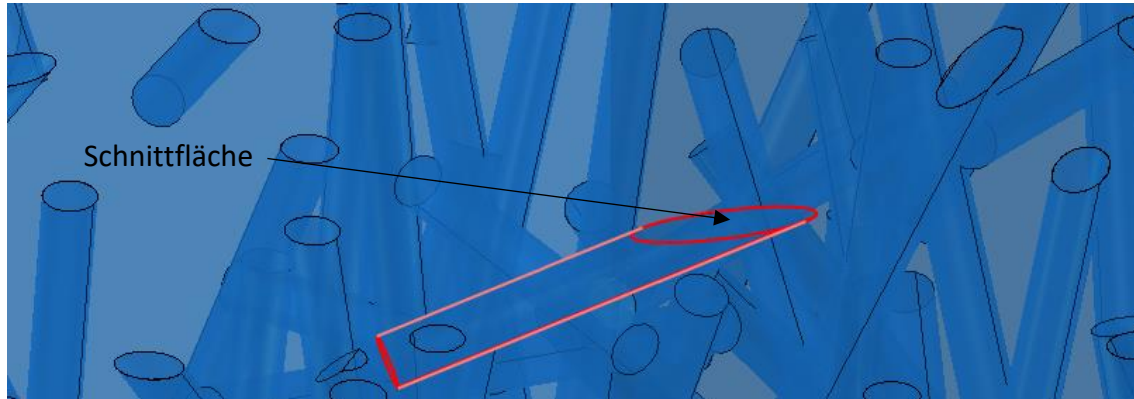


Abbildung 4-5: Elliptische Kontur einer geschnittenen zylindrischen Faser.

Die zweite Methode besteht in der Verwendung von Mikro-Computertomographie (μ CT). Hierbei wird eine Probe mittels Röntgenstrahlung durchleuchtet und die Dichteunterschiede zwischen Matrix und Faser ausgenutzt, um zwischen den Phasen unterscheiden zu können. Diese Methode ist weniger arbeitsintensiv, erfordert aber den Zugang zu einer μ CT [6].

Die Genauigkeit beider Methoden ist vergleichbar, bei der Methode der Schliffbilder ist in der Regel durch den höheren Arbeitsaufwand die Anzahl der Schliffe begrenzt. Daher werden bei der Methode mit μ CT häufig mehr Daten, insbesondere über die Dicke einer Probe, erfasst [6]. Mehr Daten erlauben dabei eine detailliertere Auswertung.

In dieser Arbeit werden alle Messungen der Faserorientierung mit der μ CT-Methode durchgeführt. Verwendet wird eine *CT-Alpha* von *ProCon X-Ray GmbH* in Kombination mit der Auswertungssoftware *VGSTUDIO MAX* von *Volume Graphics GmbH* in der Version 3.4.

Ein Bild des Aufbaus der Messung ist in der Abbildung 4-6 zu sehen. Für eine maximale Vergrößerung durch den Strahlengang wird die Probe sehr dicht vor der Röntgenquelle aufgestellt. Mit einem Abstand von ca. 15 mm zwischen Drehzentrum der Probe und Röntgenquelle kann eine Auflösung von ca. 3 μ m erzielt werden. Durch den notwendigen geringen Abstand ist die maximale Größe der Probe begrenzt. Für die Messung wird eine Beschleunigungsspannung von 110 kV verwendet.

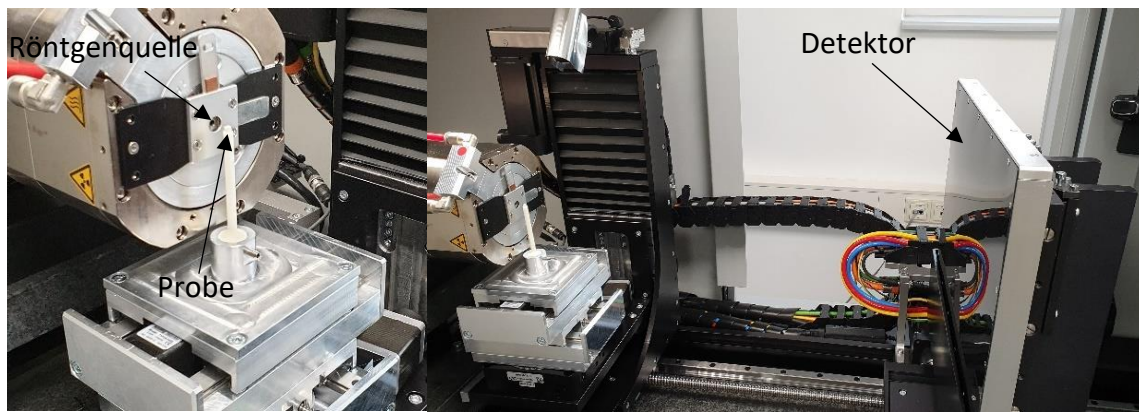


Abbildung 4-6: Aufbau der experimentellen Messung der Faserorientierung mittels μ CT (*Procon CT-ALPHA*). Abstand ca. 15 mm, Beschleunigungsspannung 110 kV.

Es werden 2D-Einzelaufnahmen aus unterschiedlichen Winkeln der Probe aufgenommen. Dafür wird die Probe vor der Röntgenquelle gedreht, hier in 1 200 Winkelschritten pro Messung. In einem anschließenden Rekonstruktionsschritt wird aus den 2D-Bildern ein Volumen als 3D-Voxeldatensatz berechnet, wie Abbildung 4-7 illustriert.

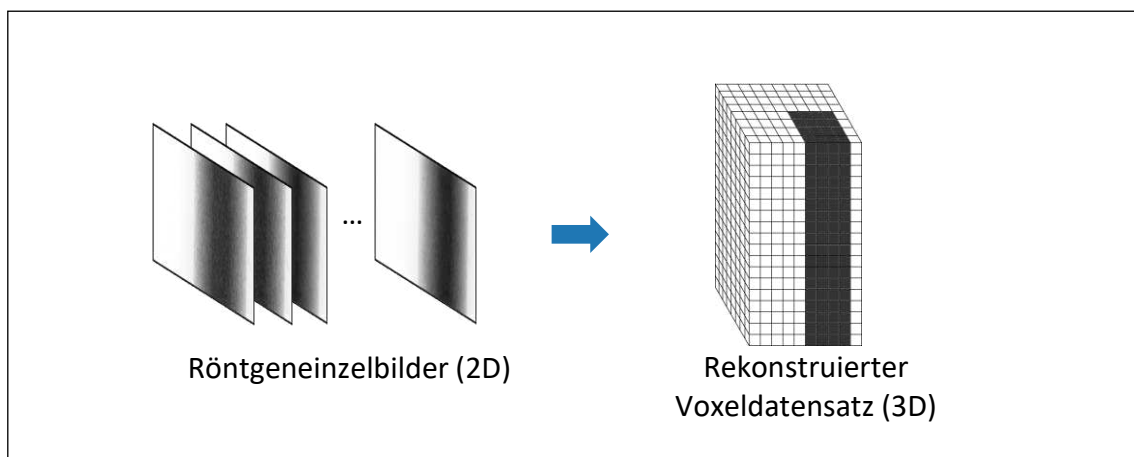


Abbildung 4-7: Prinzip der Rekonstruktion eines 3D-Voxeldatensatzes aus 2D-Röntgenaufnahmen.

Für die weitere Auswertung und Berechnung der Faserorientierung wird das rekonstruierte Volumen in ein reguläres Netz unterteilt. Für jede Zelle dieses Netzes wird der Faserorientierungstensor zweiter Stufe \mathbf{a}_2 bestimmt. Um eine Balance zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand beziehungsweise Speicherbedarf zu finden, wird in dieser Arbeit immer eine Zellgröße von $9\mu\text{m}$ verwendet. In der Abbildung 4-8 ist exemplarisch ein rekonstruierter Datensatz dargestellt. Teilbild a) und b) beinhalten Schnittansichten der Rekonstruktion, Teilbild c) eine 3D-Ansicht der Rekonstruktion. Teilbild d) beinhaltet eine Schnittansicht mit überlagertem regulärem Netz. Die Netzzellen sind entsprechend des Faservolumengehaltes farblich gekennzeichnet, die Faserorientierungstensoren sind als Tensorsymbole dargestellt.

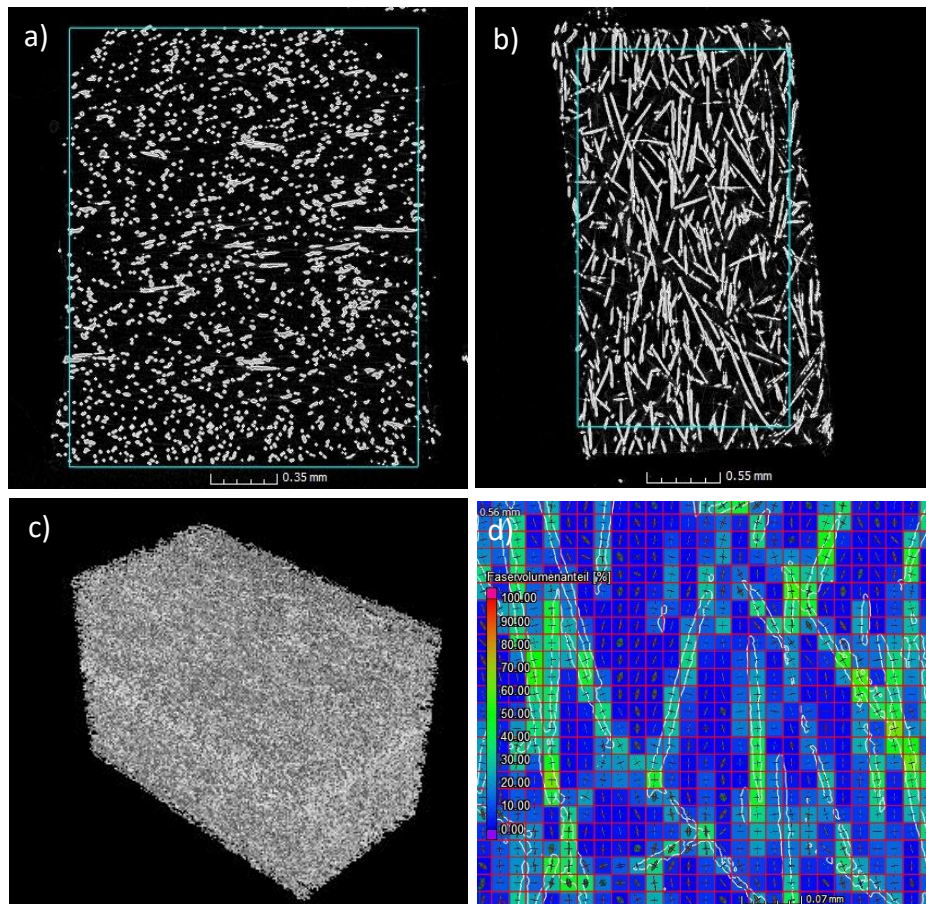


Abbildung 4-8: a) Schnittansicht senkrecht zur Injektionsrichtung. b) Schnittansicht längs zur Injektionsrichtung in Scherzone. c) 3D-Darstellung des Voxeldatensatzes. d) Schnittansicht mit überlagertem regulären Netz.

Für die Auswertung der Faserorientierung im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch nicht nur der Faserorientierungstensor zweiter Stufe \mathbf{a}_2 benötigt, sondern ebenso die ODF ψ . Hierfür wird die Annahme getroffen, dass die Netzzellen mit $9\ \mu\text{m}$ Kantenlänge so klein sind, dass pro Netzzelle lediglich eine Faser zum Faserorientierungstensor beiträgt. Ein einheitlicher Faserdurchmessers von $12\ \mu\text{m}$ rechtfertigt die Annahme. Weiter können mit der Annahme die Eigenwerte der Tensoren \mathbf{a}_2 als \mathbf{p} -Vektoren (Richtungsvektoren) einzelner Fasern aufgefasst werden. Anschließend können die \mathbf{p} -Vektoren über eine Klasseneinteilung auf der Einheitskugel \mathbb{S} in eine ODF überführt werden. Für eine solche Klasseneinteilung ist es notwendig die Einheitskugel zu diskretisieren. Eine alternative Berechnungsmethoden einer ODF ist in [100] gegeben mit der Verwendung eines Gradientenverfahrens.

Für die zur Klasseneinteilung notwendige Diskretisierung der Einheitskugel können äquidistante Winkelschritte von θ und ϕ (vgl. Abbildung 3-2) in einem Kugelkoordinatensystem verwendet werden. Dies ist jedoch ineffektiv, da die resultierenden Gitterpunkte an den Polen wesentlich dichter sind als in der Äquatorebene. Weber et al. verwenden eine verbesserte Formulierung der Einheitskugel, indem sie äquidistante Winkelschritte in Polrichtung und azi-

mutale Winkelschritte als Funktion des Polwinkels verwenden. Dies führt zu einem Oberflächennetz mit nahezu identischen Flächenstücken [101]. Allerdings sind bei dieser Formulierung die Formen der Flächen in der Äquatorialebene und an den Polen sehr unterschiedlich.

Eine weitere Methode zur Erstellung einer Einheitskugel mit annähernd gleicher Dichte an Gitterpunkten ist die Erstellung einer Ikosphäre [102]. Der Ausgangspunkt dieser Methode ist ein regelmäßiges Ikosaeder, das durch die konvexe Hülle der folgenden zwölf Punkte mit

$t = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ erstellt wird:

$$\begin{array}{lll} (-1 & t & 0) & (0 & -1 & t) & (t & 0 & -1) \\ (1 & t & 0) & (0 & 1 & t) & (t & 0 & 1) \\ (-1 & -t & 0) & (0 & -1 & -t) & (-t & 0 & -1) \\ (1 & -t & 0) & (0 & 1 & -t) & (-t & 0 & 1). \end{array}$$

Die konvexe Hülle besteht aus zwanzig gleich großen Dreiecken. Um das regelmäßige Ikosaeder zur Ikosphäre zu verfeinern, wird jedes der Dreiecke in vier kleinere Dreiecke unterteilt. Zu diesem Zweck wird der Mittelpunkt jeder Kante der Dreiecke berechnet und auf die Oberfläche der Einheitskugel projiziert. Dieser Vorgang kann beliebig oft wiederholt werden. In dieser Arbeit werden die Mittelpunkte der Flächen als Gitterpunkte für die Auswertung von ψ verwendet. Die Anzahl der Gitterpunkte n_{grid} ist gleich der Anzahl der Dreiecke der Ikosphäre. Die Abbildung 4-9 zeigt die Entwicklung der Ikosphäre mit zunehmendem Verfeinerungsgrad ref . Weiter ist der Flächeninhalt jedes Dreiecks farblich dargestellt. Mit zunehmendem Verfeinerungsgrad wird dabei das Verhältnis von maximalem zu minimalem Flächeninhalt A_{max}/A_{min} nicht geringer. Jedoch wird der Anteil der Dreiecke mit hohem Flächeninhalt geringer. Dies ist an der Standardabweichung der Flächeninhalte $std(A)$ ablesbar. In dieser Arbeit wird, wenn nicht anders angegeben, ein Verfeinerungsgrad von 5 mit insgesamt 20480 Gitterpunkten verwendet.

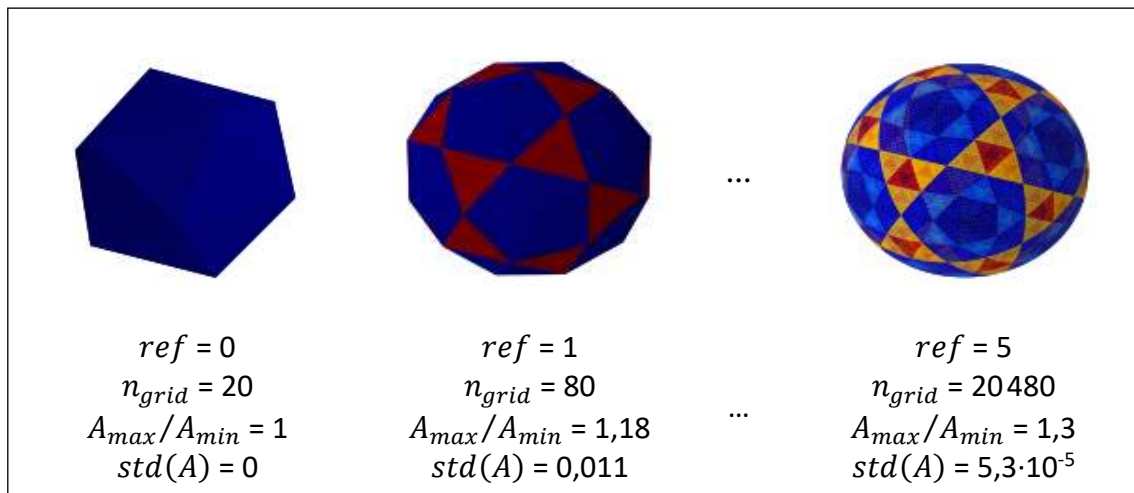


Abbildung 4-9: Evolution der Ikosphäre mit den Verfeinerungsstufen 0, 1 und 5. Die Farbe der Dreiecke entspricht dem Flächeninhalt des jeweiligen Dreiecks.

Neben einer ausreichend hohen Verfeinerungsstufe wird in dieser Arbeit ein Kerndichteschätzer verwendet, um aus der Stichprobe der \mathbf{p} -Vektoren eine stetige Dichtefunktion der ODF zu berechnen. Dies erlaubt einen besseren Vergleich unterschiedlicher ODF. Es wird ein Kerndichteschätzer mit Gauß-Kern des Python-Pakets *SciPy* [103] verwendet. Die Bandbreiten Berechnung wird mit der Scott-Regel durchgeführt [104]. Die Abbildung 4-10 zeigt beispielhaft den Effekt der Kerndichteschätzung anhand einer Stichprobe von \mathbf{p} -Vektoren. Links dargestellt ist die ODF als klassisches Histogramm auf der Ikosphäre der fünften Verfeinerungsstufe, rechts als stetige Dichtefunktion durch eine Kerndichteschätzung mit Gauß-Kern auf derselben Verfeinerungsstufe. Es ist zu erkennen, dass durch die Kerndichteschätzung die Verteilungsfunktion geglättet, aber qualitativ nicht verändert wird. Der Vergleich zeigt weiter, dass die Scott-Regel in diesem Fall verwendet werden kann und dass der Gauß-Kern geeignet ist, die zugrunde liegende Verteilung abzubilden.

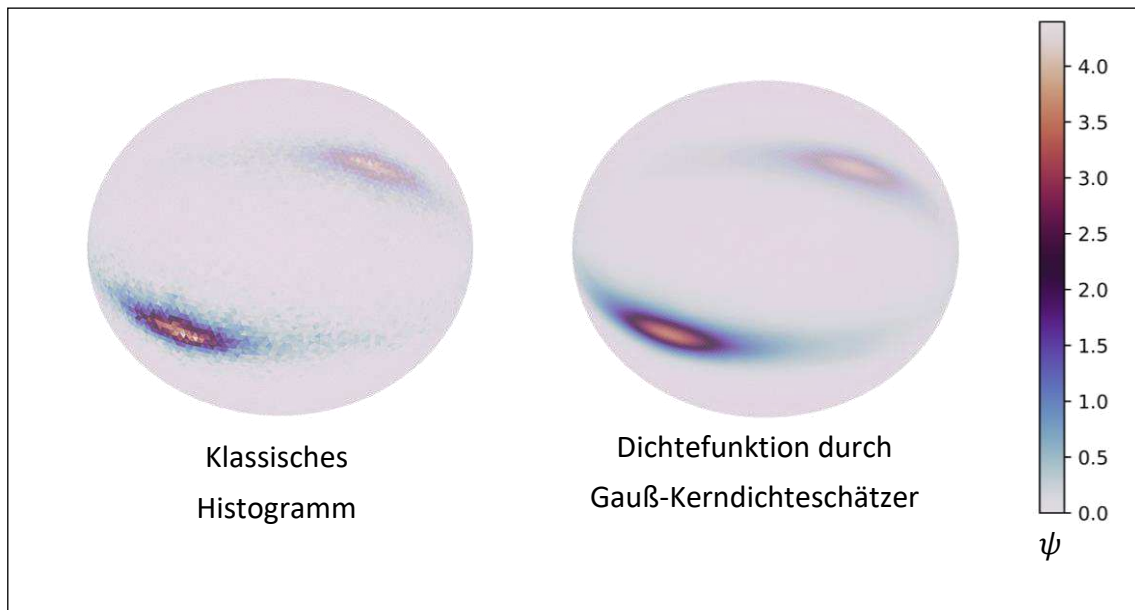


Abbildung 4-10: Darstellung einer ODF auf Basis von \mathbf{p} -Vektoren auf der Einheitskugel mit Ikosphären-diskretisierung (5. Stufe). Links dargestellt als Histogramm, rechts als Dichtefunktion berechnet durch Gauß-Kerndichteschätzer.

4.3 Faserlänge

Die Messung der Faserlänge kann ebenso wie die Messung der Faserorientierung über zwei verschiedene Methoden erfolgen. Zum einen mittels μ CT und zum anderen über die Freilegung der Fasern und anschließendes vermessen mittels Mikroskop. Das Freilegen der Fasern kann durch ein Veraschen oder durch ein chemisches Auflösen der Matrix durchgeführt werden. In der Abbildung 4-11 sind durch eine Veraschung freigelegte Glasfasern des PBT-GF20 abgebildet. Deutlich zu erkennen sind dabei viele kleine Glasbruchstücke.

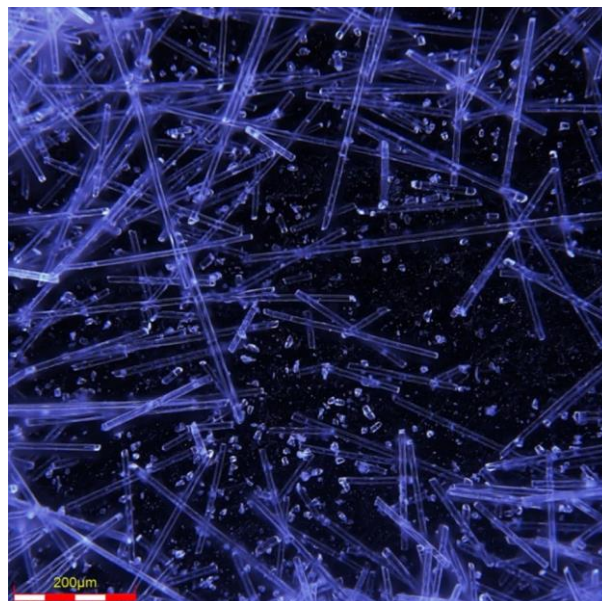


Abbildung 4-11: Mikroskopieaufnahme freigelegter Glasfasern einer PBT-GF20 Probe.

In dieser Arbeit wird zur Modellierung der Faserlänge eine typische Faserlängenverteilung zu Grunde gelegt, die mittels μ CT vom *Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF* gemessen wird. Die Faserlänge wird anhand einer zylindrischen Probe einer spritzgegossenen Platte des PBT-GF20 gewonnen. Die Messauflösung beträgt hier $1,8\ \mu\text{m}$. Fasern unter $30\ \mu\text{m}$ werden jedoch nicht berücksichtigt. In der Abbildung 4-12 ist die Längenverteilung als Histogramm dargestellt. Die Verteilung hat dabei ein Maximum bei ca. $80\ \mu\text{m}$ und verläuft dann flach auslaufend. Es sind entsprechend einige wenige sehr lange Fasern vorhanden. Diese sind für die Modellierung eines RVEs jedoch nachteilig, da das RVE groß genug sein muss damit lange Fasern darin platziert werden können. Aus diesem Grund wird die Längenverteilung für die Verwendung als Modellierungsgrundlage beschnitten. Fasern über einer Länge von $450\ \mu\text{m}$ werden gefiltert und nicht für die Modellierung berücksichtigt. Die gefilterte Verteilung ist ebenfalls in der Abbildung 4-12 dargestellt. Anhand des Histogramms ist erkennbar, dass der qualitative Charakter der Verteilung durch die Filterung erhalten bleibt. Die kumulierten Wahrscheinlichkeiten beider Verteilungen zeigen, dass bei der gefilterten Variante 95 % aller Fasern berücksichtigt werden.

Der Mittelwert einer Faserlängenverteilung kann mit

$$L = \frac{w_i l_i}{\sum_{i=1}^n w_i} \quad (\text{Gl.4-5})$$

berechnet werden. Dabei ist w_i ein Gewichtungsfaktor der Fasern, die die Länge l_i aufweisen. Der Gewichtungsfaktor kann nach [6] typischerweise mit zwei verschiedenen Ansätzen bestimmt werden. Zum einen mit

$$w_i = N_i \quad (\text{Gl.4-6})$$

wobei N_i die Anzahl der Fasern der Länge l_i ist. Der mit diesem Ansatz berechnete Mittelwert wird im Folgenden als Anzahlmittel L_N bezeichnet. Die zweite Möglichkeit besteht darin, die Faserlängen entsprechend ihren Massen zu gewichten. Da die Dichte und der Durchmesser der Fasern konstant sind, kann der Gewichtungsfaktor mit

$$w_i = N_i l_i \quad (\text{Gl.4-7})$$

angegeben werden. Die Bezeichnung des hiermit berechneten Mittelwertes einer Faserlängenverteilung ist hier im Folgenden der Längenmittelwert L_L .

Zusätzlich zu den beiden etablierten Mittelwerten wird in dieser Arbeit ein weiterer Mittelwert gebildet und verwendet. Hierbei werden die Fasern ebenfalls gewichtet, jedoch mit der

Quadratwurzel der Länge. Motiviert wird dieser Mittelwert anhand der degressiven Verstärkungswirkung der Fasern in Abhängigkeit der Länge. Der als Wurzelmittelwert L_W bezeichnete Mittelwert wird entsprechend mit dem Gewichtungsfaktor

$$w_i = N_i l_i^{0,5} \quad (\text{Gl.4-8})$$

berechnet.

Für die hier verwendete Faserlängenverteilung ergeben sich die Mittelwerte zu $L_N = 165 \mu\text{m}$, $L_L = 236 \mu\text{m}$ und $L_W = 450 \mu\text{m}$.

Aufgrund dessen, dass kommerzielle Spritzgussprogramme zwar eine Faserlängenverteilung berechnen, teilweise aber nur Anzahlmittel oder Längenmittel ausgeben, kann nicht immer das Wurzelmittel berechnet werden. In diesem Fall kann jedoch der Wurzelmittelwert angenähert werden mit

$$L_{\bar{W}} = \frac{L_N + L_L}{2}. \quad (\text{Gl.4-9})$$

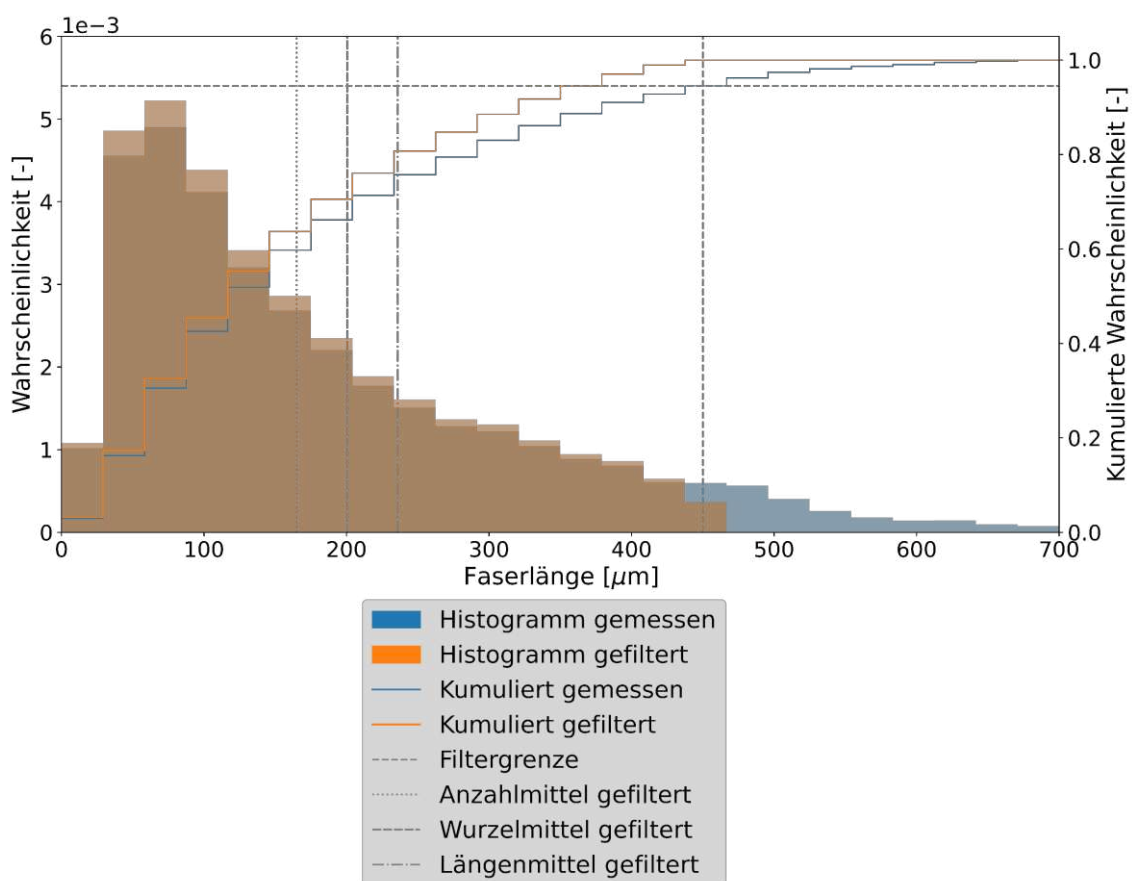


Abbildung 4-12: Gemessene und gefilterte Faserlängenverteilung einer μCT Messung. Dargestellt sind die Verteilungen als Histogramm, die kumulierten Wahrscheinlichkeiten sowie die Filtergrenze.

5 Analyse der Faserorientierung

In diesem Abschnitt wird die Analyse der Faserorientierung kurzfaserverstärkter Kunststoffe vorgestellt. Das Ziel ist es, charakteristische Faserorientierungswahrscheinlichkeiten zu erfassen und als Vergleichsgrößen für spätere Analysen und Modellierungen bereitzustellen. Zum Erreichen dieses Ziels wird die Entwicklung eines geeigneten Vorgehens sowie dessen Umsetzung beschrieben. Neben einer experimentellen Charakterisierung der Faserorientierung wird eine numerische Analyse mittels Spritzgussimulation nach dem aktuellen Stand der Technik vorgenommen.

5.1 Probegeometrien zur gezielten Steuerung der Faserorientierung

Die charakteristischen Faserorientierungswahrscheinlichkeiten werden in dieser Arbeit anhand von spritzgegossenen Probekörpern erfasst. Dabei wird der Einfluss unterschiedlicher Strömungen und unterschiedlicher Faservolumenanteile berücksichtigt. Es werden vier unterschiedliche Probekörpergeometrien und drei Composite mit unterschiedlichem Fasergehalt verwendet. Dabei werden die unterschiedlichen Fasergehalte lediglich bei einer Geometrie verwendet. Diese Aufteilung ermöglicht es den Einfluss der Strömungssituation und der des Fasergehaltes zu berücksichtigen, bei einem gleichzeitig geringeren Versuchsaufwand als bei einer vollfaktoriellen Studie.

Für den Einfluss des Fasergehaltes wird eine quadratische Platte mit 130 mm Kantenlänge und 2,5 mm Dicke verwendet, die im Folgenden als einfache Platte bezeichnet wird. Für die Untersuchung mittels der verfügbaren μ CT werden aus den spritzgegossenen Platten Teilbereiche herausgeschnitten. Das Herausschneiden erfolgt dabei nach einem definierten Muster, sodass die spätere Untersuchung der Faserorientierung in Abhängigkeit der Position auf der Platte erfolgen kann. Die einfache Platte und das Vorgehen der Präparation sind in Abbildung 5-1 illustriert.

Die Abmusterung der einfachen Platte erfolgt mit 10,20 und 30 % Fasergehalt. Hierfür werden die Composite Pocan B3215 000000, B3225 000000 und B3235 000000 von *Lanxess* [7–9] verwendet.

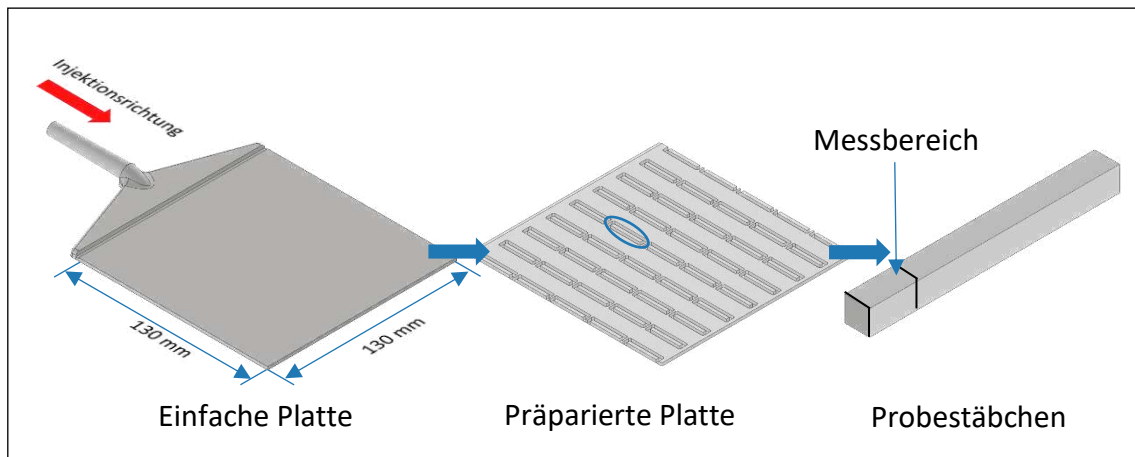


Abbildung 5-1: Probenpräparation am Beispiel der einfachen Platte zur Untersuchung der Faserorientierung mittels μ CT.

Neben dem Fasergehalt wird der Einfluss der Strömungssituation berücksichtigt. Hierfür ist es zunächst erforderlich bestimmte charakteristische Strömungsverhältnisse zu definieren, die verwendet werden sollen. Eine Möglichkeit ist die gezielte Variation von bestimmten Strömungsverhältnissen, wie in einer numerischen Studie von Cintra und Tucker aufgezeigt [36]. In der genannten Studie werden die Komponenten der Strömungsgeschwindigkeit so gewählt, dass das Feld möglicher Zustände des Faserorientierungstensors \mathbf{a}_2 breit abgedeckt wird. Die möglichen Zustände von \mathbf{a}_2 können anhand der Eigenwerte $a_{(i)}$ von \mathbf{a}_2 und der Bedingung

$$a_{(1)} + a_{(2)} + a_{(3)} = 1 \quad (\text{Gl.5-1})$$

wie folgt in der Abbildung 5-2 dargestellt werden. Alle möglichen Zustände des Faserorientierungstensors \mathbf{a}_2 liegen dabei in dem durch die Punkte B , T und U aufgespannten Dreieck.

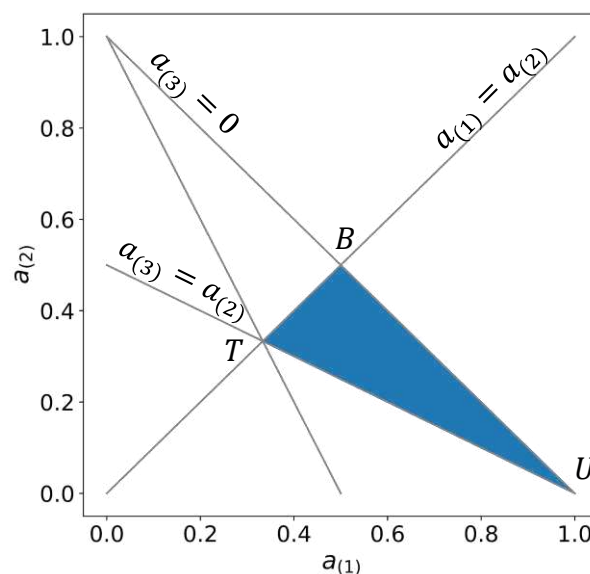


Abbildung 5-2: Mögliche Zustände des Faserorientierungstensors zweiter Stufe. $a_{(1)}$ und $a_{(2)}$ sind die größten Eigenwerte von \mathbf{a}_2 , nach [36].

Die gewählten Strömungsverhältnisse der genannten Studie sind in der Tabelle 5-1 aufgelistet. Die verwendeten Geschwindigkeitskomponenten sind dabei derart definiert, dass sie abhängig vom verwendeten Koordinatensystem (x_1, x_2, x_3) sind. Weiter sind die in der Studie verwendeten Geschwindigkeiten zeitlich konstant.

Tabelle 5-1: Strömungsverhältnisse zur Erzeugung vieler möglicher Tensorkomponenten nach [36]

Name	Geschwindigkeitskomponenten
<i>Simple Shear</i>	$(Gx_2, 0, 0)$
<i>Shear/ Stretch</i>	$(-Ex_1 + Gx_2, -Ex_2, 2Ex_3)$
<i>Uniaxial Elongation</i>	$(2Ex_1, -Ex_2, -Ex_3)$
<i>Biaxial Elongation</i>	$(Ex_1, Ex_2, -2Ex_3)$

Das beschriebene Vorgehen der Wahl der Strömungsverhältnisse ist gut geeignet für eine theoretische, numerische Studie. Für experimentelle Untersuchungen wie in dieser Arbeit ist die Adaption dieses Vorgehens jedoch nicht trivial, da die Strömungsverhältnisse eine Folge von Geometrie, Werkstoff und Prozessführung sind. Darüber hinaus ist die Strömung in der Regel instationär. Folglich kann zu einer bestimmten charakteristischen Strömung nicht immer eine Geometrie entwickelt werden, die die charakteristische Strömung sicher erzeugt. Weiter ist der Unterschied zu der vorgenannten Studie, dass es hier nicht das Ziel ist, bestimmte α_2 -Tensoren zu erzeugen, sondern Referenzlösungen für die Rekonstruktion und Modellierung der Faserorientierung zu erzeugen. Aus diesem Grund wird eine andere Herangehensweise für die Konzeptionierung der Geometrien gewählt.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Geometrien derart entwickelt, dass die Beschleunigung einer Strömungskomponente unterschiedlich ist. Hierfür sind drei Geometrien notwendig: für eine beschleunigte, eine verzögerte und eine konstante Strömung. Es wird dabei zusätzlich eine Plattengeometrie für eine einfache Herstellung des Spritzgießwerkzeugs angestrebt. Die drei in dieser Arbeit entwickelten Geometrien sind in der Abbildung 5-3 dargestellt. Zum einen wird ähnlich zur einfachen Platte eine rechteckige Geometrie verwendet. Hierbei ist jedoch der Verteiler derart optimiert, dass die Fließgeschwindigkeit innerhalb des späteren Messbereichs möglichst konstant ist. Aus diesem Grund wird diese Geometrie als konstante Platte bezeichnet. Die konstante Platte wird in 2 mm Dicke und 4 mm Dicke ausgeführt. Hierdurch kann der Einfluss der Plattendicke ebenfalls berücksichtigt werden. Weiter wird eine spitz zulaufende Platte verwendet, die als konvergente Platte bezeichnet wird. Bei dieser steigt die Fließgeschwindigkeit mit zunehmender Fließlänge an, sodass die Beschleunigung der Strömung positiv ist. Das Gegenteil stellt die dritte Platte dar. Bei dieser als divergente Platte bezeichnete Geometrie, nimmt die Fließgeschwindigkeit mit zunehmender Fließlänge durch den

sich öffnenden Fließkanal ab. Sowohl die konvergente als auch die divergente Platte werden ausschließlich in 2 mm Dicke ausgeführt.

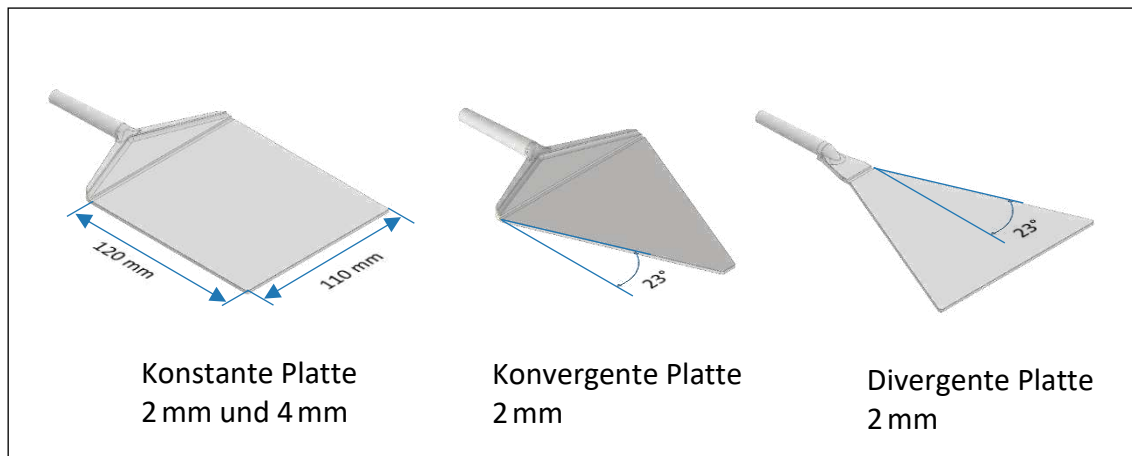


Abbildung 5-3: Übersicht über die verwendeten Geometrien konstante Platte, konvergente Platte und divergente Platte.

Die Strömungsverhältnisse werden mittels einer Spritzgussimulation mit *Moldex3D* von *CoreTech System Co., Ltd* berechnet. Für die Simulation werden die Materialparameter von *Pocan B3225 000000* verwendet. Die verwendeten Prozessparameter sind in Tabelle A-2 aufgelistet. Die Parameter entsprechen dabei denjenigen realen Parametern, die zur Abmusterung verwendet werden. Die Berechnung der Faserorientierungstensenoren werden mithilfe des *iARD-RPR* -Modells durchgeführt. Dabei werden die Standardwerte der Interaktionskonstanten C_i und C_m beziehungsweise der Standardwert für den Verlangsamungskoeffizienten α verwendet. Eine Optimierung dieser Koeffizienten für eine größtmögliche Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment erfolgt nicht. Die Intention hierbei ist es, den Fall abzubilden, dass optimale Koeffizienten aufgrund fehlender experimenteller Untersuchung nicht vorhanden sind. Darüber hinaus sei angemerkt, dass eine Optimierung der Koeffizienten für einen plattenähnlichen Probekörper nicht generell zu einer Verbesserung der Prognosegüte anderer Geometrien führt [105].

Die Abbildung 5-4 zeigt exemplarisch das Füllbild für drei ausgewählte Zeitschritte aller drei verwendeten Geometrien. Gut zu erkennen ist dabei die unterschiedliche Ausprägung der Fließfront am Ende des Fließkanals.

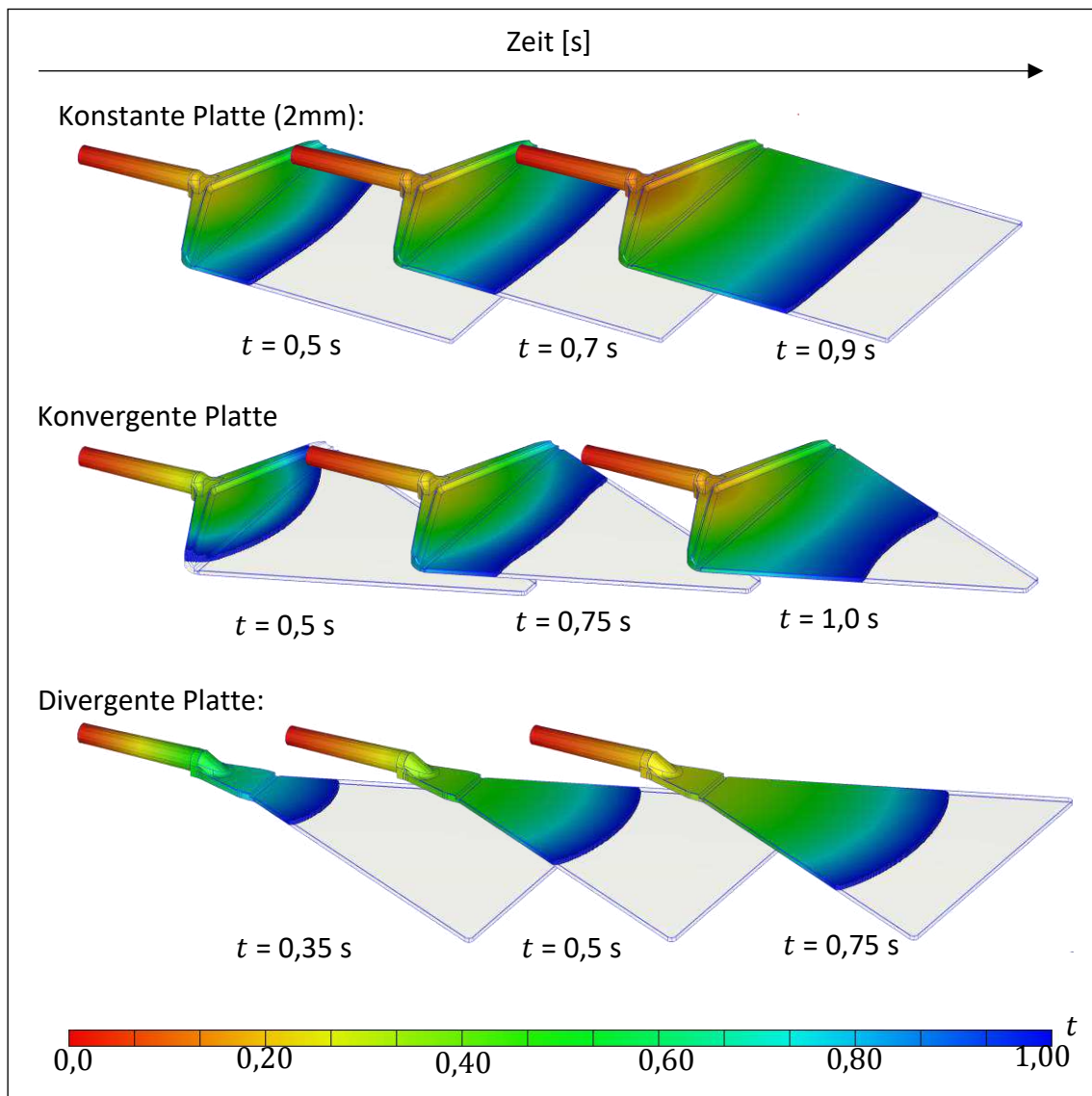


Abbildung 5-4: Darstellung dreier Zeitschritte der Füllsimulation für die drei Geometrien mit dem Pöcan B3225 000000.

In der Abbildung 5-5 sind zur weiteren Veranschaulichung die Fließgeschwindigkeiten der Füllsimulationen dargestellt. Die Fließgeschwindigkeit wird entlang des Fließweges in der Mittelachse der Geometrien ausgewertet. Der Zeitpunkt entspricht dem der vollständigen Füllung. Es ist zu erkennen, dass die Fließgeschwindigkeit der konstanten Platte zwischen 10mm und 10mm gleichbleibend ist, dann aber leicht bis zum Ende des Fließweges abfällt. Weiter ist zu erkennen, dass die konvergente und divergente Geometrie wie erwünscht eine beschleunigte beziehungsweise eine verzögerte Strömung erzeugen.

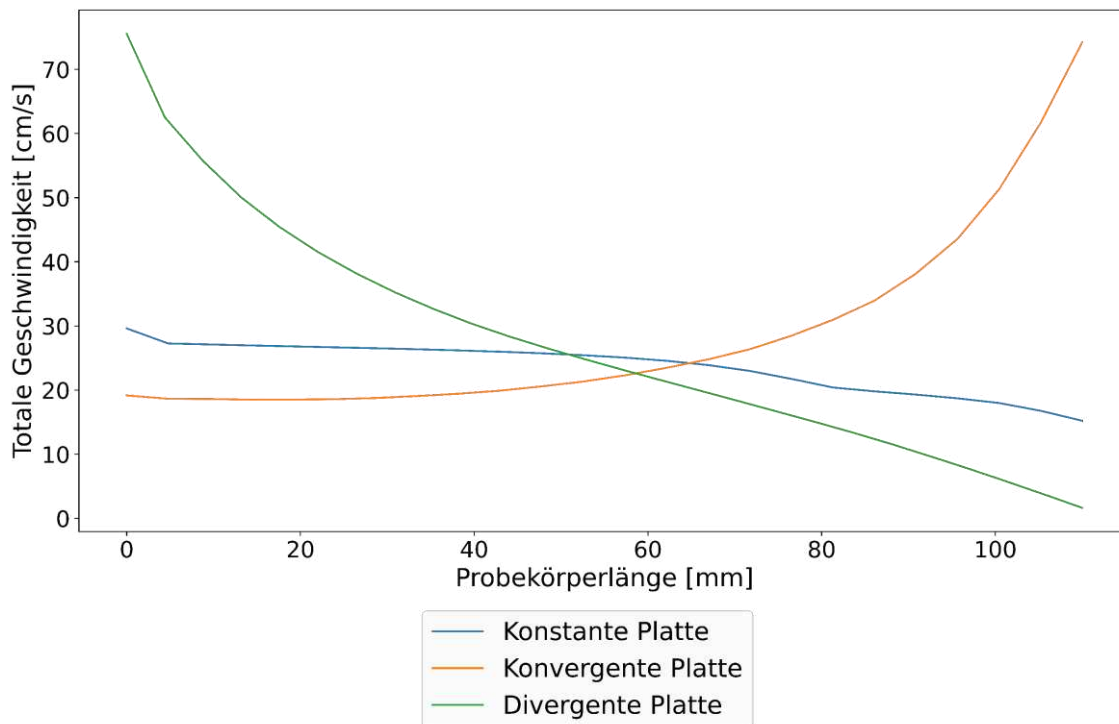


Abbildung 5-5: Strömungsgeschwindigkeit in Fließrichtung der konstanten (2mm), konvergenten und divergenten Platte. Die Strömungsgeschwindigkeit wird zum Zeitpunkt der vollständigen Füllung in der Mitte der Platte entlang der Symmetrieachse ausgewertet.

5.2 Ergebnisse der Faserorientierungsanalyse

Die Positionen auf den Probekörpern, an denen die Faserorientierung ausgewertet wird, sind in der Abbildung 5-6 dargestellt. Der Anschnitt der Probekörper befindet sich oben, so dass die Fließrichtung von oben nach unten zu sehen ist. Am Ende des Anschnittes ist jeweils ein lokales Probekörperkoordinatensystem in der Symmetrieachse des jeweiligen Probekörpers definiert. Die Auswertung der Faserorientierung findet im jeweiligen Probekörperkoordinatensystem statt. Aufgrund des zeitlichen Messaufwandes wird nicht jede mögliche Position auf den Probekörpern verwendet, sondern lediglich bestimmte Positionen. Diese sind so gewählt, dass sowohl der Verlauf der Faserorientierung in Fließrichtung (y -Richtung) als auch quer dazu (x -Richtung) analysiert werden kann. Für die konvergente und divergente Platte sind die Abstände zwischen den Messstellen im schmalen Bereich enger gewählt als im breiteren Bereich. Weiter wird die Symmetrie der Probekörper entlang der y -Achse ausgenutzt, um den Messaufwand zu verringern. Die verwendeten Positionen sind in der Tabelle A-4 Im Anhang A 2 aufgelistet.

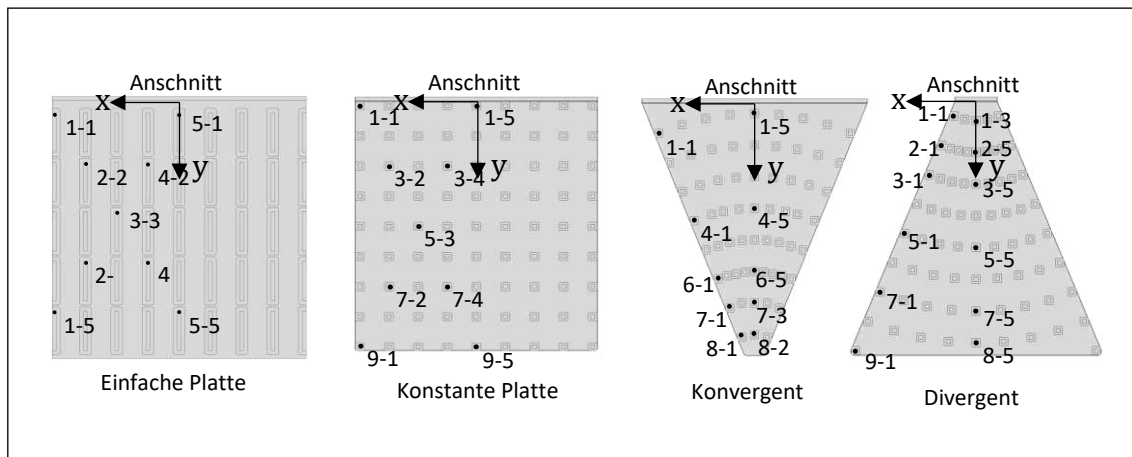


Abbildung 5-6: Positionen der Faserorientierungsanalyse der vier Probekörpergeometrien.

Die einfache Platte wird mit drei unterschiedlichen Fasergehalten untersucht. Es werden Composite mit 10,20 und 30% Gewichtsanteil Fasern verwendet. Die Ergebnisse der experimentellen Ermittlung der Faserorientierung werden an dem Beispiel des Composites PBT-GF20 in einem Tandem zweier Abbildungen dargestellt.

In einer ersten Darstellung in der Abbildung 5-7 wird die Faserorientierung durch die Komponenten des zweistufigen Faserorientierungstensors \mathbf{a}_2 über der Plattendicke dargestellt. Hierzu werden hierzu die Hauptdiagonaleinträge des Faserorientierungstensors im lokalen Probekörperkoordinatensystem genutzt. Insgesamt werden 31 Datenpunkte über die relative Dicke verwendet. Die Werte für jeden Datenpunkt entstammen dadurch einem Volumen von ca. $2000 \times 2000 \times 80 \mu\text{m}$. Die Datenpunkte, welche mittels eines Punktes markiert sind, korrespondieren zu denen, die in der zweiten Abbildung aufgeführt werden. Weiter wird eine relative Plattendicke für eine bessere Vergleichbarkeit mit anderen Plattengeometrien eingesetzt. Die Abbildung ist derart aufgebaut, dass die Position der Tensorkomponentendarstellung qualitativ der Position auf dem Probekörper entspricht.

Es ist zu erkennen, dass nahe am Anschnitt, an den Positionen 1-1 und 1-5, keine Mittelschicht (vgl. 3-Schicht-Aufbau in Abbildung 2-2) vorhanden ist. Der Eintrag des Faserorientierungstensors in Fließrichtung a_{yy} ist über der relativen Plattendicke zwischen 0,1 und 0,9 mit einem ungefähren Wert von $a_{yy} = 0,7$ nahezu konstant. Die Komponenten a_{xx} und a_{zz} sind hier deutlich kleiner. Weiter vom Plattenrand entfernt ist eine deutliche Mittelschicht mit einer Ausrichtung in x -Richtung erkennbar. Qualitative Unterschiede in Fließrichtung (vgl. Position 1-1 mit 1-5, 2-2 mit 2-4, etc.) lassen sich zwischen den einzelnen Messpositionen nicht erkennen. Neben den experimentell ermittelten Werten sind jene aus der Spritzgusssimulation mit in der Abbildung 5-7 dargestellt. Qualitativ stimmen die Einträge des Faserorientierungstensors der Spritzgusssimulation und der CT-Messungen überein. Einzelne Werte können jedoch

größere Abweichungen aufweisen, wie zum Beispiel bei der Position 1-1 bei einer relativen Plattendicke von 0,95 oder den Mittelschichten der Positionen 2-4 und 4-4.

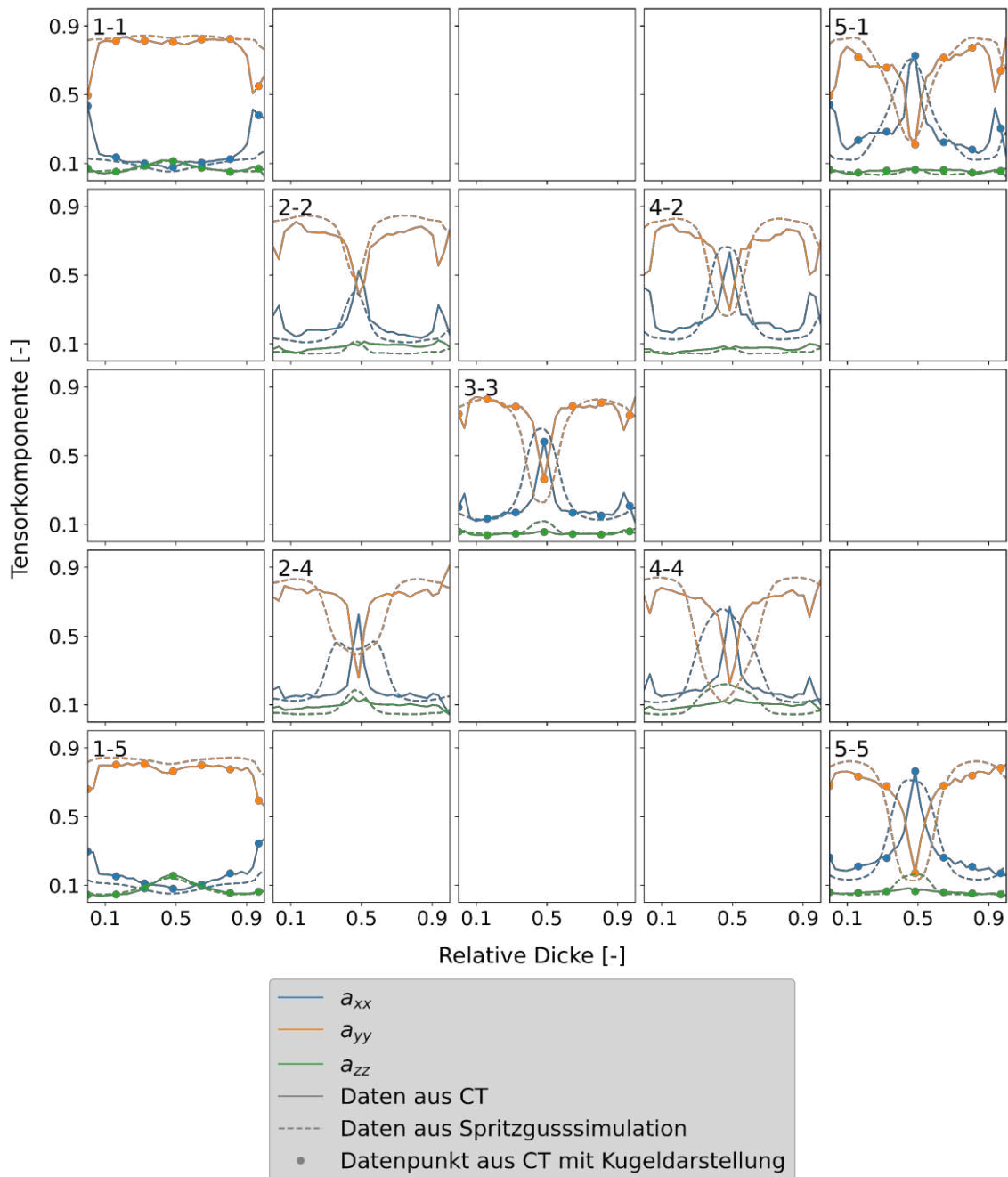


Abbildung 5-7: Darstellung der Komponenten des experimentell sowie simulativ ermittelten Faserorientierungstensors der einfachen Platte, aus PBT-GF20.

In der zweiten Abbildung (vgl. Abbildung 5-8) wird die Faserorientierung als ODF ψ über der relativen Plattendicke dargestellt. Jede ODF ist dabei als Farbdarstellung auf einer Einheitskugel S mit identischer Farbskalierung gezeigt. Aus Platzgründen wird hierbei lediglich das Ergebnis für fünf Positionen auf der Platte (1-1, 5-1, 3-3, 1-5, 5-5) und jeweils sieben Positionen über der relativen Plattendicke verwendet. Der aus der Abbildung 5-7 bekannte Unterschied

zwischen den Positionen ist auch hier ersichtlich. Die Positionen 1-1 und 1-5 zeigen im Gegensatz zu den anderen Positionen keine klassische Mittelschicht. Trotzdem ist bei den beiden benannten Positionen eine Umorientierung, jedoch in z-Richtung, zu erkennen. Weiter kann an keiner Position eine ODF gefunden werden, die mehr als ein (periodisches) signifikantes Maximum besitzt.

Die restlichen Auswertungen der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten μ CT-Messungen sind im Anhang beigefügt. Der Unterschied zwischen den Spritzgussimulationen und den μ CT-Messungen ist bei den Auswertungen im Anhang vergleichbar zu dem oben gezeigten Beispiel. Qualitativ stimmen die Einträge des Faserorientierungstensors, mit wenigen Ausnahmen überein: Beispielsweise existiert keine Mittelschicht der Spritzgussimulation der einfachen Platte mit dem PBT-GF30, die jedoch in der μ CT-Messung auftritt. Tendenziell wird der größte Wert des Faserorientierungstensors in den Randschichten in der Simulation überschätzt. Ebenso können in den hier durchgeführten μ CT-Messungen keine ODFs gefunden werden, die über signifikante Nebenmaxima verfügen.

Daher kann geschlussfolgert werden, dass eine typische ODF der hier verwendeten Strömungssituationen nur ein Maximum aufweist. Die Aussage ist jedoch bedingt durch die feine Auflösung von 31 Datenpunkten über der Plattendicke. Werden mehrere ODFs über der Plattendicke zusammengefasst, insbesondere in Übergangsbereichen der Mittelschicht, können ODFs mit mehreren lokalen Maxima entstehen.

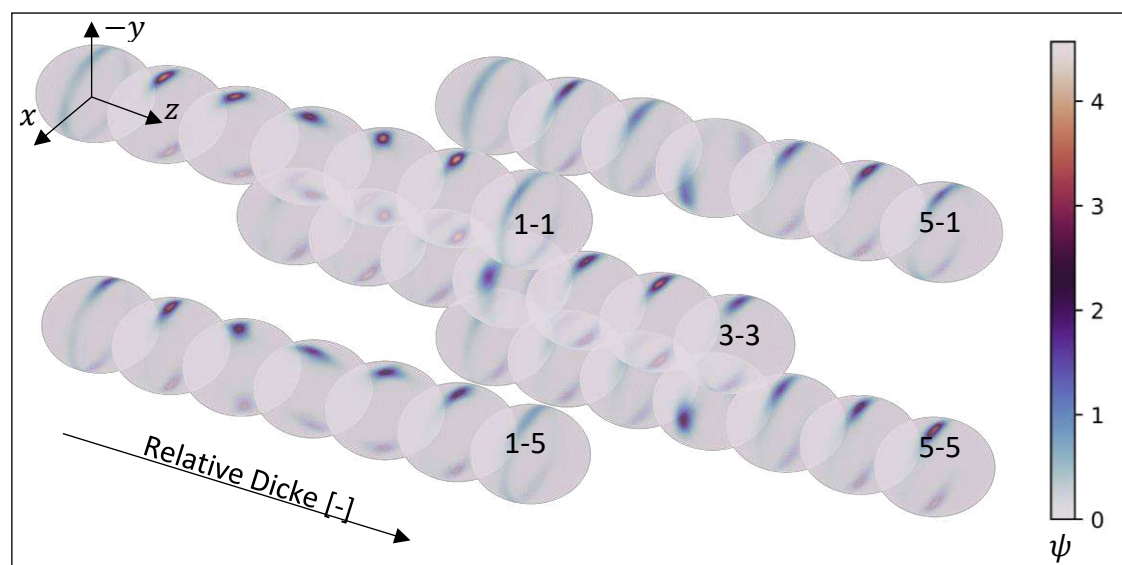


Abbildung 5-8: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der einfachen Platte, aus PBT-GF20.

6 Modellierung der Faserorientierungsdichtewahrscheinlichkeit

Kommerzielle Simulationsprogramme für Spritzgussimulationen verwenden in der Regel das Folgar-Tucker Modell oder vergleichbare Ansätze zur Berechnung der Faserorientierung. Damit steht dem Anwender lediglich der Faserorientierungstensor zweiter Stufe \mathbf{a}_2 zur Verfügung. Benötigt der Anwender jedoch die ODF, beispielsweise um die mechanischen Compositteeigenschaften mittels zweistufiger Homogenisierung oder mittels RVE zu berechnen, so muss die ODF aus dem Faserorientierungstensor rekonstruiert werden. Im folgenden Abschnitt werden daher zwei Rekonstruktionsmethoden vorgestellt und evaluiert. Es wird ausgearbeitet welche der Methoden für typische ODFs am besten geeignet ist und wie groß der resultierende Unterschied der mechanischen Eigenschaften durch die Rekonstruktion ist.

6.1 Rekonstruktionsmethoden

Eine ODF beinhaltet im Allgemeinen mehr Informationen als der zweistufige Faserorientierungstensor. Dies hat zur Folge, dass eine Rekonstruktion der ODF aus einem zweistufigen Faserorientierungstensor mathematisch nicht eindeutig ist. Die Abbildung 6-1 verdeutlicht dies. Gezeigt sind hier zwei unterschiedliche ODFs, einmal eine ODF mit zwei unidirektionalen Maxima und einmal eine ODF mit planarer Isotropie. Beide ODFs können eindeutig auf den gleichen Tensor zurückgeführt werden. Ist jedoch nur dieser Tensor bekannt, so ist die Zuordnung einer ODF nicht möglich. Daher muss für eine Rekonstruktion immer ein Ansatz gewählt werden, der die Form einer Dichtefunktion vorgibt. Im Rahmen dieser Arbeit werden dafür zwei unterschiedliche Ansätze vorgestellt und miteinander verglichen. Zum einen die Rekonstruktion mit der Methode der maximalen Entropie und einmal die Rekonstruktion auf Basis von Kugelflächenfunktionen.

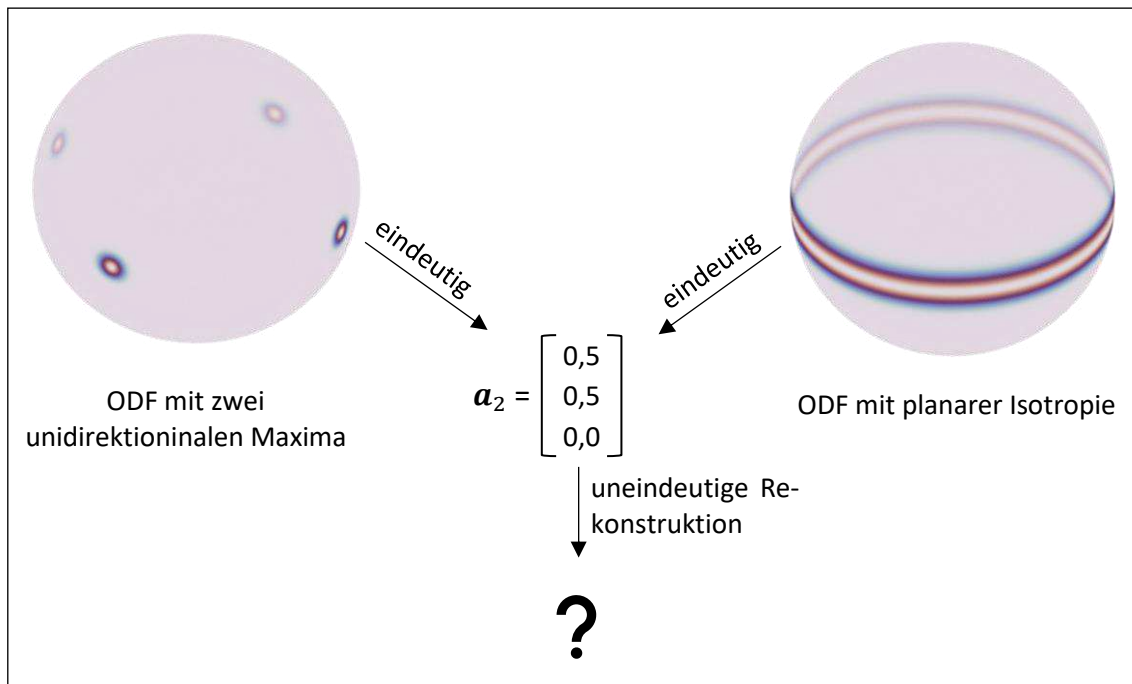


Abbildung 6-1: Rekonstruktionsproblematik anhand des Beispiels zweier ODFs.

6.1.1 Methode der maximalen Entropie

Eine Möglichkeit zur Rekonstruktion ist die Anwendung der Methode der maximalen Entropie. Diese Methode liefert die Lösung, die mit den bekannten Informationen kohärent ist und die höchste Entropie aufweist. Der Ansatz der maximalen Entropie kann erfolgreich auf viele verschiedene Probleme angewandt werden, wie z.B. die Spektralanalyse oder die Bildrekonstruktion [106]. Auch im Bereich der Beschreibung der Textur von Metalllegierungen ist die Methode der maximalen Entropie bereits angewendet worden [107].

Im Kontext der Faserorientierung entspricht die Entropie der Streuung der ODF. Analog zu Shannons Definition in [108] ist die mathematische Definition der Entropie der ODF:

$$S = - \oint_{\mathbb{S}} \psi \ln \psi dS. \quad (\text{Gl.6-1})$$

Laut Definition hat eine unidirektionale Faserverteilung eine Entropie von $S = 0$. Die Anwendung der Methode der maximalen Entropie auf das Rekonstruktionsproblem führt dazu, dass die ODF gefunden wird, die eine maximale Streuung der Orientierungsverteilungsfunktion für einen bestimmten Faserorientierungstensor aufweist. Diese Idee wird durch die Ergebnisse von Hine et al. [109] gestützt. Die Autoren bestätigen anhand von experimentellen Messungen, dass reale Mikrostrukturen von spritzgegossenen oder extrudierten Proben eine maximale Entropie der Faserorientierung aufweisen. Darüber hinaus hat Müller [110] in seiner Arbeit gezeigt, dass, wenn reale Mikrostrukturen eine Faserorientierung mit maximaler

Streuung der Faserverteilungsfunktion aufweisen, die Methode der maximalen Entropie zur Bestimmung der linear elastischen Verbundeigenschaften geeignet ist.

In dieser Arbeit wird für die Verteilungsfunktion eine Bingham-Verteilung, die einer Normalverteilung auf der Einheitskugel entspricht (Bingham 1974) verwendet. Die Verteilung wird gewählt, da sie π -periodisch ist und da die Normalverteilung die Verteilung mit maximaler Entropie ist, sofern die Standardabweichung zur Beschreibung verwendet wird [111].

Die Modifikation der Bingham-Verteilung erfolgt durch die Formulierung eines Minimierungsproblems. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Faserorientierungstensor zweiter Ordnung für das Minimierungsproblem verwendet. Das bedeutet, dass die Bingham-Verteilung so modifiziert wird, dass der aus der modifizierten Verteilung berechnete Faserorientierungstensor zweiter Ordnung mit dem gegebenen Faserorientierungstensor zweiter Ordnung übereinstimmt. Weiter wird zur Diskretisierung der Einheitskugel die Ikosphäre verwendet. Das Minimierungsproblem der Rekonstruktion mit der Methode der maximalen Entropie auf der Ikosphäre ist definiert durch:

$$f(x) = (d_{ix}w_i - a_{xx})^2 + (d_{iy}w_i - a_{yy})^2 + (d_{iz}w_i - a_{zz})^2, \quad (\text{Gl.6-2})$$

mit der Nebenbedingung

$$\sum_i w_i - 1 = 0. \quad (\text{Gl.6-3})$$

Dabei ist w_i die Wahrscheinlichkeit, mit der eine Faser in die entsprechende Richtung \bar{p}_i zeigt. Diese Richtung ist die Normalenrichtung des Ikosphärendreiecks mit dem Index i . Die Wahrscheinlichkeit wird durch die Bingham-Verteilung berechnet, die durch

$$w_i = J_i e^{(x_1 d_{ij} + x_4)} \quad (\text{Gl.6-4})$$

gegeben ist. Dabei ist J_i die Fläche des Ikosphären-Dreiecks und x_1 bis x_4 sind die Koeffizienten der Bingham-Verteilung. Weiter ist

$$d_{ij} = \bar{p}_{ij}^2 \quad (\text{Gl.6-5})$$

mit \bar{p}_{ij} als die Komponenten der Mittelpunkte der Ikosphären-Dreiecke, welche ins Hauptachsensystem des zu rekonstruierenden Faserorientierungstensors gedreht werden. Die Rotation kann mit dem Skalarprodukt der entsprechenden Rotationsmatrix \mathbf{R} mit

$$\bar{p} = \mathbf{R} \cdot p \quad (\text{Gl.6-6})$$

durchgeführt werden.

Das Minimierungsproblem kann mit jeder geeigneten numerischen Methode gelöst werden, wenn diese in der Lage ist, die Randbedingungen zu erfüllen. Hier wird ein zweistufiges Vorgehen dafür gewählt. In der ersten Stufe wird das Quasi-Newton Verfahrens BFGS [112] verwendet mit maximal 20 Iterationen oder bis zum Erreichen des Abbruchkriteriums der Genauigkeit von 10^{-16} . Ist das Quasi-Newton Verfahren nicht ausreichend wird anschließend maximal 120 Iterationen des Nelder-Mead Verfahren [112] oder ebenfalls bis zu einer Genauigkeit von 10^{-16} verwendet. Diese Kombination beider Verfahren hat sich im Rahmen dieser Arbeit als besonders effektiv gezeigt. Das BFGS Verfahren konvergiert für viele vorgegebene Faserorientierungstensenoren zweiter Stufe schon bis zur geforderten Genauigkeit. Bei fast isotropen Faserorientierungstensenoren ist die Konvergenzrate jedoch niedrig, sodass das Nelder-Mead Verfahren zur Anwendung kommt.

Angemerkt sei, dass die Umsetzung als Minimierungsproblem es weiter erlaubt, andere Verteilungsfunktionen als die Bingham-Verteilung anzusetzen. Dies könnte zum Beispiel dann interessant sein, wenn die Bingham-Verteilung keine passende Verteilungsfunktion für eine charakteristische ODF darstellen würde.

6.1.2 Kugelflächenfunktionen

Die Grundlage der Approximation einer ODF mit Kugelflächenfunktionen liegt in einer Reihenentwicklung als Laplace Reihe beziehungsweise als generalisierte Fourierreihe [20]. Die Voraussetzung für die Entwicklung, eine zweifache Integrierbarkeit, ist ODFs im Allgemeinen gegeben. Die Reihenentwicklung kann dabei bis zur Ordnung N erfolgen. Durch die Symmetrie von $\psi(\theta, \phi)$ sind nur gerade Ordnungen notwendig. Im Folgenden sind die Gleichungen für die Rekonstruktion von $\hat{\psi}_N$ durch die Kugelflächenfunktionen angegeben. Eine Herleitung der Gleichungen kann in [20, 113] gefunden werden. Die Rekonstruktion einer ODF ist bestimmt durch die Summe der Momente:

$$\hat{\psi}_N(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^N \alpha_l(\theta, \phi). \quad (\text{Gl.6-7})$$

Die Definition der Momente $\alpha_l(\mathbf{p})$ lautet:

$$\alpha_l(\theta, \phi) = \sum_{m=0}^l \beta_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{Gl.6-8})$$

mit

$$\beta_l^m(\theta, \Phi) = \left(1 - \frac{1}{2}\delta_{m0}\right) \left(\frac{1}{\pi} P_l^m \cos \theta \cos(m\Phi) \oint_{\mathbb{S}} \psi(\theta, \Phi) P_l^m \cos \theta \cos(m\Phi) d\mathbb{S} \right. \\ \left. + \frac{1}{\pi} P_l^m \cos \theta \sin(m\Phi) \oint_{\mathbb{S}} \psi(\theta, \Phi) P_l^m \cos \theta \sin(m\Phi) d\mathbb{S} \right) \quad (\text{Gl.6-9})$$

und

$$P_l^m(\mu) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \frac{1}{2^l \cdot l!} (1-\mu^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{m+l}(\mu^2-1)^l}{d\mu^{m+l}}. \quad (\text{Gl.6-10})$$

Die vorkommenden Integrale in der Gleichung 6-9 für die Berechnung von $\beta_l^m(\theta, \Phi)$ werden ersetzt durch die entsprechenden Einträge der Faserorientierungstensoren aus Gleichung 3-10.

Im Rahmen der Rekonstruktion mit Kugelflächenfunktionen kann es sein, dass $\hat{\psi}_N(\theta, \Phi)$ stellenweise negative Werte annimmt. Diese unphysikalischen Rekonstruktionen werden in dieser Arbeit modifiziert, das heißt negative Werte werden gleich Null gesetzt, sodass gilt:

$$\hat{\psi}_N(\theta, \Phi) \geq 0. \quad (\text{Gl.6-11})$$

Werden Werte modifiziert, wird im Anschluss eine Normierung von $\hat{\psi}_N(\theta, \Phi)$ durchgeführt, sodass Gleichung 3-6 weiterhin erfüllt ist.

Die Evaluierung der Rekonstruktion mit Kugelflächenfunktionen wird in unterschiedlichen Varianten durchgeführt. Die Ordnung N wird von 2 bis 8 variiert, sodass der Einfluss der Anzahl der Momente untersucht werden kann. Darüber hinaus werden nicht nur die exakten Tensoren höherer Ordnung verwendet. Es werden stattdessen einige Closures genutzt, um Tensoren höherer Ordnung zu erzeugen. Hierdurch kann der Effekt der Closures im direkten Vergleich zu exakten Tensoren herausgearbeitet werden.

Alle verwendeten Rekonstruktionsmethoden sind in Tabelle 6-1 inklusive der ab hier verwendeten Abkürzungen aufgelistet. Die Spalte Prozesssimulation gibt an, ob die Rekonstruktionsmethode bei ausschließlicher Kenntnis des zweistufigen Faserorientierungstensors möglich ist.

Tabelle 6-1: Übersicht über die verwendeten Rekonstruktionsmethoden

Methode	Abkürzung	$\hat{\psi}$	Prozesssimulation
Methode der maximalen Entropie	ME	$f(a_2)$	✓
Kugelflächenfunktionen bis 2. Stufe	SH2	$f(a_2)$	✓
Kugelflächenfunktionen bis 4. Stufe	SH4	$f(a_2, a_4)$	
Kugelflächenfunktionen bis 6. Stufe	SH6	$f(a_2, a_4, a_6)$	
Kugelflächenfunktionen bis 8. Stufe	SH8	$f(a_2, a_4, a_6, a_8)$	
Kugelflächenfunktionen bis 4. Stufe, mit Hybrid Closure für 4. Stufe	SH4HY	$f(a_2, \hat{a}_4)$	✓
Kugelflächenfunktionen bis 4. Stufe, mit Exact Closure für 4. Stufe	SH4E	$f(a_2, \hat{a}_4)$	✓
Kugelflächenfunktionen bis 4. Stufe, mit IBOF Closure für 4. Stufe	SH4IBOF	$f(a_2, \hat{a}_4)$	✓
Kugelflächenfunktionen bis 6. Stufe, mit Hybrid Closure für 6. Stufe	SH6HY	$f(a_2, a_4, \hat{a}_6)$	
Kugelflächenfunktionen bis 6. Stufe, mit Hybrid Closure für 4. und 6. Stufe	SH6HYHY	$f(a_2, \hat{a}_4, \hat{a}_6)$	✓

6.2 Evaluierung der Rekonstruktionsmethoden

Im folgenden Abschnitt wird eine Evaluierung der Rekonstruktionsmethoden vorgenommen, um deren Einfluss auf die ODF und auf die daraus resultierenden Compositeigenschaften bewerten zu können. Hierfür werden insgesamt drei unterschiedliche Evaluations szenarien erarbeitet. Grundlage aller drei Evaluations szenarien ist es eine initiale ODF mit einer rekonstruierten ODF zu vergleichen und zu bewerten. Die Bewertung findet sowohl vor dem Hintergrund des Unterschiedes beider ODFs statt als auch vor dem Unterschied der mechanischer Compositeigenschaften.

Für das erste Evaluations szenario werden synthetische ODFs verwendet. Diese bieten den Vorteil, dass die Rekonstruktion über ein sehr breites Spektrum an unterschiedlichen ODFs vorgenommen werden kann. Weiter können bei diesem Evaluations szenario Vor- und Nachteile der Rekonstruktionsmethoden systematisch in Abhängigkeit der zu rekonstruierenden Verteilung untersucht werden. Als synthetische ODFs werden solche mit Bingham-Verteilung verwendet.

Im zweiten Evaluations szenario werden die in Abschnitt 5.2 experimentell ermittelten ODFs verwendet. Diese sind im Vergleich zu den synthetischen ODFs frei von Annahmen über die Gestalt und tragen als typische ODFs praxisnaher Anwendungsfälle erheblich zur Evaluierung der Rekonstruktionsmethoden bei.

Das dritte Evaluationsszenario ist eine Variante des zweiten Szenarios, bei dem ebenfalls die experimentell ermittelten ODFs verwendet werden. Die Grundlagen der Rekonstruktionen sind dabei jedoch nicht die exakten Faserorientierungstensoren, sondern jene die mittels Spritzgussimulation berechnet (vgl. Abschnitt 5.2) werden.

Das Vorgehen für die Evaluierung ist für die drei Varianten identisch. Zunächst werden die Faserorientierungstensoren bestimmt, die die Basis der Rekonstruktion bilden. Für die erste und zweite Variante werden die Faserorientierungstensoren bis zur achten Stufe über Gleichung 3-10 bestimmt. Für die dritte Variante wird lediglich der Faserorientierungstensor zweiter Stufe aus der Spritzgussimulation entnommen. In allen drei Varianten wird anschließend die Rekonstruktion durchgeführt und die rekonstruierte ODF mit der initialen ODF verglichen.

Für den Vergleich ist ein Maß für die Ähnlichkeit zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen P und Q erforderlich. Hierfür kann die Summe der quadrierten Fehler zwischen der ursprünglichen und der berechneten ODF berücksichtigt werden durch:

$$E^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (P - Q)^2. \quad (\text{Gl.6-12})$$

Eine weitere Möglichkeit ist die Verwendung der Kullback-Leibler-Distanz [114]:

$$D_2(P\|Q) = D(P\|Q) + D(Q\|P), \quad (\text{Gl.6-13})$$

welche mit der Kullback-Leibler-Divergenz

$$D(P\|Q) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \cdot \log \frac{p(x)}{q(x)} dx \quad (\text{Gl.6-14})$$

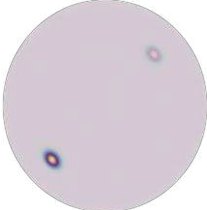
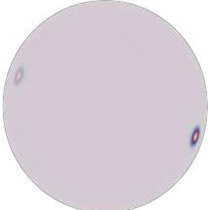
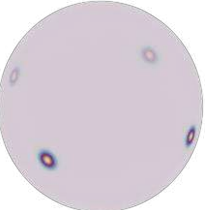
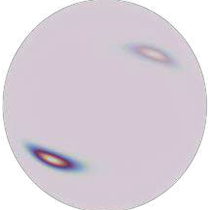
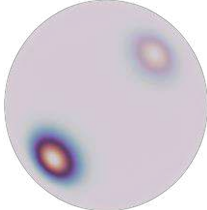
berechnet werden kann. Der Term $\log(p(x))/q(x)$ ist dabei für Wahrscheinlichkeiten von $q(x) = 0$ nicht definiert. Eine Fallunterscheidung liefert in diesem Fall $D = 0$ für $p(x) = 0$ und $D = \infty$ für $p(x) > 0$. Für die Auswertung ist es in diesem Fall zweckmäßig einen numerischen Wert von $1 \cdot 10^{-14}$ zu $q(x)$ zu addieren. Hierdurch wird die ODF qualitativ nicht verändert, da die Summe der aufaddierten Werte klein ist gegenüber der Summe der aufsummierten ursprünglichen Wahrscheinlichkeiten. Durch die Addition eines kleinen Wertes ergibt jedoch die Auswertung von D immer endliche Werte.

Eine Kullback-Leibler-Distanz von $D_2(P\|Q) = 0$ bedeutet, dass beide Wahrscheinlichkeitsverteilungen identisch sind. Je größer jedoch der Wert der Kullback-Leibler-Distanz ist, desto unterschiedlicher sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Einige Beispiele sollen die Unterschiede der Bewertungskriterien verdeutlichen. Die

Tabelle 6-2 listet insgesamt fünf ODFs. Jede der fünf ODFs wird mit der ersten ODF ψ_0 verglichen und es werden die Bewertungskriterien bestimmt. Der Vergleich der ODF ψ_0 mit sich selbst zeigt, dass der Fehler der numerischen Auswertung der Kullback-Leibler-Distanz klein ist. Mit der ODF ψ_1 kann gezeigt werden, dass der integrale Fehler E und die Kullback-Leibler-Distanz D_2 am größten sind, wenn der Erwartungswert nicht identisch ist (ψ_1) und sich die Verteilungen nicht überschneiden. Dieser Fall kann in dieser Arbeit jedoch vernachlässigt werden, da die Erwartungswerte der Wahrscheinlichkeitsverteilungen in den Evaluierungsszenarien identisch sind. Wichtiger sind die Beispiele ψ_2 bis ψ_4 . Die Kullback-Leibler-Distanz ist für die ODF ψ_3 am geringsten und für fast gleich groß für die beiden anderen ODFs. Der integrale Fehler E ist hingegen für die ODF ψ_4 am größten und fast gleich groß für die ODFs ψ_2 und ψ_3 . Diese drei Fälle zeigen, dass die Bewertungskriterien qualitativ unterschiedliche Aussagen zur Ähnlichkeit zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen liefern können. Ausgehend von den gezeigten Beispielen wird ausschließlich die Kullback-Leibler-Distanz in den folgenden Untersuchungen verwendet.

Tabelle 6-2: Exemplarischer Vergleich zwischen 5 verschiedenen ODFs.

ψ_0 (Referenz)	ψ_1	ψ_2	ψ_3	ψ_4
				
$D_2 = 4,7 \cdot 10^{-11}$	$D_2 = 53,6$	$D_2 = 13,4$	$D_2 = 7,44$	$D_2 = 12,7$
$E = 0,0$	$E = 0,159$	$E = 0,079$	$E = 0,081$	$E = 0,112$

Weiter wird für die Bewertung der Rekonstruktionsmethoden deren Einfluss auf die Berechnung der Compositesteifigkeiten untersucht. Dazu wird mittels eines Modells die effektiven Compositesteifigkeiten auf Basis der rekonstruierten ODFs und der initiale ODF berechnet. Als Modell wird das Mori-Tanaka Modell in Verbindung mit dem Pseudo-Grain Ansatz verwendet. Die verwendeten Parameter für das Mori-Tanaka Modell sind ein Faservolumenanteil von $\nu_F = 0,116$, ein Aspektverhältnis von $a_R = 13,75$, Matrixeigenschaften von $E_M = 2000$ MPa und $\nu_M = 0,42$ sowie Fasereigenschaften von $E_F = 72000$ MPa und $\nu_F = 0,2$. Von den effektiven Compositesteifigkeiten werden im Anschluss die jeweiligen Ingenieurskonstanten $\alpha_{ing} = \{E_1, E_2, E_3, G_{12}, G_{13}, G_{23}, \nu_{12}, \nu_{13}, \nu_{23}\}$ eines orthotropen Werkstoffs berechnet. Aus den Ingenieurskonstanten wird für den Vergleich der Rekonstruktionsmethoden ein skalares Fehlermaß definiert mit

$$\mathbf{F} = \frac{|\alpha_{ing}(ODF) - \alpha_{ing}(Rek)|}{\alpha_{ing}(ODF)} \quad (\text{Gl.6-15})$$

Dabei sind $\alpha_{ing}(ODF)$ die Ingenieurskonstanten, die mit initialen ODF berechnet werden und $\alpha_{ing}(Rek)$ diejenigen, die mit der rekonstruierten ODF berechnet werden. Die Ingenieurskonstanten werden verwendet, um numerische Singularitäten zu vermeiden, die bei der Verwendung des vollständigen Steifigkeitstensors entstehen würden. Weiter wird die euklidische Norm von \mathbf{F} gebildet mit

$$\|\mathbf{F}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m |F_i|^2} \quad (\text{Gl.6-16})$$

und für den Vergleich verwendet.

6.2.1 Vergleich der Rekonstruktionen mit Bingham Verteilungen

In diesem Abschnitt wird die Evaluierung der Rekonstruktionen anhand eines Vergleiches mit erstellten Bingham Verteilungen durchgeführt. Die Bingham Verteilung wird hier aufgrund der Lösung der Fokker-Planck-Gleichung gewählt. Chaubal und Leal zeigen, dass bei bestimmten Strömungsbedingungen eine Bingham-Verteilung eine mögliche Lösung der Fokker-Planck-Gleichung ist [35]. Um eine Bingham-Verteilung zu erstellen wird Gleichung 6-4 verwendet. Notwendige Informationen zur Erstellung einer Bingham-Verteilung sind der Erwartungswert und die Kovarianz. Der Erwartungswert gibt die Position des Maximums der Verteilung an. Die Kovarianz hingegen bestimmt die Streubreite der Verteilung.

Der Erwartungswert wird für alle synthetischen ODFs auf der Äquatorialebene mit $(\frac{1}{2\pi}, \frac{1}{2\pi})$ gewählt und wird nicht weiter verändert. Die Kovarianz wird variiert, um die verschiedenen Testszenarien zu erzeugen. Die Variation wird in dieser Arbeit so gewählt, dass die Faserorientierung einer unidirektionalen, orthotrop in Bezug auf die Äquatorial- und Meridianebene und quasi-isotropen Faserorientierung entspricht. Hierfür werden x_1 und x_3 unabhängig voneinander in 30 logarithmisch äquidistanten Schritten von 10^{-4} bis 10^4 variiert, so dass sich insgesamt 900 einzelne Testszenarien ergeben. Für alle Testszenarien gilt $x_2 = x_4 = 0$

Zunächst werden zwei ausgewählte Testszenarien beispielhaft ausgewertet, um die prinzipiellen Unterschiede zwischen den Rekonstruktionsmethoden aufzuzeigen. Die beiden gewählten Testszenarien stellen dabei jeweils qualitativ unterschiedliche Herausforderungen für die Rekonstruktionsverfahren dar.

Das erste ausgewählte Testszenario einer unidirektionalen Verteilung ist in Abbildung 6-2 zusammen mit den Rekonstruktionen dargestellt. Die Farbdarstellung der Wahrscheinlichkeit ist für jede ODF entsprechend ihres Maximums skaliert, für einen qualitativen Vergleich der ODFs. Weiter ist jeweils die Kullback-Leibler-Distanz D_2 und die euklidische Norm des Fehlers

der Ingenieurskonstanten $\|\mathbf{F}\|_2$ angegeben. Das erste Testszenario stellt einen Extremfall der fast perfekten unidirektionalen Ausrichtung dar. Mit diesem Testszenario kann überprüft werden, inwieweit sich scharf begrenzte Verteilungen rekonstruieren lassen. Anhand der Abbildung ist leicht zu erkennen, dass mittels ME eine ODF rekonstruiert werden kann, die nahezu identisch mit der ursprünglichen ODF ist. Entsprechend sind D_2 und $\|\mathbf{F}\|_2$ numerisch null. Die Methoden SH2 bis SH8 hingegen rekonstruieren eine ODF mit einer viel breiteren Verteilung und einem weniger scharf begrenzten Maximum. Weiter sind Ringartefakte als Nebenmaxima zu erkennen. Die Methode SH4 weist ein, SH6 zwei und SH8 drei Ringartefakte auf. Die breitere Verteilung aller Rekonstruktionen mit Kugelflächenfunktionen ist auf die verwendeten Momente zurückzuführen, die nicht geeignet sind, eine unidirektionale Faserverteilung zu approximieren. Dies zeigt, dass scharf begrenzte Verteilungen nur unzureichend approximiert werden können, denn für eine geringe Streuung der Verteilung bedarf es einer sehr hohen Anzahl an Momenten. In dem hier gezeigten Beispiel ist selbst bei der Verwendung von Tensoren bis einschließlich Stufe 8 die rekonstruierte Verteilung zu breit. Die Kullback-Leibler-Distanz wird mit steigender Anzahl an Momenten kleiner, bleibt aber entsprechend auch bei SH8 signifikant größer als bei der ME-Methode. Interessanterweise ist die euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten mit SH4 bis SH8 fast gleich. Eine Verbesserung durch eine erhöhte Anzahl der Momente kann hier nicht festgestellt werden. Die Rekonstruktion mit Verwendung der Closures liefert in diesem ersten Beispiel keine weiteren Informationen, da alle hier verwendeten Closures für eine unidirektionale Verteilung exakt sind. Somit sind die Rekonstruktionen SH4HY, SH4E, SH4IBOF, SH6HY und SH6HYHY identisch mit SH4 bzw. SH6. Entsprechend kann, wenn nur der Tensor zweiter oder vierter Stufe vorhanden ist, über die Verwendung einer Closure die Rekonstruktion verbessert werden, da so ein Moment mehr zur Rekonstruktion beitragen kann.

Daten der initialen ODF		Initiale ODF						
x_1	10^4							
x_3	10^4							
$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{22} \\ a_{33} \end{bmatrix}$	<table border="1"> <tr><td>0</td></tr> <tr><td>1</td></tr> <tr><td>0</td></tr> </table>		0	1	0			
0								
1								
0								
Rekonstruktion								
ME	SH2	SH4	SH6	SH8				
$D_2 = 5,05 \cdot 10^{-6}$	$D_2 = 29,1$	$D_2 = 28,5$	$D_2 = 28,1$	$D_2 = 27,6$				
$\ F\ _2 = 10^{-9}$	$\ F\ _2 = 0,158$	$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,116$				
SH4HY	SH4E	SH4IBOF	SH6HYHY	SH6HY				
$D_2 = 28,5$	$D_2 = 28,5$	$D_2 = 28,5$	$D_2 = 28,1$	$D_2 = 28,1$				
$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,115$	$\ F\ _2 = 0,115$				

Abbildung 6-2: Oben: Ursprüngliche ODF und Daten des ersten Testszenarios mit unidirektionaler Verteilung. Unten: Rekonstruktion und Kullback-Leibler-Distanz des Testszenarios mit den verschiedenen Rekonstruktionsmethoden.

Die Auswertung des zweiten Testszenarios ist in der Abbildung 6-3 dargestellt. Bei diesem Testszenario wird eine initiale ODF mit planarer Isotropie sowie geringer Streuung in Polarrichtung verwendet. Auch bei diesem zweiten Testszenario zeigt sich die ME-Methode als exakt in der Rekonstruktion. Die Rekonstruktionen mit den Kugelflächenfunktionen (SH2-SH8) zeigen ein qualitativ ähnliches Ergebnis wie im ersten Testszenario. Sowohl die Streubreite ist erneut zu groß als auch Ringartefakte sind vorhanden. Im Unterschied zum ersten Testszenario

rio stellt die Verwendung einer Closure hier nicht uneingeschränkt eine Verbesserung der Rekonstruktion dar. Alle hier getesteten Closures verändern den Charakter der Rekonstruktion deutlich. Mit den Methoden SH4HY, SH4E, SH6HY und SH6HYHY werden statt einer planar isotropen Verteilung solche mit orthogonal zueinanderstehenden Peaks in der Äquatorialebene rekonstruiert. Die Kullback-Leibler-Distanzen sind in diesen Fällen mit Ausnahme von SH4HY schlechter als mit den entsprechenden Methoden ohne Closure (SH2 und SH4) und in allen Fällen deutlich schlechter als mit den exakten Tensoren (SH4 und SH6). Mit SH4IBOF ist zwar eine planar isotrope Verteilung vorhanden, jedoch auch ein deutliches numerisches Artefakt an den Polen. Die euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurkonstanten ist wie die Kullback-Leibler-Distanz mit Closures ebenfalls schlechter als ohne. Dies gilt auch für die Variante SH4HY.

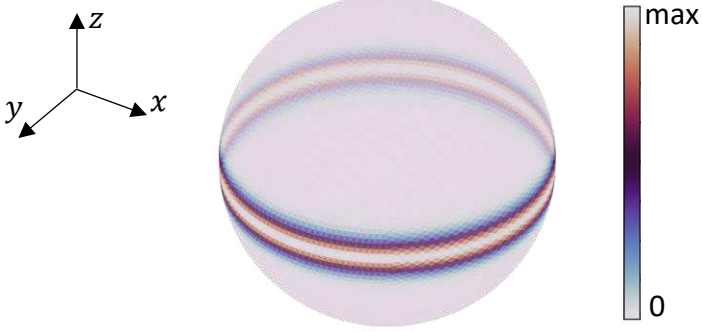
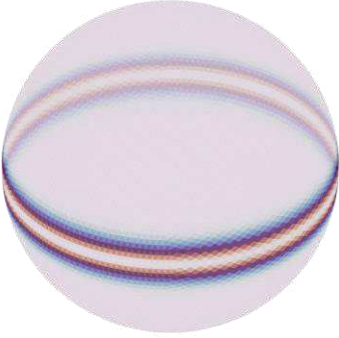
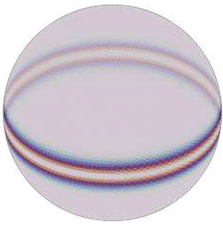


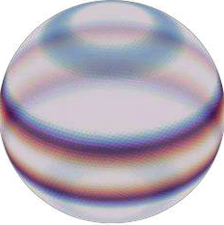


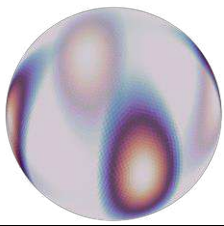
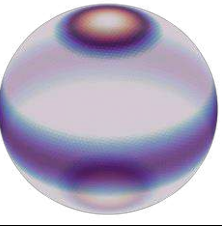
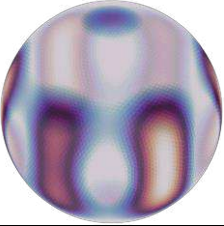
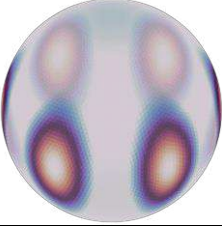
Daten der initialen ODF		Initiale ODF					
x_1	0,012						
x_3	30						
$\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{22} \\ a_{33} \end{bmatrix}$	<table border="1"> <tr><td>0,48</td></tr> <tr><td>0,48</td></tr> <tr><td>0,04</td></tr> </table>						
0,48							
0,48							
0,04							
Rekonstruktion							
ME	SH2	SH4	SH6	SH8			
							
$D_2 = 2,2 \cdot 10^{-10}$	$D_2 = 8,309$	$D_2 = 4,861$	$D_2 = 3,674$	$D_2 = 3,252$			
$\ F\ _2 = 10^{-9}$	$\ F\ _2 = 0,041$	$\ F\ _2 = 0,021$	$\ F\ _2 = 0,019$	$\ F\ _2 = 0,017$			
SH4HY	SH4E	SH4IBOF	SH6HYHY	SH6HY			
							
$D_2 = 6,930$	$D_2 = 19,766$	$D_2 = 10,153$	$D_2 = 17,516$	$D_2 = 11,995$			
$\ F\ _2 = 0,062$	$\ F\ _2 = 0,095$	$\ F\ _2 = 0,080$	$\ F\ _2 = 0,052$	$\ F\ _2 = 0,023$			

Abbildung 6-3: Oben: Ursprüngliche ODF und Daten des zweiten Testszenarios mit planar isotroper Verteilung. Unten: Rekonstruktion und Kullback-Leibler-Distanz des Testszenarios mit den verschiedenen Rekonstruktionsmethoden.

Die Auswertung aller synthetischer Testszenarios mit gewählter Bingham-Verteilung ist in der Abbildung 6-4 zu finden. Hier dargestellt ist die Kullback-Leibler-Distanz D_2 in Abhängigkeit der Kovarianz der gewählten Bingham Verteilung. In dieser Darstellung ist ersichtlich, dass die Methode der maximalen Entropie für alle gewählten Testszenarios eine nahezu identische Rekonstruktion der Bingham Verteilung liefert. Die Rekonstruktionen mit den Kugelflächen-

funktionen sind dagegen besonders in den Bereichen der unidirektionalen und planar isotropen Verteilungen sehr unterschiedlich zur vorgegeben Bingham Verteilung. Dies liegt an der schlechten Approximation einer scharf begrenzten Funktion, bei begrenzter Anzahl an Momenten. Hier kann gezeigt werden, dass selbst unter Einbezug von Tensoren bis zur 8. Stufe keine signifikante Verringerung der Kullback-Leibler-Distanz für die gewählten Testszenerarien erzielt werden kann.

Zu dem Einfluss der Tensorstufe kann in der Abbildung der Effekt der Closures erfasst werden. Generell kann der Einsatz von Closures den Vergleich zwischen der Methode der maximalen Entropie und Kugelflächenfunktionen nicht nennenswert beeinflussen. Lediglich im unidirektionalen Bereich lassen sich leichte Verbesserung erzielen. In allen anderen Bereichen können je nach Closure erhebliche Verschlechterungen auftreten. Besonders die Varianten SH4E und SH6HYHY liefern im planar isotropen und isotropen Bereich schlechtere Werte als die Variante SH2.

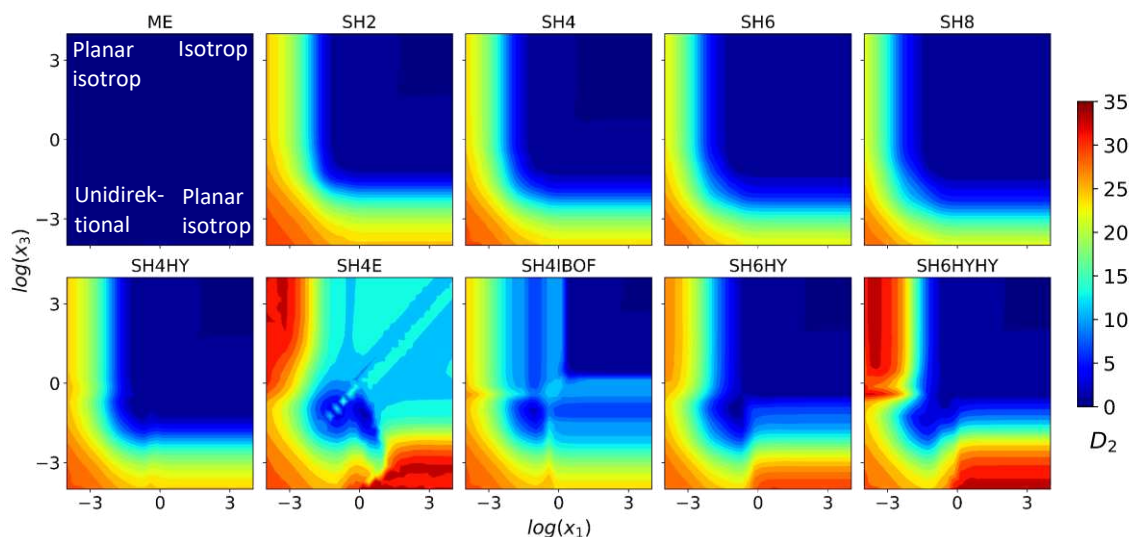


Abbildung 6-4: Farbdarstellung der Kullback-Leibler-Distanz D_2 in Abhängigkeit der Kovarianz der gewählten Bingham Verteilung.

Analog kann die Auswertung für die euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten $\|\mathbf{F}\|_2$ dargestellt werden (vgl. Abbildung 6-5). Die Ergebnisse sind analog zur Kullback-Leibler-Distanz. Demnach schneiden alle Varianten mit Kugelflächenfunktionen deutlich schlechter ab als die Methode der maximalen Entropie. Ebenfalls der Einsatz der Closures bringt hier Vor- und Nachteile in unterschiedlichen Bereichen. Während im unidirektionalen Bereich die Verwendung einer beliebigen Closure eine Verbesserung darstellt, bewirken sie eine Verschlechterung in fast allen anderen Bereichen. Insbesondere die Varianten SH4E und SH4IBOF fallen dabei besonders negativ auf, mit hohen Werten von $\|\mathbf{F}\|_2$ im isotropen beziehungsweise planar isotropen Bereich.

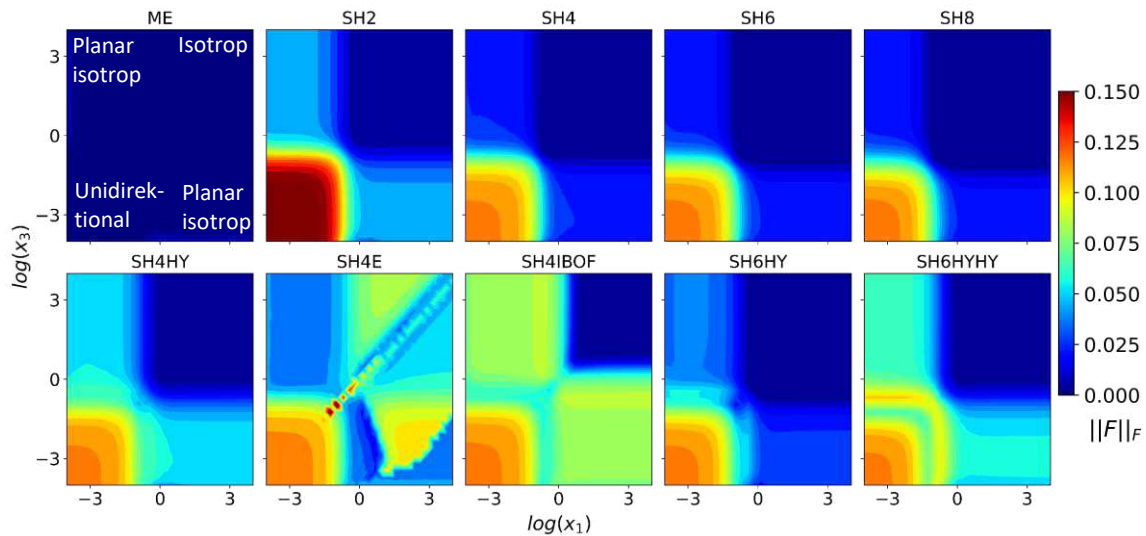


Abbildung 6-5: Farbdarstellung der euklidischen Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten $\|\mathbf{F}\|_2$ in Abhängigkeit der Kovarianz der gewählten Bingham Verteilung.

6.2.2 Vergleich der Rekonstruktionen mit Messdaten

Die zweite Evaluierungsvariante basiert auf gemessenen ODFs der verwendeten Probekörper aus Abschnitt 5.2. Für die Evaluierung werden von jeder gemessenen ODF zunächst die Faserorientierungstensoren (\mathbf{a}_2 bis \mathbf{a}_8) bestimmt. Anhand dieser Tensoren wird für jede Methode die Rekonstruktion durchgeführt und mit der gemessenen ODF verglichen.

Die Auswertung wird für alle experimentell ermittelten ODFs durchgeführt, detailliert dargestellt ist im Folgenden jedoch zunächst die Evaluierung einer beispielhaft ausgewählten ODF der einfachen Platte mit dem PBT-GF20. Die ODF befindet sich an der Position 1-1, bei einer relativen Höhe von 0,93. In der Abbildung 5-7 entspricht die ausgewählte ODF dem letzten Datenpunkt mit Kugeldarstellung der Position 1-1. Die Auswertung mit allen Rekonstruktionsmethoden ist in der Abbildung 6-6 dargestellt. Der qualitative Vergleich der gemessenen ODF und den Rekonstruktionen ist hierbei identisch zu den bisherigen Ergebnissen der synthetischen ODFs, nämlich dass die ME-Methode am ähnlichsten zur initialen ODF ist. Entsprechend ist die berechnete euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten hier am geringsten, analog zur Kullback-Leibler-Distanz, die ebenfalls mit aufgeführt ist. Mit steigender Anzahl an Momenten wird die Rekonstruktion der Kugelflächenfunktion besser, aber selbst bei SH8 ist der relative Fehler größer als mit ME. Die Closures führen qualitativ zu gänzlich anderen ODFs, mit mehreren Peaks statt einer ringförmigen Verteilung. Der relative Fehler ist bei diesen Methoden sogar größer als bei den entsprechenden Rekonstruktionen niedrigerer Ordnung ohne Verwendung einer Closure. Diese Ergebnisse bestätigen die bisherigen Erkenntnisse aus den synthetischen Vergleichen. Dies ist insofern nicht überraschend, da die ausgewählte ODF große Ähnlichkeit mit einer Bingham-Verteilung aufweist, jedoch etwas schärfer begrenzt ist, was durch den qualitativen Vergleich mit der ME-Rekonstruktion deutlich wird.

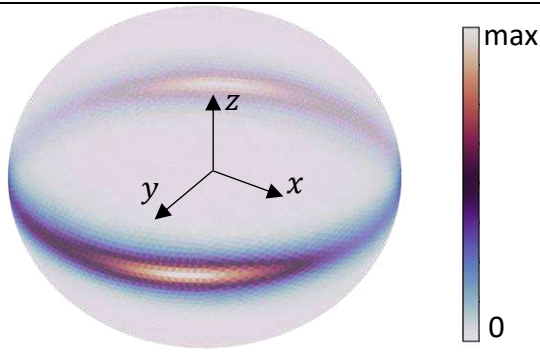






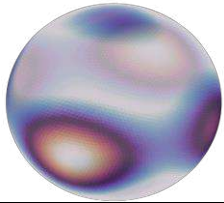

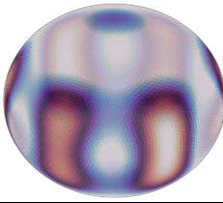
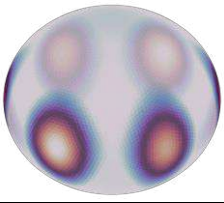
ODF aus CT		Daten der ODF		
		Geometrie: einfache Platte Werkstoff: PBT-GF20 Position: 1-1, relative Höhe: 0.93		
Rekonstruktion				
ME	SH2	SH4	SH6	SH8
				
$D_2 = 0,197$	$D_2 = 1,818$	$D_2 = 1,207$	$D_2 = 1,026$	$D_2 = 1,011$
$\ F\ _2 = 0,004$	$\ F\ _2 = 0,035$	$\ F\ _2 = 0,017$	$\ F\ _2 = 0,014$	$\ F\ _2 = 0,011$
SH4HY	SH4E	SH4IBOF	SH6HYHY	SH6HY
				
$D_2 = 1,630$	$D_2 = 1,761$	$D_2 = 3,522$	$D_2 = 7,897$	$D_2 = 5,886$
$\ F\ _2 = 0,043$	$\ F\ _2 = 0,021$	$\ F\ _2 = 0,079$	$\ F\ _2 = 0,020$	$\ F\ _2 = 0,047$

Abbildung 6-6: Übersicht über die exemplarische Auswertung des Einflusses der Rekonstruktion auf die Compositesteifigkeit. Dargestellt ist die mittels CT gemessene ODF, die mit den verschiedenen Methoden durchgeführte Rekonstruktion sowie die daraus berechneten Vergleichswerte.

Zur weiteren Analyse des Einflusses der Rekonstruktion auf die Compositesteifigkeit ist in Abbildung 6-7 ein Polardiagramm der Ingenieurskonstanten E_1 und E_2 gezeigt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist das Polardiagramm in zwei Hälften mit jeweils 5 Rekonstruktionsmethoden aufgeteilt. In der linken Darstellung ist zu erkennen, dass die Moduln der ME Rekonstruktion und der gemessenen ODF aus der CT fast identisch sind, mit geringfügigen Unterschieden in maximalem Wert und der Richtung des maximalen Wertes. Ebenfalls zu erkennen

ist, dass mit steigender Anzahl an Momenten eine Annäherung der Rekonstruktionen mit Kugelflächenfunktionen stattfindet. Die Annäherung ist dabei sowohl beim maximalen Wert als auch bei der Ausrichtung vorhanden. In der rechten Abbildung sind alle Rekonstruktionen mit Closures dargestellt. Diese sind in Form, Ausrichtung und Maximalwert deutlich unterschiedlich zu den Moduln aus der gemessenen ODF. Die Abbildung verdeutlicht den Unterschied der mechanischen Compositeigenschaften aufgrund der unterschiedlichen Rekonstruktionen.

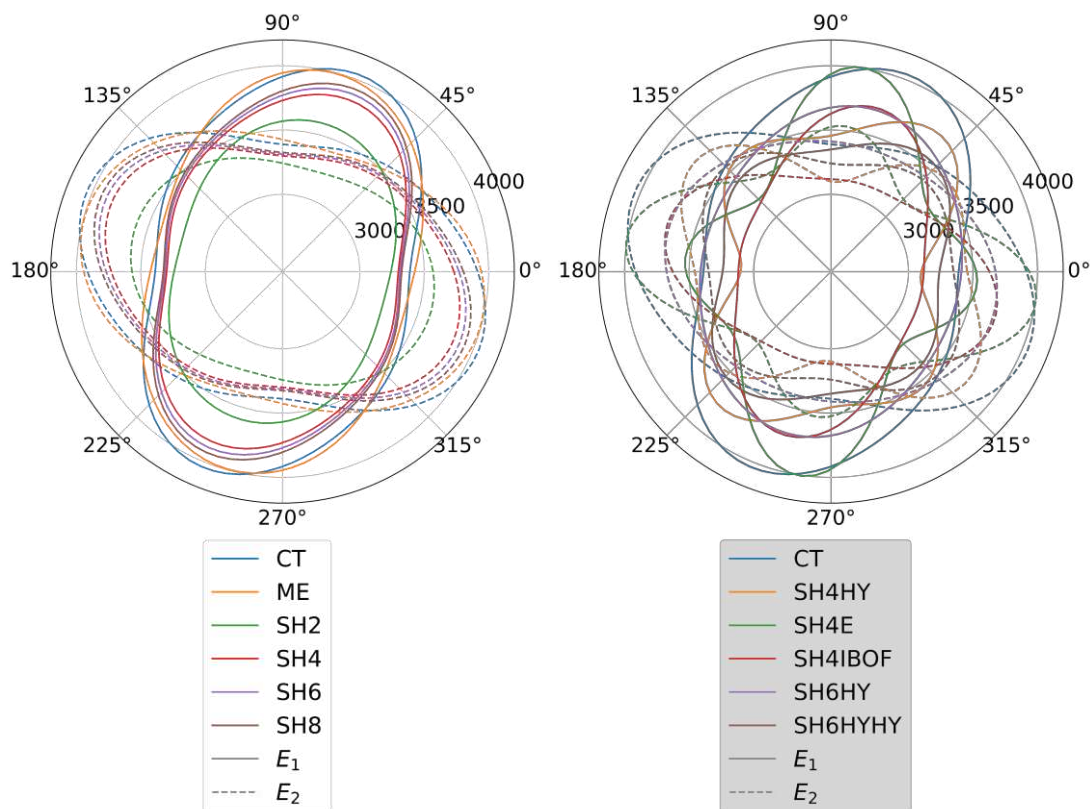


Abbildung 6-7: Polardiagramme der Steifigkeit C_{11} und C_{22} für eine ausgewählte Stelle (1-1) der einfachen Platte aus PBT-GF20. Die Steifigkeit wird berechnet mit allen Rekonstruktionen auf Grundlage des exakten Tensors aus der CT-Untersuchung.

Die statistische Auswertung aller Rekonstruktionen erfolgt in drei Schritten. Zunächst wird die Kullback-Leibler-Distanz ausgewertet, anschließend die euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten und abschließend eine Überlagerung beider Fehlerkriterien.

In der Abbildung 6-8 ist die Kullback-Leibler-Distanz für alle Rekonstruktionen als Boxplot dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Methode der maximalen Entropie die deutlich bessere Bewertung der Rekonstruktionen liefert. Sowohl der Mittelwert als auch die Streuung sind bei dieser Methode am geringsten. Des Weiteren ist ebenfalls der positive Einfluss der höheren Momente für die Kugelflächenfunktion zu erkennen. Mit steigenden Momenten wird sowohl die Lage als auch die Streuung der Kullback-Leibler-Distanz geringer. Der Einfluss der Momente auf den Mittelwert ist dabei allerdings degressiv. Die Rekonstruktionen unter Einbezug einer Closure müssen differenziert bewertet werden. So verbessert SH4HY die Rekonstruktion

gegenüber der Variante SH2 leicht. Alle weiteren Closures können hingegen keine Verbesserung gegenüber den Varianten ohne Closure liefern.

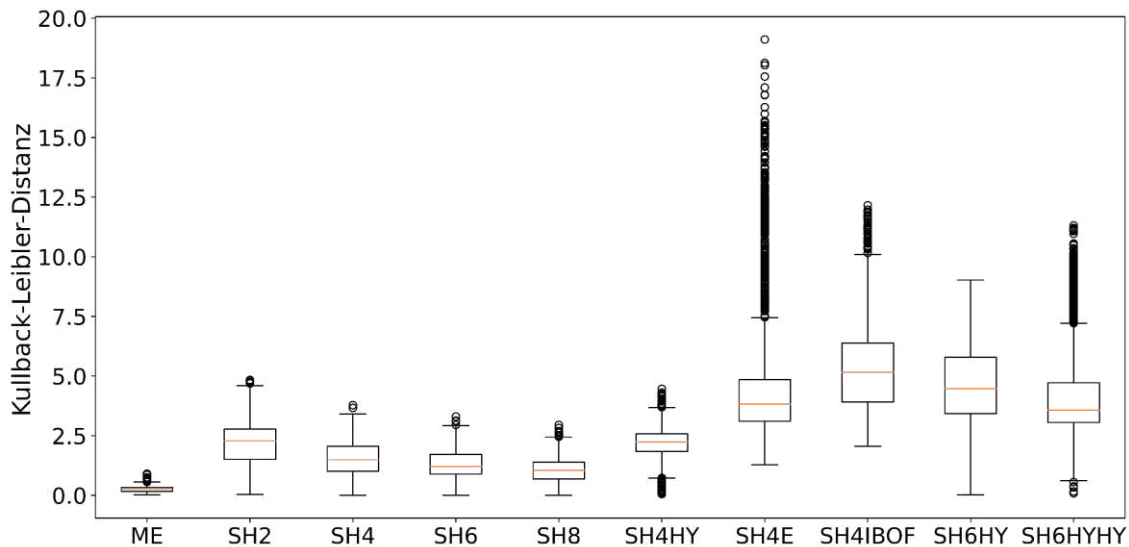


Abbildung 6-8: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen allen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen für alle Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessenen Faserorientierungstensoren.

Die Erkenntnisse aus dem Boxplot mit allen gemessenen ODFs verfestigt die bisherigen Beobachtungen der synthetischen Vergleiche und der detaillierteren Analyse anhand des Beispiels aus der einfachen Platte aus PBT-GF20. Die Methode der maximalen Entropie liefert im Mittel die besseren Rekonstruktionen mit geringerer Streuung. Die Rekonstruktionen auf Basis der Kugelflächenfunktionen sind aufgrund der begrenzten Anzahl der Momente problematisch. Der Einsatz von Closures hilft dabei in der Regel nicht.

Eine Aufschlüsselung des Boxplots nach verwendetem Composite und Geometrie ist im Anhang (vgl. Abbildung A-13 bis Abbildung A-16) beigefügt. Qualitativ sind die aufgeschlüsselten Ergebnisse identisch zum Gesamtergebnis. Das zeigt, dass das Gesamtergebnis der Bewertung der Rekonstruktionsmethoden robust ist und hier allgemeingültig für die untersuchten Fälle ist.

In der Abbildung 6-9 ist die euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten als Boxplot für alle Rekonstruktionen dargestellt. Hier ist das zu erwartende Resultat zu erkennen, dass die ME Rekonstruktion nicht nur die bessere Rekonstruktion der ODF liefert, sondern dass ebenfalls der Fehler der Ingenieurskonstanten am geringsten ist. Das heißt, dass im Mittel die effektive Compositesteifigkeit mit der ME-Methode am genauesten berechnet wird. Weiter ist ebenfalls die Streuung bei der ME-Methode am geringsten. Das bedeutet, dass nicht nur die Genauigkeit der Berechnung der Compositesteifigkeit hier am größten ist, sondern auch die Sicherheit, dass die Berechnung genau ist.

Die Bewertung des Fehlers der Kugelflächenfunktion ist ebenfalls analog zur Kullback-Leibler-Distanz der Rekonstruktionen. Das heißt, dass mit Anzahl der Momente der Mittelwert und auch die Streuung des Fehlers geringer wird. Die Closures zeigen hier diesmal keine Verbesserung des Mittelwertes gegenüber Rekonstruktionsvarianten ohne Closure. Lediglich die Streuung des Fehlers wird bei den Varianten SH4HY, SH4E und SH4IBOF verringert.

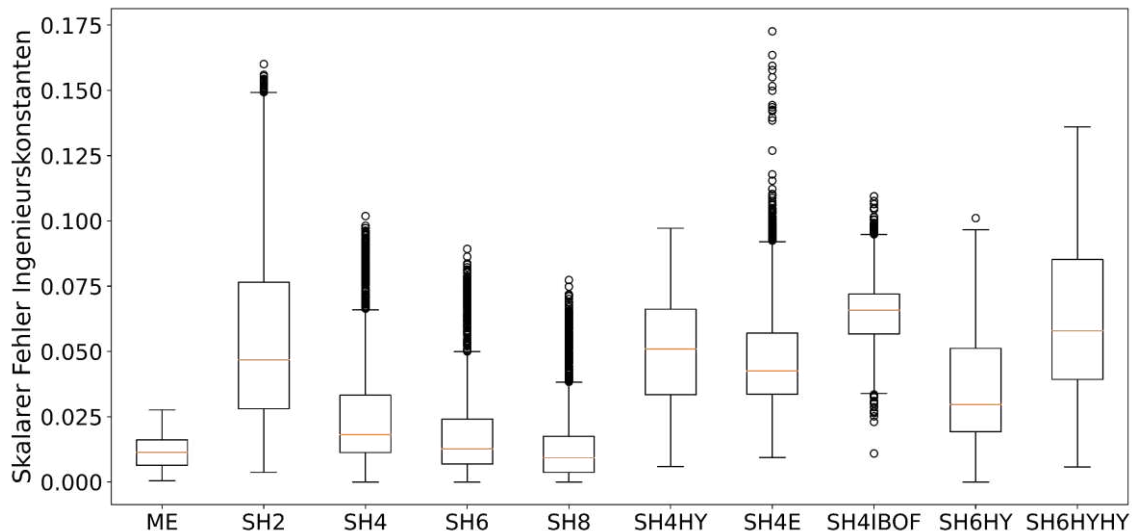


Abbildung 6-9: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessene Faserorientierungstensoren.

In der letzten Darstellung (Abbildung 6-10) zur statistischen Auswertung wird die euklidische Norm des relativen Fehlers in Abhängigkeit der Kullback-Leibler-Distanz dargestellt. Es wird eine Heatmap-Visualisierung durch eine Kerndichteschätzung mit Gauß-Kern verwendet. Die Farbskala ist in jeder Teilabbildung auf das Maximum der Wahrscheinlichkeit skaliert. Die Abbildung verdeutlicht die bisherigen Ergebnisse der Untersuchung der Rekonstruktionsgüte und des relativen Fehlers. Darüber hinaus ist durch die flächige Ausdehnung der Wahrscheinlichkeiten ersichtlich, dass die Kullback-Leibler-Distanz und der relative Fehler nicht eindeutig voneinander abhängig sind. Rekonstruktionen mit niedriger Kullback-Leibler-Distanz weisen nicht zwangsweise einen niedrigen relativen Fehler auf und umgekehrt. Dies liegt daran, dass unterschiedliche ODFs in den gleichen oder ähnlichen Compositeigenschaften resultieren können. Weiter können ODFs mit niedrigen Kullback-Leibler-Distanzen in unterschiedlichen Compositeigenschaften resultieren.

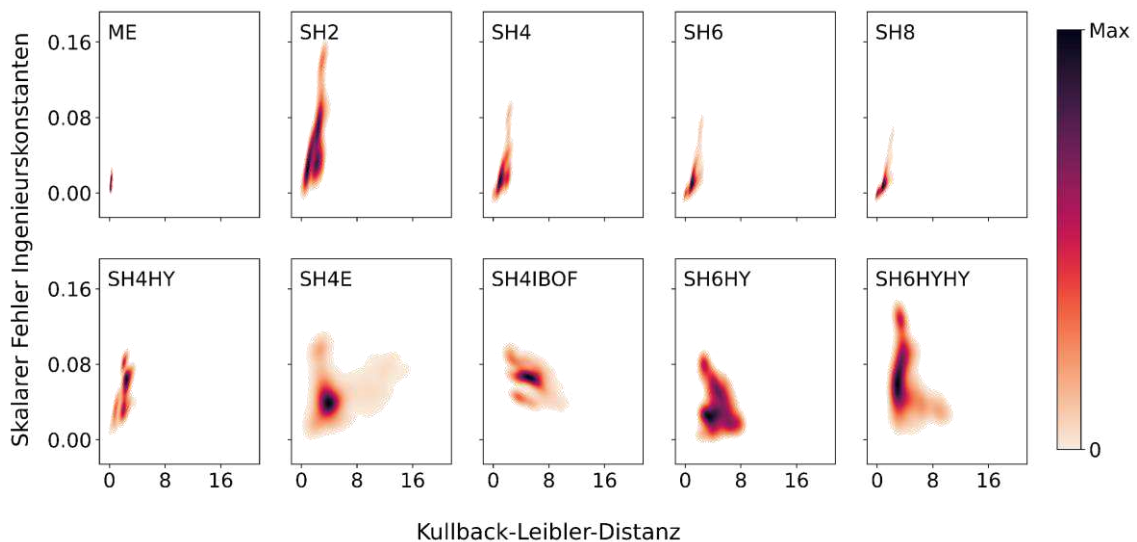


Abbildung 6-10: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle Rekonstruktionsmethoden in Abhängigkeit der Kullback-Leibler-Distanz. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessenen Faserorientierungstensoren.

In einer weiteren Untersuchung kann die Wichtigkeit der Rekonstruktion weiter belegt werden. Hierfür wird die Berechnung des skalaren Fehlers der Ingenieurskonstanten wiederholt, diesmal jedoch auf Basis des Full-Mori-Tanaka Modells für die Homogenisierung. Mit

$$\Delta\|\mathbf{F}\|_2 = (\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{FMT}} - (\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{PG}} \quad (\text{Gl.6-17})$$

wird die Differenz zwischen dem Fehler mit Full-Mori-Tanaka Ansatz $(\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{FMT}}$ und dem Fehler mit Pseudo-Grain Ansatz $(\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{PG}}$ berechnet. In Relation gesetzt zum Mittelwert beider Fehler mit

$$\overline{\|\mathbf{F}\|_2} = \frac{(\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{FMT}} + (\|\mathbf{F}\|_2)_{\text{PG}}}{2} \quad (\text{Gl.6-18})$$

kann der Einfluss der Homogenisierungsmethode vom Einfluss der Rekonstruktionsmethode auf die euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten getrennt werden. In der Abbildung 6-11 ist der Vergleich für alle Rekonstruktionsmethoden dargestellt. Zu erkennen ist, dass die Unterschiede zwischen den beiden Homogenisierungsmethoden vernachlässigbar klein im Vergleich zu den Unterschieden zwischen den Rekonstruktionsmethoden sind. Dies verdeutlicht die Wichtigkeit der verwendeten Rekonstruktionsmethode.

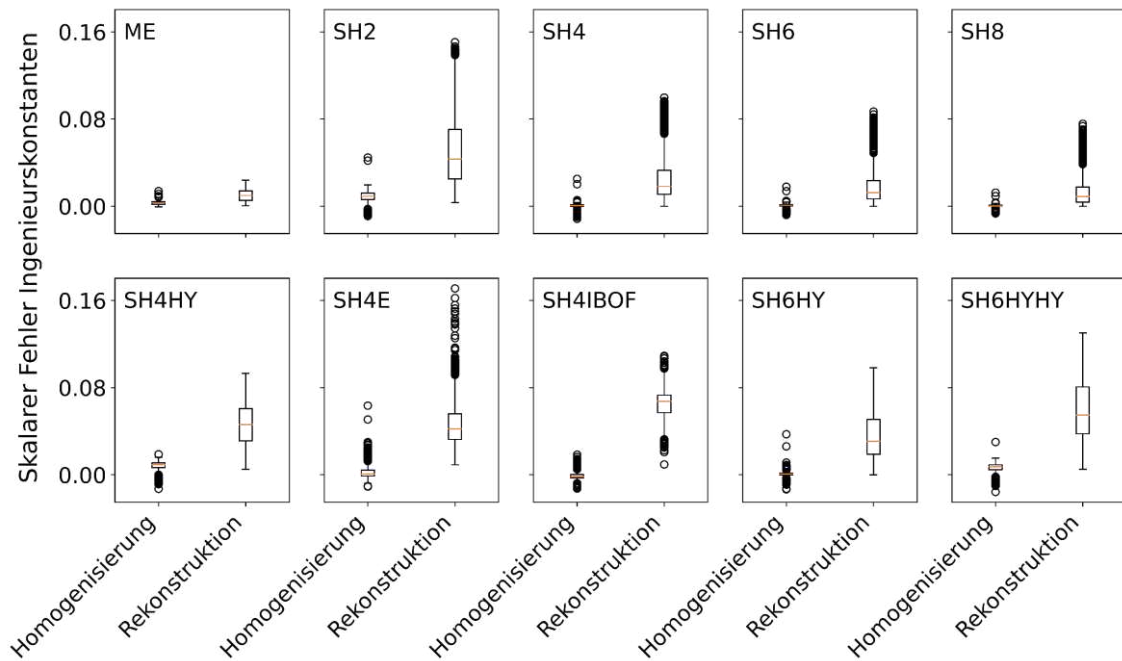


Abbildung 6-11: Vergleich des Einflusses der Homogenisierungsmethode und des Einflusses der Rekonstruktionsmethode auf die euklidische Norm des Fehlers der Ingenieurskonstanten. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessenen Faserorientierungstensenoren.

Abschließend kann als Fazit zu den Rekonstruktionsmethoden festgehalten werden, dass die Methode der maximalen Entropie in den hier verwendeten Evaluierungsfällen deutlich besser als die Rekonstruktion auf Basis von Kugelflächenfunktionen geeignet ist. Dies ist prinzipiell auf die fehlende Anzahl an Momenten der Kugelflächenfunktionen zurückzuführen. Es kann hier jedoch gezeigt werden, dass selbst bei einer Verwendung von Tensoren bis zur achten Stufe noch zu wenige Momente vorhanden sind. Dabei sind Tensoren höherer Stufe häufig unbekannt, zum Beispiel bei Spritzgussimulationen. Closures zur Berechnung von höheren Tensorstufen führen aber in der Regel nicht zu einer verbesserten Rekonstruktion, mit Ausnahme fast unidirektionaler ODFs.

Zu dem Fazit sei angemerkt, dass die hier gemachte Untersuchung bereits ein breites anwendungsnahe Feld abdeckt, die real vorkommenden ODFs jedoch eine unendliche Menge darstellen. Daher ist es unmöglich eine generelle Überlegenheit einer Rekonstruktionsmethode zu beweisen. Es sei betont, dass die Methode der maximalen Entropie hier deutlich besser abschneidet, dies jedoch nicht zwangsläufig immer gelten muss.

6.2.3 Vergleich der Rekonstruktionen aus Spritzguss simulationsdaten

Zu den bisherigen Vergleichen auf Basis der exakten Tensoren wird ein Vergleich auf Basis des mittels Spritzguss simulation gewonnen Faserorientierungstensors durchgeführt. Hierbei wird der Faserorientierungstensor zweiter Stufe aus den Spritzguss simulationen (vgl. Abschnitt 5.2) entnommen und in den möglichen Rekonstruktionsmethoden verwendet. Da nur der Tensor zweiter Stufe vorhanden ist, können nur die Methoden ME, SH4HY, SH4E, SH4IBOF, SH6HYHY

und SH2 verwendet werden. Die rekonstruierten ODFs werden, wie in den bisherigen Untersuchungen, mit den experimentell ermittelten ODFs verglichen. Ausgewertet wird die Kullback-Leibler-Distanz und die euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten.

Ziel dieses Vergleiches ist nicht die Rekonstruktionsmethoden als solches zu bewerten, sondern den Einfluss eines nicht exakten Tensors auf die Rekonstruktion. Der Hintergrund hierfür ist, dass in der Regel bei einer Bauteilauslegung keine exakten Faserorientierungstensoren vorhanden sind, sondern ausschließlich mittels Spritzgusssimulation bestimmte. Mit kommerziell verfügbaren Spritzgusssimulationsprogrammen sind zudem nur die Faserorientierungstensoren zweiter Stufe verfügbar. Faserorientierungstensoren höherer Ordnung müssen mittels Closure bestimmt werden.

Zunächst sei auch hier exemplarisch für dieselbe Stelle (einfache Platte, PBT-GF20, Position 1-1, relative Höhe 0,93) eine Einzelauswertung in der Abbildung 6-12 gezeigt. Bei dieser ausgewählten Stelle ist der gemessene Faserorientierungstensor $(\mathbf{a}_2)_{CT}$ stark unterschiedlich zu dem mittels Spritzgusssimulation berechneten $(\mathbf{a}_2)_{sim}$. Dabei wird der größte Eintrag des Faserorientierungstensors in der Spritzgusssimulation überschätzt. Mittels ME-Methode wird daher eine ODF rekonstruiert, die eher als unidirektional bezeichnet werden kann, statt als planar isotrop. Entsprechend schlecht fallen Kullback-Leibler-Distanz und euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten aus. Die anderen Methoden liefern dabei ähnliche Rekonstruktionen, jedoch mit höherer Streuung. Die Kullback-Leibler-Distanzen sind in diesem Fall größer als mit ME, die Fehler der Ingenieurskonstanten jedoch geringer.

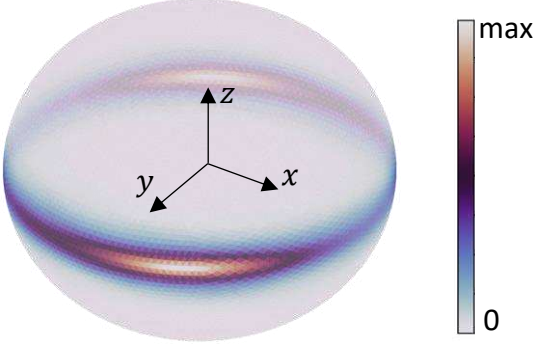

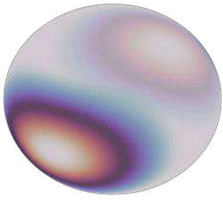
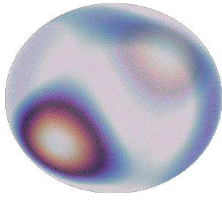
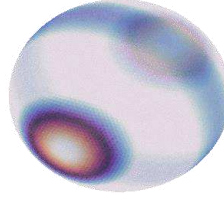
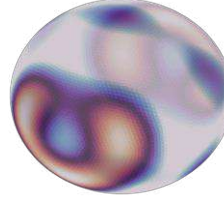
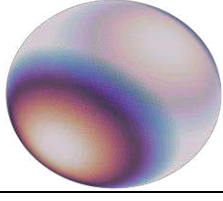
Daten der ODF aus CT		Daten aus Spritzgussimulation											
		$(\mathbf{a}_2)_{sim} = $ <table border="1" data-bbox="983 349 1273 470"> <tr> <td>0,117</td> <td>0,004</td> <td>0,002</td> </tr> <tr> <td>0,004</td> <td>0,834</td> <td>0,048</td> </tr> <tr> <td>0,002</td> <td>0,048</td> <td>0,048</td> </tr> </table>			0,117	0,004	0,002	0,004	0,834	0,048	0,002	0,048	0,048
0,117	0,004	0,002											
0,004	0,834	0,048											
0,002	0,048	0,048											
$(\mathbf{a}_2)_{CT} = $ <table border="1" data-bbox="354 701 671 822"> <tr> <td>0,406</td> <td>-0,046</td> <td>0,001</td> </tr> <tr> <td>-0,046</td> <td>0,571</td> <td>-0,011</td> </tr> <tr> <td>0,001</td> <td>-0,011</td> <td>0,022</td> </tr> </table>		0,406	-0,046	0,001	-0,046	0,571	-0,011	0,001	-0,011	0,022			
0,406	-0,046	0,001											
-0,046	0,571	-0,011											
0,001	-0,011	0,022											
Geometrie: einfache Platte Werkstoff: PBT-GF20 Position: 1-1, relative Höhe: 0.93													
Rekonstruktion													
ME	SH4HY	SH4E	SH4IBOF	SH6HYHY									
													
$D_2 = 2,504$	$D_2 = 6,235$	$D_2 = 8,448$	$D_2 = 10,561$	$D_2 = 8,472$									
$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,093$	$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,062$	$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,051$	$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,052$	$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,047$									
SH2													
													
$D_2 = 6,055$													
$\ \mathbf{F}\ _2 = 0,054$													

Abbildung 6-12: Übersicht über die exemplarische Auswertung des Einflusses der Rekonstruktion auf die Compositesteifigkeit auf Basis des mittels Spritzgussimulation bestimmten Faserorientierungstensors.

Das Ergebnis der Rekonstruktionen kann durch den Unterschied zwischen exaktem und numerischem Faserorientierungstensor erklärt werden. Der Faserorientierungstensor aus der Spritzgusssimulation hat einen deutlich größeren größten Eintrag auf der Hauptdiagonale als der exakte Tensor. Der numerisch bestimmte Faserorientierungstensor kann qualitativ als unidirektional angesehen werden, während der exakte Faserorientierungstensor eher als planar isotrop betrachtet werden kann. Der numerische Faserorientierungstensor führt entsprechend mit ME zu einer fast unidirektionalen ODF. Mit den Kugelflächenfunktionen fällt die rekonstruierte ODF aufgrund der Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen breiter aus. Daher liegt die Auffassung nahe, dass die Kugelflächenfunktionen in diesem Beispiel nicht besser funktionieren als die ME-Methode, sondern sich lediglich Fehler des Faserorientierungstensors und Unzulänglichkeit der Kugelflächenfunktionen gegenseitig aufheben.

Die Abbildung 6-13 zeigt in einem Polardiagramm die Ingenieurskonstanten E_1 und E_2 und verdeutlicht, dass ME hier schlechter abschneidet als die anderen Rekonstruktionen. Der maximale Wert der Moduln ist mit der ME-Methode deutlich größer als mit den Kugelflächenfunktionen und größer als mit der gemessenen ODF.

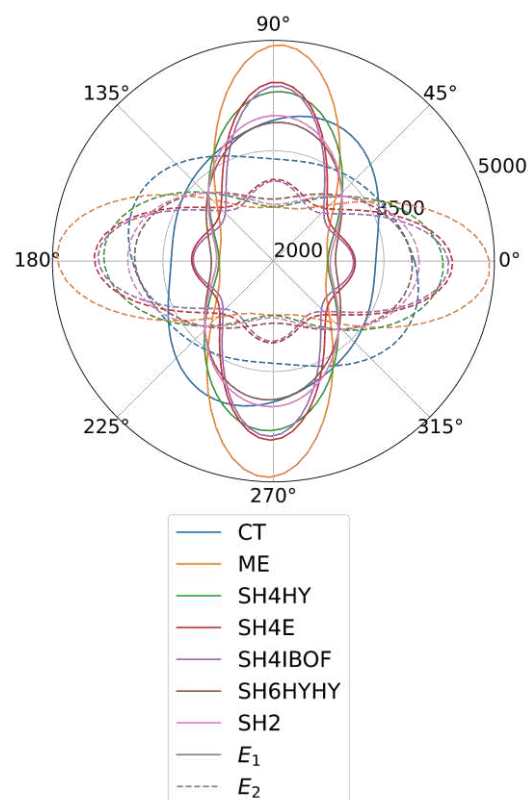


Abbildung 6-13: Polardiagramme der Ingenieurskonstanten E_1 und E_2 für eine ausgewählte Stelle (1-1) der einfachen Platte aus PBT-GF20. Die Steifigkeit wird berechnet mit allen hier möglichen Rekonstruktionen auf Grundlage des Faserorientierungstensors aus der Spritzgusssimulation.

Die statistische Auswertung aller Rekonstruktionen erfolgt analog zur vorherigen Untersuchung in drei Schritten. Zunächst wird die Kullback-Leibler-Distanz ausgewertet, anschließend

die euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten und abschließend eine Überlagerung beider Fehlerkriterien.

Die Abbildung 6-14 zeigt die Kullback-Leibler-Distanz für alle hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Die Methode der maximalen Entropie liefert auch in dieser Auswertung im Mittel die geringste Kullback-Leibler-Distanz. Im Vergleich zur Analyse mit den exakten Tensoren ist hier der Unterschied zwischen ME und Kugelflächenfunktionen jedoch nicht so ausgeprägt. Dies liegt daran, dass die Kullback-Leibler-Distanz mit ME mehr zunimmt als mit den Kugelflächenfunktionen. Zurückzuführen ist dies auf die Differenz zwischen exaktem und berechnetem Tensor in Wechselwirkung mit der Rekonstruktion. Das gewählte Beispiel aus der Abbildung 6-12 ist dabei stellvertretend für den häufigen Fall eines größeren ersten Eigenwertes in den numerisch bestimmten Faserorientierungstensoren. Insbesondere in Fließrichtung in den Randschichten tritt der Fall häufig auf, wie auf den Abbildungen A-1 bis A-12 im Anhang zu erkennen ist. Entsprechend wird die statistische Bewertung der ME-Methode hier besonders verschlechtert gegenüber der Rekonstruktion aus exakten Tensoren.

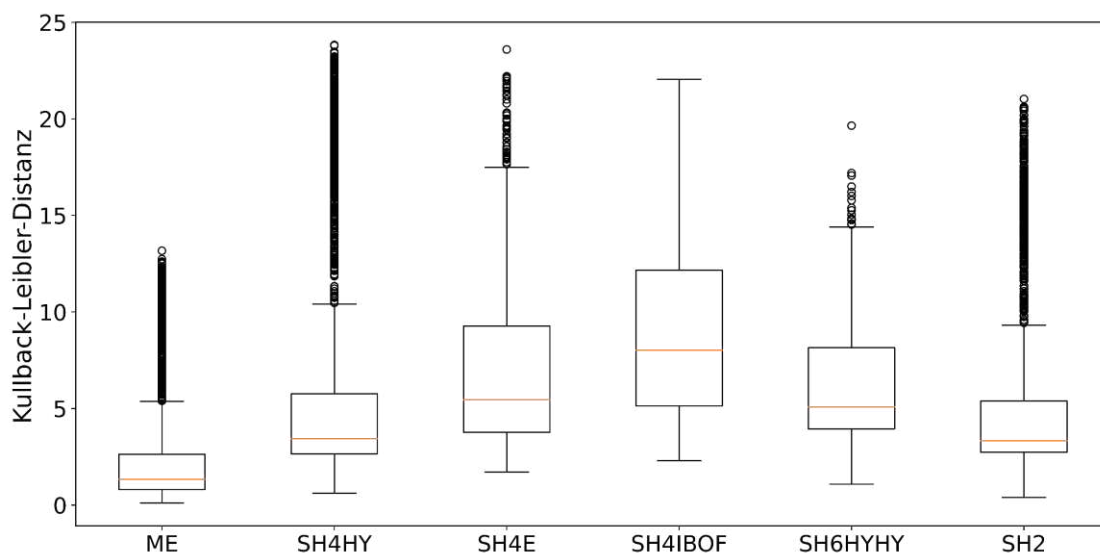


Abbildung 6-14: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen allen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen für alle möglichen Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die mittels Spritzgussimulation bestimmte Faserorientierungstensoren.

In der Abbildung 6-15 ist die euklidische Norm des relativen Fehlers der Ingenieurskonstanten dargestellt. Das Ergebnis ist analog zur Kullback-Leibler-Distanz, mit geringeren Werten für die euklidische Norm des relativen Fehlers mittels ME. Eine Aufschlüsselung nach Geometrie und verwendeten Compositen ist dabei im Anhang in Abschnitt A 5 und A 6 gegeben.

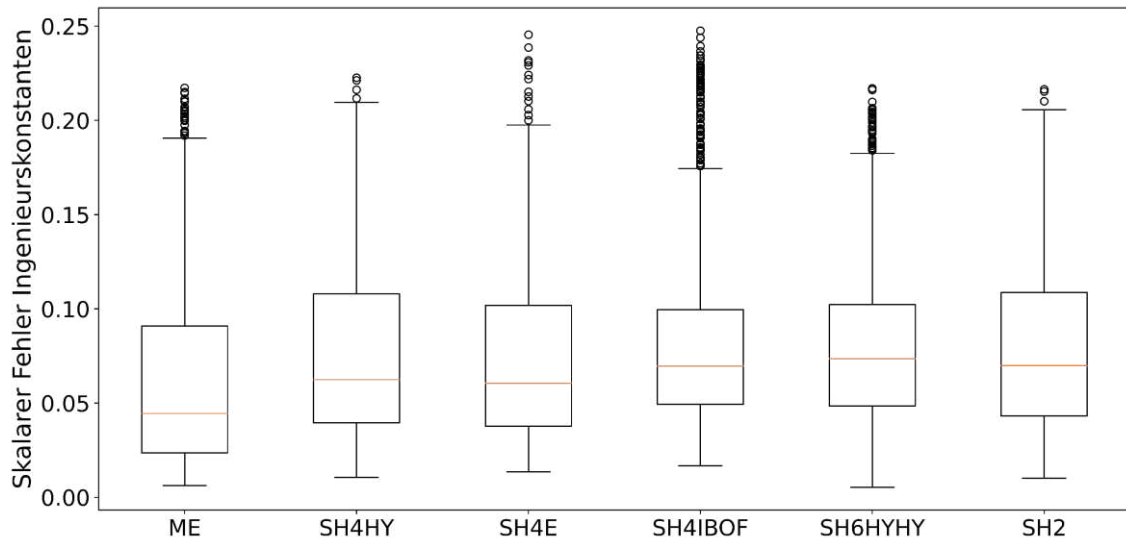


Abbildung 6-15: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die mittels Spritzgussimulation berechneten Faserorientierungstensoren.

Die Überlagerung beider Fehlerbewertungskriterien ist in der Abbildung 6-16 dargestellt. Verwendet wird eine Heatmap-Visualisierung durch eine Kerndichteschätzung mit Gauß-Kern. Die Farbskala ist in jeder Teilabbildung auf das Maximum der Wahrscheinlichkeit skaliert. Es ist ersichtlich, dass der Kern häufiger Auftretenswahrscheinlichkeit bei der ME-Methode weiterhin niedriger als bei den anderen Varianten ist. Das heißt, dass Rekonstruktionen der ME-Methode häufiger eine geringere Kullback-Leibler-Distanz und eine geringere euklidische Norm des relativen Fehlers aufweisen.

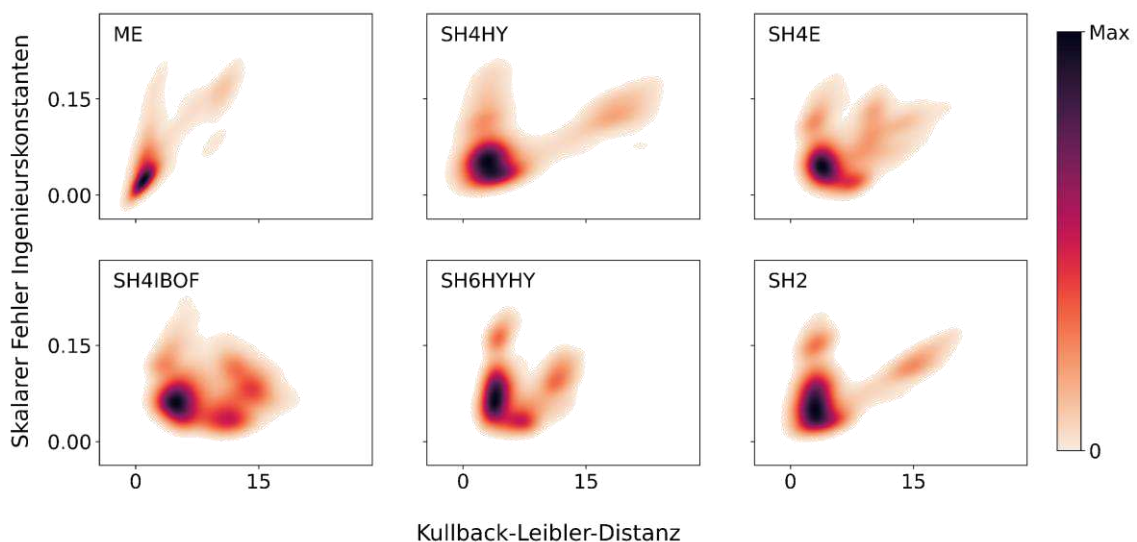


Abbildung 6-16: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle möglichen Rekonstruktionsmethoden in Abhängigkeit der Kullback-Leibler-Distanz. Grundlage der Rekonstruktion sind die numerisch bestimmten Tensoren.

Zusammenfassend für die Rekonstruktion mit numerisch bestimmten Faserorientierungstensenoren kann geschlussfolgert werden, dass der Fehler der numerischen Faserorientierungstensenoren mit ME stärker durchschlägt als mit Kugelflächenfunktionen. Trotzdem liefert die ME auch in diesem Evaluierungsszenario insgesamt die besseren Rekonstruktionen.

Als abschließendes Fazit zu allen drei Evaluationsszenarien kann festgehalten werden, dass die Methode der maximalen Entropie den Kugelflächenfunktionen deutlich überlegen ist. Scharf begrenzte Verteilungen können rekonstruiert werden, typische Verteilungen werden im Mittel genauer und sicherer rekonstruiert und die effektiven Compositeigenschaften werden hierdurch exakter berechenbar. Problematisch sind dabei jedoch fehlerbehaftete Faserorientierungstensenoren. Durch die Leistungsfähigkeit der ME-Methode schlägt ein Fehler der Faserorientierungstensenoren stärker durch als mit Rekonstruktionen auf Basis von Kugelflächenfunktionen.

Über die hier gezeigte Untersuchung hinaus ist vorstellbar, dass sich der Einfluss der Rekonstruktionen auf nicht-lineare Compositeigenschaften von dem auf die linearen unterscheidet. Zur Überprüfung könnten in weiteren Arbeiten nicht-lineare Compositeigenschaften auf Basis der unterschiedlichen Rekonstruktionsmethoden berechnet und miteinander verglichen werden.

7 Finite-Elemente Modellierung der Mikrostruktur

Ein zentraler Punkt dieser Arbeit ist es, unterschiedliche Modell- und Idealisierungsannahmen kurzfaserverstärkter Kunststoffe für die Berechnung effektiver Compositeeigenschaften zu untersuchen und zu bewerten. Hierzu werden RVEs verwendet, die unter verschiedenen Annahmen erstellt und miteinander verglichen werden. Auf diese Weise kann der Effekt der Modellierung herausgearbeitet werden. Die Analyse der RVEs erfolgt mit Hilfe der Finite-Elemente (FE) Methode.

In diesem Abschnitt wird zunächst der zugrunde liegende Modellaufbau der RVEs vorgestellt. Dazu zählen der generelle Ablauf zur Erstellung der RVEs, die verwendeten Randbedingungen sowie Geometriedefinitionen. Da die verfügbare Rechenleistung für viele Untersuchungen mit RVEs noch einen limitierenden Faktor darstellt, ist im Anhang eine Rechenzeitbetrachtung beigefügt, bei der verschiedene Aspekte zur Beschleunigung der Berechnungen analysiert werden. Im Abschnitt A 7 werden dabei effiziente Faserplatzierungsalgorithmen zur Erstellung der RVEs vorgestellt. Als besonders effizient erweist sich dabei ein Faserplatzierungsalgorithmus, bei dem die Überschneidung von Fasern mittels eines Separationsachsenverfahrens [115] bestimmt wird. In Abschnitt A 8 werden numerische Lösungsverfahren des Randwertproblems der FEM, der Einfluss der Randbedingungen und die verwendete CPU-Anzahl diskutiert.

Die FE-Simulationen aller hier verwendeten RVEs werden mit dem kommerziellen FE-Simulationsprogramm *Abaqus* von *Dassault Systems* durchgeführt. Dieses bietet die Möglichkeit FE Modelle per Python Schnittstelle automatisiert zu erstellen und auszuwerten. Zu diesem Zweck wird ein Python-Skript erstellt, dessen Ablauf in Abbildung 7-1 schematisch dargestellt ist. Das Skript ist derart aufgebaut, dass zunächst ein Simulationsplan erstellt wird, der ein sogenanntes Batch erzeugt. Innerhalb eines Batchs werden unterschiedliche Faserensembles generiert. Ein Faserensemble bezeichnet hier ein vollständiges 3D-Modell der Mikrostruktur. Dies beinhaltet die Abmessungen des betrachteten Volumens sowie die genaue Position, Rotation und Abmessungen jeder einzelnen verwendeten Faser. Jedes Faserensemble kann mithilfe des Skriptes in mehreren Simulationen verwendet werden, zum Beispiel um ein Faserensemble richtungsabhängig zu untersuchen, oder die Auswirkung verschiedener Materialmodelle an einem Faserensemble zu testen. Für eine Simulation wird ein Faserensemble zunächst vernetzt und anschließend werden Randbedingungen aufgeprägt. Für die Vernetzung werden in dieser Arbeit ausschließlich Tetraeder-Elemente mit quadratischer Ansatzfunktion (C3D10) verwendet. Die Berechnung der lokalen Zustandsgrößen wird dann durch den Abaqus Solver durchgeführt. Falls notwendig kann dabei für jede Einzelsimulation eine Netzkonvergenzstudie durchgeführt werden.

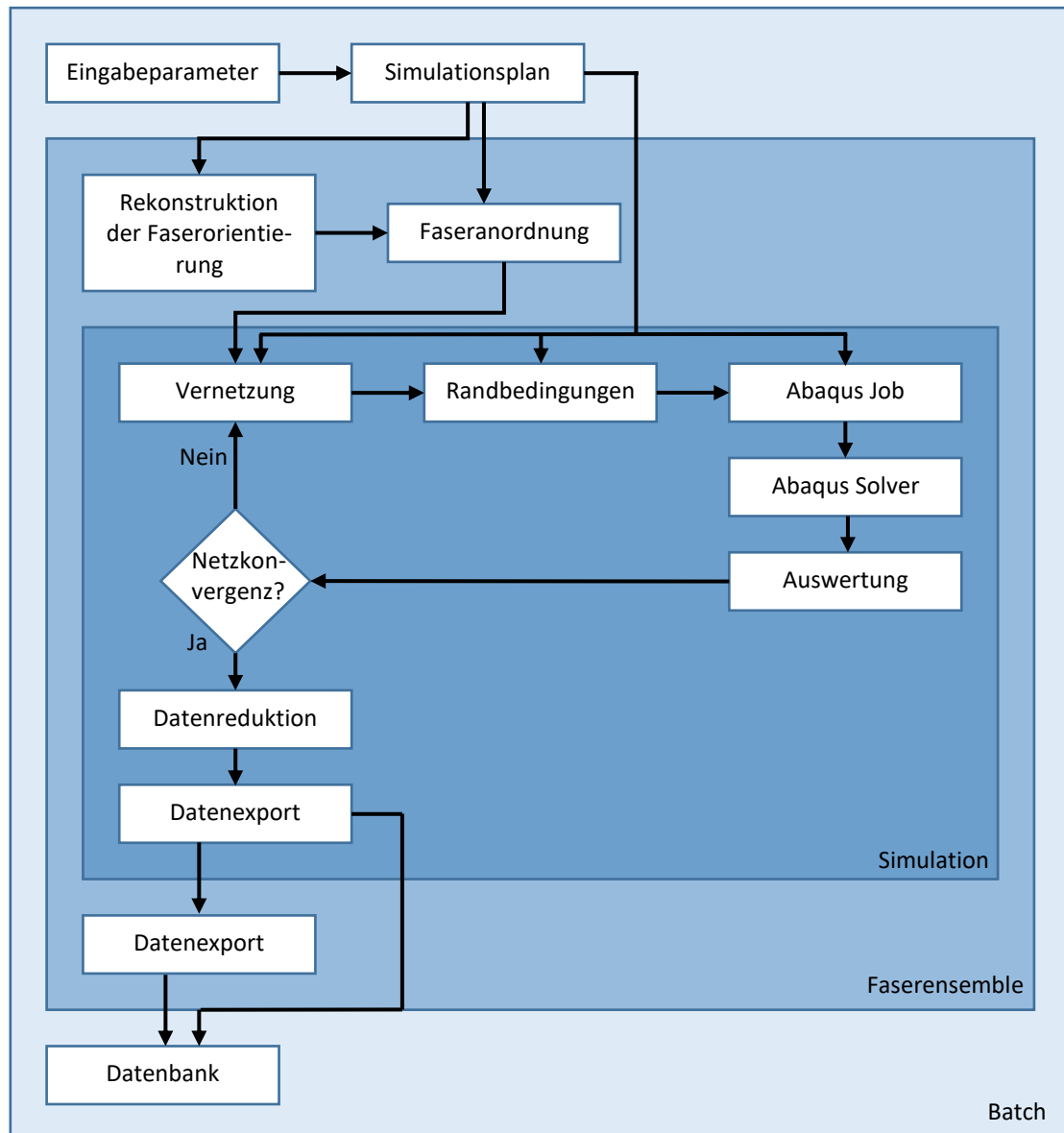


Abbildung 7-1: Struktur des Python-Skriptes zur automatischen Erstellung und Analyse von RVEs.

Die Auswertung jeder einzelnen Simulation erfolgt sowohl durch die Berechnung effektiver Zustandsgrößen als auch durch die Berechnung der Zustandsgrößenverteilung als Histogramm. Für die Klasseneinteilung der Zustandsgrößenverteilung wird die Freedman-Diaconis Regel [116] verwendet. Die eindeutige Zuweisung von Zustandsgröße zu Integrationspunkt (örtliche Auflösung) des RVEs wird zur Datenreduktion nicht gespeichert. Die Datenreduktion ist dabei für diese Arbeit aufgrund des Speicherbedarfs notwendig.

Die Berechnung einer effektiven Zustandsgröße ξ^* ist definiert durch

$$\xi^* = \frac{1}{V} \int_V \xi dV \quad (\text{Gl.7-1})$$

und wird auch als Homogenisierung bezeichnet [117]. Im Rahmen der FE-Simulationen kann das Integral ersetzt werden durch eine endliche Summe, sodass die Homogenisierung durchgeführt werden kann mittels

$$\xi^* = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{I=1}^{n_{int}} \xi^I \cdot V^I. \quad (\text{Gl.7-2})$$

Dabei ist V^I das Integrationsgewicht, das als das zugehörige Volumen eines Integrationspunktes I interpretiert werden kann. V_{RVE} ist das Gesamtvolumen des RVEs.

Für eine Zustandsgrößenverteilung wird die entsprechende Zustandsgröße, innerhalb der unterschiedlichen Phasen des RVEs getrennt, mittels Histogramm-Darstellung erfasst. Durch die Verwendung der Freedman–Diaconis Regel [116] wird sichergestellt, dass das Histogramm die Verteilung optimal repräsentiert. Unter Einbezug des Integrationsgewichts V^I und einer Normierung liefert das Histogramm die Zustandsgrößenwahrscheinlichkeit.

Für die Berechnung effektiver Compositeigenschaften werden die effektiven Zustandsgrößen in Bezug zueinander gesetzt. So zum Beispiel für den effektiven E-Modul E^* , bei dem die effektive Spannung σ^* in Bezug zur effektiven Dehnung ε^* mit

$$E_i^* = \frac{\sigma_i^*}{\varepsilon_i^*} \quad (\text{Gl.7-3})$$

ins Verhältnis gesetzt wird. Der so berechnete Wert entspricht jedoch nur dann einem Modul, wenn der Deformationszustand des RVEs so gewählt wird, dass ein einachsiger Spannungszustand vorliegt. Ein einachsiger Spannungszustand kann durch die Wahl entsprechender Randbedingungen eingestellt werden. Die genaue Definition der Randbedingungen ist in Abschnitt 7.1 aufgeführt.

Soll hingegen der vollständige effektive Steifigkeitstensor \mathbf{C}^* bestimmt werden ist eine einzelne Simulation unzureichend. Insgesamt 6 unabhängige Simulationen sind dafür notwendig, wie die Abbildung 7-2 illustriert. Weiter ist in jeder einzelnen Simulation ein einachsiger Dehnungszustand notwendig. Hierfür müssen in jeder einzelnen Simulation j die Randbedingungen entsprechend gewählt werden. Zweckmäßig ist die Definition eine vorgeschriebene effektive Dehnung $\bar{\varepsilon}_i$, welche für die notwendigen Simulationen zur Bestimmung eines vollständigen Steifigkeitstensors

$$(\bar{\varepsilon}_i)_j = \begin{cases} 1 \cdot \varepsilon_s & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases} \quad (\text{Gl.7-4})$$

entspricht. ε_s ist dabei ein Skalierungsfaktor für die Höhe der Belastung. Der Steifigkeitstensor wird anschließend durch

$$C_{ij}^* = \frac{\sigma_i^*}{(\varepsilon_j^*)_j} \quad (\text{Gl.7-5})$$

zusammengesetzt, wobei der äußere Index j die Einzelsimulation angibt.

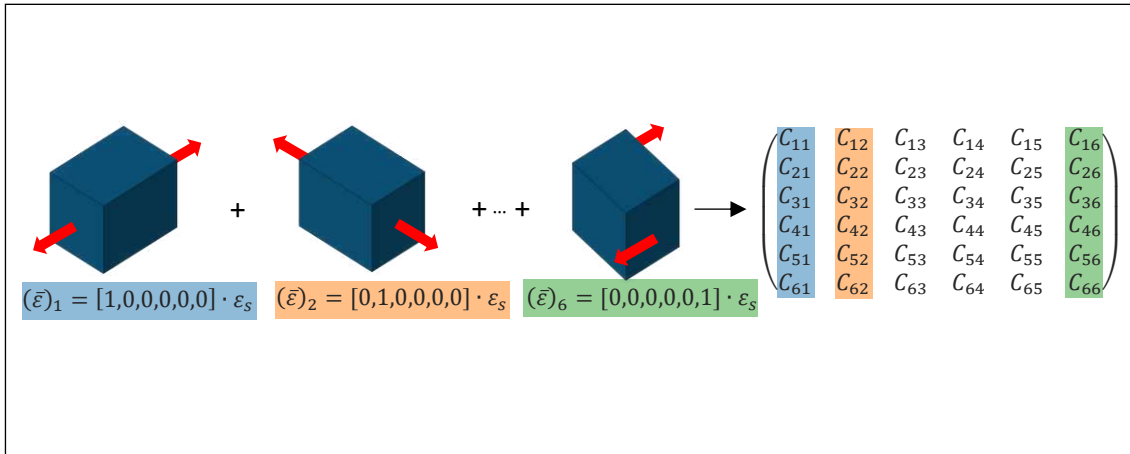


Abbildung 7-2: Benötigte Deformationen für die Berechnung des vollständigen effektiven Steifigkeitstensors.

Ebenfalls können aus den FE-Ergebnissen Konzentrationstensoren der einzelnen Phasen bestimmt werden. Der Dehnungskonzentrationstensor der Matrix wird beispielsweise über den Zusammenhang

$$B_{ij}^* = \frac{\varepsilon_i^*}{(\varepsilon_j^{M*})_j} \quad (\text{Gl.7-6})$$

berechnet. Dabei ist ε_j^{M*} die effektive Dehnung der Matrix. Ein Spannungskonzentrationstensor kann analog bestimmt werden.

Mit der Verwendung von Zufallsparametern für Faserensembles, zum Beispiel einer zufälligen Position der Fasern innerhalb des RVE-Volumens, stellt ein Faserensemble eine Stichprobe einer Batch dar. Zur statistischen Absicherung der Untersuchungen müssen daher mehrere Faserensembles verwendet werden. In dieser Arbeit wird hierfür ein Monte-Carlo Ansatz verwendet, bei dem auf der Batch-Ebene des Python-Skriptes mehrere Faserensembles erstellt werden. Die Abbildung 7-3 verdeutlicht das Prinzip der Monte-Carlo Simulation. Gezeigt sind unterschiedliche Faserensembles, die jeweils einer FE Analyse unterzogen werden und die jeweils ein eigenes Ergebnis liefern.

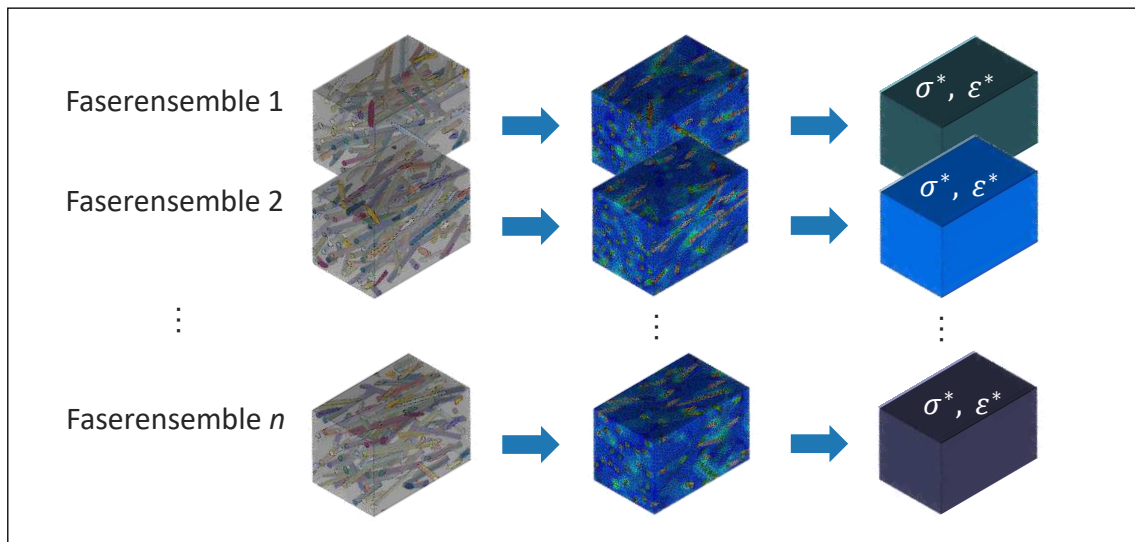


Abbildung 7-3: Monte-Carlo Ansatz auf Batch-Ebene. Jedes einzigartige Faserensemble liefert einzigartige effektive Zustandsgrößen.

Die Berechnung eines mittleren effektiven Steifigkeitstensors $\bar{\mathbf{c}}^*$ und dessen Standardabweichung $\bar{\mathbf{c}}^{std}$ erfolgt über

$$\bar{\mathbf{C}}^* = \frac{1}{\sum_i^{n_{RVE}} V_i} \sum_i^{n_{RVE}} V_i \mathbf{C}_i^* \quad (\text{Gl.7-7})$$

beziehungsweise

$$\bar{\mathbf{c}}^{std} = \sqrt{\frac{1}{\sum_i^{n_{RVE}} V_i} \sum_i^{n_{RVE}} V_i (\mathbf{C}_i - \bar{\mathbf{C}}^*)^2}. \quad (\text{Gl.7-8})$$

Hierbei ist V das Volumen eines RVEs, n_{RVE} die Anzahl der berücksichtigten RVEs und i der Index für das jeweilige RVE.

7.1 Periodische Randbedingungen

Die FE-Analyse eines RVEs hinsichtlich der Compositeigenschaften bedarf eine Aufprägung von äußeren Randbedingungen. Hierbei entstehen immer Randeffekte, da das RVE eine finite Größe besitzt. Zur Verringerung der Randeffekte sind in der Literatur verschiedene Randbedingungen untersucht worden. Für mechanische Analysen sind eine lineare Verschiebung, eine konstante Kraft oder periodische Randbedingungen bekannt. Die Abbildung 7-4 zeigt den Effekt der unterschiedlichen Randbedingungen [84]. Hierzu ist das Konvergenzverhalten eines homogenisierten, effektiven Mittelwertes der Steifigkeit in Abhängigkeit der verwendeten RVE Größe aufgezeigt. Es kann gezeigt werden, dass die periodischen Randbedingungen effektiver sind, da die RVE Größe kleiner sein kann, um einen effektiven Mittelwert zu bestimmen [80, 81]. Aus diesem Grund werden für alle RVEs in dieser Arbeit periodische Randbedingungen verwendet.

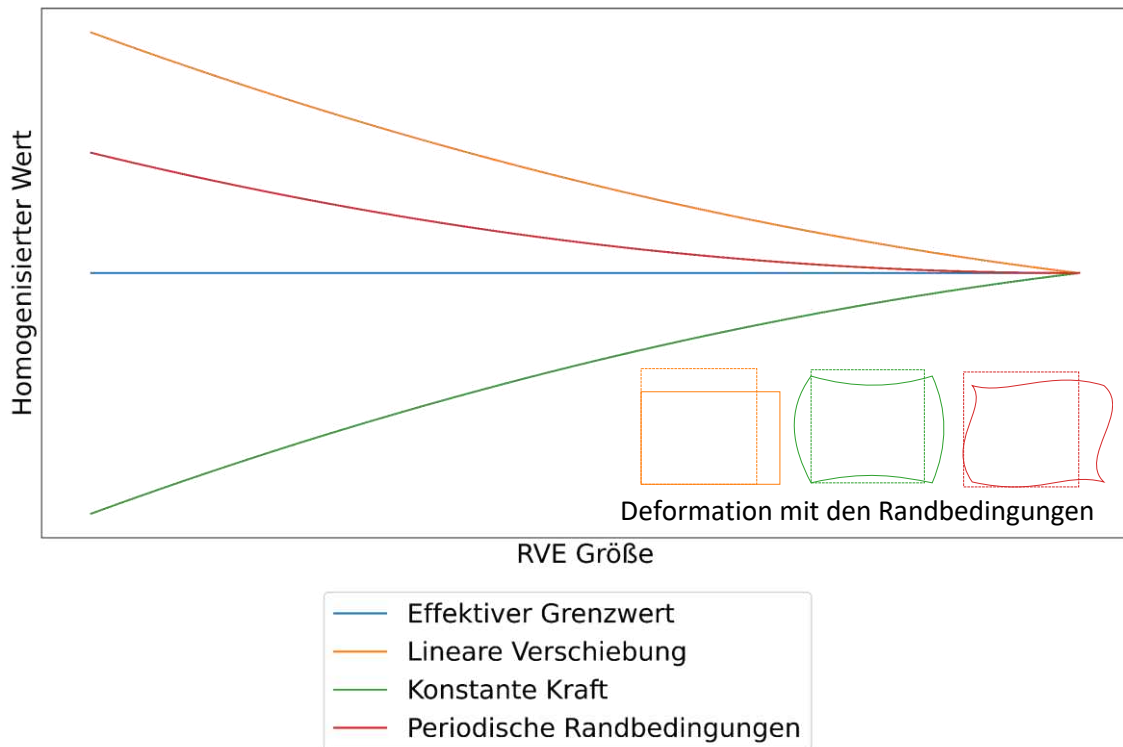


Abbildung 7-4: Effekt der RVE Größe auf das Konvergenzverhalten unterschiedlicher Randbedingungen, nach [84].

Für die Verwendung der periodischen Randbedingungen muss zunächst die Struktur periodisch sein, zumindest für vollständig (starke) periodische Randbedingungen. In der Abbildung 7-5 ist eine periodische Compositestruktur gezeigt. Bei dieser sind die Fasern so angeordnet, dass der Teil einer Faser, der über eine Grenze des RVEs hinaus ragt (B) an der gegenüberliegenden Seite wieder hereinragt (A). Ordnet man das gleiche RVE außen um das ursprüngliche RVE herum an, entsteht ein sich wiederholendes Muster.

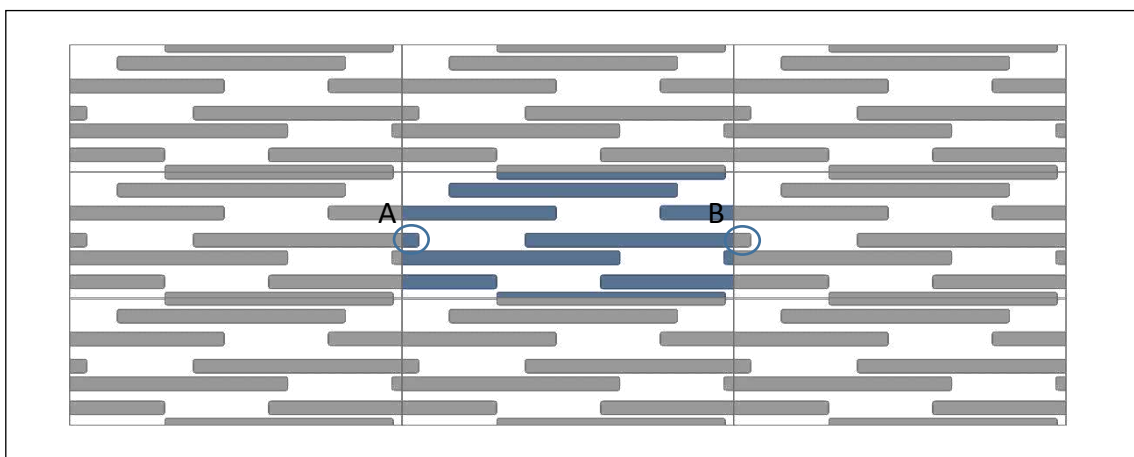


Abbildung 7-5: 2D-Illustration einer periodischen Compositestruktur.

Periodische Randbedingungen werden auf gegenüberliegenden Flächen eines RVEs definiert. Betrachtet sei ein RVE mit periodischem Netz, so lautet die mathematische Beschreibung der periodischen Randbedingung nach [118]:

$$u_i^{j+} - u_i^{j-} = \bar{\varepsilon}_{ik}(x_k^{j+} - x_k^{j-}). \quad (\text{Gl.7-9})$$

Hierbei bezeichnet u die Verschiebung eines Knotens auf den sich gegenüberliegenden Seiten j^+ und j^- in Richtung i , $\bar{\varepsilon}_{ik}$ die Dehnung des RVEs und x_k die Position. Die Implementierung der periodischen Randbedingungen mit der FE-Software Abaqus wird über die Verwendung von *linear constraint equations* vorgenommen. Dabei wird die Verschiebung $\bar{\varepsilon}_{ik}(x_k^{j+} - x_k^{j-})$ über einen Referenzpunkt u_i^{RP} umgesetzt:

$$u_i^{j+} - u_i^{j-} + u_i^{RP} = 0 \quad (\text{Gl.7-10})$$

Dieser Referenzpunkt ist dabei nicht mit dem FE-Netz des RVEs verbunden. Weiter ist die Lage des Referenzpunktes ohne Bedeutung. Um jeden beliebigen Verformungszustand $\bar{\varepsilon}$ abbilden zu können ist es notwendig die Randbedingung über mehrere Referenzpunkte zu definieren:

$$\begin{aligned} u_1^{1+} - u_1^{1-} + u_1^{RP1} &= 0 & u_2^{2+} - u_2^{2-} + u_2^{RP2} &= 0 & u_3^{3+} - u_3^{3-} + u_3^{RP4} &= 0 \\ u_2^{1+} - u_2^{1-} + u_2^{RP2} &= 0 & u_2^{2+} - u_2^{2-} + u_2^{RP1} &= 0 & u_2^{3+} - u_2^{3-} + u_2^{RP3} &= 0 \\ u_3^{1+} - u_3^{1-} + u_3^{RP4} &= 0 & u_3^{2+} - u_3^{2-} + u_3^{RP3} &= 0 & u_3^{3+} - u_3^{3-} + u_3^{RP1} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{Gl.7-11})$$

Die Abbildung 7-6 zeigt exemplarisch zwei Deformationszustände und die dazugehörige Verschiebung der Referenzpunkte.

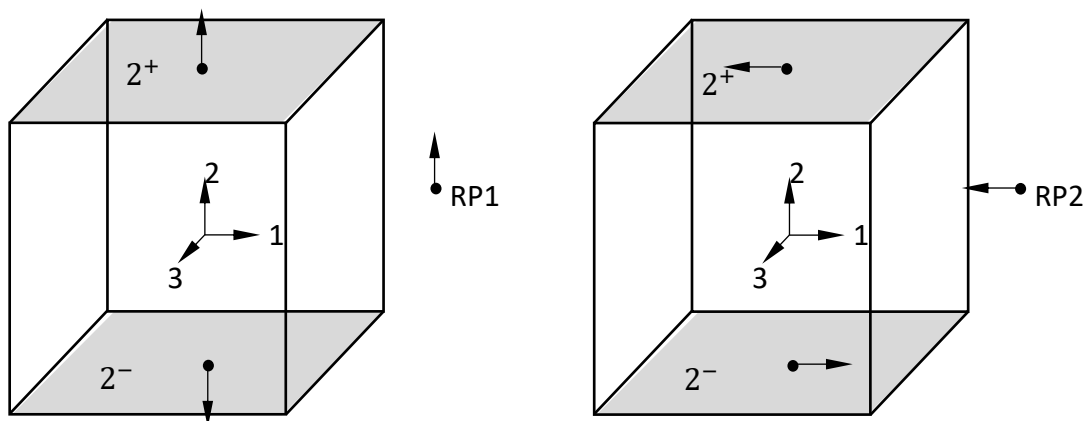


Abbildung 7-6: Aufbringung der periodischen Randbedingungen durch Referenzpunkte am Beispiel einer Zugdeformation (links) und einer Schubbelastung (rechts).

Mit der Verschiebung von Referenzpunkt $RP1$ kann eine Deformation in alle 3 Normalenrichtungen des RVEs erzeugt werden, mit den Referenzpunkten $RP2$ bis $RP4$ können Schubdeformationen erzeugt werden durch den Zusammenhang

$$\begin{aligned}
u_1^{RP1} &= dMat_{11} & u_2^{RP1} &= dMat_{12} & u_3^{RP1} &= dMat_{13} \\
u_1^{RP2} &= dMat_{21} & u_2^{RP2} &= dMat_{22} & u_3^{RP2} &= dMat_{23} \\
u_1^{RP3} &= dMat_{41} & u_2^{RP3} &= dMat_{42} & u_3^{RP3} &= dMat_{43} \\
u_1^{RP4} &= dMat_{31} & u_2^{RP4} &= dMat_{32} & u_3^{RP4} &= dMat_{33}
\end{aligned} \tag{Gl.7-12}$$

mit

$$dMat = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon}_1 & \bar{\varepsilon}_2 & \bar{\varepsilon}_3 \\ \bar{\varepsilon}_4 & \bar{\varepsilon}_4 & UNSET \\ \bar{\varepsilon}_5 & UNSET & \bar{\varepsilon}_5 \\ UNSET & \bar{\varepsilon}_6 & \bar{\varepsilon}_6 \end{pmatrix}. \tag{Gl.7-13}$$

Hierbei ist *UNSET* ein Abaqus internes Schlüsselwort, dass das Weglassen der Verschiebungsrandbedingung für den entsprechenden Referenzpunkt zur Folge hat. Weiter können durch das Setzen von *UNSET* in Einträgen von $\bar{\varepsilon}$ spannungsfreie Deformationszustände erzeugt werden. So zum Beispiel für die Durchführung eines virtuellen Zugversuchs mit

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon^S(1, UNSET, UNSET, UNSET, UNSET, UNSET). \tag{Gl.7-14}$$

Der Faktor ε^S ist für die Skalierung der gesetzten Verschiebungsrandbedingungen zuständig und wird bestimmt durch die entsprechende Katenlänge des RVEs l^{RVE} und der zu erzielenden Dehnung $\bar{\varepsilon}^*$ mit

$$\varepsilon_j^S = l_j^{RVE} * \bar{\varepsilon}_j^*. \tag{Gl.7-15}$$

Je nach verwendetem Vernetzungsalgorithmus kann es trotz periodischer Compositestruktur sein, dass das FE-Netz nicht exakt periodisch ist. Das heißt, dass Netzknoten auf einer Seite des Netzes nicht die identische Position auf der Oberfläche haben wie die Netzknoten auf der gegenüberliegenden Seite. Selbst eine unterschiedliche Anzahl von Knoten auf zwei gegenüberliegenden Seiten können vorkommen.

Abhilfe kann hier das Erstellen eines Oberflächennetzes auf einer Seite des RVEs mit anschließendem Übertragen des Netzes auf die gegenüberliegende Seite bringen [119]. Dieses Vorgehen stellt sicher, dass die Netze auf der Oberfläche exakt periodisch sind. Der Nachteil dieses Vorgehens ist, dass die erstellten Elemente der kopierten Seite gegebenenfalls stärker verzerrt sind und damit zu numerischen Ungenauigkeiten führen. Dies liegt daran, dass die Oberflächen beider Seiten zwar identisch sind, die darunterliegende Struktur jedoch nicht.

Ein anderer Ansatz ist die Verwendung von geeigneten Interpolationsansätzen bei nicht periodischen Netzen. In der Literatur werden viele solcher Ansätze diskutiert. Eine kubische Interpolation wird in [120] verwendet, allgemeine polynomiale Interpolation in [84]. Ein periodisches Gitter, das zusätzlich auf gegenüberliegenden Seiten verwendet wird, wird in [121]

vorgeschlagen. Ebenfalls werden in [122] zusätzliche Gitterpunkte erzeugt, die exakt periodisch zu Netzknoten der gegenüberliegenden Seite sind. Kubisch hermitesche Splineinterpolation wird in [123] und radiale Basisfunktion-Interpolation wird in [118] vorgestellt. Schwache periodische Randbedingungen, die auch bei nicht periodischen Geometrien verwendet werden können, werden in [124] beschrieben. Das Konzept wird in [125] für thermo-mechanisch gekoppelte Probleme erweitert. In [126] und in [127] wird ein Ansatz auf Basis der Mortar-Zerlegung vorgestellt und analysiert.

In der Numerik ist oftmals die Güte einer Interpolationsmethode von der konkreten Problemstellung abhängig, sodass es auch im Rahmen dieser Arbeit als lohnend erscheint, Interpolationsmethoden zu vergleichen. Es werden 3 Ansätze miteinander verglichen. Zunächst ein Ansatz, bei dem keine Interpolation stattfindet, sondern lediglich der nächstgelegene Knotenpunkt verwendet wird. Der zweite Ansatz besteht aus einer linearen Interpolation und der dritte Ansatz aus einer quadratischen Interpolation.

Allen Ansätzen gemein ist, dass zunächst geeignete Knotenpaare identifiziert werden müssen. Knotenpaare meint hier, dass zu jedem Knoten einer Seite (hier $j+$) des RVEs n Knoten der gegenüberliegenden Seite (hier $j-$) zugeordnet werden. Im Folgenden seien die Koordinaten eines Knotens der Seite $j+$ mit \mathbf{x} bezeichnet. Die Koordinaten der Knoten der gegenüberliegenden Seite werden mit \mathbf{x}^l bezeichnet.

Für die Zuordnung der Knotenpaare mit den ersten beiden Interpolationsansätzen werden die n Knoten verwendet, die in der Projektion die kürzeste Distanz zum Knoten \mathbf{x} haben. Für die Berechnung der Distanzen werden virtuelle Knoten mit den Koordinaten \mathbf{x}^v eingeführt, mit

$$\mathbf{x}_{j+}^v = \mathbf{x}_{j-}. \quad (\text{Gl.7-16})$$

Die Berechnung der Distanz d_I zwischen Knoten \mathbf{x}^v und den Knoten \mathbf{x}^l erfolgt durch

$$d_I = \|\mathbf{x}^l - \mathbf{x}^v\|_2. \quad (\text{Gl.7-17})$$

Die ersten beiden hier verwendeten Ansätze können verallgemeinert ausgedrückt werden durch einen reziproken Interpolationsansatz mit den Interpolationsgewichten w_I :

$$w_I = \frac{d_I}{\sum_v^n d_I}. \quad (\text{Gl.7-18})$$

Für den ersten Ansatz wird dabei $n = 1$ gesetzt, sodass keine Interpolation stattfindet. Für den Ansatz der linearen Interpolation wird $n = 3$ gesetzt, falls \mathbf{x}^v auf einer Fläche des RVEs liegt. $n = 2$ wird verwendet, wenn \mathbf{x}^v auf einer Kante liegt. In diesem Fall werden auch lediglich Knoten \mathbf{x}^l verwendet, die auf der gegenüberliegenden Seite ebenfalls auf einer Kante liegen.

Für den quadratischen Ansatz werden zur Identifizierung der Knotenpaare nicht die nächstliegenden Knoten verwendet. Stattdessen werden die Knoten verwendet, die zum Element gehören, das den virtuellen Knoten mit den Koordinaten x^v umschließt. Dabei werden nur die Knoten des Elementes verwendet, die auf der Oberfläche j - des RVEs liegen. Weiter werden die Koordinaten x^v um den Eintrag in der Dimension j reduziert auf $x^{v,red}$ und in natürlichen Dreieckskoordinaten ζ des umschließenden Elementes dargestellt durch

$$\begin{bmatrix} 1 \\ x_1^{v,red} \\ x_2^{v,red} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1^{1,red} & x_1^{2,red} & x_1^{3,red} \\ x_2^{1,red} & x_2^{2,red} & x_2^{3,red} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \end{bmatrix}. \quad (\text{Gl.7-19})$$

Mit einer quadratischen Ansatzfunktion [128] und den natürlichen Dreieckskoordinaten werden die Interpolationsgewichte mit

$$w_I = \begin{bmatrix} \zeta_1(2\zeta_1 - 1) \\ \zeta_2(2\zeta_2 - 1) \\ \zeta_3(2\zeta_3 - 1) \\ 4\zeta_1\zeta_2 \\ 4\zeta_2\zeta_3 \\ 4\zeta_1\zeta_3 \end{bmatrix} \quad (\text{Gl.7-20})$$

berechnet. Mit bekannten Interpolationsgewichten kann dann für jeden Knoten i die periodischen Randbedingungen im Allgemeinen durch

$$u_i^{j+} - \sum_{I=1}^n w_I \cdot u_i^I + u_i^{RP} = 0 \quad (\text{Gl.7-21})$$

bestimmt werden. Für die Umsetzung beliebiger Deformationszustände muss analog zum exakten periodischen Netz die Gleichung 7-21 für vier Referenzpunkte aufgeteilt werden (vgl. Gleichung 7-12 bis 7-14).

Die Abbildung 7-7 zeigt qualitativ den Effekt der vorgestellten Ansätze für periodische Randbedingungen bei nicht periodischen FE-Netzten. Dargestellt ist eine gewählte quadratische Verschiebungsfunktion auf zwei Elementen der Seite j -. Mit den drei Ansätzen wird jeweils die Verschiebungsfunktion des Elements auf der Seite $j+$ berechnet. Die Ansatzfunktion ist hierbei ebenfalls quadratisch. Keine der gezeigten Ansätze kann die ursprüngliche Verschiebungsfunktion exakt abbilden. Alle drei Ansätze erzeugen Abweichungen. Dies liegt daran, dass die quadratische Ansatzfunktion des Elements auf der Seite $j+$ eine exakte periodische Verschiebung, die auf zwei Elementen basiert, nicht abbilden kann. Dies erklärt zum Teil auch die vielen Beiträge in der Literatur zu unterschiedlichen Interpolationsmethoden. An dem Beispiel hier ist weiter zu erkennen, dass nur mit der quadratischen Interpolationsmethode die Verschiebungswerte an den Knotenpunkten identisch sind mit denen der ursprünglichen Ver-

schiebungsfunktion auf der Seite j^- . Aus diesem Grund wird die quadratische Interpolationsmethode für alle Simulationen in dieser Arbeit verwendet, außer für einen Konvergenzvergleich der Interpolationsmethoden (vgl. Abschnitt A 8).

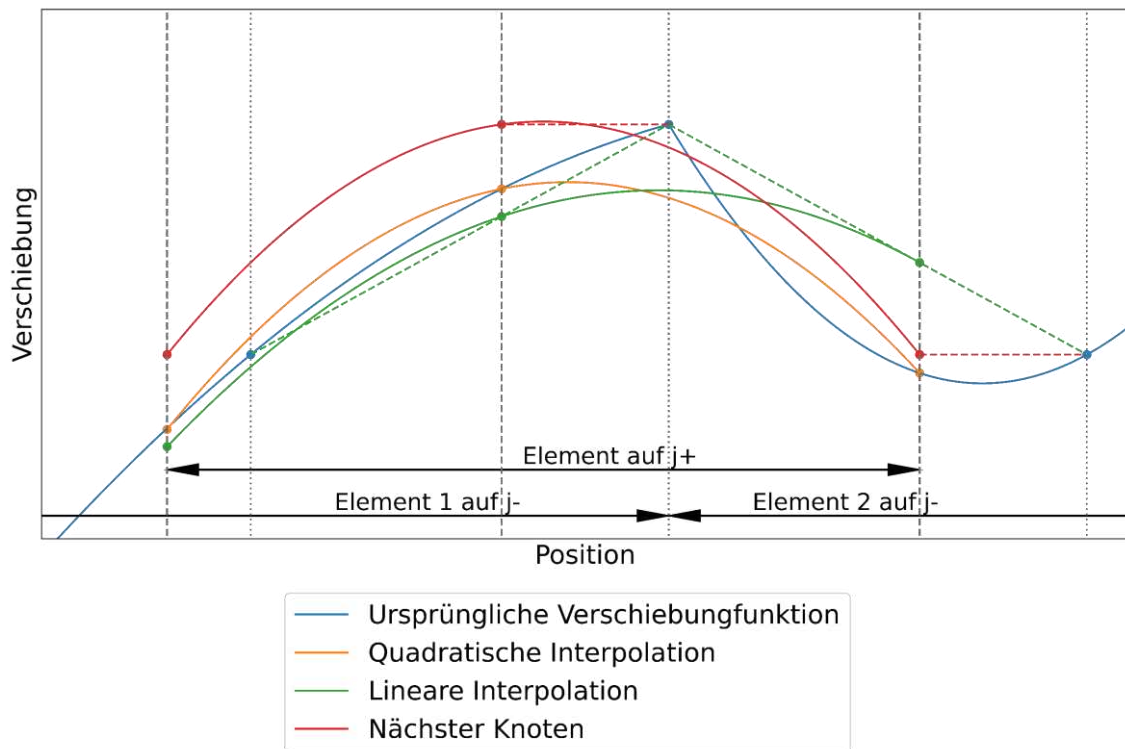


Abbildung 7-7: Vergleich der Interpolationsmethoden auf Elementebene.

7.2 Definition der RVE-Abmessungen

Die Abmessungen von RVEs sind häufig Gegenstand von wissenschaftlichen Untersuchungen [78, 82, 129–131]. In der Regel liegt der Fokus dieser Untersuchungen jedoch auf der volumetrischen Größe. Durchaus interessant ist jedoch auch die Form eines RVEs. Daher werden in dieser Arbeit zunächst zwei unterschiedliche Konzepte zur Definition der RVE-Abmessungen vorgestellt und anschließend bewertet. Beide Konzepte haben gemein, dass die Abmessungen des RVEs in Abhängigkeit des Faservolumens definiert werden. Die Alternative, dass die Fasern in Abhängigkeit gewählter RVE-Abmessungen bestimmt werden, wird in dieser Arbeit nicht betrachtet.

Das Vorgehen der beiden hier verwendeten Konzepte wird in der Abbildung 7-8 illustriert. Zu Beginn (1) wird die Anzahl der Fasern gewählt und es werden die Faserlängen beziehungsweise -durchmesser definiert. Liegt eine Faserlängenverteilung zugrunde wird für jede Faser aus der Faserlängenverteilung eine Länge gezogen (2). Das Volumen V des RVEs kann nun durch den Faservolumenanteil v_F und das gesamte Volumen aller Fasern V_F durch

$$V = \frac{V_F}{v_F} \quad (\text{Gl.7-22})$$

berechnet werden. Weiter wird analog zur Länge der Fasern für jede Faser die Ausrichtung entsprechend einer Faserorientierungsverteilung gezogen (3). Für jede Faser wird dann ein umschließendes Rechteck bestimmt. Aus den umschließenden Rechtecken und dem Volumen V werden schließlich die Abmessungen des RVEs bestimmt (4).

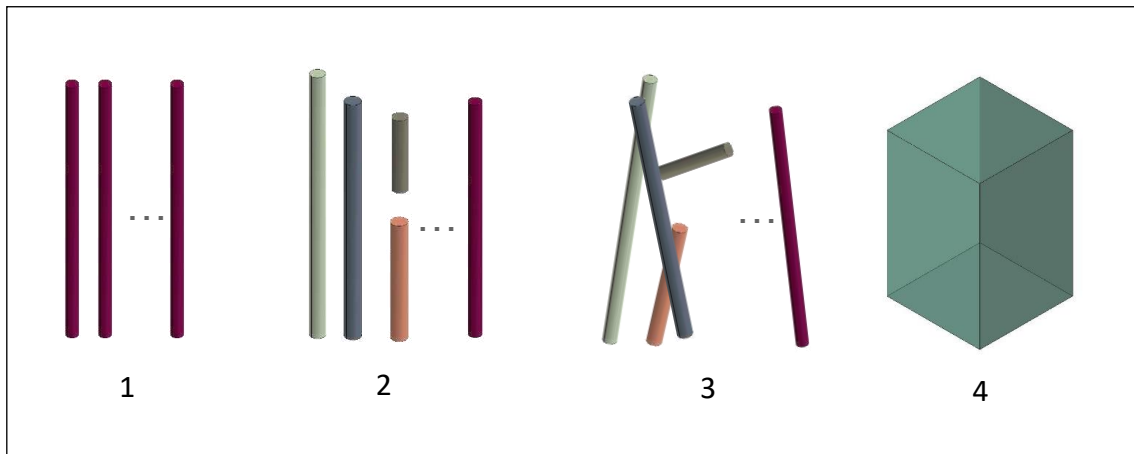


Abbildung 7-8: Vorgehen zur Bestimmung der Abmessungen des RVEs.

Die Abmessungen eines umschließenden Rechtecks sind identisch mit den maximalen Abmessungen der zugehörigen Fasern, mit der Bedingung, dass die Flächen eines umschließenden Rechtecks parallel zu den Flächen des RVEs sind. Die Abmessungen des umschließenden Rechtecks sind

$$\mathbf{X}_i = (|x_{i,max} - x_{i,min}|, |y_{i,max} - y_{i,min}|, |z_{i,max} - z_{i,min}|), \quad (\text{Gl.7-23})$$

mit x, y, z als minimale beziehungsweise maximale Koordinaten der Fasern. Aus den kapselnden Rechtecken wird ein mittleres kapselndes Rechteck mit

$$\mathbf{X}_F = \frac{\sum_{i=1}^n \mathbf{X}_i}{n} \quad (\text{Gl.7-24})$$

berechnet. Die zwei hier verwendeten Ansätze unterscheiden sich darin, wie aus einem mittleren kapselnden Rechteck die RVE Abmessungen berechnet werden. Verwendet wird zum einen eine Skalierung des mittleren kapselnden Rechtecks mit

$$\mathbf{X}_{RVE} = \mathbf{X}_F \cdot \left(\frac{V_{RVE}}{\prod \mathbf{X}_F} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (\text{Gl.7-25})$$

welche im Folgenden als konstante Skalierung bezeichnet wird, da bei dieser Skalierungsmethode das Verhältnis der Abmessungen konstant bleibt.

Zum anderen kann aus dem mittleren kapselnden Rechteck über einen konstanten Offset s die RVE Dimension bestimmt werden mit

$$\mathbf{X}_{\text{RVE}} = \mathbf{X}_F + s. \quad (\text{Gl.7-26})$$

Für den Offset s gilt die Bedingung, dass das Produkt aus den Abmessungen des RVEs gleich dem Volumen des RVEs ist:

$$\prod_{F=1}^3 (X_F + s) = \mathbf{V}_{\text{RVE}}. \quad (\text{Gl.7-27})$$

Diese kubische Gleichung kann entweder analytisch oder numerisch gelöst werden, zum Beispiel mit dem Newton-Verfahren. Von den drei möglichen mathematischen Lösungen ist nur eine physikalisch sinnvoll, also nicht komplex. Mit beiden Varianten lassen sich die RVE Dimensionen so bestimmen, dass bei vorgegebenen Fasern ein bestimmter Faservolumenanteil erzielt wird. Dennoch sind bei beiden Varianten die Dimensionen unterschiedlich. In der Abbildung 7-9 ist das Seitenverhältnis des RVEs, also $\mathbf{X}_{i,\text{max}}/\mathbf{X}_{i,\text{min}}$, für beide Varianten in Abhängigkeit der Anzahl der Fasern dargestellt. Verwendet wird hierzu eine Faserlängenverteilung nach Abbildung 4-12, einer mit der Methode der maximalen Entropie rekonstruierten ODF des Tensors $a_{ii} = [0,8 \ 0,15 \ 0,05]$ und einem Faservolumenanteil von 11,6%. Es ist zu erkennen, dass für den Spezialfall einer Faser mit beiden Varianten das Seitenverhältnis gleich ist. Mit der konstanten Skalierungsvariante bleibt das Seitenverhältnis bei allen Faseranzahlen konstant. Mit der Offset-Skalierung fällt das Seitenverhältnis ab und erreicht bei 100 Fasern einen Wert von ca. 1,3. Mit zunehmender Faseranzahl nähern sich die RVE Abmessungen einem Würfel mit konstanter Kantenlänge an. Die Offset-Skalierungsmethode bildet daher nicht nur einen Übergang von einer Einheitszelle zu einem würfelförmigen RVE, sondern sie bietet darüber hinaus weitere Vorteile.

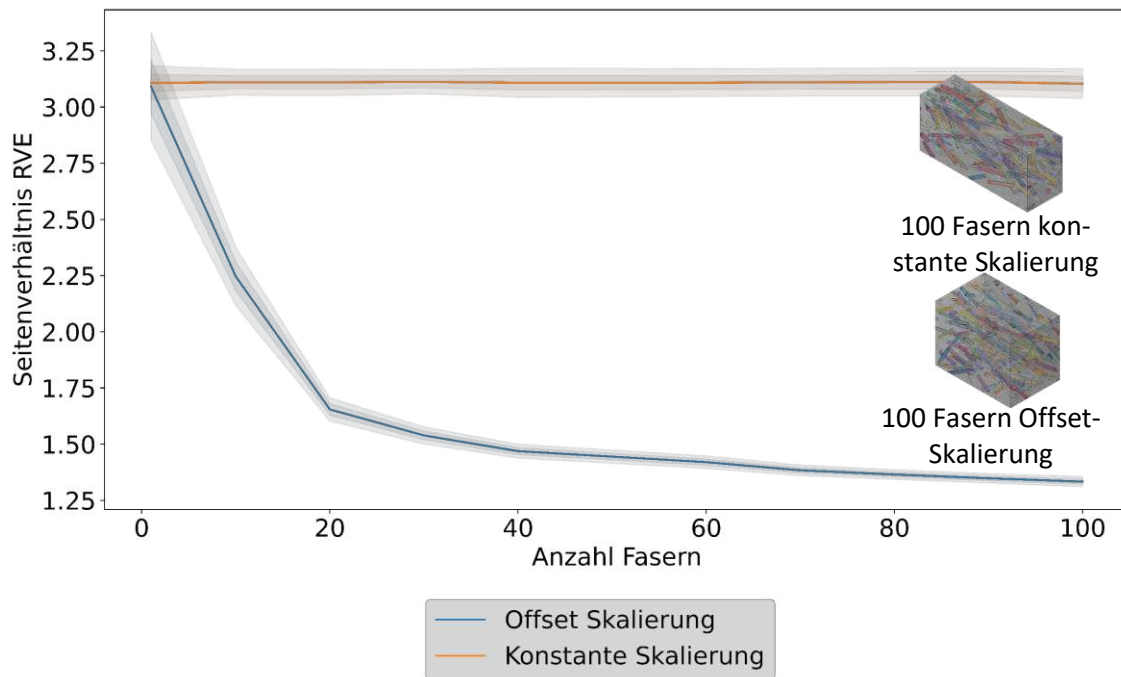


Abbildung 7-9: Seitenverhältnis der RVEs durch die Verwendung der konstanten und Offset-Skalierung für die gewählten Parameter.

Die Vorteile der Offset-Skalierungsmethode bestehen darin, dass mit steigender Anzahl an Fasern die Abmessungen des RVEs gleichmäßig zunehmen. Relativ betrachtet steigen die kurzen Kantenlängen schneller als die langen, wie in dem gezeigten Beispiel. Das wiederum hat zur Folge, dass lange Fasern auch bei geringer Faseranzahl in jeder Richtung frei platziert werden können. Dies ist insbesondere dann von Interesse, wenn Faserlängenverteilungen modelliert werden sollen. Hier kann eine Faser die vielfache Länge einer mittleren Faser haben. Entsprechend groß müssen die RVEs sein, um diese Faser in jeder Richtung platzieren zu können. Bei der Offset-Skalierungsmethode werden hierfür jedoch wesentlich weniger Fasern benötigt, um eine solche Faser in die Richtung der kürzeren Abmessung platzieren zu können als mit der konstanten Skalierungsmethode.

Gegenüber einer direkten Modellierung des RVEs als Würfel bietet die Offset-Skalierungsmethode den Vorteil, dass diese bei wenigen Fasern immer möglich ist. Würfelförmige RVEs können je nach Faserlänge und Faservolumengehalt bei wenigen Fasern geometrisch nicht möglich sein, da die Faserlänge länger als die Kantenlänge wäre. Ein weiterer Vorteil der Offset-Skalierung gegenüber Würfeln besteht in der benötigten Rechenzeit. Sind die maximalen Kantenlängen eines würfelförmigen RVEs und eines RVEs mit Offset-Skalierung identisch, so ist das gesamte Volumen des RVEs mit der Offset-Skalierungsmethode kleiner als das des würfelförmigen RVEs. Aus einem kleineren Volumen folgt eine geringere Berechnungszeit.

7.3 Fasergeometrie und Faseranbindung

In der klassischen Mikromechanik werden Fasern in der Regel als Ellipsoide approximiert. Begründet ist dies auf der Arbeit von Eshelby, die die Grundlage der klassischen Mikromechanik bildet. Reale Fasern sind jedoch von zylindrischer Gestalt. Um die Unterschiede einer ellipsoiden und einer zylindrischen Modellierung auszuarbeiten, wird hier eine Untersuchung (vgl. Abbildung 7-10) anhand einer einzelnen Faser durchgeführt. Ferner wird bei den zylindrischen Fasern unterschieden zwischen einer vollangebundenen und einer teilangebundenen Faser. Vollangebunden meint das jede Oberfläche der Fasern fest mit der Matrix verbunden ist. Teilangebunden dagegen bedeutet, dass die Mantelfläche fest verbunden ist, die Deckel der zylindrischen Faser jedoch nur Druckkräfte übertragen können. Zug- oder Scherkräfte können entsprechend nicht übertragen werden. Der Hintergrund für diese Unterscheidung liegt in der Schlichte der Fasern. Eine Glasfaser wird zur Herstellung aus einem Schmelzebad gezogen, sodass eine Endlosfaser entsteht. Auf diese Endlosfaser wird eine Schlichte aufgebracht, die als Haftvermittler zwischen Matrix und Faser dient [6]. Ohne die Schlichte ist die effektive Compositesteifigkeit, -bruchdehnung und -festigkeit geringer, aufgrund der geringeren Kraftübertragung durch Adhäsion [6, 132]. Da Kurzfasern geschnittene und gebrochene Endlosfasern sind, ist entsprechend nur Schlichte auf der Mantelfläche. Daher liegt die Annahme nahe, dass eine Kraftübertragung an den Stirnflächen der Fasern reduziert ist.

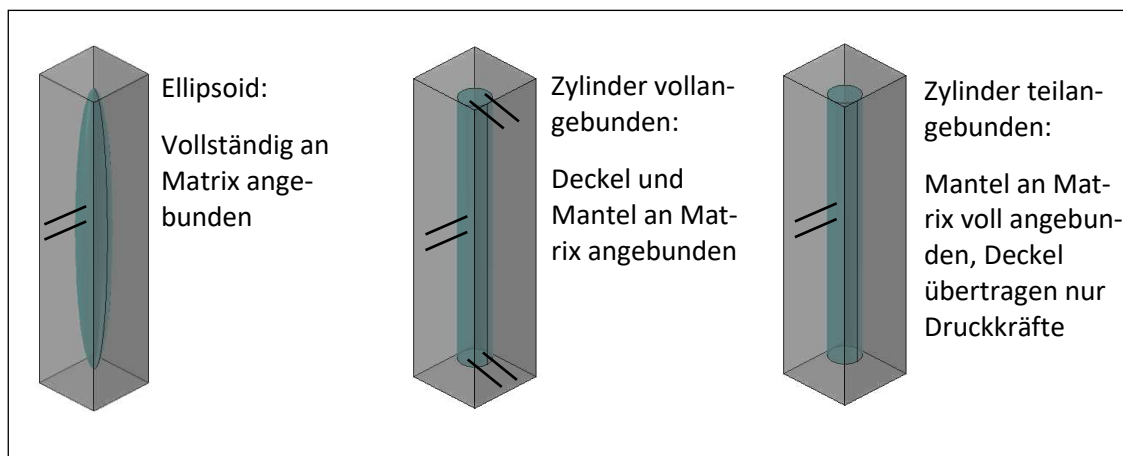


Abbildung 7-10: Untersuchte Fasergeometrien beziehungsweise untersuchte Anbindungen.

Zur Eingrenzung des Effekts einer geringeren Kraftübertragung werden hier die beiden Extremfälle untersucht. Die vollangebundenen Zylinder stellen dabei den Fall dar, dass eine Kraftübertragung über alle Flächen stattfindet. Die teilangebundenen Zylinder stellen die Annahme dar, dass lediglich die Mantelflächen über eine kraftschlüssige Verbindung verfügen.

Für die Untersuchung wird die Matrix als linear-elastisch modelliert, mit einem E-Modul von $E_M = 2000 \text{ MPa}$ und einer Querkontraktionszahl von $\nu_M = 0,42$. Die teilweise Anbindung der

Matrix an den Faserenden wird über einen *penalty*-Kontakt modelliert mit einem Steifigkeitskalierungsfaktor von 1.0.

Mit einem Aspektverhältnis von $\alpha_R = 10$ sind alle drei Varianten in der Abbildung 7-11 dargestellt. Gezeigt ist die resultierende von-Mises Spannung bei einer vorgeschriebenen Dehnung $\bar{\epsilon}_j^*$ von 1% und einem Deformationszustand mit $\epsilon^s(1, UNSET, UNSET, UNSET, UNSET, UNSET)$. In der Abbildung ist ersichtlich, dass die Spannungsverteilung der ellipsoiden Faser vollständig anders ist als in den zylindrischen Fasern. Bei der ellipsoiden Faser ist das Spannungsmaxima an den Faserenden, bei den zylindrischen Fasern in der Mitte. Weiter sind die Spannungsmaxima bei den zylindrischen Fasern größer als bei der ellipsoiden Faser. Der Unterschied zwischen den Anbindungen besteht in einem anderen maximalen Wert des Spannungsmaximums, der qualitative Verlauf ist vergleichbar. Das Spannungsfeld in der Matrix um die Fasern herum ist bei den drei Varianten ebenfalls qualitativ unterschiedlich. Deutlich sichtbar ist bei der teilangebundenen Variante die Ablösung der Matrix von der Faser.

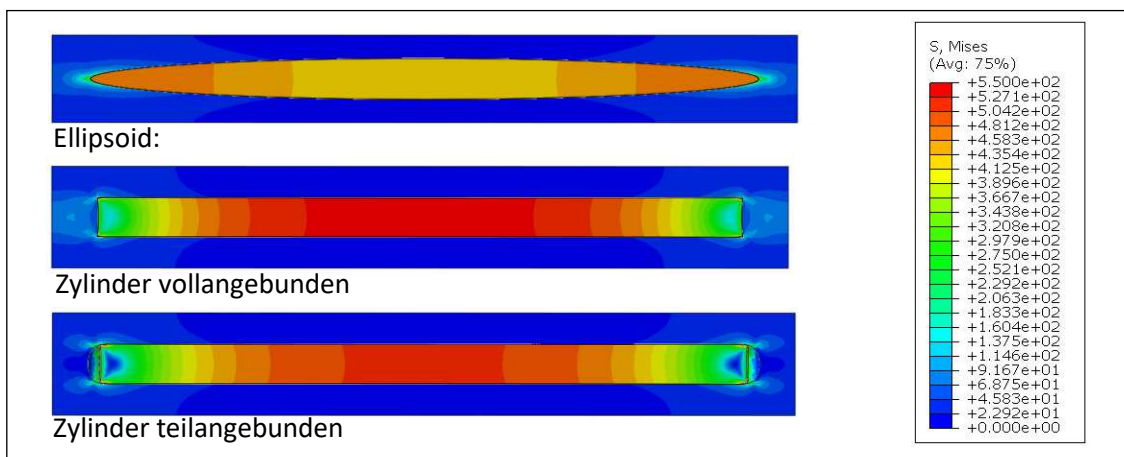


Abbildung 7-11: Von-Mises Vergleichsspannung für die drei Fasergeometrien beziehungsweise Anbindungsvarianten unter uniaxialer globaler Dehnung von 1% in Faserrichtung.

Inwieweit die effektive Steifigkeit durch die unterschiedliche Fasermodellierung beeinflusst wird, zeigt die nächste Untersuchung, deren Ergebnis in Abbildung 7-12 Teilbild a) gezeigt ist. Hier wird der effektive E-Modul in Faserrichtung in Abhängigkeit von Aspektverhältnis und E-Modul der Matrix aufgezeigt. Die vollangebundenen Zylinder liefern dabei immer das steifste Composite, gefolgt von den teilangebundenen.

Weiter wird die effektive Querkontraktionszahl ν_{32} (2-Richtung entspricht Faserrichtung) analog zur vorherigen Untersuchung im Teilbild b) dargestellt. Hier kann gezeigt werden, dass der Unterschied zwischen den Faservarianten für kleine Aspektverhältnisse ein dominierender Faktor ist. Mit Ellipsoiden werden dabei die größten Werte erreicht, gefolgt von den vollangebundenen Zylindern. Mit steigendem Aspektverhältnis wird der Unterschied kleiner, zwischen vollangebundenen und teilangebundenen Zylindern ist der Wert der Querkontraktionszahl ab einem Aspektverhältnis von 5 numerisch identisch.

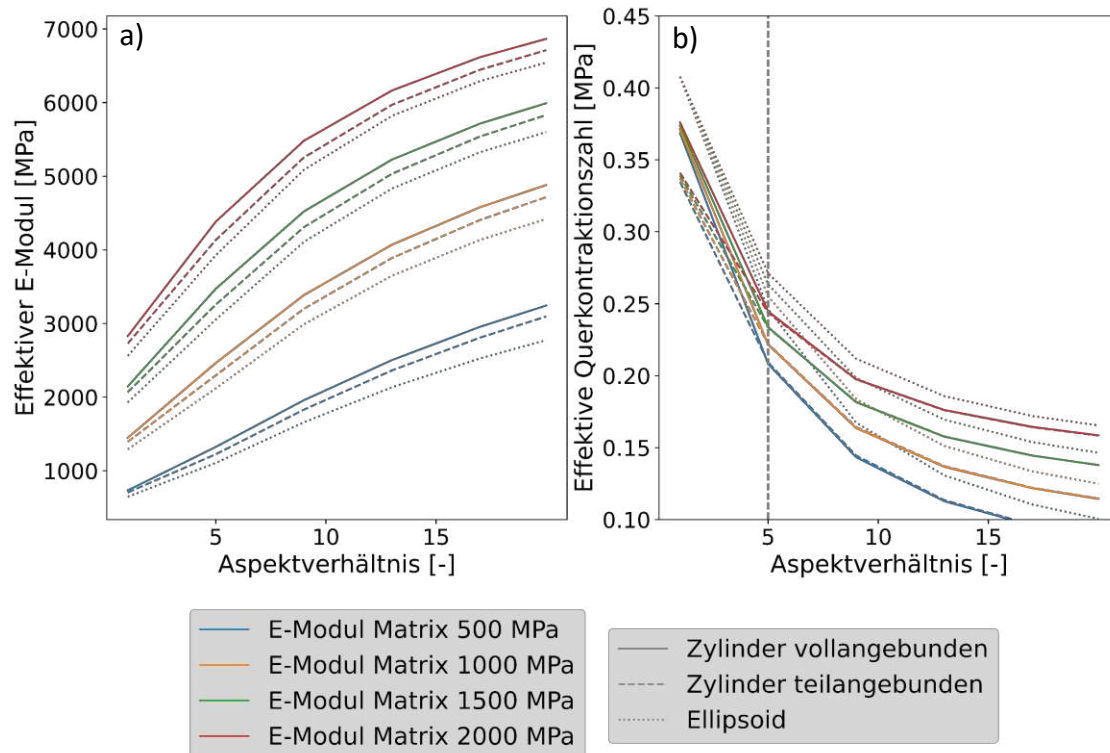


Abbildung 7-12: a) Effektiver E-Modul für die drei Fasergeometrievarianten in Abhängigkeit des Aspektverhältnisses und des E-Moduls des Matrixmaterials. b) Effektive Querkontraktionszahl (ν_{32}) für die drei Fasergeometrievarianten in Abhängigkeit des Aspektverhältnisses und des E-Moduls des Matrixmaterials.

Die durchgeführte Untersuchung zeigt, dass die Fasergeometrie und die Faseranbindungen wichtige Modellierungsparameter für kurzfaserverstärkte Composite sind. Insbesondere eine ellipsoide Fasergeometrie ist ungeeignet zur Berechnung der Spannung innerhalb der Faser, der effektive E-Modul des Composites wird im Vergleich zur zylindrischen Fasergeometrie unterschätzt. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit für die weiteren Untersuchungen immer eine zylindrische Fasergeometrie verwendet.

Vor dem Hintergrund der Annahme einer ellipsoiden Geometrie bei der Berechnung des Eshelby-Tensors im Rahmen der Methode von Mori-Tanaka wird im Weiteren geprüft, ob es ein Ersatzaspektverhältnis gibt, das für Ellipsoide verwendet werden kann, um dieselbe Steifigkeit zu berechnen wie mit einer zylindrischen Fasergeometrie.

Es ist hierzu in der Abbildung 7-13 in Teilbild a) zunächst das Verhältnis der effektiven E-Module zwischen vollangebunden, zylindrischen Fasern und ellipsoiden Fasern in Abhängigkeit von dem verwendeten Aspektverhältnis sowie des E-Moduls der Matrix dargestellt. Dabei ist bis zu einem Aspektverhältnis von 5 ein steigendes Verhältnis und ab einem Aspektverhältnis von 5 ein degressiv fallendes Verhältnis erkennbar. In Teilbild b) ist der Faktor eines virtuellen Aspektverhältnisses dargestellt. Dieses virtuelle Aspektverhältnis ist notwendig, um mit einer

ellipsoiden Fasergeometrie denselben effektiven E-Modul zu berechnen, wie mit einer vollangegebenen zylindrischen Fasergeometrie. Der Faktor f beschreibt dabei das Verhältnis von virtuellem Aspektverhältnis $(a_R)_{virt}$ zum tatsächlich vorliegenden Aspektverhältnis a_R :

$$f = \frac{(a_R)_{virt}}{a_R}. \quad (\text{Gl.7-28})$$

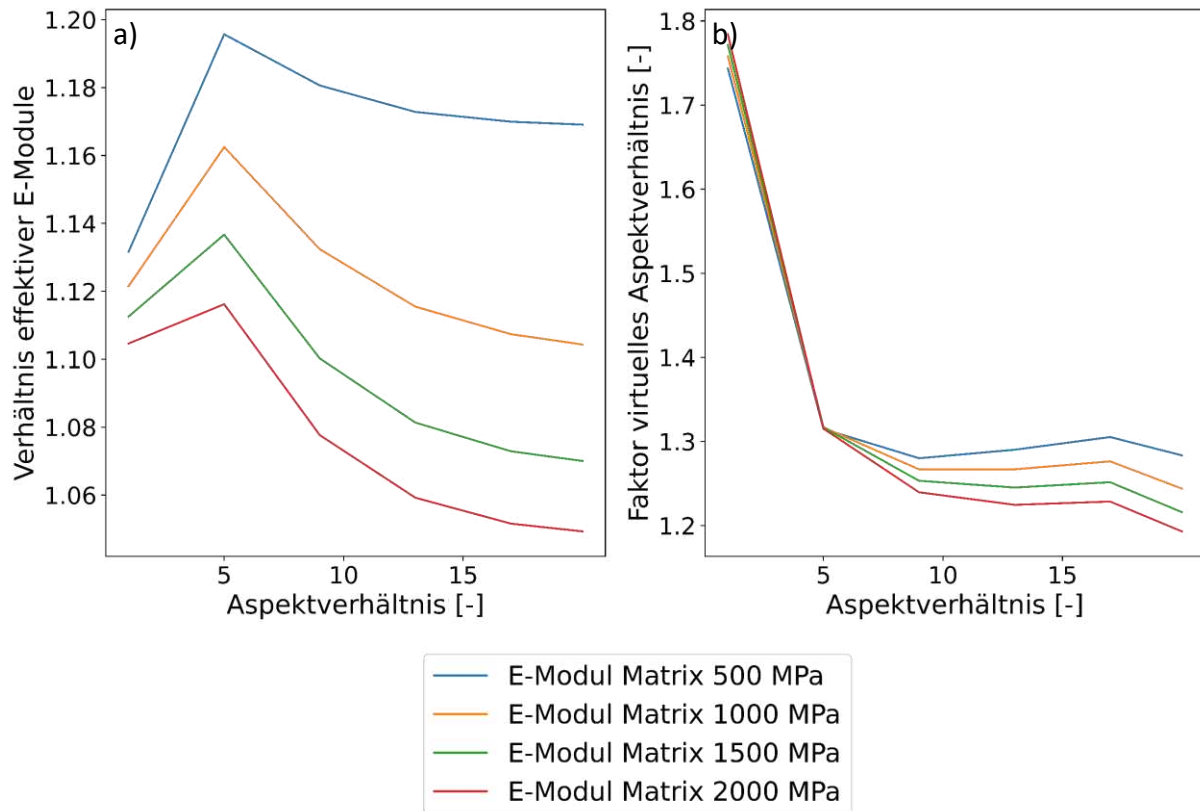


Abbildung 7-13: a) Verhältnis der effektiven E-Module mit zylindrischer (vollangegeben) und ellipsoider Fasergeometrie. b) Faktor eines virtuellen Aspektverhältnisses für eine ellipsoide Fasergeometrie zur Erzeugung gleicher effektiver E-Module wie mit zylindrischer (vollangegeben) Fasergeometrie.

8 Statistische Betrachtung des Composites

In diesem Abschnitt werden die Auswirkungen unterschiedlicher Modellannahmen und Idealisierungen der Mikrostruktur kurzfaserverstärkter Composite anhand von RVEs untersucht. Zu den Modellannahmen, die hier überprüft werden, zählt die innerhalb eines RVEs verwendete Anzahl an Fasern. Bei mehr als einer Faser und der Verwendung von Zufallswerten für Position, Länge oder Orientierung der Fasern entsteht ein einzigartiges Faserensemble. Mit der Einzigartigkeit ist gemeint, dass ein RVE mit einem einzigartigen Faserensemble einzigartige effektive Eigenschaften aufweist. Das Faserensemble entspricht dabei einer Stichprobe einer mikrostrukturellen Grundgesamtheit. Dies meint, dass die effektiven Eigenschaften eines RVEs von Faserensemble zu Faserensemble variieren können, obwohl dieselben Verteilungsfunktionen für Position, Länge und Orientierung zugrunde liegen. Aus diesem Grund muss immer eine statistische Betrachtung erfolgen. Effektive Werte unterliegen aufgrund des Stichprobencharakters der Ensembles prinzipiell einer Verteilungsfunktion.

Die hier untersuchten Modellannahmen werden sowohl hinsichtlich ihrer Auswirkung auf einen effektiven Mittelwert als auch auf die Streuung untersucht. Analysiert wird zunächst die bereits genannte Anzahl der Fasern innerhalb eines Faserensembles. Weiter wird die direkte Modellierung der Faserorientierung innerhalb eines RVEs verglichen mit einer zweistufigen Homogenisierung. Die Verwendung einer Faserlängenverteilung wird bewertet im Vergleich zur Modellierung einer einheitlichen, mittleren Faserlänge. Der Einfluss des Faservolumenanteils, sowie der Definition des betrachteten Volumens werden ebenfalls untersucht. In einer weiteren Untersuchungsreihe wird der Effekt des Phasenkontrastes, sowie der Effekt bei einer nicht-linearen Materialmodellierung der Matrix analysiert. Abschließend werden die Auswirkungen der gewonnenen Erkenntnisse der Einzeluntersuchungen auf der makroskopischen Bauteilebene diskutiert.

8.1 Faserensemble

Die Verwendung von Faserensembles statt einer Einzelfaser kann motiviert werden, durch die Betrachtung von Faserensembles zweier Fasern. Die Abbildung 8-1 zeigt den entsprechenden Aufbau mit unidirektionaler Faserorientierung. Die Faserensembles werden charakterisiert durch die Abstände Δx und Δy der Fasern zueinander.

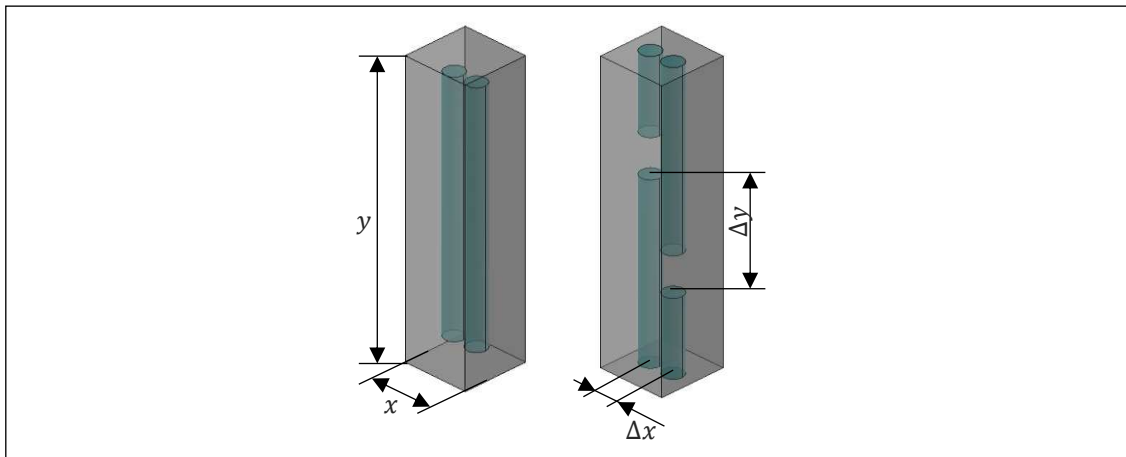


Abbildung 8-1: Faserensemble mit 2 Fasern.

Die Kombination von minimalen und maximalen Abständen ergibt 4 Grenzfälle, unter Einbezug der periodischen Randbedingungen. In der Abbildung 8-2 ist die Hauptdehnung für diese 4 Grenzfälle gezeigt, bei 0,1% uniaxialer, globaler Dehnung in Faserrichtung. Zu erkennen ist eindeutig eine unterschiedliche Belastung der Fasern und der Matrix. In den letzten beiden Fällen ist die Dehnung innerhalb der Fasern größer als in den ersten beiden Fällen. Es kommt zu einer Art „Überbrückungseffekt“, bei denen der Kraftfluss qualitativ von Faser zu Faser läuft. Dieses einfache Beispiel zeigt, dass die spezielle Faseranordnung einen erheblichen Einfluss auf die lokalen Spannungen und Dehnungen besitzen und somit auch auf effektive Compositteeigenschaften.

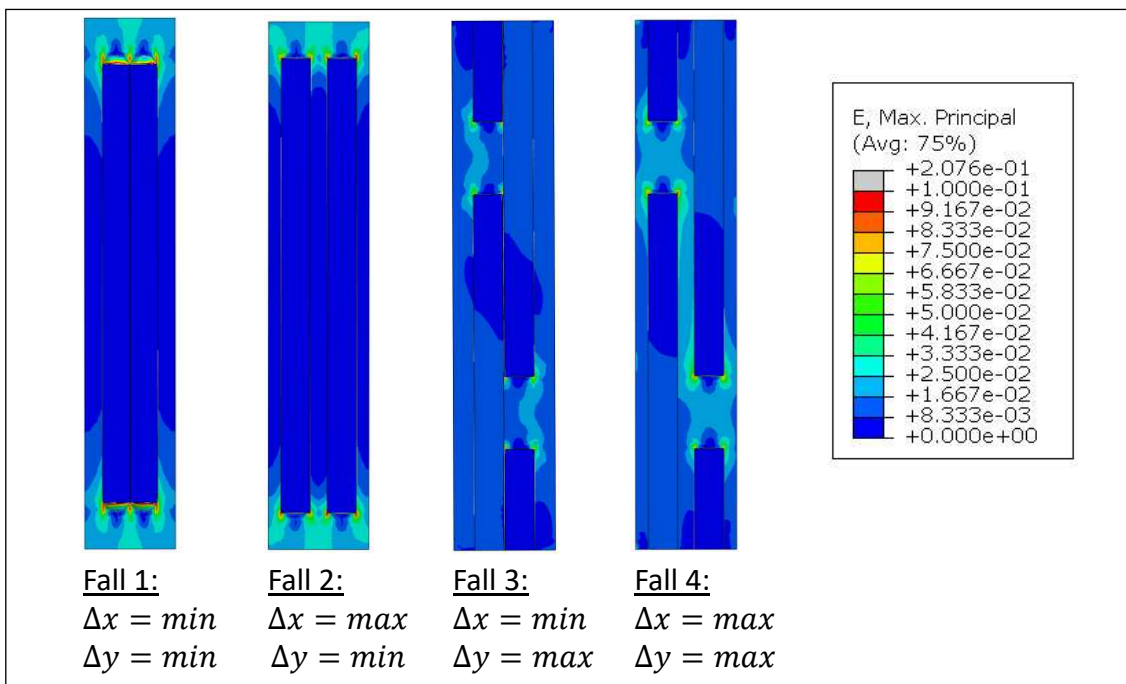


Abbildung 8-2: Hauptdehnung für die vier Grenzfälle eines Faserensembles mit 2 Fasern und unidirektionaler Faserausrichtung bei einer globalen Dehnung von 0,1%.

Inwiefern solche Extremfälle bei zufälliger Faseranordnung von sehr vielen Fasern einen Einfluss auf die effektiven Compositeeigenschaften aufweisen, wird mit der folgenden Analyse untersucht. Hierzu werden RVEs mit 1, 5, 10, 20, 50, 100 und 200 Fasern erstellt und untersucht.

Es werden jeweils mindestens 70 unterschiedliche Faserensembles je Faseranzahl betrachtet, mit Ausnahme der Einzelfaser, bei der nur ein RVE notwendig ist. Verwendet wird eine uniaxiale Faserorientierung. Die Länge der Fasern ist konstant mit 165 μm . Die Positionen der Fasern im RVE sind zufällig, wie Abbildung 8-3 illustriert. Die Matrix wird als linear-elastisch modelliert, mit einem E-Modul der Matrix von $E_M = 2000\text{MPa}$ und einer Querkontraktionszahl von $\nu_M = 0,42$. Berechnet wird der vollständige Steifigkeitstensor bei einer vorgeschriebenen Dehnung $\bar{\epsilon}_j^*$ von 0,1%. Alle weiteren Parameter für die verwendeten Faserensembles sind in der Tabelle A-5 im Anhang zusammengefasst. Die verwendeten Faserensembles stellen den Batch 1 dar.

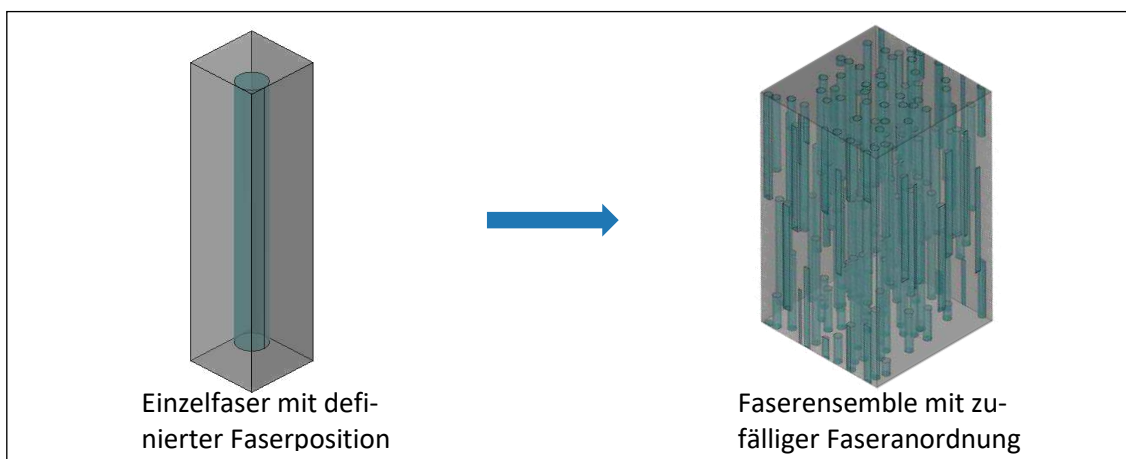
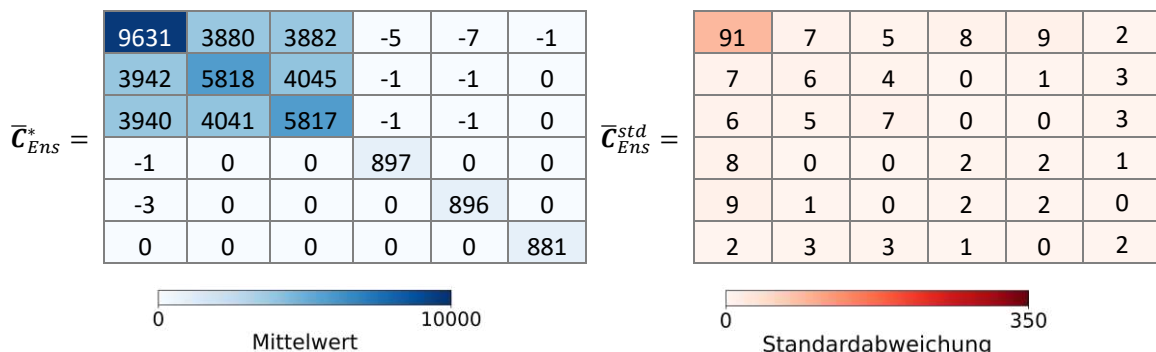


Abbildung 8-3: Vergleich von Faserensemble mit Einzelfaser.

Als Ergebnis ist zunächst der vollständige Faserorientierungstensor für 100 Fasern mit



dargestellt. Zur unterstützenden Darstellung sind die einzelnen Tensoreinträge entsprechend ihres numerischen Wertes farblich hinterlegt. Durch die unidirektionale Faserausrichtung in

der 1-Richtung ist der entsprechende Steifigkeitseintrag der größte Eintrag des Tensors. Weiter ist ersichtlich, dass der effektive Steifigkeitstensor nicht exakt transversal isotrop ist. Dies liegt darin begründet, dass ein eckiges RVE keine Rotationssymmetrie aufweist. Die Standardabweichung ist im 11-Eintrag am größten, weshalb die folgende Untersuchung anhand von \mathbf{C}_{11}^* durchgeführt wird.

\mathbf{C}_{11}^* ist in der Abbildung 8-4 in Abhängigkeit der verwendeten Faseranzahl dargestellt. Der Mittelwert fällt zunächst ausgehend von einer Faser ab und konvergiert dann in einem leicht alternierenden Muster. Dabei ist der Unterschied zwischen minimaler und maximaler Steifigkeit 2,3% groß. Eine mögliche Erklärung für die Unterschiede begründet sich dabei in der gegenseitigen Faserbeeinflussung bei mehreren Fasern. Dabei gilt, dass je mehr Fasern verwendet werden, desto mehr mögliche Faserkonstellationen können realisiert werden. Bei nur wenigen Fasern sind einige Faserkonstellationen nicht möglich, dies entspricht einer Selektion von Faserkonstellationen. Es ist dabei nicht ausgeschlossen, dass diese Selektion an Faserkonstellationen einen systematischen Fehler zur Folge hat. Ein weiterer Grund für die Unterschiede zwischen minimaler und maximaler Steifigkeit kann in dem Verhältnis von Oberfläche zu Volumen des RVEs liegen. Je mehr Fasern verwendet werden, desto kleiner ist dieses Verhältnis. Dies hat zur Folge, dass die Randeffekte, welche trotz periodischer Randbedingungen vorhanden sind, bei größeren RVEs einen geringeren Anteil am Ergebnis besitzen. Die Erkenntnis von Song et al. in [133], dass viele kleine RVEs äquivalent zu einigen großen sind, kann entsprechend hier nicht bestätigt werden.

Die Standardabweichung \bar{C}_{11}^{std} weist ein anderes Muster als der Mittelwert auf. Mit einer einzelnen Faser ist die Standardabweichung 0. Dies muss auch dann der Fall sein, wenn RVEs mit variabler Position der Faser innerhalb des RVEs verwendet werden. Dies ist bedingt durch die periodischen Randbedingungen, mit denen der virtuelle Abstand zwischen modellierter Faser und periodischer Faser (vgl. Abschnitt 7.1) immer identisch ist. Mit der nächsthöheren Anzahl an Fasern ist in der Untersuchung die Standardabweichung am größten. Mit weiter zunehmender Faseranzahl nimmt die Standardabweichung erneut ab. Dies wird dadurch erklärt, dass Anordnungen einzelner Fasern, die besonders hohe oder niedrige effektive Steifigkeiten erzeugen, beispielsweise wie in den Fällen 3 und 4 der Abbildung 8-2, bereits innerhalb des RVEs statistisch ausgemittelt werden. Ihr Einfluss schwindet mit zunehmender Faseranzahl.

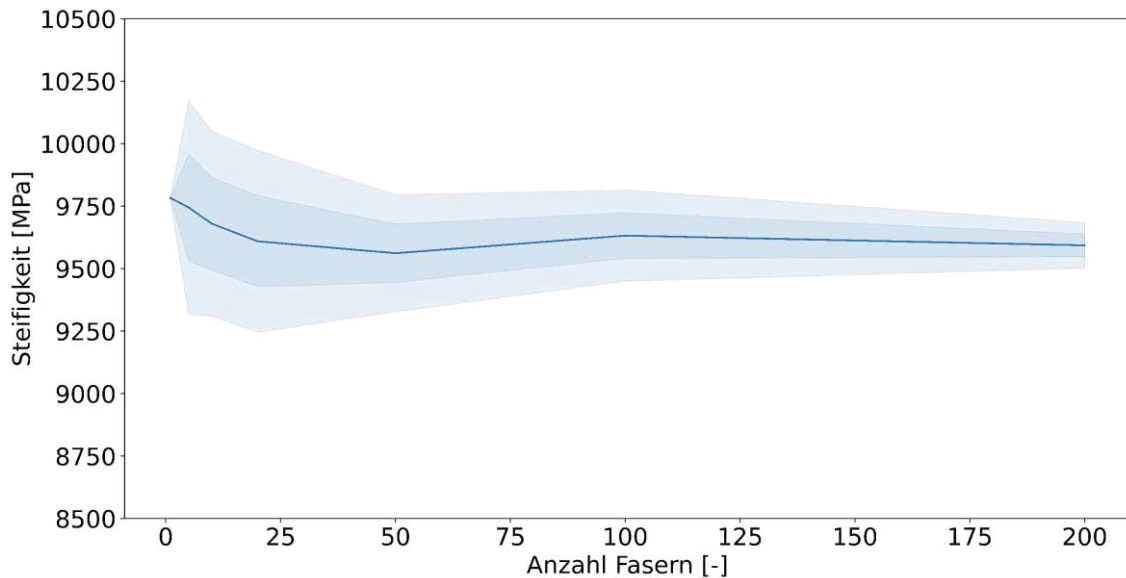


Abbildung 8-4: Effektive Steifigkeit in Faserrichtung in Abhängigkeit der Anzahl der Fasern für eine transversal isotrope Faserorientierung.

Für rein mittelwertbasierte Untersuchungen reicht daher eine einfache Konvergenzanalyse des Mittelwertes, um die notwendige Größe des RVEs zu finden anhand derer sich Aussagen zu effektiven Compositeeigenschaften treffen lassen. Sollen tiefergehende Analysen die statistische Abweichung durch die gegenseitige Faserbeeinflussung mit einbeziehen, ist die hier gewählte Darstellung jedoch unzureichend, da die Streuung mit zunehmender Anzahl an Fasern immer geringer wird. Stattdessen muss eine Darstellung gewählt werden, bei der der Effekt unterschiedlicher Faserkonstellationen sichtbar ist und nicht ausgemittelt werden kann.

Hierfür eignen sich Histogramme der durchschnittlichen Spannungsverteilung. Zunächst sei als vorgelagerte Einführung die Spannungsverteilung dreier zufällig ausgewählter RVEs mit je 20 Fasern in der Abbildung 8-5 dargestellt. Verwendet wird die Spannung in Faserrichtung der Simulation, bei der die Belastungsrichtung in Faserrichtung vorliegt. Die Spannungsverteilung ist dabei aufgeteilt für Matrix sowie Fasern und ist darüber hinaus normiert. Aufgrund dessen, dass die Matrix eine deutlich niedrigere Steifigkeit hat als die Fasern, ist die Spannungsverteilung der Matrix bei deutlich geringeren Werten als bei den Fasern. Zusätzlich zu den Verteilungen sind die Mittelwerte ebenfalls für Matrix und Fasern getrennt dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die Verteilungen und Mittelwerte der drei ausgewählten RVEs deutlich voneinander abweichen. Die Abbildung verdeutlicht damit, dass die Faseranordnung einen wesentlichen Einfluss auf die vorkommenden Spannungen hat. Darüber hinaus ist anhand der Werte für die Matrix ersichtlich, dass sich auch bei identischen Mittelwerten die zugrundeliegenden Verteilungen vollständig voneinander unterscheiden können.

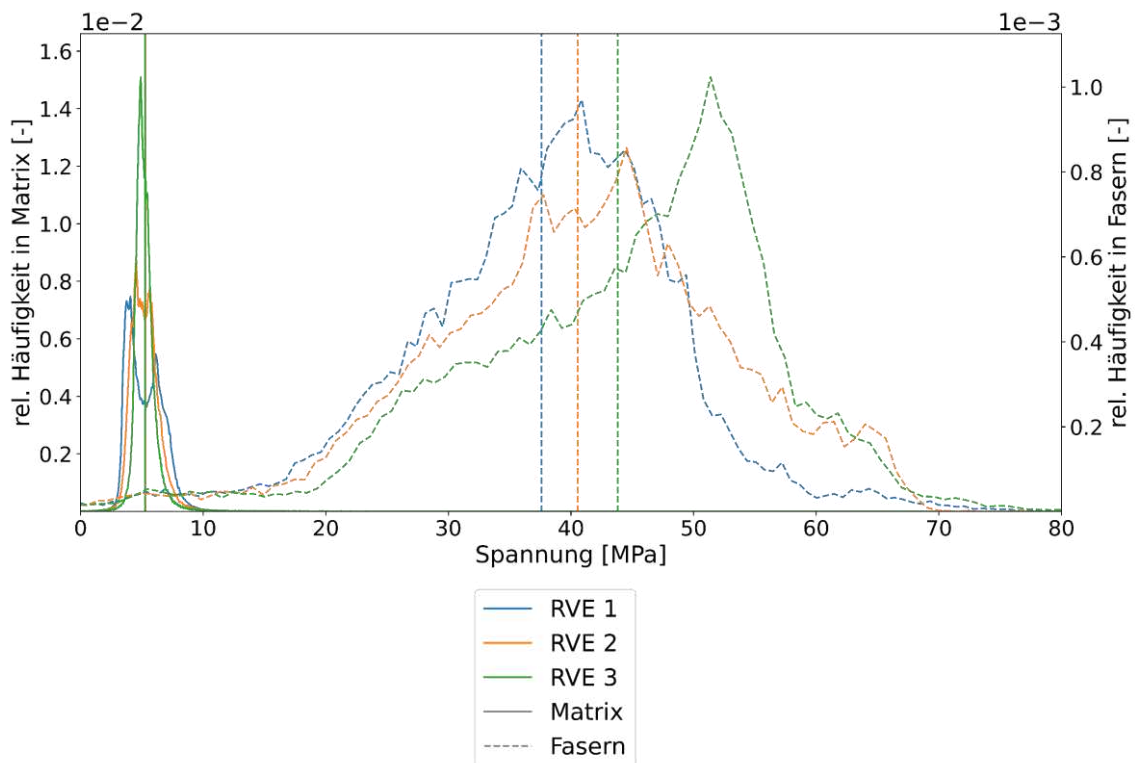


Abbildung 8-5: Spannungsverteilung in Belastungsrichtung für Matrix und Fasern innerhalb von drei zufällig ausgewählten RVEs mit je 20 Fasern als Histogramm. Die Klasseneinteilung erfolgt nach der Freedman-Diaconis Regel.

Für die statistische Analyse des Einflusses der Faseranzahl ist die Betrachtung der Spannungsverteilungen einzelner RVEs noch nicht ausreichend. Hierfür wird weiter eine durchschnittliche Spannungsverteilung aus allen RVEs berechnet, wobei für jedes RVE das totale Volumen V als Gewichtungsfaktor mit berücksichtigt wird. Die Spannungswahrscheinlichkeit $p(\sigma)$ wird entsprechend berechnet durch

$$p(\sigma) = \frac{1}{\sum_i^{n_{RVE}} V_i} \sum_i^{n_{RVE}} V_i p_i(\sigma), \quad (\text{Gl.8-1})$$

mit n_{RVE} als die Anzahl aller RVEs. Da die Klasseneinteilung der Spannungsverteilung für jedes RVE unterschiedlich sein kann, werden für die Berechnung der durchschnittlichen Spannungsverteilung die Wahrscheinlichkeiten $p_i(\sigma)$ für ein gesuchtes Spannungsintervall auf eine gemeinsame Klasseneinteilung mit 1 000 Klassen interpoliert.

In der Abbildung 8-6 ist die durchschnittliche Spannungsverteilung für die verwendeten Faseranzahlen zu sehen. Die Verteilung mit einer Faser unterscheidet sich dabei stark von den restlichen Verteilungen der Ensembles, sowohl für die Matrix als auch für die Fasern. Die Verteilungen für eine Faser sind nach unten beziehungsweise nach oben scharf begrenzt, während die Verteilungen der Ensembles auslaufen. Bei den Verteilungen der Ensembles lässt sich ein Konvergenzverhalten beobachten. Je mehr Fasern verwendet werden, desto mehr wird die

Verteilung von der Einzelfaser hin verändert zu der Verteilung mit 100 Fasern. Dies ist insbesondere in dem Spannungsintervall zwischen 30MPa und 40MPa und bei ca. 45MPa zu erkennen. Die Unterschiede zwischen den Mittelwerten sind für die verschiedenen Faseranzahlen weniger stark ausgeprägt, wie anhand der eingangs durchgeführten Konvergenzbetrachtung zu erwarten war. Für das Matrixmaterial sind die Mittelwerte dabei sogar fast identisch.

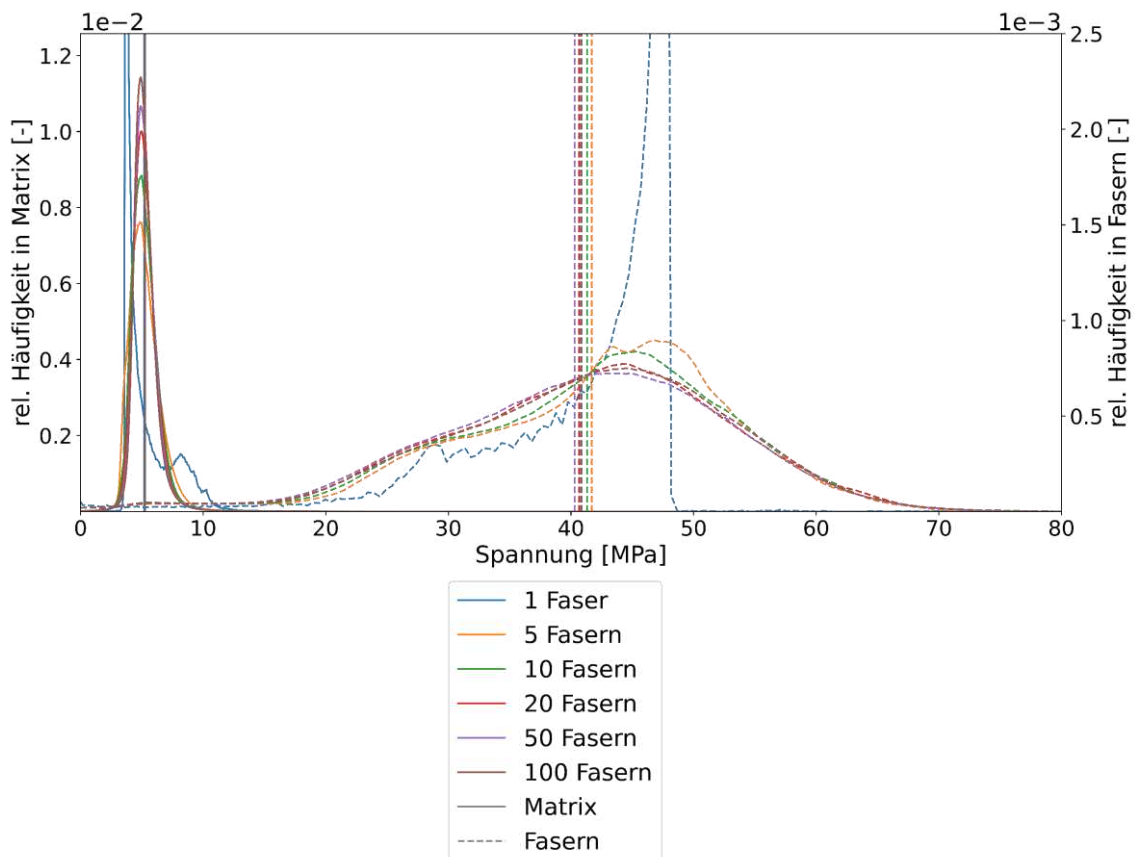


Abbildung 8-6: Durchschnittliche Spannungsverteilung in Belastungsrichtung für Matrix und Fasern in Abhängigkeit der verwendeten Faseranzahl als Histogramm mit interpolierter Klasseneinteilung.

Anhand der hier durchgeführten Untersuchung zum Einfluss der Anzahl der Fasern kann gezeigt werden, dass die Betrachtung eines effektiven Mittelwertes für die Steifigkeit nicht ausreicht, um über die Anzahl der verwendeten Fasern zu entscheiden. Zwar unterscheiden sich die Werte der effektiven Steifigkeit mit unterschiedlicher Anzahl an Fasern geringfügig, aber die Spannungsverteilung dafür erheblich. Dabei hat die gezeigte Darstellung der Spannungsverteilung den weiteren Vorteil, dass die Information über die Streuung aufgrund des Faserensembles erhalten bleibt und nicht ausgemittelt wird. Des Weiteren kann anhand dieser Darstellung besser entschieden werden, ob eine bestimmte Faseranzahl nach Hill [75] repräsentativ für das Composite ist. Informationen über die Streuung der Compositeeigenschaften, durch Zufallswerte wie die Positionen der Fasern, bleiben in dieser Darstellung erhalten.

Die Streuung aufgrund der Faserensembles wird daher in dieser Arbeit als eine intrinsische Eigenschaft des Composites aufgefasst und nicht als numerische Unsicherheit der Untersuchungsmethode zur Bestimmung eines Mittelwertes.

8.2 Faserorientierungsverteilung

In diesem Abschnitt wird die Modellierung einer Faserorientierungsverteilung innerhalb der Ensembles untersucht im Vergleich zu einer zweistufigen Homogenisierung unidirektionaler Faserensembles. Die Verwendung von unidirektionalen Faserensembles als Basis für die zweistufige Homogenisierung erlaubt dabei einen direkten Vergleich. Dies umgeht die Problematik eines Vergleichs zwischen Ensembles mit ausmodellierter Faserorientierung und einer zweistufigen Homogenisierung auf Basis des Mori-Tanaka Modells. Andernfalls würden bereits die Unterschiede zwischen den Ergebnissen von Mori-Tanaka und unidirektionalen Ensembles in die Bewertung des Unterschieds mit einfließen.

Verwendet wird für die zweistufige Homogenisierung zum einen der Voigt-Ansatz, welcher alternativ auch als Pseudo-Grain (PG) bezeichnet wird. Weiter wird auch der als Full-Mori-Tanaka (FMT) bekannte Ansatz verwendet, sodass auch die beiden viel diskutierten Ansätze miteinander verglichen und bewertet werden können.

Die Abbildung 8-10 verdeutlicht schematisch die verwendete Modellierung, mit einerseits unidirektionalen Faserensembles in Verbindung mit einer zweistufigen Homogenisierung und andererseits Faserensembles mit ausmodellierter Faserorientierung. Die zugrundeliegende ODF für die Orientierung ist für beide Modellierungen identisch. Die ODF wird mittels der Methode der maximalen Entropie aus dem Tensor \mathbf{a}_2 mit $eig(\mathbf{a}_2) = [0,8 \quad 0,15 \quad 0,05]$ rekonstruiert. Wesentlicher Unterschied zwischen den Modellierungen ist, dass bei der zweistufigen Homogenisierung im zweiten Schritt immer die vollständige ODF verwendet wird, für die Ensembles mit ausmodellierter Orientierung wird hingegen aus der ODF eine Stichprobe gezogen (vgl. Abschnitt 7).

In allen Ensembles werden jeweils 100 Fasern verwendet, die restlichen Parameter der Ensembles sind identisch zur vorherigen Untersuchung. Die Tabelle A-5 im Anhang fasst alle verwendeten Parameter für die Ensembles mit ausmodellierter Faserorientierung zusammen (Batch 2).

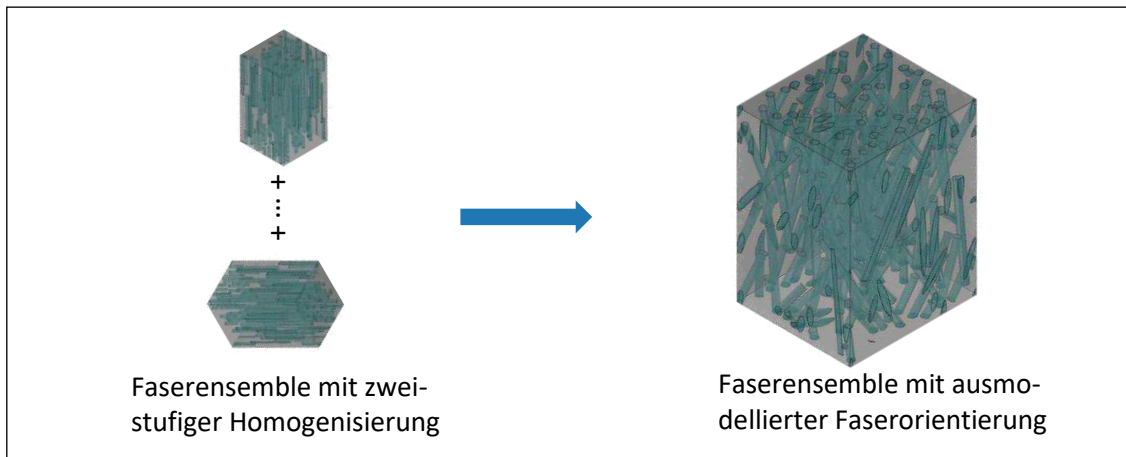


Abbildung 8-7: Verwendete Modellierungen: Zweistufige Homogenisierung unidirektionaler Ensembles, Faserensemble mit Faserorientierung einer mittleren Faserlänge und Faserensemble mit einer Faserlängenverteilung und Faserorientierung.

Analog zur vorherigen Untersuchung wird zunächst der vollständige effektive Steifigkeitstensor und dessen Standardabweichung dargestellt. Mit ausmodellierter Faserorientierungsverteilung ergeben sich:

8356	4194	4037	-30	-14	-9
4240	6003	4041	-13	-6	-6
4085	4043	5835	-9	-5	-4
-9	-1	0	1202	-4	1
-1	1	1	-4	1030	-1
-4	-3	-2	1	-1	911

 $\bar{c}_{FOV}^* =$

103	29	20	79	55	16
28	48	9	35	10	14
21	11	12	7	10	4
78	34	7	28	16	12
54	10	10	16	17	9
15	14	4	12	9	7

 $\bar{c}_{FOV}^{std} =$

und mit zweistufiger Homogenisierung mit Pseudo-Grain:

8368	4226	4050	-2	-2	0
4265	6031	4042	-1	0	0
4094	4046	5839	-1	-1	0
-1	0	0	1211	0	0
-1	0	0	0	1034	0
0	0	0	0	0	925

 $\bar{c}_{PG}^* =$

52	8	5	3	1	0
8	9	5	0	0	0
6	5	7	0	0	1
3	0	0	7	1	0
1	0	0	1	3	0
0	0	1	0	0	2

 $\bar{c}_{PG}^{std} =$

und mit dem Full-Mori-Tanaka-Ansatz:

8421	4214	4063	-2	-1	0
4256	6123	4037	0	0	0
4112	4043	5907	0	-1	0
-1	0	0	1003	0	0
-1	0	0	0	932	0
0	0	0	0	0	875

 $\bar{c}_{FMT}^* =$

55	5	2	3	1	1
5	7	2	1	0	0
2	1	4	0	1	1
3	0	0	4	0	0
2	0	0	1	2	0
0	1	1	0	0	2

 $\bar{c}_{FMT}^{std} =$

Die effektiven Steifigkeitstensoren der ausmodellierten Faserorientierung und der zweistufigen Homogenisierung mit Pseudo-Grain Ansatz sind, mit nur geringen Unterschieden sehr

ähnlich. Im Eintrag \bar{C}_{11}^* beträgt der Unterschied 0,1%. Der effektive Steifigkeitstensor mit Full-Mori-Tanaka Ansatz weist hingegen in den Normalenrichtungen höhere Einträge auf und in den Schubeinträgen niedrigere. Entsprechend kann daraus gefolgert werden, dass die Verwendung des Pseudo-Grain Ansatzes genauere Ergebnisse liefert als die Verwendung des Full-Mori-Tanaka Ansatzes. Dabei sind die hier gefundenen Unterschiede zwischen Full-Mori-Tanaka und Pseudo-Grain identisch zu den in [73] dargestellten Unterschieden zwischen beiden Methoden.

Weiter sei hier die effektive Standardabweichung betrachtet. Diese ist mit ausmodellierter Faserorientierung deutlich ausgeprägter als mit beiden zweistufigen Homogenisierungsansätzen. Der Unterschied zwischen Full-Mori-Tanaka- und Pseudo-Grain Ansatz ist dabei zu vernachlässigen. Der Unterschied zwischen ausmodellierter Faserorientierung und zweistufiger Homogenisierung ist dabei im 11-Eintrag am stärksten ausgeprägt. In der Abbildung 8-8 ist daher zur weiteren Analyse die Steifigkeitsverteilung für diesen Eintrag als Histogramm dargestellt. Die drei Verteilungen können mit einer Normalverteilung gut angenähert werden, welche ebenfalls mit dargestellt ist. Es ist ersichtlich, dass der Pseudo-Grain Ansatz und die ausmodellierten Faserorientierungsverteilungen nahezu denselben Erwartungswert aufweisen, wie bereits anhand der Tensoren festgestellt. Entsprechend der Standardabweichung ist die Verteilung mit ausmodellierter Faserorientierungsverteilung breiter als mit zweistufiger Homogenisierung.

Diese breitere Verteilung ist zurückzuführen auf den Stichprobencharakter der Ausmodellierung der Faserorientierungsverteilung. Jedes Ensemble ist aufgrund der endlichen Anzahl an Fasern eine Stichprobe, wie in Abschnitt 8.1 erläutert. Zu der Zufallsvariable der Faserposition kommt bei der ausmodellierten Faserorientierungsverteilung die Zufallsvariable der Orientierung hinzu. Entsprechend ist die Standardabweichung hier größer.

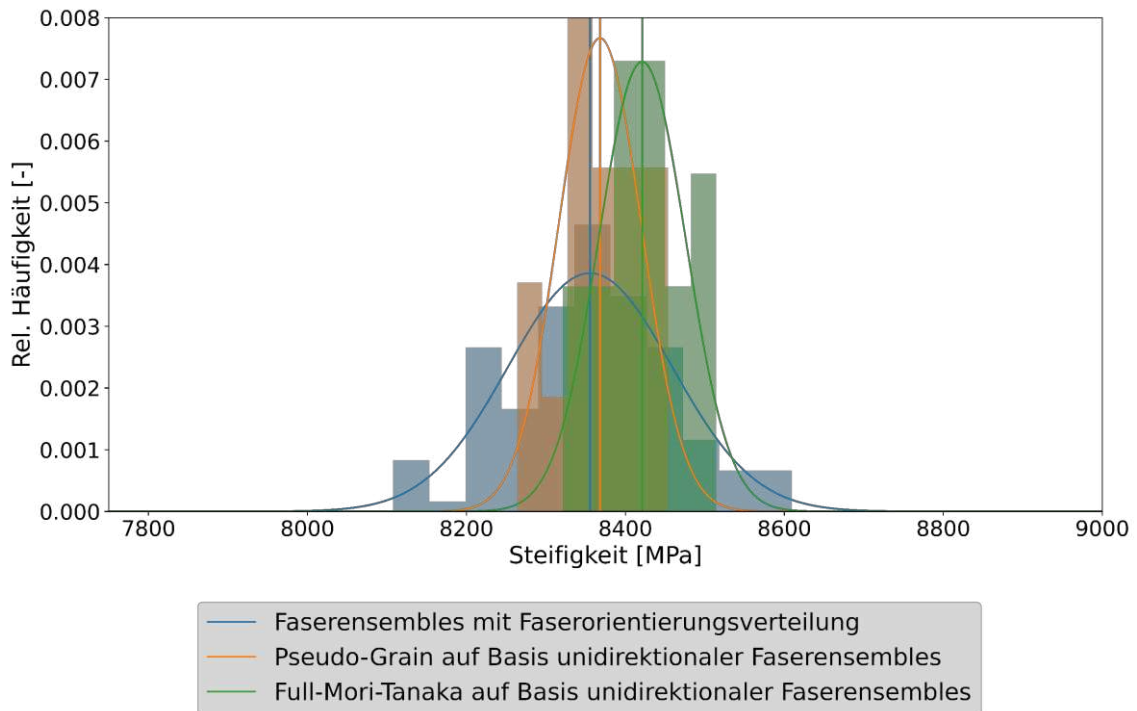


Abbildung 8-8: Histogramm der effektiven Steifigkeit C_{11} für die Faserensembles mit Faserlängenverteilung sowie die effektive Steifigkeit nach zweistufiger Homogenisierung.

Zur Verdeutlichung des Stichprobencharakters der Faserorientierung mit endlicher Anzahl an Fasern ist die Abbildung 8-9 dargestellt. Gezeigt ist die ursprüngliche ODF, die die Grundlage der hier modellierten Faserorientierung darstellt. Aus dieser ODF sind Realisierungen verschieden großer Stichproben auf der Einheitskugel dargestellt. Des Weiteren ist der zweistufige Faserorientierungstensor, beziehungsweise dessen Eigenwerte, für jede der Realisierungen angegeben. Qualitativ wird deutlich, dass mit 100 Fasern die Ensembles hier aufgrund der modellierten Faserorientierungsverteilung signifikant mehr streuen müssen als mit zweistufiger Homogenisierung. Dieses Kriterium kann lose mit dem Faserorientierungstensor belegt werden. Für wenig Fasern ist ein Unterschied zum ursprünglichen Faserorientierungstensor gegeben, welcher dann mit zunehmender Anzahl an Fasern geringer wird.

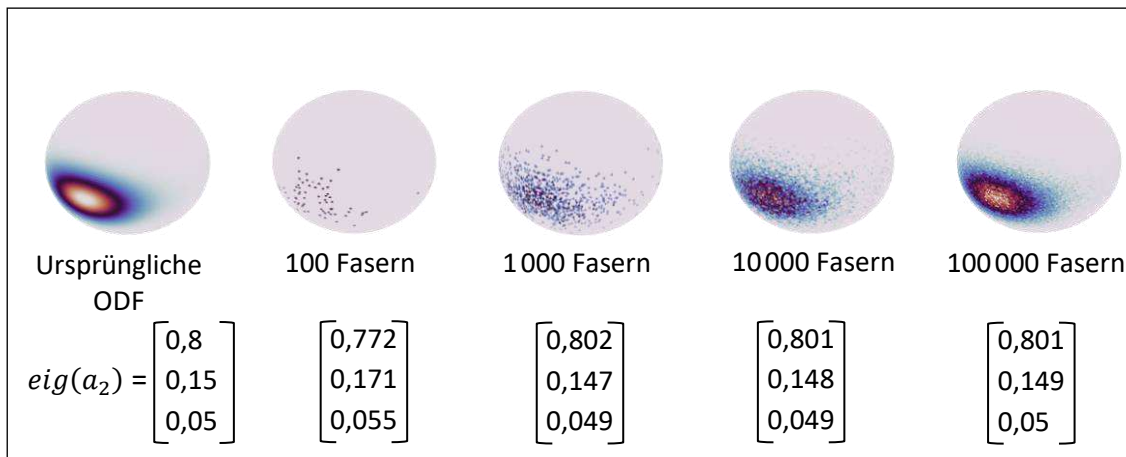


Abbildung 8-9: Darstellung der ursprünglichen ODF und daraus zufällig gezogenen Fasern als Speckledarstellung auf der Einheitskugel. Zusätzlich sind die Eigenwerte der jeweiligen Realisierungen angegeben.

Aus den Ergebnissen dieser Untersuchung wird geschlossen, dass Faserensembles mit ausmodellierter Faserorientierungsverteilung und zweistufiger Homogenisierung einen identischen Mittelwert der effektiven Compositeigenschaften liefern, sofern der Pseudo-Grain Ansatz gewählt wird. Ist entsprechend nur der Mittelwert von Interesse, so kann durch eine zweistufige Homogenisierung dieser rechengünstig, im Vergleich zur ausmodellierten Variante, berechnet werden. Soll jedoch die Streuung mitberechnet werden, so ist eine Faserorientierungsverteilung innerhalb der Ensembles notwendig, da diese eine weitere Zufallsvariable darstellt.

Dieses Ergebnis hat außerdem eine Auswirkung auf die Aussagen zum Einfluss der Rekonstruktion auf die effektive Compositeigenschaft in Abschnitt 6. Die dort gemachten Aussagen, dass mittels der Methode der maximalen Entropie die genauere Berechnung der effektiven Steifigkeit möglich ist, kann hier erweitert werden. Durch die hohe Übereinstimmung zwischen zweistufiger Homogenisierung und ausmodellierten Ensembles kann zunächst angenommen werden, dass das Ergebnis aus Abschnitt 6 gleich wäre, wenn statt zweistufiger Homogenisierung ausmodellerte Faserensembles verwendet worden wären. Unterschiedlich wäre hingegen die Streuung der effektiven Steifigkeit. Die ODF hat dabei maßgeblich einen Einfluss auf die Streuung, entsprechend hat auch die Rekonstruktion der ODF einen. Eine Wiederholung der Untersuchung aus Abschnitt 6 mit ausmodellierten Faserensembles ist aktuell aufgrund der verfügbaren Rechenleistung jedoch nicht umsetzbar. Trotzdem kann mithilfe der Kullback-Leibler-Distanz auch die Überlegenheit der Methode der maximalen Entropie in Bezug auf die Streuung der Compositeigenschaften argumentiert werden. Grundannahme ist, dass mit einer geringeren Kullback-Leibler-Distanz die Streuung genauer berechnet werden kann, da die zugrundeliegenden ODFs ähnlicher sind. Aus dieser Grundannahme folgt, dass mit der Methode der maximalen Entropie nicht nur der Mittelwert der effektiven Steifigkeit genauer bestimmt werden kann, sondern auch die Streuung.

8.3 Faserlängenverteilung

Der nächste Untersuchungspunkt ist der der Modellierung einer Faserlängenverteilung. Die Fragestellung hier ist, inwieweit die effektiven Compositeigenschaften durch eine ausmodellerte Faserlängenverteilung innerhalb der Ensembles unterschiedlich sind zu einer einheitlichen, mittleren Faserlänge. Aus den Ergebnissen der vorherigen Untersuchung des Einflusses der Faserorientierungsverteilung (vgl. Abschnitt 8.2) kann spekulativ erwartet werden, dass die Streuung der effektiven Compositeigenschaften mit Berücksichtigung der Faserlänge als eine weitere Zufallsvariable steigt. Besonders interessant bei dieser Untersuchung ist welchen Einfluss die Wahl des Mittelwertes der Faserlängenverteilung (vgl. Abschnitt 4.3) hat. Alle 3 vorgestellten Mittelwerte, der Anzahlmittelwert, Längenmittelwert und der Wurzelmittelwert, werden zur Ausarbeitung des Einflusses in einem jeweiligen Batch verwendet. Das Anzahlmittel ist in Batch 2, das Längenmittel in Batch 3 und das Wurzelmittel in Batch 4 umgesetzt. Batch 5 verwendet die ausmodellerte Faserlängenverteilung. Die Tabelle A-5 im Anhang fasst die verwendeten Parameter zusammen.

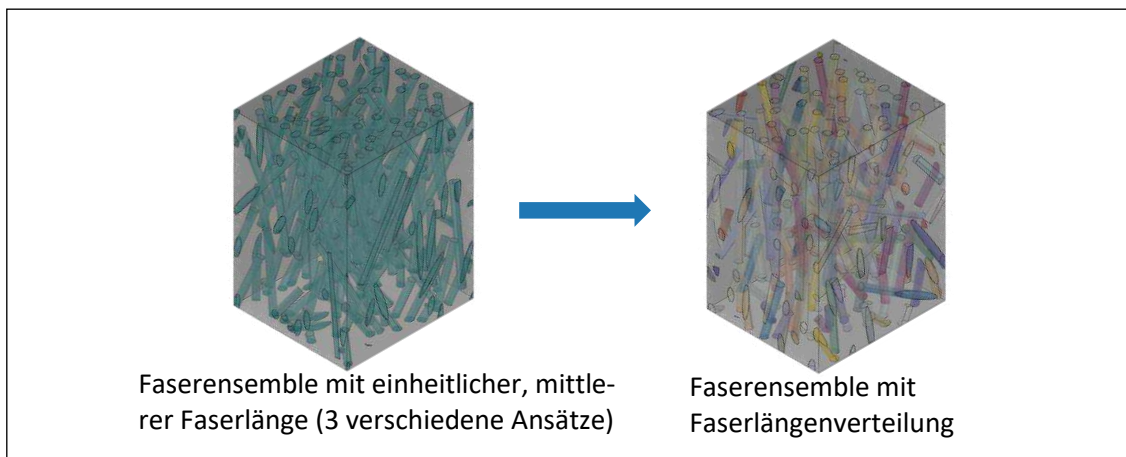


Abbildung 8-10: Verwendete Modellierungen: Faserensemble mit einheitlicher, mittlerer Faserlänge im Vergleich zu Faserensemble mit Faserlängenverteilung.

Für die Ensembles mit Faserlängenverteilung wird der mittlere effektive Steifigkeitstensor \bar{c}^* und dessen Standardabweichung \bar{c}^{std} :

$\bar{c}_{FLV}^* =$	8639	4223	4046	-23	-26	-11	$\bar{c}_{FLV}^{std} =$	160	46	29	127	83	25
	4266	6030	4041	-19	-8	-8		44	74	13	58	16	21
	4088	4042	5838	-8	-7	-5		31	15	19	10	14	8
	-5	-8	0	1239	-8	-3		126	57	10	44	25	18
	-14	-2	-2	-8	1045	0		83	16	13	25	27	13
	-7	-5	-2	-3	0	914		25	21	8	18	13	12

mit dem Anzahlmittelwert:

\bar{c}_{LN}^*	8356	4194	4037	-30	-14	-9
	4240	6003	4041	-13	-6	-6
	4085	4043	5835	-9	-5	-4
	-9	-1	0	1202	-4	1
	-1	1	1	-4	1030	-1
	-4	-3	-2	1	-1	911

\bar{c}_N^{std}	103	29	20	79	55	16
	28	48	9	35	10	14
	21	11	12	7	10	4
	78	34	7	28	16	12
	54	10	10	16	17	9
	15	14	4	12	9	7

mit dem Wurzellängenmittelwert:

\bar{c}_{LW}^*	8619	4240	4058	-25	-24	-5
	4277	6034	4049	-11	-5	-2
	4094	4050	5843	-8	-6	-1
	-7	0	0	1249	-2	0
	-12	1	-1	-2	1047	-1
	-1	0	1	0	-1	914

\bar{c}_W^{std}	118	34	21	89	56	20
	34	54	12	41	10	16
	23	14	15	7	10	7
	88	40	7	33	21	11
	56	10	9	21	19	9
	20	16	6	11	9	8

und mit dem Längenmittelwert:

\bar{c}_{LL}^*	8847	4273	4083	-19	5	-1
	4301	6081	4062	-4	-4	-1
	4110	4061	5856	-6	-4	-1
	-4	4	0	1274	3	1
	15	0	1	3	1063	0
	2	1	1	1	0	919

\bar{c}_L^{std}	135	36	20	79	73	19
	35	64	10	42	11	19
	21	11	13	8	14	7
	78	42	8	37	20	13
	72	11	13	20	20	10
	19	19	7	13	10	10

berechnet. Bei Betrachtung der Steifigkeitstensoren \bar{c}^* fällt zunächst auf, dass der größte Unterschied in der 11-Richtung zu finden ist. Daher sollen im Folgenden zunächst die Werte in 11-Richtung genauer untersucht werden. Weiter wird hierzu ein Histogramm verwendet, welches in Abbildung 8-11 dargestellt ist. Basierend auf den Mittelwerten und den Standardabweichungen ist eine Normalverteilung jedem Histogramm zugeordnet.

Anhand der Verteilungen ist zu erkennen, dass die drei unterschiedlichen Mittelwerte der Faserlänge jeweils zu unterschiedlichen Mittelwerten der effektiven Steifigkeit führen. Je größer der Mittelwert der Faserlänge, desto größer der Mittelwert der effektiven Steifigkeit. Weiter gilt, dass der Mittelwert der Faserlänge nur einen untergeordneten Einfluss auf die Streuung der effektiven Steifigkeit hat. Bei einer ausmodellierten Faserlängenverteilung ist der Mittelwert der effektiven Steifigkeit in etwa identisch zur Variante mit Wurzelmittelwert. Die Streuung ist, wie eingangs erwartet, größer als mit einheitlicher Faserlänge.

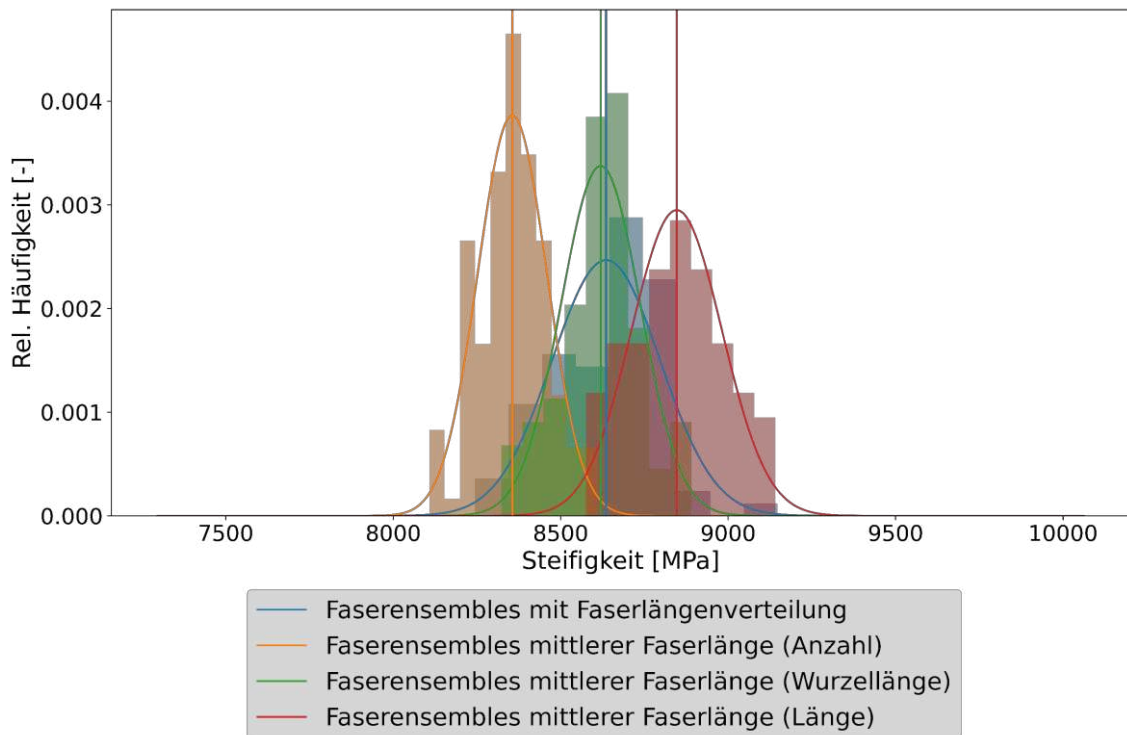


Abbildung 8-11: Histogramm der effektiven Steifigkeit C_{11} für die Faserensembles mit mittlerer Faserlänge und Faserlängenverteilung sowie die effektive Steifigkeit nach zweistufiger Homogenisierung.

Die Unterschiede zwischen den Mittelwertbildungen der Faserlänge und den ausmodellierten Faserlängenverteilungen werden weiter in Abbildung 8-12 analysiert, welche die durchschnittliche Spannungsverteilung in 1-Richtung darstellt. Interessant sind hier insbesondere die Spannungswahrscheinlichkeiten der Fasern. Es ist dabei zu erkennen, dass mit der Verwendung der Faserlängenverteilung die Spannungswahrscheinlichkeit am breitesten ist, gefolgt von den Verteilungen mit einheitlicher Faserlänge in absteigender Reihenfolge: Länge, Wurzellänge und Anzahl. Die Mittelwerte der Spannungsverteilung der Fasern sind bei der Wurzellänge und bei der ausmodellierten Faserlängenverteilung identisch.

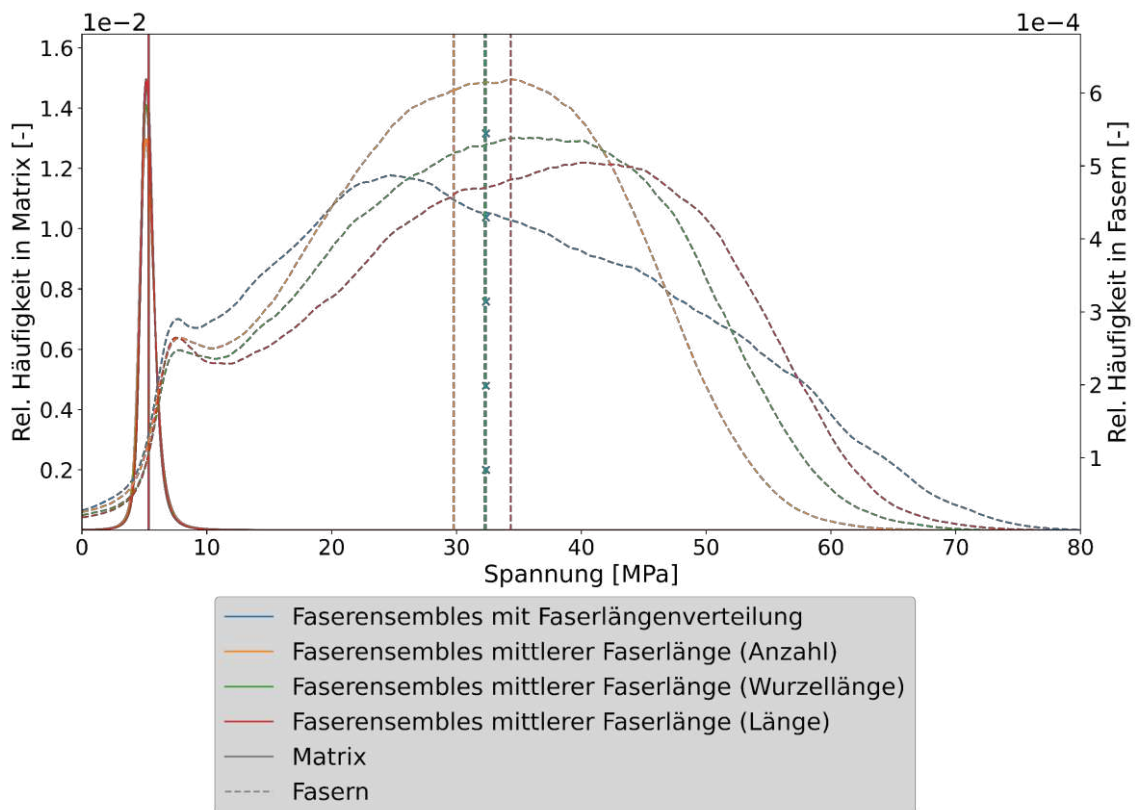


Abbildung 8-12: Durchschnittliche Spannungsverteilung in 1-Richtung für Matrix und Fasern für die drei Modellierungsvarianten als Histogramm mit interpolierter Klasseneinteilung.

Aus der Untersuchung kann geschlussfolgert werden, dass eine Längenmodellierung mit einer Verteilungsfunktion einen erheblichen Einfluss auf die Lage und die Streuung der effektiven Eigenschaften hat. Die Lage kann dabei mit einer einheitlichen Faserlänge in gleicher Höhe bestimmt werden, wenn die Mittelwertbildung der Faserlänge mit dem Wurzelmittel durchgeführt wird. Die Streuung ist jedoch nur in Verbindung mit einer ausmodellierten Faserlängenverteilung zu bestimmen. Die gezogene Schlussfolgerung ist damit analog zu der Untersuchung über die Faserorientierung. Die Wahl des richtigen Mittelwerts des Modellierungsparameters erlaubt die Berechnung des gleichen Mittelwerts der effektiven Compositesteifigkeit. Die Streuung ergibt sich nur bei verwendeter Modellierung der Verteilung.

8.4 Einfluss des betrachteten Volumens der Finite-Elemente Modelle

Wie bereits gezeigt hat die Verwendung von Zufallsparametern, wie die Faserposition, Länge und Orientierung, einen Einfluss auf die Streuung der effektiven Compositeigenschaften. In diesem Abschnitt soll dies ebenfalls für den Faservolumenanteil überprüft werden. Motiviert wird diese Untersuchung anhand von Abbildung 8-13. Zu sehen ist ein Composite, für das Ausschnitte definiert werden. Diese Ausschnitte werden nach zwei unterschiedlichen Methoden definiert. Zum einen über eine konstante Größe des Ausschnittes und zum anderen über einen konstanten Faservolumengehalt. Für die Einhaltung des konstanten Faservolumengehaltes

muss dabei die Größe des Ausschnittes an die Fasern angepasst werden, die mit ausgeschnitten werden. Dies entspricht dem bisherigen Vorgehen zur Modellierung der RVEs (vgl. Abschnitt 7.2). Die Methode der konstanten Größe entspricht hingegen eher der Ziehung einer Stichprobe aus dem Composite und wird daher als Statistisches Volumen Element (SVE) bezeichnet.

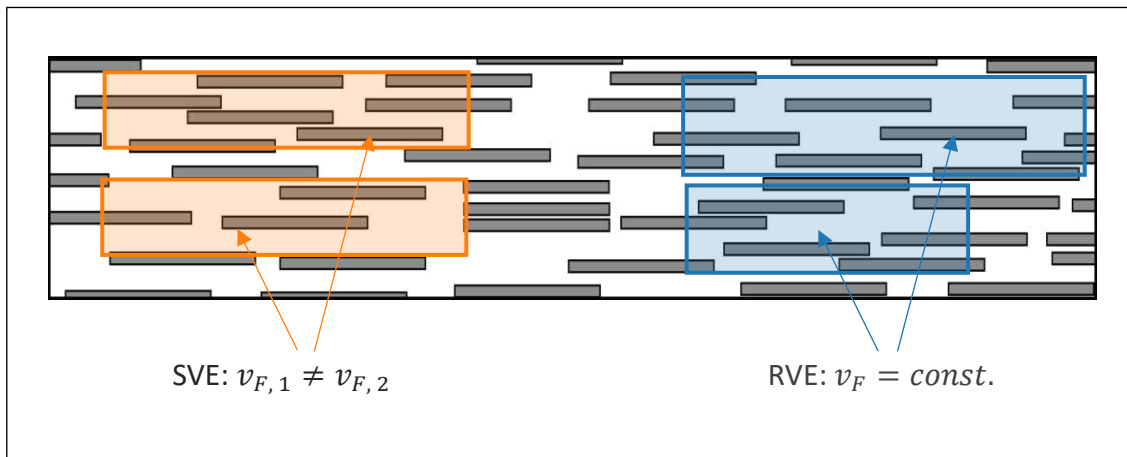


Abbildung 8-13: Modellbildung mit Statistischen und Repräsentativen Volumen Elementen.

Zur Erarbeitung des Unterschieds beider Modellierungsvarianten werden die RVEs aus Batch 5 (vgl. Abschnitt 8.2) mit Faserlängenverteilung und Faserorientierung verglichen mit neu erstellten SVEs (Batch 6) mit gleichen Parametern, die in Tabelle A-5 aufgelistet sind.

Für die Erstellung der SVEs wird die Volumendefinition aus Abschnitt 7.2 angepasst. Es werden für die Berechnung der Abmaße 3 000 Fasern verwendet, von denen dann anschließend 100 im Volumen platziert werden. Durch die hohe Anzahl der verwendeten Fasern zur Berechnung der Abmaße sind diese für alle erstellten Faserensembles konstant.

Der mittlere effektive Steifigkeitstensor \bar{c}^* und dessen Standardabweichung \bar{c}^{std} für die SVEs ergeben sich zu

$\bar{c}_{SVE}^* =$	8647	4236	4047	-13	-10	-5
	4277	6040	4046	-14	-6	-2
	4088	4047	5844	-9	-7	-1
	5	-3	-1	1250	-1	-1
	2	-1	-2	-1	1044	-1
	-1	1	1	-1	-1	917

$\bar{c}_{SVE}^{std} =$	252	51	33	117	84	28
	51	82	21	50	17	22
	35	22	40	10	15	10
	117	50	10	49	30	19
	84	17	15	30	29	12
	28	22	9	19	12	15

In der Abbildung 8-14 ist der C_{11} Eintrag für die Ensembles beider Varianten als Histogramm dargestellt. Es ist ersichtlich, dass der Mittelwert identisch ist für SVEs und RVEs, die Streuung aber beim SVE Ansatz größer ist. Dies liegt darin begründet, dass der Faservolumenanteil für jedes Ensemble unterschiedlich sein kann, im Mittel jedoch dem der RVEs entspricht.

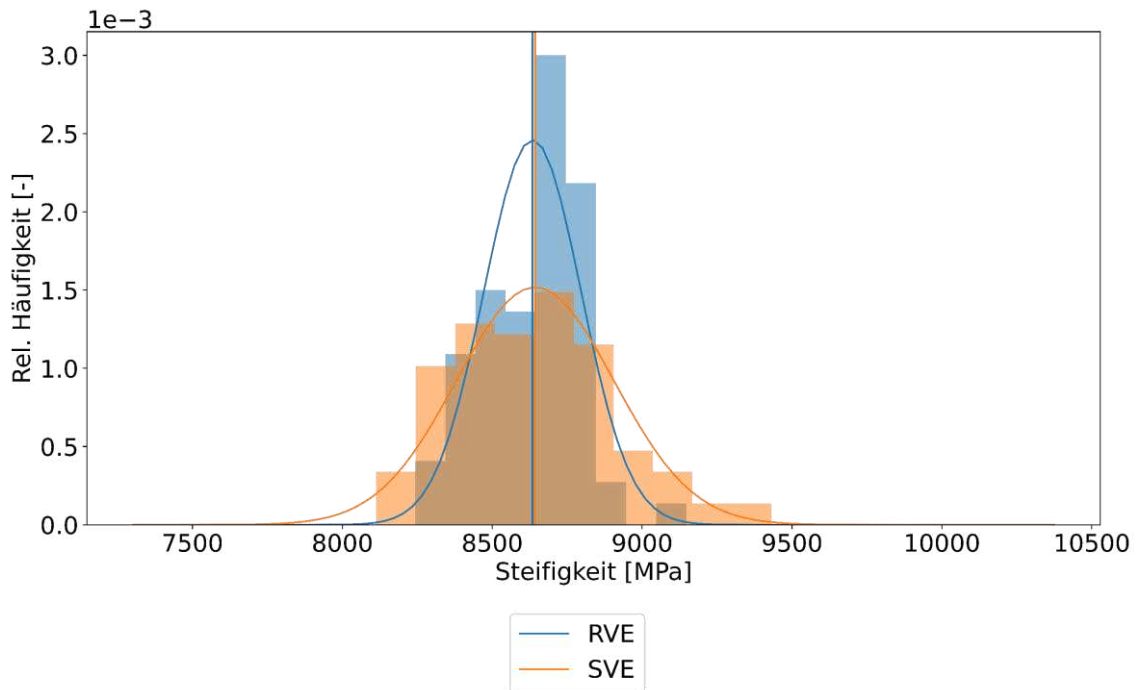


Abbildung 8-14: Histogramm der effektiven Steifigkeit C_{11} für die Faserensembles mit Statistischen und Repräsentativen Volumen Elementen.

Der Unterschied zwischen SVE und RVE besteht folglich aus der Modellierung des Faservolumenanteils als Verteilungsfunktion, deren Streuung abhängig ist von der Größe des betrachteten Volumens. Als Konsequenz ist die Streuung der berechneten effektiven Steifigkeit größer, da insgesamt ein Parameter mehr einer Verteilung unterliegt. Abschließend sei die Spannungsverteilung für beide Varianten betrachtet (vgl. Abbildung 8-15). Hier fällt auf, dass für beide Varianten die Spannungsverteilung nahezu gleich ist. Anders als die Modellierung der Verteilungsfunktionen für Länge und Orientierung hat die Modellierung als SVE statt als RVE hier keinen Einfluss. Beide Varianten sind also dazu geeignet, alle auftretenden Spannungen innerhalb des Composites zu erfassen. Die RVE Methode hat dabei den Vorteil einer geringeren Standardabweichung und ist daher effizienter in der Berechnung effektiver Mittelwerte. Jedoch liefern nur SVEs die korrekte größenabhängige Standardabweichung effektiver Mittelwerte, da nur bei SVEs die statistische Abweichung des Faservolumengehaltes eines finiten Volumens erfasst wird.

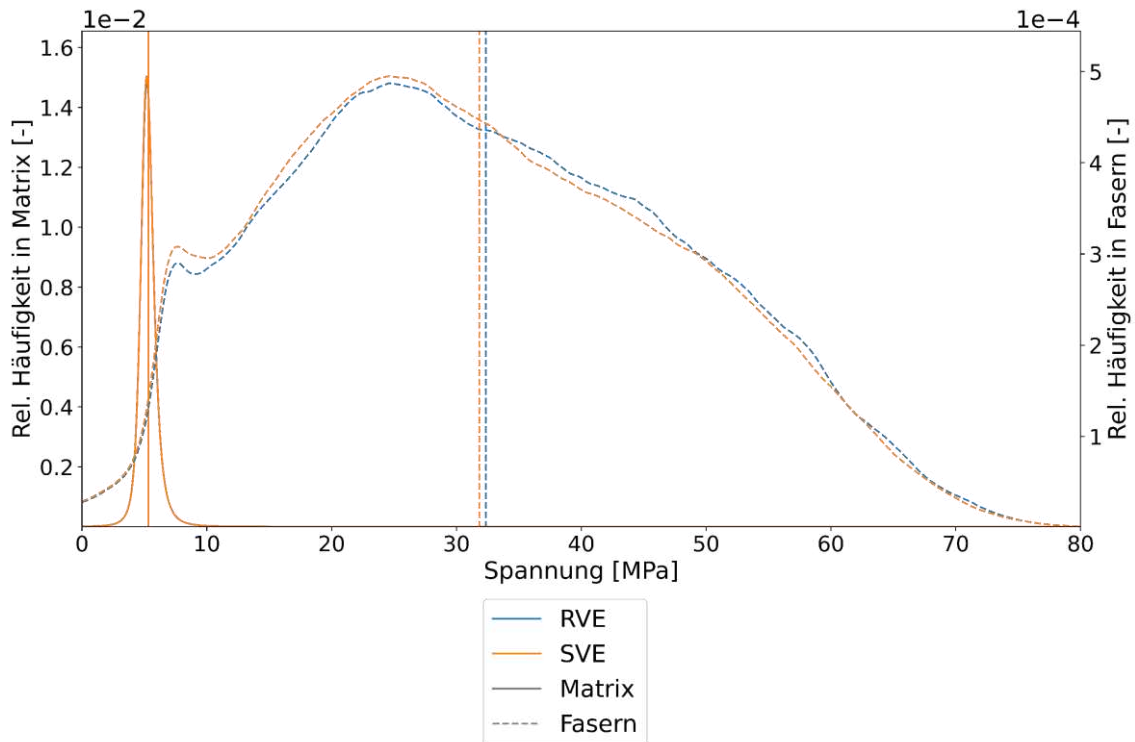


Abbildung 8-15: Durchschnittliche Spannungsverteilung in 1-Richtung für Matrix und Fasern für die Faserensembles mit Statistischen und Repräsentativen Volumen Elementen als Histogramm mit interpolierter Klasseneinteilung.

8.5 Einfluss des Faservolumenanteils

Neben der Streuung des Faservolumenanteils wird auch der Einfluss des mittleren Faservolumenanteils hinsichtlich der effektiven Compositesteifigkeit untersucht. Motiviert wird diese Untersuchung anhand der Idee, dass bei geringen Faservolumengehalt eine gegenseitige Faserinteraktion nur eine untergeordnete Rolle spielt und daher die Streuung durch Faserensembles ebenso. Weiter ist bei hochgefüllten Compositen die Anordnungsmöglichkeit der Fasern beschränkt, daher kann auch hier die Annahme getroffen werden, dass die Streuung durch spezielle Faseranordnungen gering ist. Aus diesen beiden Grenzfällen einer geringeren Streuung kann auf eine maximale Streuung dazwischen spekuliert werden.

Für die Untersuchung werden SVEs (Batch 7) mit unterschiedlichen mittleren Faservolumengehalten erstellt und ausgewertet. Einschränkend wirkt dabei der verwendete Faserplatzierungsalgorithmus (vgl. Abschnitt A 7), so dass maximal 24% Faservolumengehalt berücksichtigt werden können. Sämtliche weitere Parameter wie Matrixeigenschaften, Faserorientierung und -Länge sind identisch zu den vorangegangenen Untersuchungen und in Tabelle A-5 im Anhang aufgelistet.

In der Abbildung 8-16 ist in Abhängigkeit des mittleren Faservolumenanteils effektive Steifigkeit in 11-Richtung als Boxplot dargestellt. Weiter ist die relative Streuung mit C^{std}/C^* abgebildet. Zu erkennen ist, dass die effektive Steifigkeit mit dem mittleren Faservolumengehalt

ansteigt, die relative Streuung hingegen jedoch bei ca. 20% ein Maximum aufweist. Das heißt, dass der Einfluss einer spezifischen Anordnung der Fasern als ein Faserensemble mit ca. 20% Faservolumengehalt am größten ist.

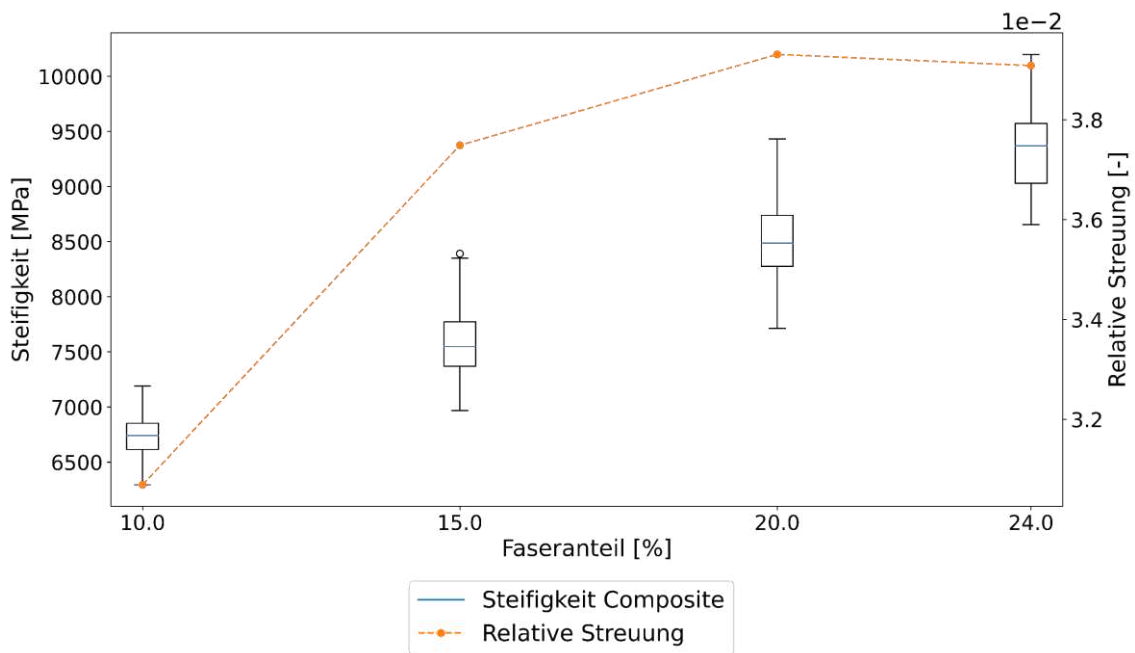


Abbildung 8-16: Effektive Steifigkeit C_{11} und relative Streuung in Abhängigkeit des mittleren Faservolumenanteils mit SVE Ansatz. Die effektive Steifigkeit ist als Boxplot dargestellt.

8.6 Phasenkontrast

In diesem Abschnitt werden die Auswirkungen des Phasenkontrastes zwischen Matrix und Faser untersucht. Neben der Höhe des Phasenkontrastes wird mit der Berücksichtigung einer Interphase zwischen Faser und Matrix auch ein abgestufter Phasenkontrast untersucht. Ziel ist es zu erarbeiten, inwiefern der Phasenkontrast die Compositeigenschaften und vor allem die Streuung dieser beeinflussen.

Zunächst wird der Einfluss des Phasenkontrastes ohne Interphase analysiert. Verwendet werden hierzu SVEs, deren Parameter in der Tabelle A-5 im Anhang aufgelistet werden. Die Faserensembles bilden die Batch 8. Variiert wird der Phasenkontrast, indem der hier verwendete E-Modul der Matrix zwischen 100 MPa und 10 000 MPa eingestellt wird. Im Gegensatz zu den bisherigen Untersuchungen wird in dieser Untersuchung nicht der gesamte Steifigkeitstensor, sondern nur der effektive E-Modul in 1-Richtung (Vorzugsrichtung der Fasern) berechnet. Dies geschieht vor dem Hintergrund der Reduzierung der Berechnungszeit.

Die Abbildung 8-17 zeigt den Verlauf des effektiven E-Moduls des Composites in Abhängigkeit des E-Moduls der Matrix. Weiter ist die relative Streuung des Composite E-Moduls dargestellt. Wie zu erkennen ist, steigt der effektive E-Modul des Composites mit zunehmendem Matrix E-Modul an. Die absolute Streuung steigt ebenfalls an, ab ca. einem Matrix E-Modul von

2 000 MPa jedoch nicht mehr signifikant. Die relative Streuung hingegen ist für niedrige Matrix E-Moduln höher als für höhere. Relativ betrachtet hat der Phasenkontrast demnach bei hohen Werten einen größeren Einfluss auf die Streuung der Compositesteifigkeit. Begründet wird dies dadurch, dass bei hohem Phasenkontrast der Überbrückungseffekt noch wichtiger wird.

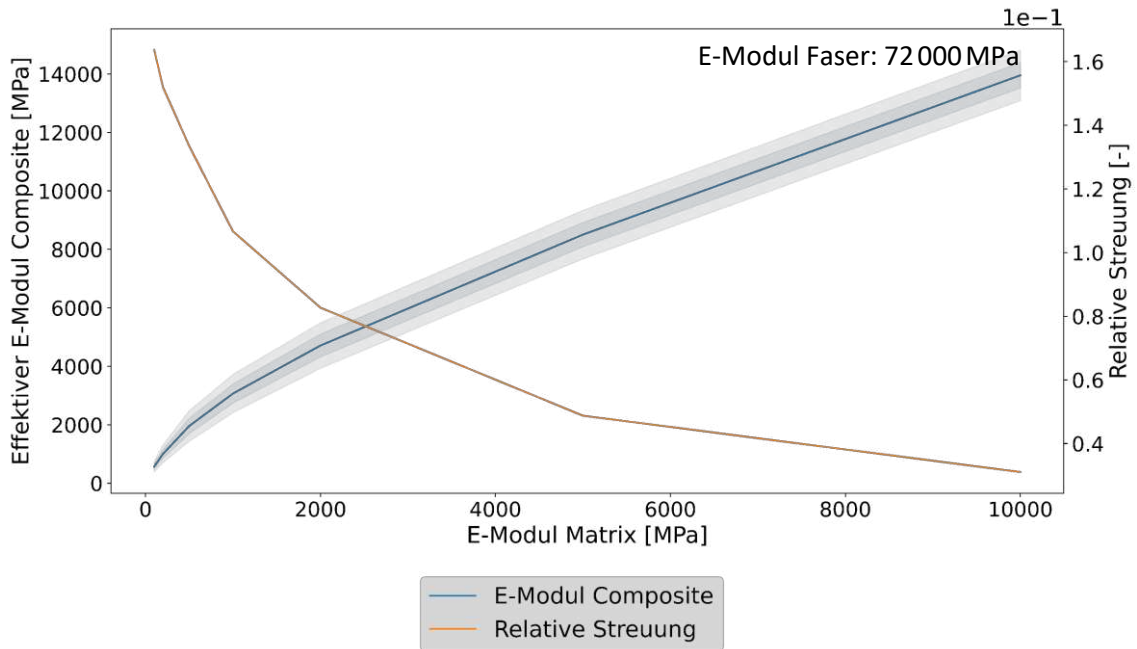


Abbildung 8-17: Effektiver E-Modul und relative Streuung des effektiven E-Moduls in Abhängigkeit des E-Moduls der Matrix.

Weiter wird in diesem Abschnitt die Berücksichtigung einer Interphase zwischen Matrix und Fasern untersucht. Gemeint ist hier eine Zwischenschicht zwischen Matrix und Fasern, die eigene Eigenschaften besitzen kann, wie in Abbildung 8-18 dargestellt. Motiviert wird diese Untersuchung aus den Ergebnissen in [134]. In dieser Arbeit wird der Effekt einer vorhandenen Interphase zwischen Matrix und Faser (vgl. Abbildung 8-18) untersucht. Für die Modellierung wird ein dreiphasiges Modell zur Homogenisierung (RDI-Modell) verwendet. Dabei wird die Steifigkeit der Interphase so gewählt, dass sie der hochkristallinen Matrix entspricht. Das Ergebnis der Untersuchung ist, dass das Composite mit Berücksichtigung der Interphase steifer ist. Weiter ist die Steifigkeitssteigerung gegenüber einem zweiphasigen Modell abhängig von der Matrixsteifigkeit.

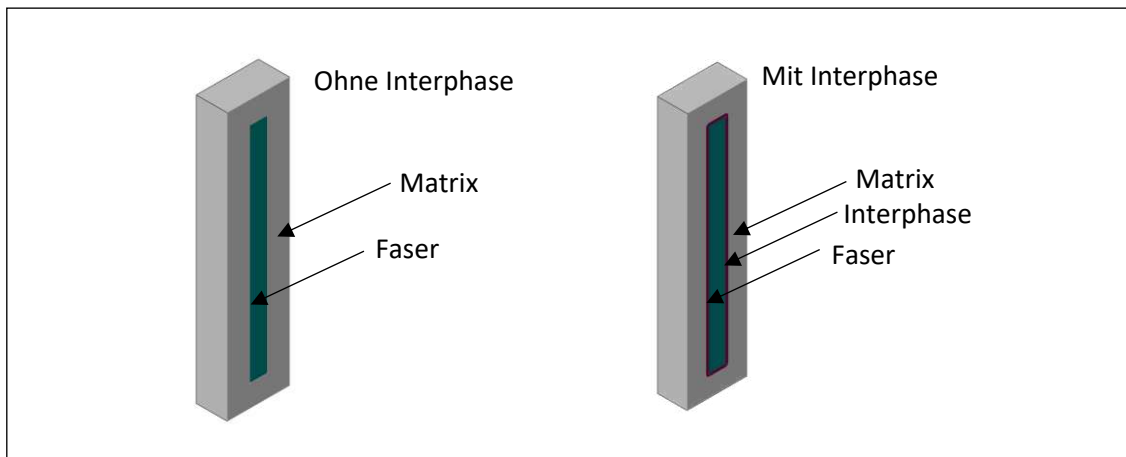


Abbildung 8-18: Prinzipieller Aufbau des Composites mit Interphase zwischen Matrix und Faser im Vergleich zum Aufbau ohne Interphase.

In der vorliegenden Arbeit werden die Ergebnisse der genannten Arbeit überprüft und in Hinblick auf die Streuung der effektiven Compositeigenschaften erweitert. Hierzu werden Faserensembles erstellt, die zwischen Faser und Matrix eine 0,5 µm dicke Interphase besitzen. Der volumetrische Anteil der Interphase beträgt damit 2% am Composite. Die Interphase wird als eigenständiges Objekt mit eigener Vernetzung modelliert. Bei der Platzierung der Fasern zu einem Faserensemble wird die Interphase ebenfalls berücksichtigt, das heißt, dass die Interphasen sich wie die Fasern nicht überschneiden können. Die Anbindung der Interphase an die Matrix wird sowohl an den Zylinder- als auch an den Deckelflächen modelliert. Die Anbindung der Fasern an die Interphase wird analog zu den bisherigen Modellierungen nur über die Zylinderflächen modelliert. Weiter wird ein linear-elastisches Materialmodell für die Interphase verwendet. Die Werte hierfür werden zum einen wie in [134] mit $E_I = 10000 \text{ MPa}$ und $\nu_I = 0,42$ gewählt und zum anderen identisch zum hier verwendeten Matrixmaterial. In der hier durchgeführten Untersuchung werden Faserensembles jeweils mit beiden Wertepaaren für die Interphase verwendet. Hierdurch kann der Effekt der Interphase getrennt von dem der Faserensembles untersucht werden. In der Tabelle A-5 im Anhang sind alle Parameter des Batch (Batch 9) für die Untersuchung des Einflusses der Interphase aufgeführt.

Ausgewertet wird zunächst der vollständige Steifigkeitstensor $\bar{\mathbf{C}}^*$ sowie dessen Standardabweichung $\bar{\mathbf{C}}^{std}$. Für eine Interphase mit $E_I = 10000 \text{ MPa}$ ergibt sich

$$\bar{\mathbf{C}}_{I10}^* =$$

8419	3933	3771	-102	-139	-125
4156	5886	3903	-66	-66	-59
3986	3899	5756	-63	-60	-59
41	4	-3	1245	1	-4
-9	-4	-2	2	1062	3
3	3	-3	-3	2	926

$$\bar{\mathbf{C}}_{I10}^{std} =$$

223	50	32	78	78	31
43	75	11	38	17	21
28	14	27	12	18	9
76	35	16	51	31	18
76	15	15	30	27	11
27	19	7	17	12	12

und mit einer Interphase von $E_I = 2000 \text{ MPa}$

\bar{c}_{I2}^* =	7929	3755	3617	-100	-132	-114	\bar{c}_{I2}^{std} =	209	47	31	77	78	30
	3917	5622	3745	-62	-57	-48		39	67	8	35	16	21
	3753	3718	5510	-52	-49	-47		28	9	17	11	18	9
	39	1	-1	1177	0	-5		75	33	14	49	31	18
	-9	-5	-1	0	1002	3		74	15	15	29	26	11
	1	3	-3	-4	3	877		26	19	7	17	11	9

Bei einem direkten Vergleich der Steifigkeitstensoren kann der steifigkeitssteigernde Effekt einer Interphase mit 10 000 MPa gegenüber einer 2 000 MPa steifen Interphase bestätigt werden. Die Streuung ist ebenfalls erhöht mit höherer Steifigkeit der Interphase.

Im Vergleich zu den Faserensembles ohne jegliche Modellierung der Interphase zeigt sich, dass sowohl Mittelwert als auch Streuung mit modellierter Interphase von 2 000 MPa niedriger ausfallen. Der Grund hierfür kann die Art der Interphasenmodellierung sein, bei der die Faserplatzierung beeinflusst wird, sodass der minimale Abstand zwischen zwei Fasern der zweifachen Interphasendicke entspricht. Hierdurch ist zum einen eine geringe Streuung zu erwarten, da weniger Möglichkeiten vorhanden sind Fasern zu platzieren, als auch ein geringerer Mittelwert da gerade geringe Faserabstände zu hohen Spannungen und damit hohen Steifigkeiten führen. Werden diese ausgeschlossen, so muss im Umkehrschluss der Mittelwert geringer ausfallen. Es sei jedoch angemerkt, dass hier nur 16 Ensembles betrachtet werden, entsprechend die statistische Sicherheit gering ist. Die geringe Anzahl der Ensembles hat dabei jedoch keine Auswirkung auf den direkten Vergleich innerhalb des Batch 11, da dieselben Ensembles für die unterschiedlichen Interphaseneigenschaften verwendet werden.

Zur weiteren Analyse für die steifigkeits- und streuungssteigernde Wirkung einer 2 000 MPa steifen Interphase im Vergleich zu einer 10 000 MPa steifen Interphase ist die durchschnittliche Spannungsverteilung in 1-Richtung in Abbildung 8-19 dargestellt. Ersichtlich ist dabei, dass die Spannungsverteilung der Interphase zu höheren Spannungswerten verschoben ist. Dies ist aufgrund der höheren Steifigkeit der Interphase naheliegend. Weiter ist die Spannungsverteilung jedoch breiter. Die Spannungsverteilung der Matrix und der Fasern ist dabei ebenfalls zu höheren Werten verschoben und ebenfalls breiter. Bei den Fasern ist dies stärker ausgeprägt als bei der Matrix.

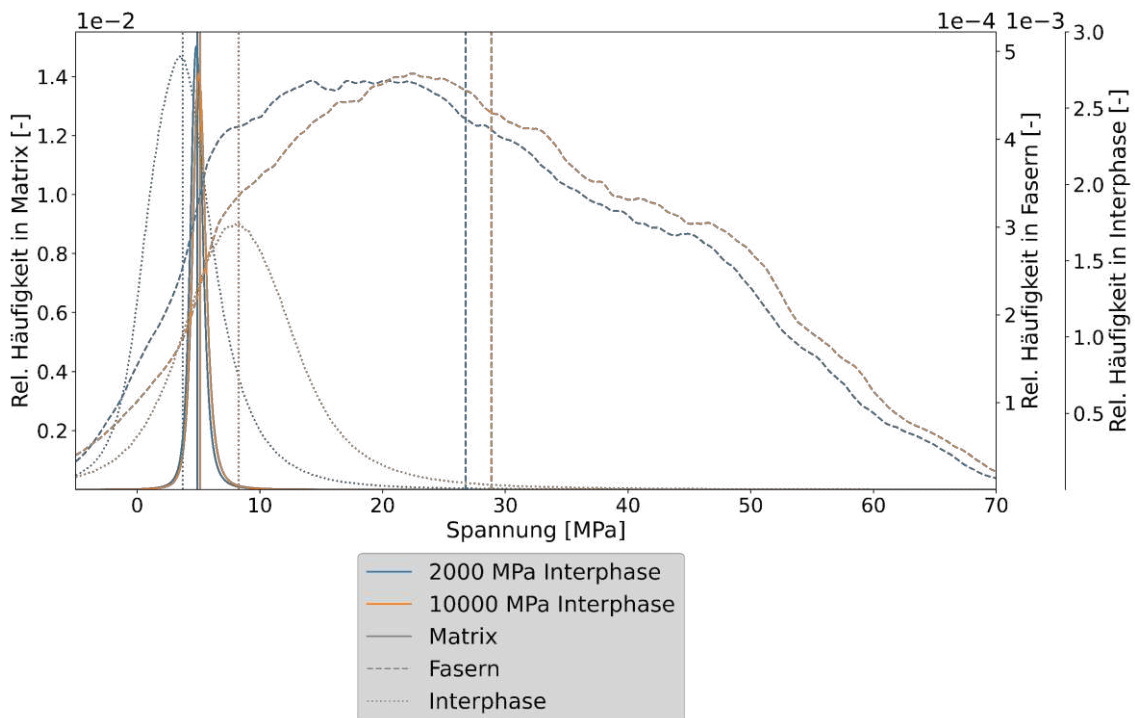


Abbildung 8-19: Durchschnittliche Spannungsverteilung in Belastungsrichtung für Matrix, Fasern und Interphase für die betrachteten Modellierungsvarianten als Histogramm mit interpolierter Klasseneinteilung.

Daraus kann geschlussfolgert werden, dass die Modellierung einer Interphase nicht nur einen signifikanten Einfluss auf die effektive mittlere Compositesteifigkeit hat, sondern auch auf die Spannungsverteilung und damit auch auf die Streuung der Compositesteifigkeit.

Der Effekt des ansteigenden minimalen Faserabstandes konnte dabei noch nicht final geklärt werden. Dies gilt es in weiteren Studien zu untersuchen, wobei auch unterschieden werden müsste zwischen Interphasen, die sich überschneiden können und solchen die sich nicht überschneiden können. Motiviert sein kann beides durch einerseits eine Interphase, die durch Kristallisation des Matrixmaterials entsteht und andererseits durch eine Interphase, die als Coating auf die Fasern aufgebracht wird.

8.7 Nicht-lineare Materialmodellierung

In diesem Abschnitt wird der Effekt einer nicht-linearen Materialmodellierung auf die effektiven Werte und vor allem auf die statistische Streuung der effektiven Werte untersucht. Betrachtet wird der Effekt einer linear-viskoelastischen und einer plastischen Matrixmodellierung.

8.7.1 Lineare-Viskoelastizität

In diesem Abschnitt wird der Einfluss einer linear-viskoelastischen Matrix auf die effektiven elastischen Compositeigenschaften untersucht. Eine viskoelastische Matrix, bei linear-elasti-

schen Fasern, hat ein viskoelastisches Composite zur Folge. Die Motivation für die Untersuchung liegt in einem heterogenen Dehnungsfeld der Matrix und damit auch einer heterogenen Dehnrate innerhalb der Matrix begründet. Ob dies einen Einfluss auf die homogenisierte Steifigkeit hat, soll die folgende Untersuchung anhand der Batch 10 zeigen. Hierzu werden SVEs mit linear-viskoelastischer Matrix modelliert mit ansonsten identischen Parametern zur Batch 6 erstellt. Verwendet wird für die Modellierung der Viskoelastizität eine Prony-Reihe, die in Abbildung 8-20 dargestellt ist. Der Kompressionsmodul wird als konstant mit 4688 MPa angenommen. Ebenfalls in der Abbildung 8-20 abgebildet ist der bisherige linear-elastische E-Modul.

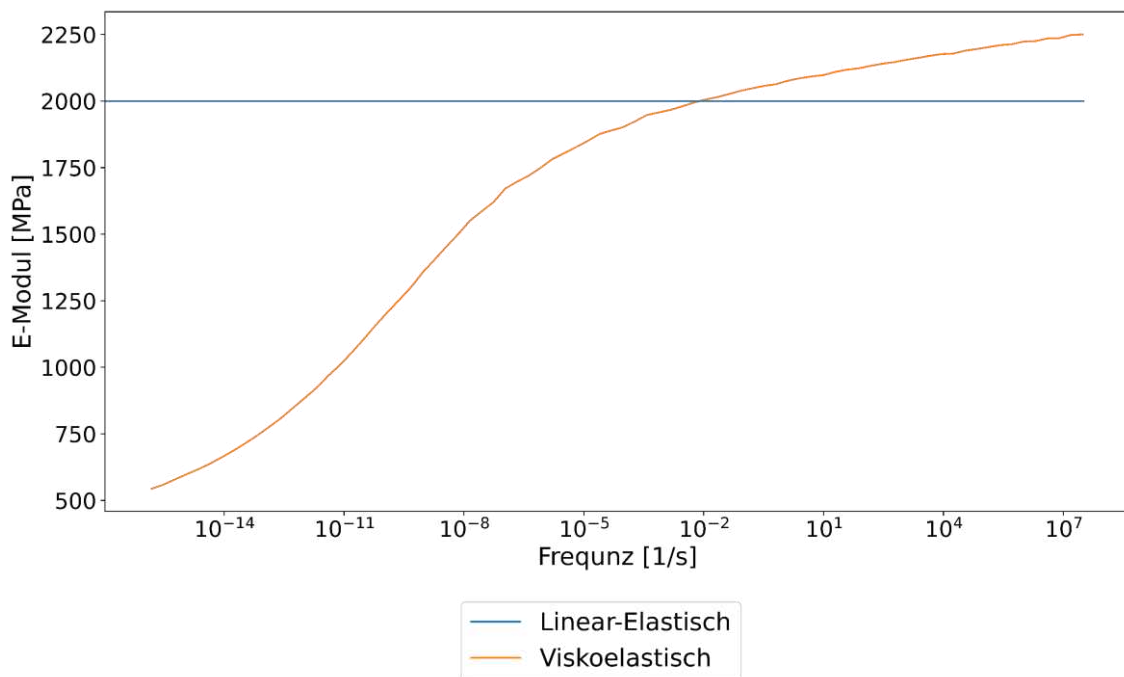


Abbildung 8-20: Frequenzabhängige Steifigkeit der modellierten Matrix durch Prony-Reihe.

Anhand eines virtuellen Zugversuchs eines Probekörpers nach DIN 512 1BA kann gezeigt werden, dass die Prony-Reihe bei einer Belastungsgeschwindigkeit von 1 mm/min dieselbe Spannung im Prüfbereich zur Folge hat, wie die linear-elastische Modellierung mit 2000 MPa. Die virtuellen Zugversuche sind in Abbildung 8-21 bei einer Verschiebung von 1 mm dargestellt. Die Belastungsgeschwindigkeit entspricht dabei einer Dehnrate von $1,518 \cdot 10^{-4}$ 1/s im Prüfbereich. Diese Dehnrate wird für die Untersuchung des Einflusses einer viskoelastischen Matrix verwendet und erlaubt den Vergleich zwischen den effektiven Compositesteifigkeiten mit linear-elastischer und linear-viskoelastischer Matrix.

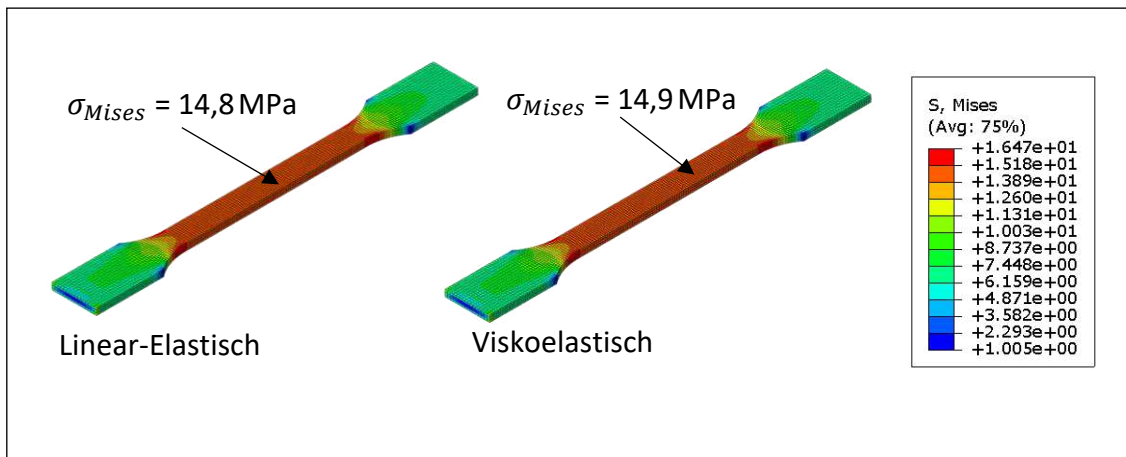


Abbildung 8-21: Virtueller Zugversuch an einem Probekörper nach DIN 512 1BA mit linear-elastischem und viskoelastischem Werkstoffverhalten bei 1mm/min.

Ein direkter Vergleich, abgebildet in der Abbildung 8-22, bestätigt die Motivation für diese Untersuchung. Zu sehen ist die von-Mises Vergleichsspannung an einer zufällig ausgewählten Stelle eines Faserensembles, einmal mit linear-elastischer und einmal mit linear-viskoelastischer Matrix. Hierbei sind die auftretenden Spannungen mit viskoelastischer Matrix höher als mit linear-elastischer Matrix, insbesondere an Konzentrationsstellen wie einem Faserende. Dies kann dadurch begründet werden, dass die Dehnungen an diesen Stellen größer sind, damit auch die Dehnraten und schließlich so auch die Spannungen bei viskoelastischem Werkstoffverhalten.

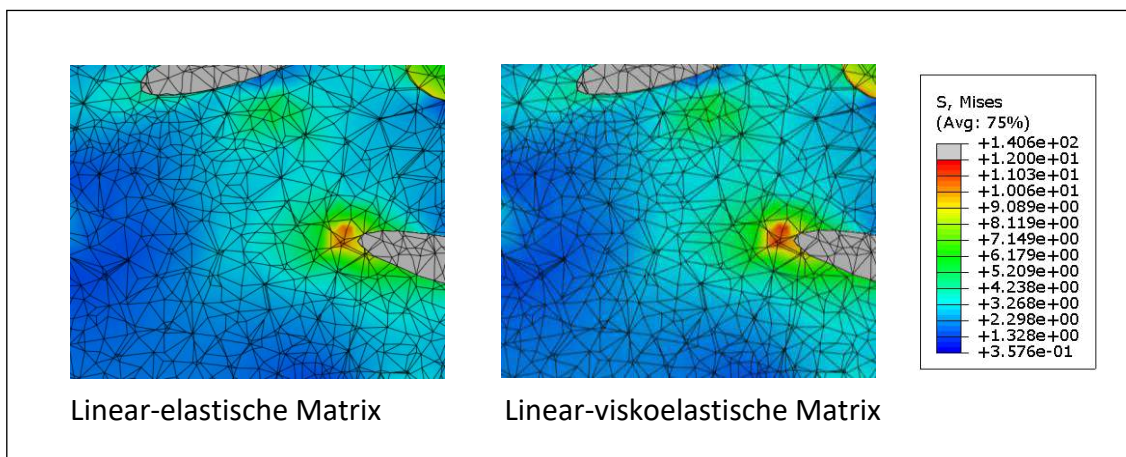


Abbildung 8-22: Vergleich der lokalen von-Mises Spannung bei linear-elastischer Matrix und viskoelastischer Matrix desselben Ensembles.

Zur weiteren Analyse wird die Spannungs- und Dehnungsverteilung der Matrix für beide untersuchten Modellierungsvarianten in der Abbildung 8-23 dargestellt. Es werden die Daten der 1-Richtung aus der Simulation verwendet, deren Belastungsrichtung der 1-Richtung entspricht. Wie zu erkennen ist, ist die Spannungsverteilung mit viskoelastischer Matrix zu höhe-

ren Spannungen verschoben im Vergleich zur Spannungsverteilung mit linear-elastischer Matrix. Die Dehnungsverteilungen beider Modellierungsvarianten weisen den gleichen Mittelwert auf, die Verteilung mit viskoelastischer Matrix ist geringfügig schmaler.

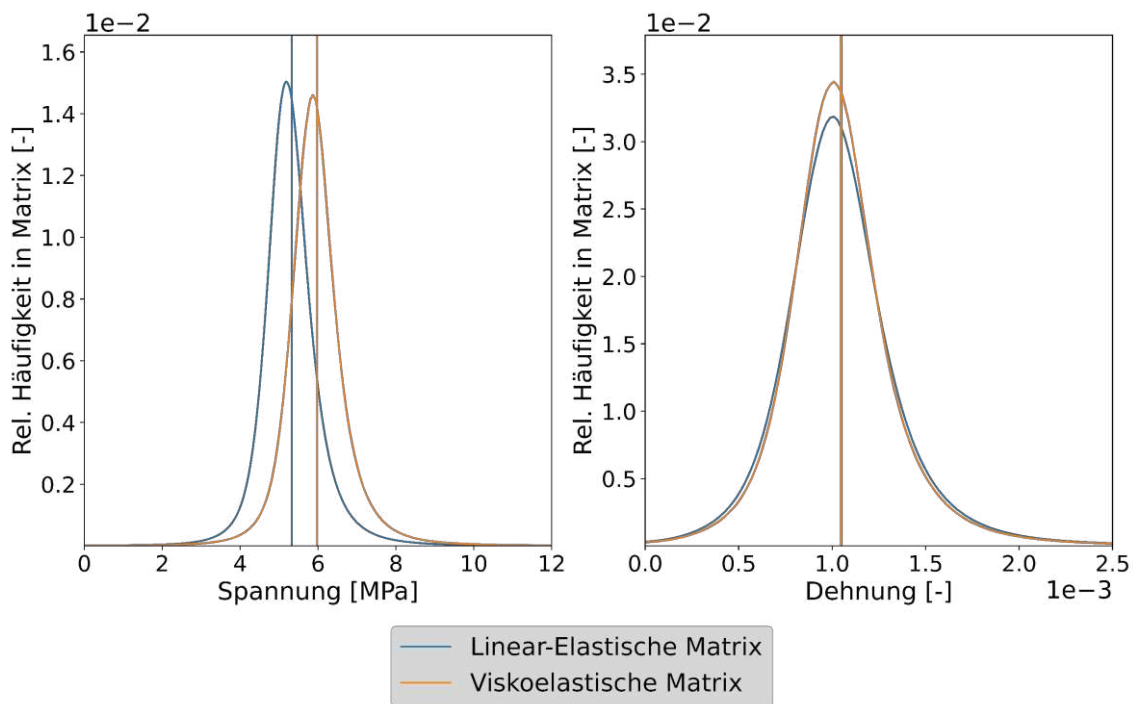


Abbildung 8-23: Durchschnittliche Spannungs- und Dehnungswahrscheinlichkeit der Matrix in 1-Richtung für eine linear-elastische und eine viskoelastische Matrix als Histogramme mit interpolierter Klasseneinteilung.

Ein Grund für den höheren Mittelwert der Spannungsverteilung liegt in der mittleren intrinsischen Dehnrates der Matrix. Diese ist mit $\epsilon_M^* = 1,589 \cdot 10^{-4} \text{ 1/s}$ etwa 5% größer als die des Composites mit $\epsilon^* = 1,518 \cdot 10^{-4} \text{ 1/s}$. Entsprechend ist die Matrix bei viskoelastischer Modellierung steifer und damit auch die Spannungen höher bei gleicher globaler Dehnung des Composites. Dies hat eine höhere Gesamtsteifigkeit des Composites zur Folge, wie der mittlere effektive Steifigkeitstensor \bar{C}_{VE}^* und dessen Standardabweichung des effektiven Steifigkeitstensors \bar{C}_{VE}^{std} beweist mit

$$\bar{C}_{VE}^* = \begin{bmatrix} 9270 & 4695 & 4514 & -29 & -5 & -6 \\ 4740 & 6705 & 4523 & -11 & -5 & -6 \\ 4559 & 4524 & 6528 & -11 & -4 & -4 \\ -10 & 0 & -3 & 1343 & -2 & 2 \\ 8 & 1 & 2 & -2 & 1146 & -3 \\ -2 & -3 & -2 & 2 & -3 & 1016 \end{bmatrix} \quad \bar{C}_{VE}^{std} = \begin{bmatrix} 328 & 56 & 36 & 99 & 79 & 28 \\ 57 & 88 & 27 & 52 & 15 & 20 \\ 38 & 27 & 55 & 9 & 15 & 7 \\ 100 & 52 & 9 & 59 & 29 & 17 \\ 79 & 14 & 15 & 29 & 37 & 12 \\ 28 & 20 & 7 & 17 & 12 & 18 \end{bmatrix} .$$

Dabei ist nicht nur der Mittelwert der Steifigkeit mit viskoelastischer Modellierung größer, sondern auch die Standardabweichung. Eine Begründung hierfür kann in der noch gesteigerten Wichtigkeit des Faserensembles angenommen werden. Faserensembles, die auch bei

linear-elastischer Modellierung zu besonders hohen Steifigkeiten geführt haben, führen bei viskoelastischer Modellierung der Matrix zu noch höheren Steifigkeiten.

Zwei Konsequenzen können aus der Untersuchung zum Einfluss einer linear-viskoelastischen Modellierung der Matrix gezogen werden. Die Gesamtsteifigkeit des Composites wird bei einer linear-elastischen Modellierung der Matrix unterschätzt, ebenso wie der Einfluss der Faserkonstellation auf die Streuung der effektiven Compositesteifigkeit. Aus der frequenzabhängigen Steifigkeit der Matrix können hierzu weitere Überlegungen angeführt werden. Zum einen ist der gezeigte Effekt einer viskoelastischen Modellierung aufgrund des großen Frequenzbereiches für Dehnraten in technischen Anwendungsfällen in der Regel vorhanden. Zum anderen könnte der Effekt im Glasübergangsbereich maximal sein, wobei diese Überlegung insbesondere vor dem Hintergrund des Einflusses der Querkontraktionszahl der Matrix überprüft werden müsste.

Darüber hinaus ist zu erwähnen, dass der Effekt einer viskoelastischen Matrix in der hier durchgeführten Analyse durch die Annahme eines konstanten Kompressionsmoduls beeinflusst werden könnte. Dies liegt an den Spannungszuständen an Faserenden, die bei Belastung in Faserrichtung qualitativ als hydrostatischer Zugzustand beschreiben werden können. Denkbar ist, dass der Unterschied der effektiven Compositesteifigkeit mit linear-elastischer beziehungsweise viskoelastischer Modellierung der Matrix noch größer ausfällt, wenn ein frequenzabhängiger Kompressionsmodul verwendet wird.

8.7.2 Plastizität

Neben der Viskoelastizität wird auch ein plastisches Verhalten der Matrix untersucht. Aus der vorherigen Untersuchung wird deutlich, dass ein heterogenes Dehnungsfeld, insbesondere mit den Dehnungskonzentrationen um Faserenden herum, einen Einfluss auf die homogenisierten Werkstoffeigenschaften haben kann. Es ist ein Plastifizieren der Matrix an Dehnungskonzentrationsstellen vorstellbar, obwohl die mittlere Matrixbelastung unterhalb der Fließgrenze ist. Die in diesem Abschnitt vorgestellte Untersuchung soll dies näher beleuchten. Verwendet wird für die Modellierung eine von-Mises Plastizität durch die Fließkurve mit isotroper Verfestigung, welche in Abbildung 8-24 dargestellt ist.

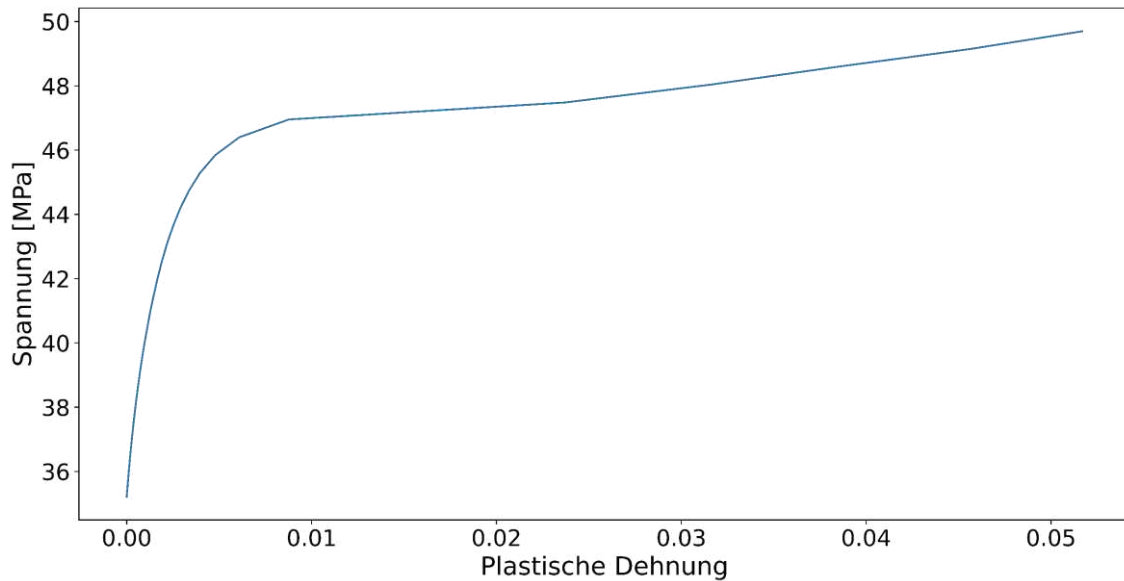


Abbildung 8-24: Fließkurve der plastischen Materialmodells für die Matrix.

Zunächst wird eine Netzstudie an einem Faserensemble durchgeführt, um die verwendete Netzfeinheit für eine plastische Modellierung zu überprüfen. Es werden hier nur 10 Fasern verwendet, um den notwendigen Rechenaufwand zu minimieren. Die verwendeten Parameter sind in der Tabelle A-5 im Anhang aufgeführt.

Der effektive Spannungs-Dehnungs Verlauf sowie die homogenisierte plastische Dehnung der Matrix ist in Abbildung 8-25 für die unterschiedlichen Vernetzungsgrade dargestellt. Eine Konvergenz des Spannungs-Dehnung Verlaufs ist dabei nicht zu erkennen, ebenso wenig wie für die homogenisierte plastische Dehnung der Matrix. Zurückzuführen ist dies jedoch nicht auf eine nicht ausreichende Vernetzungsfeinheit, sondern auf den Steifigkeitssprung an den Faserenden. In der Literatur ist hierzu bereits gezeigt worden, dass bei Compositen eine gradientenbasierte Modellierung der Plastizität erforderlich ist [135].

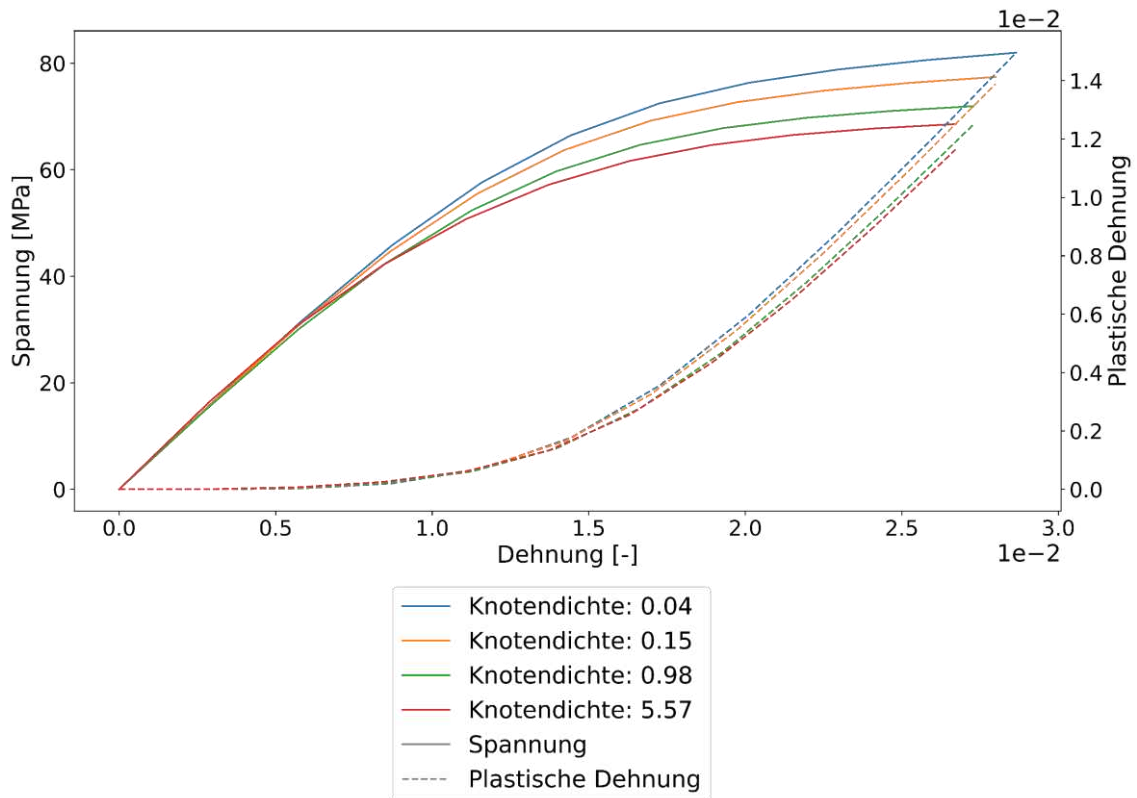


Abbildung 8-25: Studie zur Netzkonvergenz an einer Einzelfaser bei Verwendung eines plastischen Materialmodells für die Matrix.

Weiter ist auffällig, dass ein feineres Netz zwar eine niedrigere Spannungs-Dehnungs Kurve zur Folge hat, jedoch auch eine niedrigere homogenisierte plastische Dehnung. Dies scheint zunächst nicht intuitiv, da eine größere homogenisierte plastische Dehnung eine geringere homogenisierte Spannung in der Matrix und somit eine geringere effektive Steifigkeit der Matrix zur Folge hat. Weitere Simulationen mit Faserensembles sollen den Effekt genauer erläutern. Hierzu ist in der Abbildung 8-26 ein Ausschnitt eines Ensembles dargestellt. Es ist zum einen die äquivalente plastische Dehnung (PEEQ) sowie die elastische Dehnung (EE) für zwei Netzfeinheiten gezeigt. Die Knotendichte beträgt zum einen $0,04 \text{ 1}/\mu\text{m}^3$ und zum anderen $0,09 \text{ 1}/\mu\text{m}^3$. Bei der äquivalenten plastischen Dehnung ist zu erkennen, dass diese mit feinerem Netz stärker um eine Faser herum lokalisiert ist. Dies führt zu einer „weicheren“ Anbindung der Fasern an die Matrix bei einem feineren Netz. Folglich wird die Faser weniger belastet, sodass die elastische Dehnung der Faser geringer ist, wie in der Abbildung zu erkennen ist. Entsprechend ist die effektive Steifigkeit geringer, obwohl die Matrix eine höhere homogenisierte Spannung aufweist.

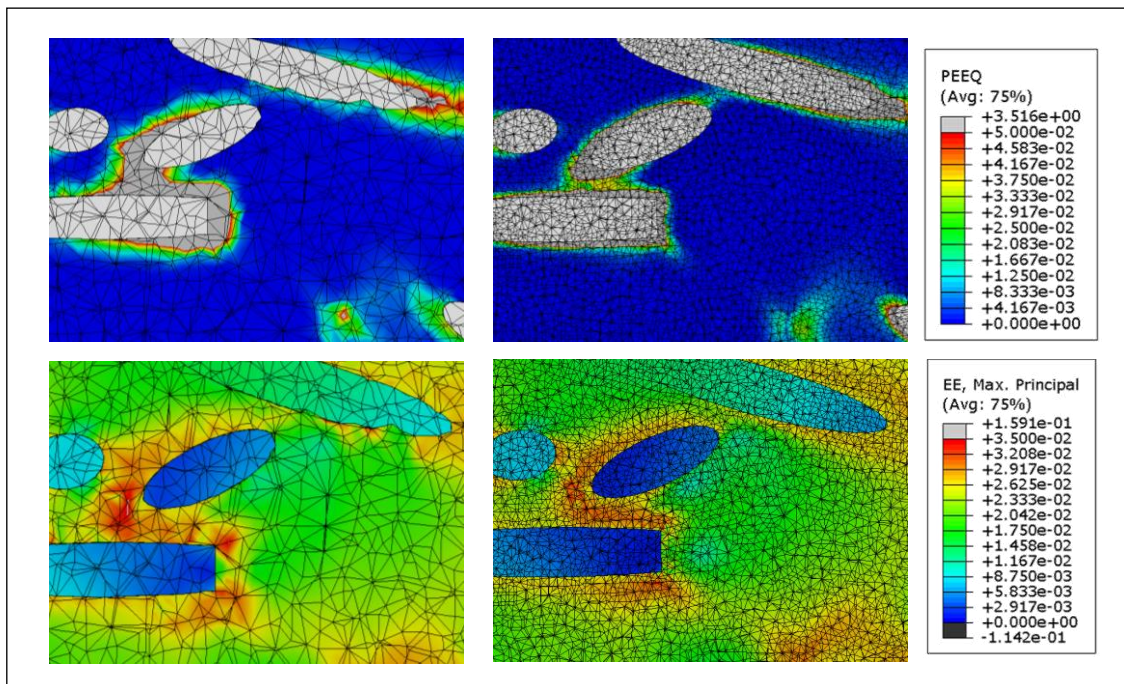


Abbildung 8-26: Vergleich der äquivalenten plastischen Dehnung (PEEQ, oben) sowie der elastischen Vergleichsdehnung (EE, unten) für dieselbe Stelle eines Ensembles mit grober (links) und feiner (rechts) Vernetzung.

Aufgrund der genannten Problematik der Netzverfeinerung ist eine Untersuchung mit plastischer Modellierung der Matrix vorsichtig zu bewerten.

Trotz dessen werden zufällig ausgewählte Faserensembles der Batch 6 mit plastischer Matrixmodellierung wiederverwendet, wodurch ein direkter Vergleich zwischen elastischer und plastischer Modellierung möglich ist. Die Parameter der Batch mit plastischer Modellierung (Batch 12) sind in der Tabelle A-5 im Anhang aufgeführt.

In der Abbildung 8-27 ist der durchschnittliche effektive Spannungs-Dehnungs Verlauf mit linear-elastischer und plastischer Matrixmodellierung dargestellt. Dabei soll hier keine Aussage getroffen werden, bis zu welcher globalen Dehnung das effektive Composite Verhalten als linear-elastisch betrachtet werden kann. Die Abweichung zwischen linear-elastischer und plastischer Modellierung ist wie gezeigt abhängig von der Netzgröße. Unter der Annahme, dass eine Netzverfeinerung jedoch im gleichen Maße den effektiven Spannungs-Dehnungs Verlauf eines Faserensembles beeinflusst, können hier bei gleicher Netzverfeinerung jedoch Aussagen über die Streuung getätigt werden. Die Streuung der Spannung bei gleicher Dehnung ist mit plastischer Modellierung geringer als mit elastischer Modellierung. Eine Erklärung hierfür besteht darin, dass steifere Faserensembles früher plastifizieren und damit die Krafteinleitung in die Fasern ineffizienter wird. Durch diesen Vorgang ist der Abfall der Spannung im Vergleich zur linear-elastischen Modellierung, für Faserensembles mit höherer Ursprungssteifigkeit größer als für solche mit niedrigerer Ursprungssteifigkeit. Eine Beurteilung des Einflusses der Faserkonstellation ist also am Spannungs-Dehnungs Verlauf weniger sinnvoll. Besser kann der

Unterschied an der effektiven plastischen Dehnung der Matrix abgelesen werden. Die Streuung hier nimmt mit zunehmender globaler Dehnung zu. Bei einer globalen Dehnung von 2% erreicht die Standardabweichung relative Werte von 47,5%. Dies verdeutlicht, dass das Ensemble auch bei einer plastischen Modellierung einen signifikanten Einfluss hat.

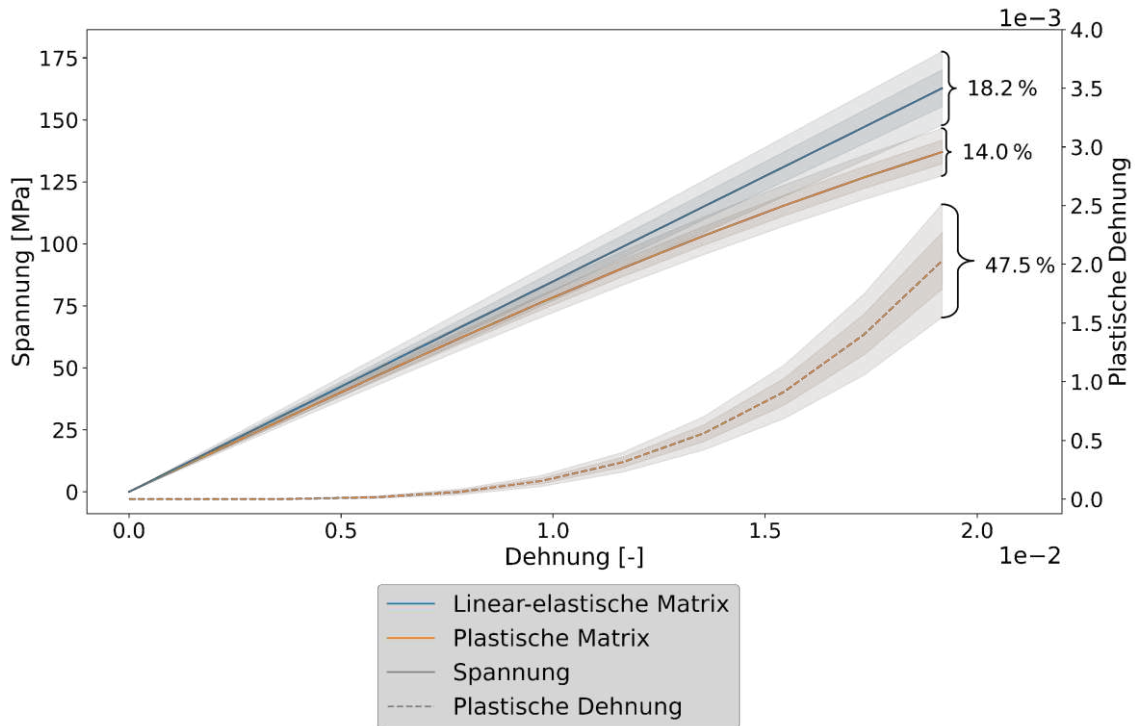


Abbildung 8-27: Effektiver Spannungs-Dehnungs Verlauf mit linear-elastischer und plastischer Dehnung sowie plastischer Dehnung der Matrix.

8.8 Konsequenz auf Bauteilebene

Die bisherigen Untersuchungen in Kapitel 8 zeigen die Effekte einer statistischen Betrachtung mit unterschiedlichen Modellierungen des Composites auf der Mikroebene. In diesem Abschnitt soll die Bedeutung dieser statistischen Betrachtung auf der Makroebene herausgearbeitet werden. Für Modellierungen, die den Mittelwert der effektiven Steifigkeit beeinflussen, ist sie notwendig, da der Mittelwert für Berechnungen auf der Makroebene verwendet wird, um zum Beispiel Struktursimulationen für Bauteile durchzuführen. Die Bedeutung der Streuung der effektiven Compositesteifigkeit ist bislang jedoch unklar. In der Regel wird auf der Makroebene die Streuung vernachlässigt. Dies beruht auf der Annahme, dass das zugehörige Volumen zu jedem Punkt einer FE-Analyse eines Bauteils sehr groß ist und damit sehr viele Fasern beinhaltet, sodass eine etwaige Streuung ausgemittelt wird. Diese Annahme soll in der folgenden Untersuchung bewertet werden, insbesondere vor dem Hintergrund dünnwandiger Spritzgussbauteile, mit über der Wandstärke unterschiedlicher Faserorientierung.

Zur Beurteilung der Streuung auf der Makroebene ist der Zusammenhang zwischen Größe und Streuung notwendig. Hierfür könnten Faserensembles mit unterschiedlicher Größe verwendet werden, um die entsprechende Information zu erhalten. Hier wird jedoch ein alternativer Ansatz verwendet, da die direkte Modellierung zwei Probleme birgt. Zum einen ist die Berechnungsdauer gerade für viele Fasern sehr hoch und zum anderen ist eine minimale Größe notwendig, um bestimmte Faserlängen darzustellen. Der alternative Ansatz umgeht diese zwei Probleme. Er beruht auf der statistischen Annahme der Grundgesamtheit. Hierbei entspricht jedes Faserensemble einer Stichprobe und mit genügend Faserensembles kann auf die Grundgesamtheit geschlossen werden. Eine solche Grundgesamtheit wird für die Spannungsverteilung aufgestellt. Aus der Grundgesamtheit der Spannungsverteilung wird wiederum eine Stichprobenziehung durchgeführt. Über die Art und Weise der Stichprobenziehung aus der Grundgesamtheit kann die Streuung (Stichproben-) größenabhängig berechnet werden. Das Vorgehen gliedert sich in insgesamt 5 Schritte:

1. Ziehen der Stichprobe aus Grundgesamtheit
2. Berechnung des effektiven Mittelwertes aus Stichprobe
3. Berechnung effektive Steifigkeit mit Mittelwert der Stichprobe und globaler Dehnung
4. Wiederholung der Schritte 1-3 zur Erzeugung der Steifigkeitsverteilung
5. Wiederholung der Schritte 1-4 für unterschiedliche Größen

Im ersten Schritt werden Spannungswerte aus der Grundgesamtheit der Spannungswahrscheinlichkeit gezogen. Es werden n_d Spannungswerte gezogen, dabei ist die Anzahl n_d proportional zur betrachteten Größe V_S mit

$$V_S = \frac{n_d}{n_S} \quad (\text{Gl.8-2})$$

und n_S als Anzahl an Diskretisierungswerten der Grundgesamtheit. Es sei dabei erneut darauf hingewiesen, dass die Wahrscheinlichkeit der Spannung für die Grundgesamtheit normiert ist. Die Teilmenge einer Stichprobe entspricht der Teilmenge des Gesamtvolumens. Die Abbildung 8-28 zeigt exemplarisch einen Ausschnitt der Grundgesamtheit der Ensembles aus Abschnitt 8.4. Weiter sind aus der Grundgesamtheit 1 000 Werte der Spannung als Stichprobe gezogen und als Histogramm dargestellt. Wie zu erkennen, unterscheidet sich der Mittelwert der Grundgesamtheit von dem der Stichproben.

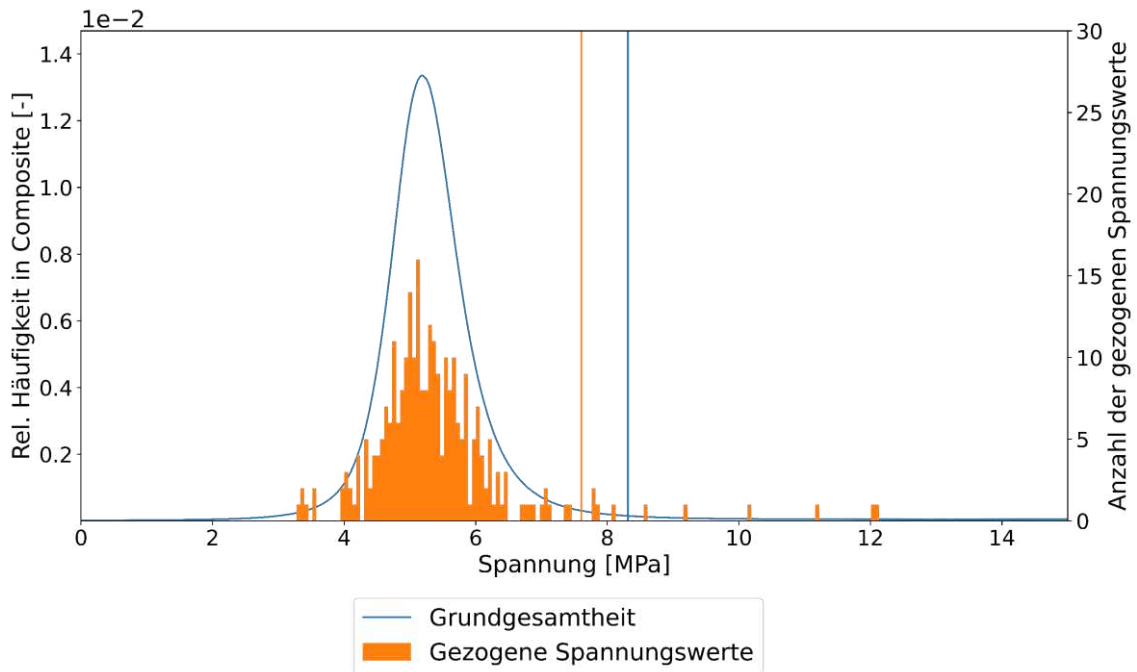


Abbildung 8-28: Durchschnittliche Spannungsverteilung als Grundgesamtheit und Histogramm 1000 gezogener Spannungswerte.

Die Stichprobenziehung kann für Matrix und Fasern getrennt oder für das Composite kombiniert durchgeführt werden. Dies entspricht dem SVE- (kombiniert) und dem RVE-Ansatz (getrennt). Im Falle des RVE-Ansatzes muss das genaue Verhältnis der Stichproben von Matrix und Fasern sichergestellt werden, damit das Volumenverhältnis, dem der in der Monte-Carlo-Simulation verwendeten entspricht. Für die weitere Untersuchung in dieser Arbeit werden die Proben aus der Spannungsverteilung des Composites entnommen, d.h. es wird der SVE-Ansatz verwendet. Um die effektive Compositesteifigkeit aus den gezogenen Spannungswerten zu berechnen, wird zunächst der arithmetische Mittelwert der gezogenen Spannungswerte ermittelt, dann wird die Steifigkeit bestimmt.

Die Abbildung 8-29 zeigt die Verteilung der berechneten Steifigkeiten aus den gezogenen Spannungen mit unterschiedlicher Größe. Dargestellt ist dabei lediglich die Steifigkeit in 11-Richtung. Verwendet werden 10 000 Wiederholungen der Stichprobenziehung, um die Verteilung der Steifigkeit zu bestimmen. In der Abbildung zu erkennen ist, dass die Verteilungen denselben Mittelwert haben und dass dieser identisch ist zu dem Mittelwert aus der Monte-Carlo Simulation in Abschnitt 8.4. Weiter ist ersichtlich, dass die Streuung größenabhängig ist. Die Stichprobenziehung mit dem kleinsten Volumen hat die größte Streuung.

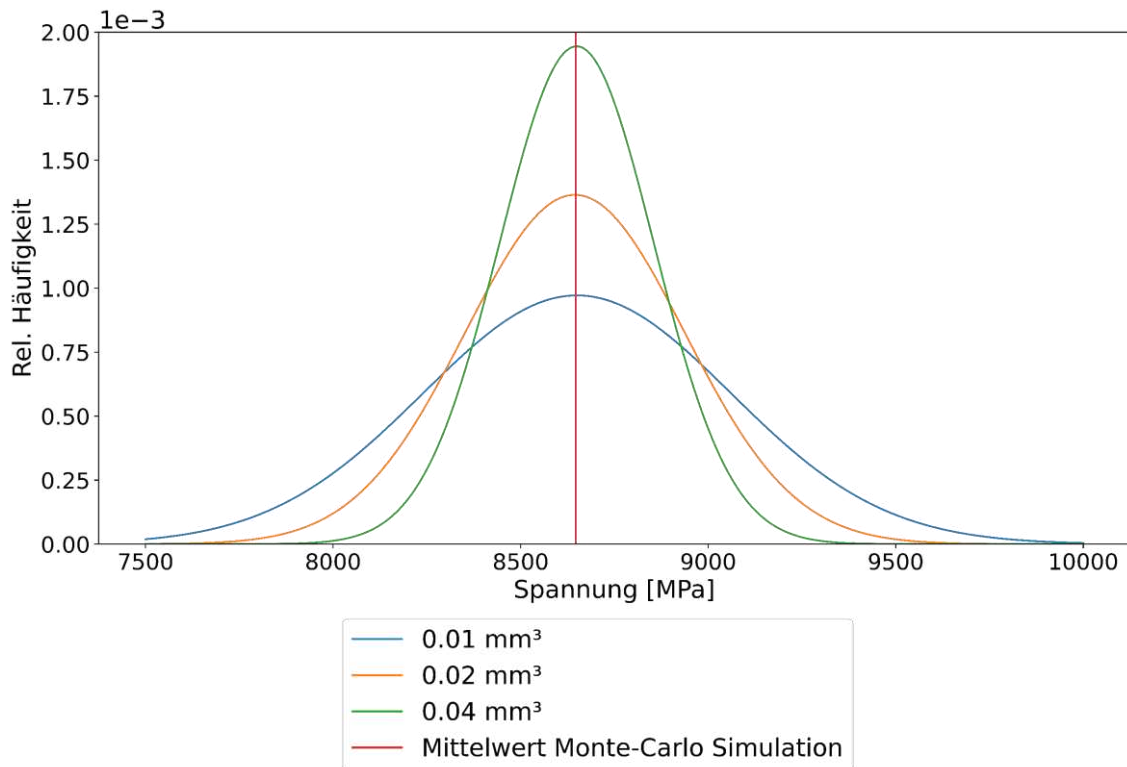


Abbildung 8-29: Größenabhängige effektive Steifigkeitsverteilung aus gezogenen Spannungswerten für die Daten aus den SVEs aus Abschnitt 8.4.

Die aus den dargestellten Steifigkeitsverteilungen ermittelte Standardabweichung kann weiter als Funktion der Größe dargestellt werden und ist in Abbildung 8-30 zu sehen. Die Darstellung über einer charakteristischen Länge, mit $l = \sqrt[3]{V_s}$, wird zum besseren Verständnis gewählt. Außerdem wird die Standardabweichung relativ zum Mittelwert der Compositesteifigkeit dargestellt. Die Einzelwerte stammen direkt aus Monte-Carlo-Simulationen von 50 und 100 Fasern und dienen der Validierung der Stichprobenmethode. Dabei stimmen die Werte der Monte-Carlo-Simulation und die des Stichprobenverfahrens gut überein. Damit wird das Stichprobenverfahren zur Bestimmung der größenabhängigen Standardabweichung aus einer statistischen Grundgesamtheit validiert. Weiter ist ersichtlich, dass mit zunehmender Kantenlänge die relative Standardabweichung der effektiven Verbundsteifigkeit rasch abnimmt und für große Kantenlängen vernachlässigbar ist. Für kleinere Kantenlängen, insbesondere unter 0,2 mm ist die Abweichung jedoch nicht vernachlässigbar klein.

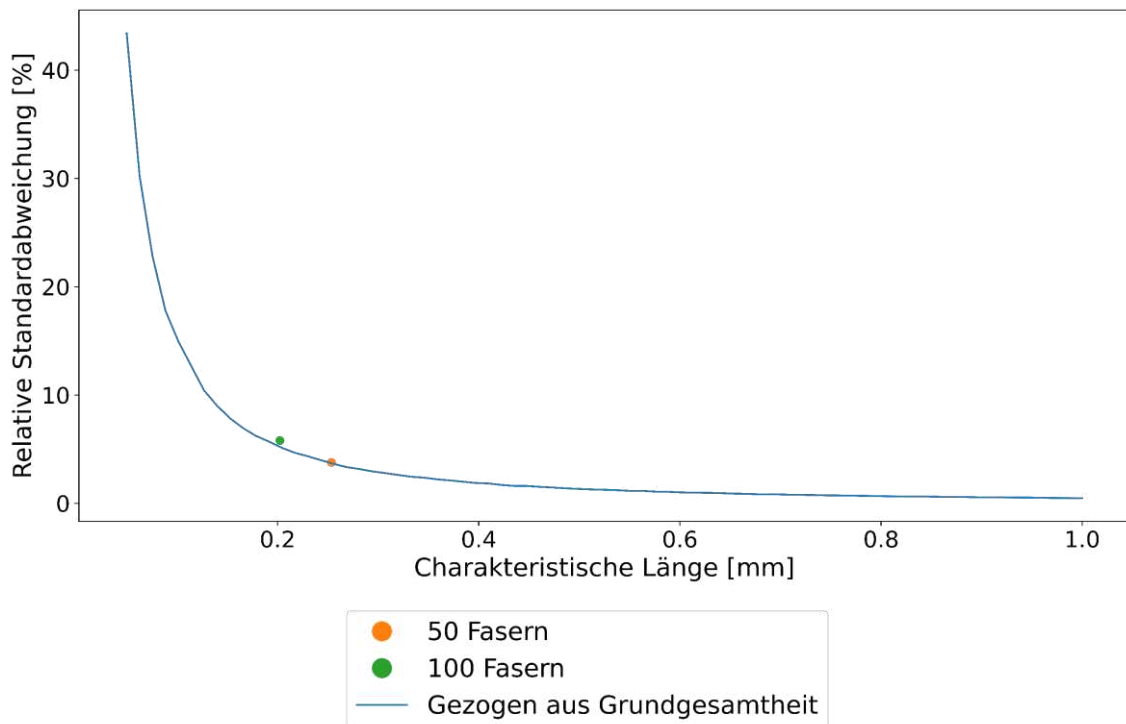


Abbildung 8-30: Relative Standardabweichung der effektiven Steifigkeit in Abhängigkeit der Größe sowie die relative Standardabweichung der Monte-Carlo Simulationen mit 50 und 100 Fasern.

Nach dem derzeitigen Stand der Technik werden bei der Auslegung von Bauteilen aus kurzfaserverstärkten Kunststoffen üblicherweise die Mittelwerte der effektiven Compositesteifigkeit verwendet [6]. Dies beruht auf der Annahme, dass das Volumen eines jeden Punktes einer Bauteilauslegung sehr groß im Verhältnis zur Mikrostruktur und die Streuung der mittleren Eigenschaften daher gering ist. Diese Annahme ist vor dem Hintergrund der Ergebnisse der dargestellten Untersuchung (vgl. Abbildung 8-30) neu zu bewerten.

Dafür wird der Einfluss einer lokalen Streuung der Compositesteifigkeit auf der Bauteilebene aufgezeigt. Zu diesem Zweck wird im Folgenden eine Zugprobe unter Berücksichtigung der lokalen Streuung der Compositesteifigkeit numerisch analysiert. Das Composite wird als linear-elastisches Material modelliert. Dazu wird eine Zugprobe nach DIN EN ISO 527, Typ 1BA (vgl. Abbildung 2-1) verwendet. Zur Vereinfachung wird nur die Randschicht mit einer homogenen Faserorientierung in der Analyse berücksichtigt. Mit dieser Vereinfachung kann die Wirkung der Streuung an den Faserensembles von der Wirkung der Streuung an der Faserorientierung getrennt werden.

Die numerische Analyse wird mit zwei gewählten Netzgrößen durchgeführt. Im ersten Fall mit 1 mm Kantenlänge und 0,25 mm im zweiten Fall. Die verwendeten Elemente sind quadratische Hexaeder-Elemente (C3D20). Für jeden Knoten des Finite-Elemente-Modells wird der E-Modul entsprechend einer für jede Netzfeinheit angenommenen Normalverteilung gezogen. Dabei

ist der Mittelwert der Normalverteilungen mit 5300 MPa identisch, jedoch die Standardabweichungen sind mit 1060 MPa (0,25 mm) und 132,5 MPa (1 mm) unterschiedlich. Durch dieses Vorgehen ist die Schwankung des E-Moduls bei dem feineren Netz größer als bei dem gröberem Netz.

Als Randbedingung für die FEA des Probekörpers wird ein Ende des Probekörpers fixiert und eine Verschiebung von 0,4 mm auf das gegenüberliegende Ende aufgeprägt. In Abbildung 8-31 ist als Ergebnis die von-Mises Vergleichsspannung dargestellt.

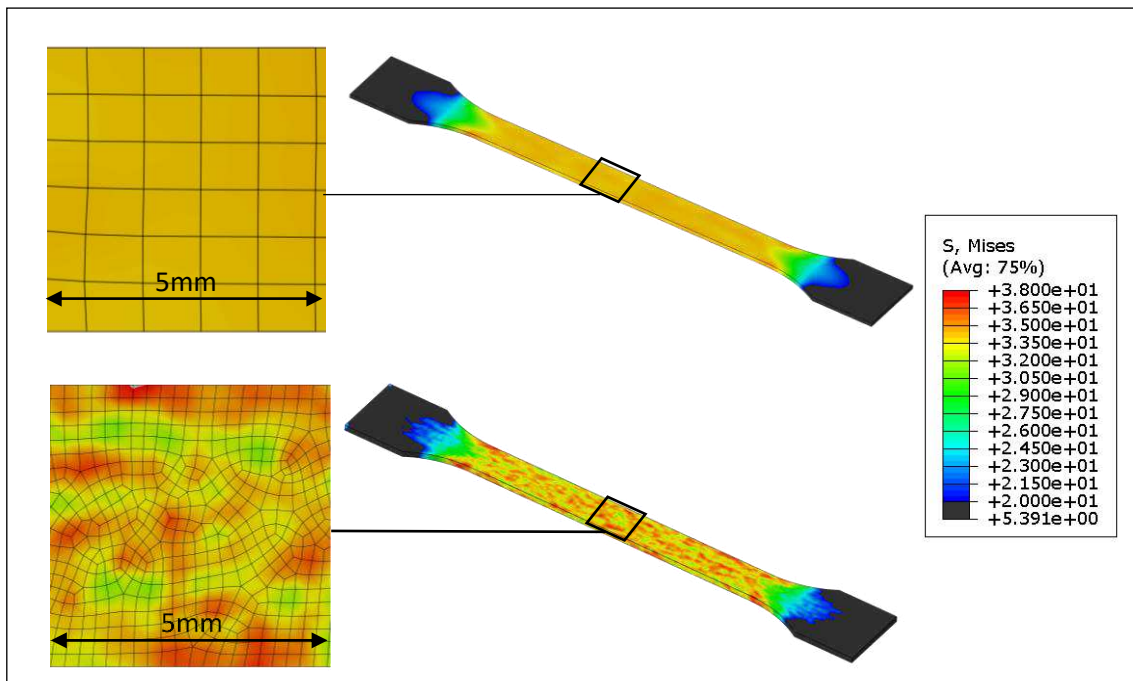


Abbildung 8-31: FEA mit zwei unterschiedlichen Netzgrößen (oben: 1,0 mm, unten: 0,25 mm) eines Probekörpers mit gleichmäßiger Faserorientierung unter Berücksichtigung der statistischen Abweichung des effektiven E-Moduls durch den Einfluss unterschiedlicher Faserensembles.

Die FEA mit 1 mm Netzgröße ergibt eine nahezu konstante Spannung von etwa 33 MPa mit einer maximalen Streuung von $\pm 0,4$ MPa. Mit dem feineren Netz ist jedoch eine heterogene Spannungsverteilung der Zugprobe aufgrund der Streuung der Compositesteifigkeit deutlich erkennbar. In einem vergrößerten Abschnitt der Oberfläche treten Spannungswerte zwischen etwa 3 MPa und 38 MPa auf. Die gesamte Reaktionskraft des Bauteils ist dabei mit beiden Netzgrößen numerisch identisch. Aufgrund der Größe des Bauteils wird die Streuung der Compositesteifigkeit integral für das Bauteil ausgemittelt.

Die gezeigte heterogene Belastungsverteilung kann qualitativ mittels Digital-Image-Correlation (DIC) an experimentell durchgeführten Zugversuchen nachgewiesen werden. Für die Auswertung wird die Software *GOM Correlate Professional 2020* verwendet. Verwendet wird eine Facettengröße von 32 Pixeln, bei einem Punktabstand von 30 Pixeln. Über die Probenbreite des Zugprobekörpers ergibt die gewählte Einstellung ca. 20 Facetten, eine qualitativ ähnliche

Anzahl zu den Elementen in der gezeigten FEM Simulation des Zugprobekörpers. Zur Reduzierung eines Messrauschens wird eine Spline-Glättung verwendet, welche zeitlich über mehrere Aufnahmen das Ergebnis glättet. Unterteilt wird das Ergebnis in zwei Varianten mit und ohne die Verwendung einer weiteren räumlichen Glättung auf Mittelwertbasis. Die genauen Einstellungen für das DIC sind in der Tabelle A-6 im Anhang aufgeführt.

In der Abbildung 8-32 ist die erste Hauptdehnung dargestellt, ermittelt mittels DIC und FEM. Verwendet wird eine identische Skalierung von 0,5% bis 0,75%. Mit räumlicher Glättung der DIC-Auswertung kann die „globale“ Hauptdehnung gezeigt werden. Dabei ist diese nicht konstant, sondern lokal unterschiedlich. In der oberen linken und unteren rechten Ecke sind Dehnungskonzentrationen ersichtlich. Ohne räumlichen Filter kann gezeigt werden, dass eine starke Streuung die lokale Hauptdehnung überlagert. Im Vergleich dazu gibt es beim Ergebnis der FEM keine Regionen mit Dehnungskonzentration, aber ebenfalls eine Streuung. Die Streuung des Ergebnisses der FEM ist dabei deutlich geringer ausgeprägt als die Streuung der DIC Ergebnisses.

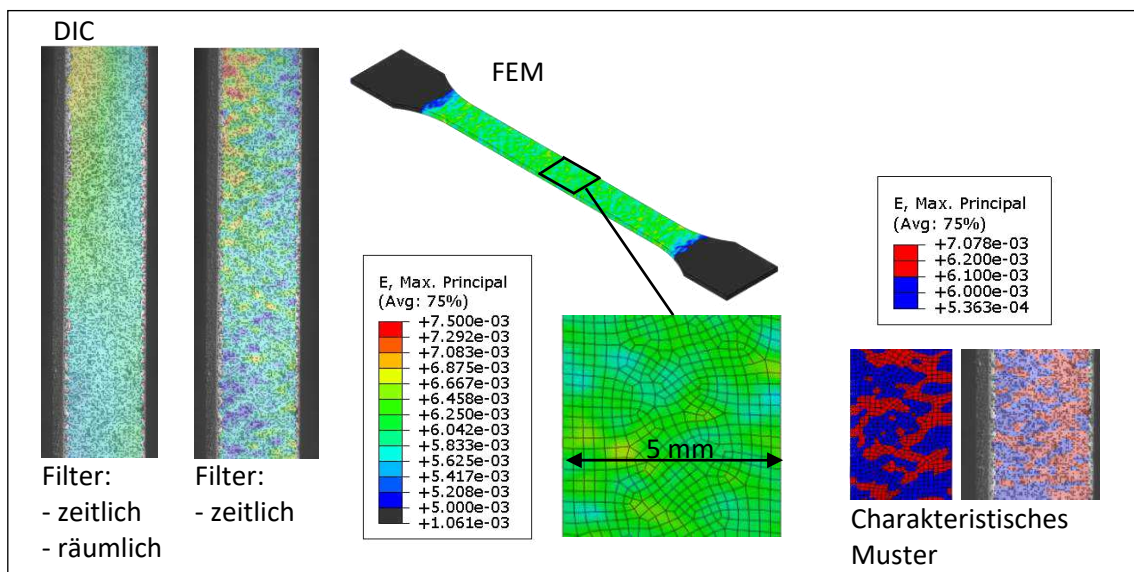


Abbildung 8-32: Vergleich der ersten Hauptdehnung zwischen FEM Simulation und DIC unter Berücksichtigung der lokalen Streuung bei gleicher Skalierung.

Die Unterschiede der lokalen Streuung und der regionalen Dehnung zwischen DIC und FEM lassen sich dabei durch die Reihe von Annahmen des FEM-Modells erklären. Im FEM-Modell werden eine einheitliche Faserorientierungsverteilung, Faserlängenverteilung und ein homogener Faservolumengehalt angenommen. Diese drei Größen können jedoch bei einem Zugprobekörper bereits globale Schwankungen aufweisen. Hierdurch kann die globale Deformation heterogen über den gesamten Probekörper ausfallen. Dass die lokale Streuung per DIC größer ausfällt als per FEM kann ebenfalls über die Modellierungsparameter der zugrunde

liegenden RVEs erklärt werden. So wird zum Beispiel die Viskoelastizität der Matrix nicht berücksichtigt, welche die Streuung der Compositesteifigkeit erhöht. Des Weiteren ist die Faserlängenverteilung im Gegensatz zu einer realen Verteilung beschränkt. Grundsätzlich existieren in realen Compositen mehr Zufallsvariablen als in den hier verwendeten RVEs. Eine weitere Überlagerung mit zufälligem Messrauschen kann hier zwar nicht ausgeschlossen werden, wird aber durch die zeitliche Glättung minimiert. Des Weiteren zeigt sich bei der Benutzung einer binären Skalierung für DIC und FEM ein identisches charakteristisches Muster, welches ein Art Vorzugsrichtung quer zur Zugrichtung zeigt. Dies spricht gegen ein als isotrop angenommenes Messrauschen.

Aus den Ergebnissen der heterogenen Belastungsverteilung lassen sich zwei wesentliche Punkte ableiten. Erstens können die Belastungen auf makroskopischer Bauteilebene von denen abweichen, die durch ein rein mittelwertbasiertes Modell berechnet werden. Eine Auslegung eines Bauteils auf der Grundlage von Mittelwerten wäre daher nicht in der Lage, die lokal auftretenden höheren Spannungen zu berücksichtigen. Dies birgt das Risiko, dass die Konstruktion dadurch nicht ausreichend sicher gegen mechanisches Versagen ist. Zweitens ist die Streuung der Spannungswerte von der örtlichen Auflösung abhängig. Im Kontext einer FEM ist somit die Berechnung netzgrößenabhängig, mit einer größeren Streuung der lokalen Belastung bei einer kleineren Netzgröße. Offensichtlich ist es nicht sinnvoll, die Netzgrößen immer weiter zu verkleinern, bis die Grenze der Annahme des Composites als Kontinuum erreicht ist. Die explizite Modellierung einzelner Fasern in einer Bauteilanalyse ist außerhalb der Möglichkeiten aktueller, durchschnittlicher Rechenleistung. Stattdessen scheint es sinnvoller zu sein, ein mesoskaliges Materialmodell zu entwickeln, das die Spannungsstreuung auf statistischer Basis mit einbezieht. Insbesondere in einem kritischen Abschnitt eines Bauteils würde dies wichtige Informationen für den Auslegungsprozess von kurzfaserverstärkten Kunststoffen liefern.

8.9 Ableitung eines Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium

Die effektive Steifigkeit ist für eine Bauteilauslegung zwar notwendig, aber nicht immer hinreichend. Insbesondere wenn das Versagen von Bauteilen berechnet werden muss, bedarf es der Kenntnis von Werkstoff-Belastungsgrenzen. Diese könnten zwar aus Simulationen entnommen werden, bei denen kritische Versagensmechanismen berücksichtigt werden, aber dies ist aufgrund der notwendigen Berechnungsdauer aktuell sehr zeitaufwendig. Phänomenologische Ansätze, wie das Tsai-Wu-Kriterium, mit denen Werkstoff-Belastungsgrenzen auf globaler Ebene bestimmt werden können, sind hingegen schnell zu berechnen, haben jedoch erhebliche Nachteile. Zum einen werden zugrundeliegende mikromechanische Schädigungsmechanismen nicht berücksichtigt. Zum anderen werden für die Kalibrierung der Richtungsabhängigkeit physische Versuche des Composites zur Kalibrierung der

Richtungsabhängigkeit benötigt. Für kurzfaserverstärkte Kunststoffe sind solche Kalibrierungsversuche insofern kritisch, da häufig Versuche in und quer zur Faserrichtung verwendet werden. Spritzgegossene Proben weisen jedoch in der Regel keine unidirektionale, einheitliche Faserorientierung auf. Daher kann ein Kalibrierungsversuch in oder quer zur Faserrichtung nur eine grobe Näherung darstellen.

Sowohl die phänomenologischen Ansätze als auch die komplette Modellierung der Versagensmechanismen innerhalb von RVEs sind daher für die Bauteilauslegung nicht optimal. Daher soll hier ein Vorschlag für die Bestimmung einer Belastungsgrenze anhand linear-elastischer Modellierungen erarbeitet werden. Dabei wird im Gegensatz zu den phänomenologischen Modellen die Mikrostruktur berücksichtigt und die Art des Versagensmechanismus. Im Gegensatz zur vollständigen Modellierung aller Schadensmechanismen bleibt die benötigte Berechnungsdauer vertretbar. Die Verwendung einer linear-elastischen Modellierung wird weiter dadurch motiviert, da für eine Bauteilauslegung häufig bereits die Kenntnis der Grenze des linear-elastischen Bereichs ausreichend ist.

Aus den bisherigen Untersuchungen ist offensichtlich, dass ein mittelwertbasierter Ansatz für kurzfaserverstärkte Kunststoffe nicht als sinnvoll erachtet werden kann, da der Einfluss der Faserensembles nicht berücksichtigt wird. Übereinstimmend dazu wird in [136] aufgezeigt, dass ein mittelwertbasierter Ansatz den Fließbeginn einer plastischen Matrix unterschätzt.

Der hier vorgestellte Ansatz soll daher die Streuung der effektiven Compositeigenschaften berücksichtigen. Dazu wäre zum Beispiel ein Monte-Carlo Ansatz mit vielen Faserensembles auf der Bauteilebene denkbar, jedoch ist dies mit einem erheblichen Rechenaufwand verbunden und aufgrund dessen nicht praktikabel. Eine Alternative ist es, die Zustandsgrößenverteilung einer Grundgesamtheit zu nutzen. Diese beinhaltet die Information über die Streuung und ist wie gezeigt größenunabhängig. Ein Versagenskriterium könnte so aussehen, dass der Anteil einer Zustandsvariable, wie Spannung oder Dehnung, der oberhalb eines kritischen Wertes liegt, mit einer Versagenswahrscheinlichkeit korreliert. Diese Idee soll hier weiter ausgearbeitet werden.

Zunächst sei betont, dass eine Versagenswahrscheinlichkeit nicht bedeutet, dass es einen exakten Punkt des Versagens gibt, sondern nur die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Belastung ein Versagen eintritt. Die Information über eine solche Wahrscheinlichkeit kann auf zwei Arten weiterverarbeitet werden. Eine Möglichkeit ist es, die Wahrscheinlichkeit direkt innerhalb der FEM zu verwenden. Ein solcher Ansatz wird zum Beispiel bei der Modellierung von Scher-Transformations-Zonen [137] verfolgt. Dies hat jedoch zur Folge, dass die Lösung des FE-Problems mit einer statistischen Unsicherheit erfolgt. Dadurch wird jedoch eine statistische Absicherung der FE-Rechnung notwendig, also einer Wiederholung der Simulation. Eine Alter-

native der Informationsverarbeitung der Wahrscheinlichkeit ist es, dem Anwender diese Information bereitzustellen, die FE-Lösung jedoch ausschließlich auf mittleren Werten zu berechnen.

Für eine genaue Ausarbeitung einer Versagenswahrscheinlichkeit bedarf es eigentlich einer genauen Modellierung der unterschiedlichen Versagensmechanismen auf der Mikroebene. Hierzu zählt ein Versagen der Matrix, der Faser und der Faser-Matrix Haftung. Da in dieser Arbeit diese Versagensmechanismen nicht hinreichend genau modelliert werden können, ist eine genauere Ausarbeitung der Versagenswahrscheinlichkeit nur in engen Grenzen möglich. Zur Vereinfachung wird statt eines werkstofflichen Totalversagens durch einen Bruch eine maximale Belastungsgrenze untersucht. Diese wird anhand von Zugversuchen vereinfachend frei als der Punkt definiert, an dem die gemessenen Spannungen 10% zur linear-elastischen Ursprungssteifigkeit abweichen. In der Abbildung 8-33 sind die Zugversuche aus Kapitel 2 dargestellt, sowie die linear-elastische Modellierung bis zu der hier definierten Belastungsgrenze.

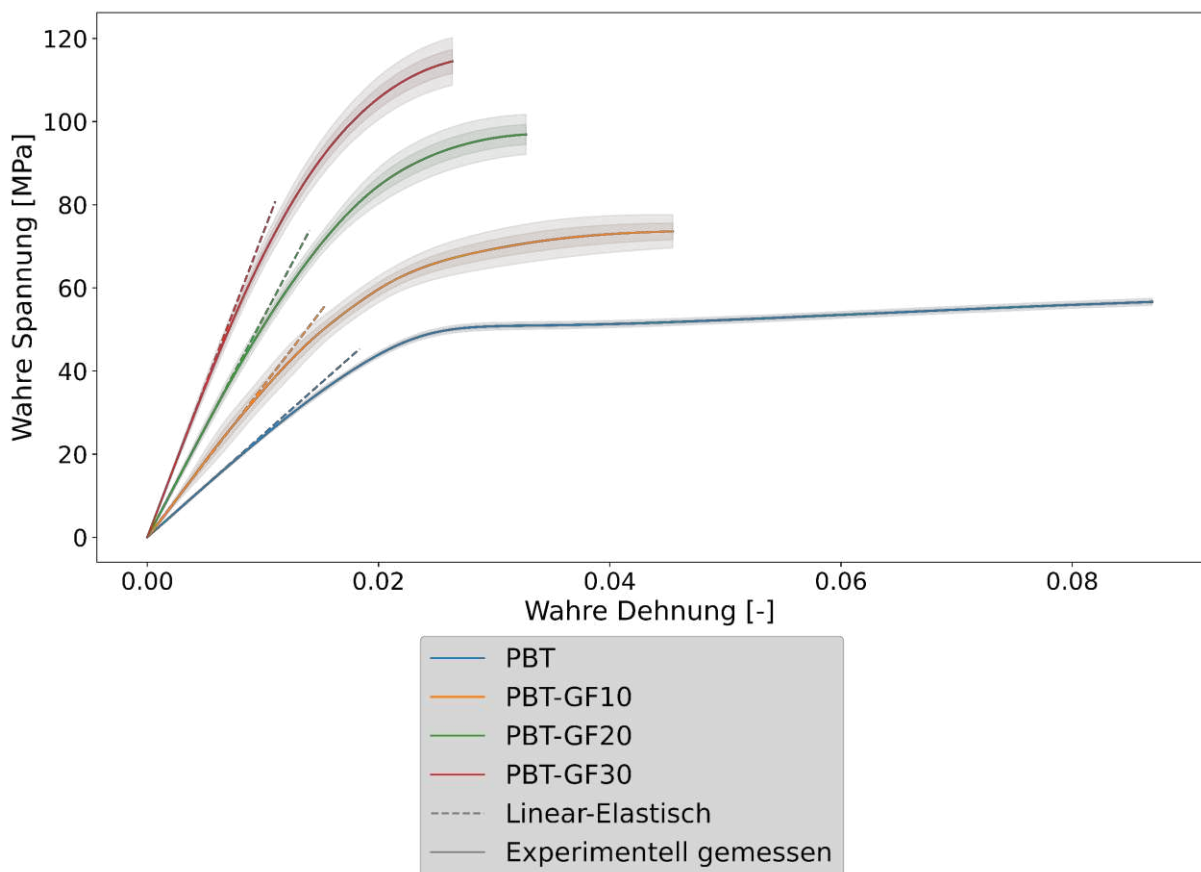


Abbildung 8-33: Experimentell gemessene Zugversuche sowie linear-elastische Steifigkeit bis zur definierten Belastungsgrenze.

Weiter wird vereinfachend angenommen, dass die Belastungsgrenze ausschließlich durch die Matrix bestimmt wird, das heißt, dass eine durch Faser-Matrix Haftung oder durch Faserbruch bestimmte Belastungsgrenze nicht berücksichtigt wird.

Für die Ausarbeitung der Idee werden erneut SVEs verwendet, die Parameter (Batch 13) sind in der Tabelle A-5 im Anhang aufgelistet. Der E-Modul für die Matrix wird hierfür aus den Zugversuchen mittels PBT ermittelt. Die Belastung wird so gewählt, dass sie der Belastungsgrenze des PBT-GF20 aus den Zugversuchen entspricht. Der Idee entsprechend wird der Mittelwert der Belastungsgrenze sowie der Mittelwert plus/minus die zweifache Standardabweichung verwendet. Die gewählten Werte entsprechen dabei einer 5 %, 50 % und 95 % Wahrscheinlichkeit der Belastungsgrenze des PBT-GF20 im Zugversuch.

In der Abbildung 8-34 ist die Grundgesamtheit der Spannungsverteilung $p(\sigma)$ der Matrix aus den SVEs für die drei gewählten Belastungen dargestellt. Aus den dargestellten Grundgesamtheiten wird jeweils der Anteil bestimmt, der oberhalb eines kritischen Wertes liegt. Verwendet wird hierzu die mittlere Spannung bei Erreichen der Belastungsgrenze $\sigma_{krit,PBT}$ des unverstärkten PBT-Zugversuchs. Der Anteil wird berechnet mit

$$A_{krit} = \int_{\sigma_{krit,PBT}}^{\infty} p(\sigma) d\sigma. \quad (Gl.8-3)$$

Für die drei Grundgesamtheiten ergibt sich der kritische Anteil zu ca. 5 %, 10 % und 17 %.

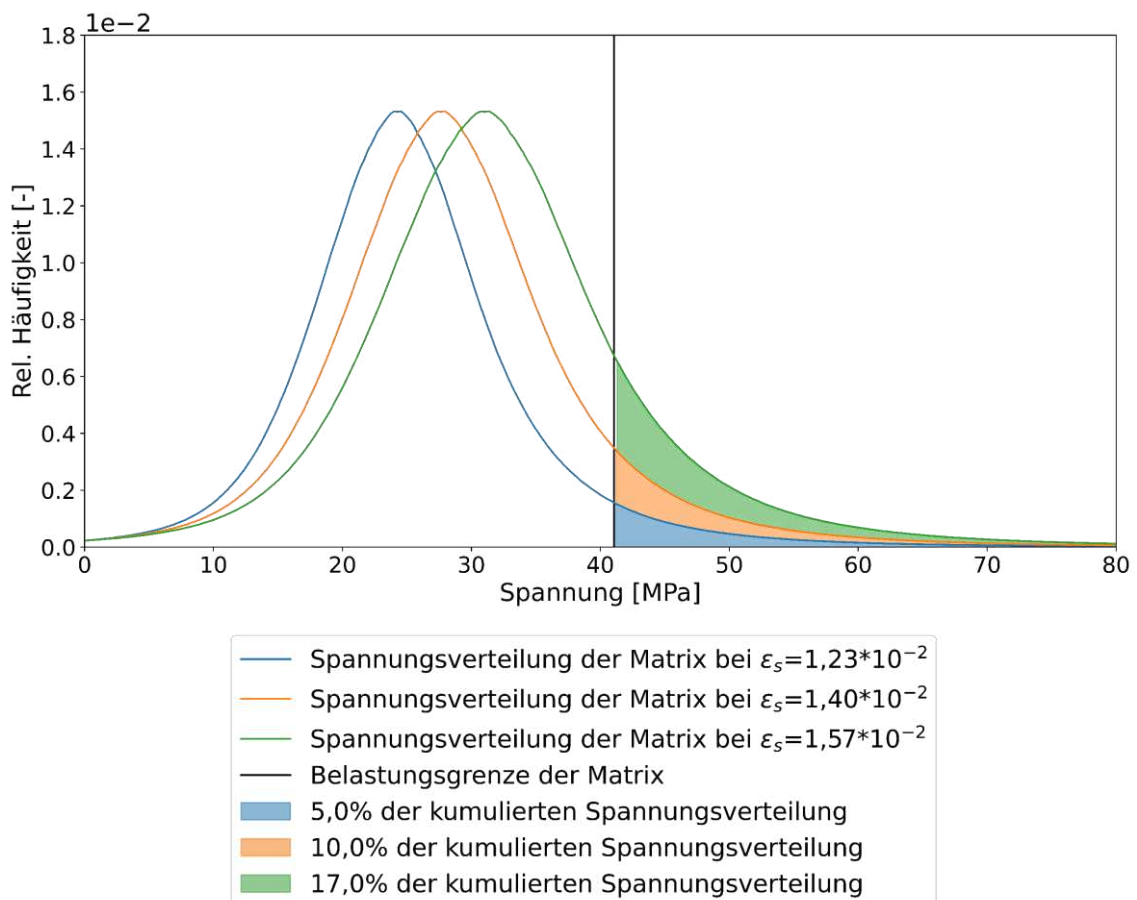


Abbildung 8-34: Spannungsverteilung der linear-elastischen Matrix bei der globalen Dehnung, die im Experiment als Belastungsgrenze definiert wird, sowie Belastungsgrenze der Matrix.

Weiter wird angenommen, dass die Belastungsgrenze einer Normalverteilung entspricht. Aus dieser Annahme und den drei Werten des kritischen Anteils für eine 5%, 50% und 95% Wahrscheinlichkeit eines Versagens kann eine kumulierte Wahrscheinlichkeit des Erreichens einer Belastungsgrenze angegeben werden. Diese ist in Abbildung 8-35 exemplarisch dargestellt. Die Abbildung zeigt dabei den Verlauf der Wahrscheinlichkeit des Erreichens der Belastungsgrenze in Abhängigkeit des Anteils der Matrix oberhalb des definierten kritischen Wertes.

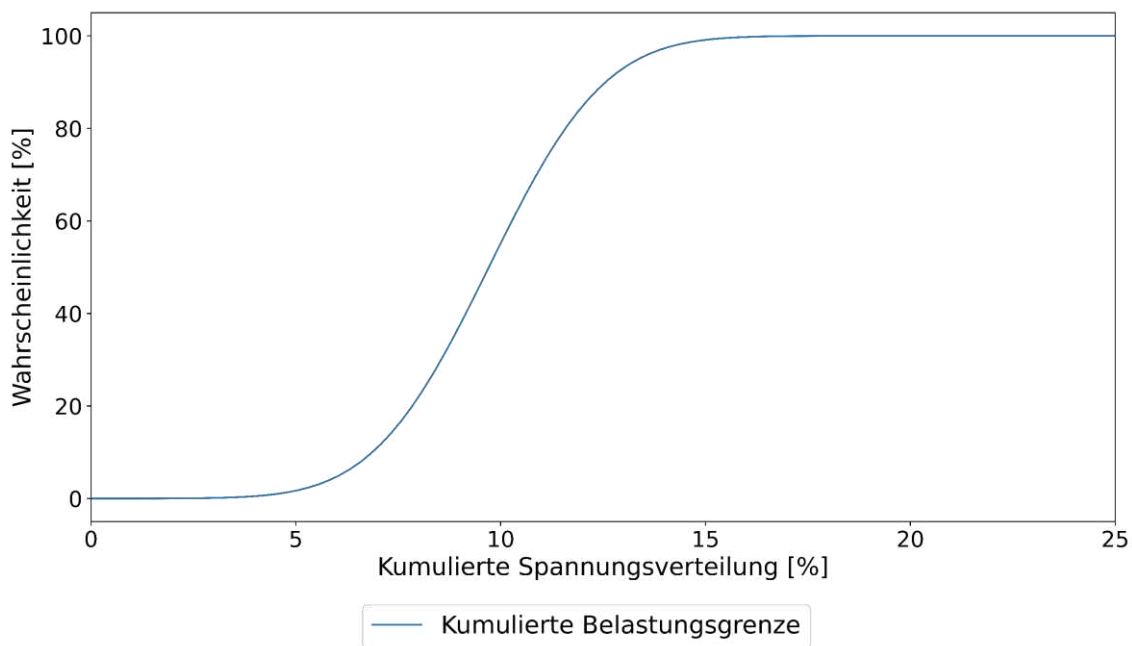


Abbildung 8-35: Kumulierte Wahrscheinlichkeit des Erreichens einer Belastungsgrenze in Abhängigkeit der kumulierten Spannungsverteilung oberhalb des kritischen Wertes der Matrix.

Soll der dargestellte Zusammenhang für eine Bauteilauslegung genutzt werden, ist es notwendig die kumulierte Belastungsgrenze in ein Modell zu überführen, da diese generell vom äußeren Belastungszustand und der Mikrostruktur abhängig ist. Genutzt werden können hierfür die Werte oberhalb der kumulierten Spannungsverteilung (5%, 10% und 17%). Bei einer gegebenen äußeren Last können diese Werte eindeutig einem Spannungswert zugeordnet werden, wie die Abbildung 8-36 verdeutlicht. Die drei Spannungswerte können in Verbindung mit der effektiven Dehnung der hier vorhandenen äußeren Last formal als Steifigkeit behandelt werden. Verallgemeinert kann jeweils ein Tensor $C_{kum,x}$ (hier $x = \{5,10,17\}$) definiert werden. Mittels dieses Tensors kann die Spannung bestimmt werden, die $x\%$ der kumulierten Spannungsverteilung ausmacht.

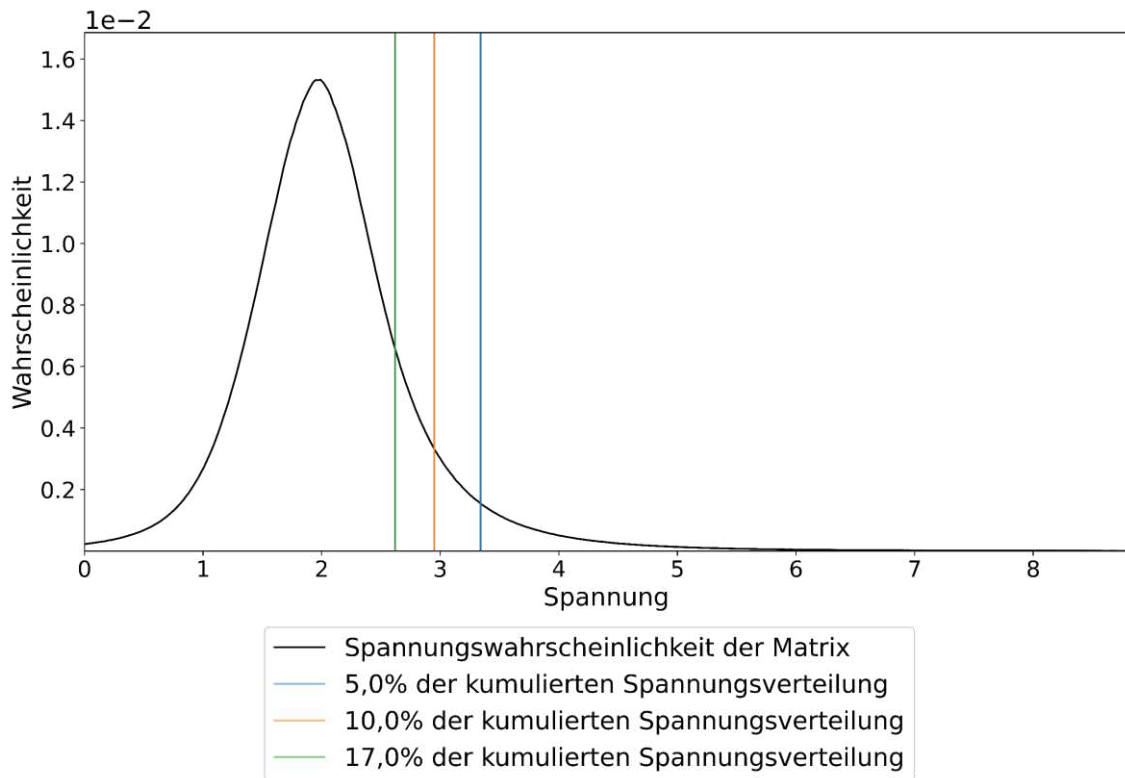


Abbildung 8-36: Durchschnittliche Spannungsverteilung der Matrix bei einer globalen Dehnung von 1% sowie die drei Spannungswerte, die 5%, 10% und 17% der kumulierten Spannungsverteilung oberhalb eines kritischen Wertes liegen.

Ein Vergleich dieser Spannung mit der Belastungsgrenze liefert dann die Aussage zur Ausfallwahrscheinlichkeit. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung 8-37 ein Ablaufschema für die Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeit im Kontext einer Bauteilauslegung dargestellt. Berechnet wird die Ausfallwahrscheinlichkeit für jeden Punkt des Bauteils, mit der jeweiligen Dehnung ϵ und den Tensoren $C_{kum,x}$. Verglichen wird anschließend die Spannung $\sigma_{kum,x}$ mit dem kritischen Wert der Spannung σ_{krit} . Verwendet wird hierfür die Vergleichsspannungshypothese nach von Mises.

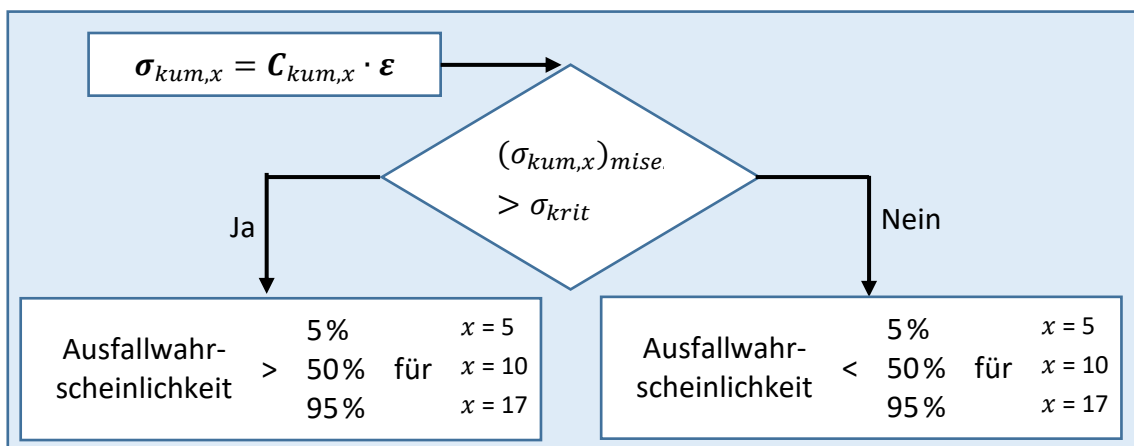


Abbildung 8-37: Ablaufschema zur Berechnung der Ausfallwahrscheinlichkeit im Kontext einer Bauteilauslegung bei gegebener Dehnung an jedem Punkt des Bauteils.

Es sei abschließend erneut betont, dass es sich bei dieser Idee um ein Konzept handelt, das zur Beschreibung der Belastungsgrenze einer zum sofortigen Bruch führenden Schädigung dient. Die Bauteiltragfähigkeit entspricht demnach der Werkstofffestigkeit. Trotzdem kann bereits festgehalten werden, dass bei dieser Überlegung die Streuung der Grundgesamtheit von entscheidender Bedeutung für die Belastungsgrenze ist. Entsprechend ist eine Modellierung der Mikrostruktur mit Rücksicht auf die Streuung der Compositeigenschaften wichtig.

9 Homogenisierung mittels neuronaler Netzwerke

Die in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen anhand der RVEs zeigen deutlich, dass eine präzise Modellierung der Mikrostruktur essenziell für eine genaue Bestimmung effektiver Compositeigenschaften ist. Ein grundlegendes Problem ist jedoch die erforderliche Rechenzeit. Selbst mit der heute verfügbaren Rechenleistung können detaillierte RVEs zu inakzeptablen Rechenzeiten führen. Insbesondere bei der FE^2 -Methode [138] kann der Rechenaufwand für komplexe technische Bauteile extrem hoch und damit unwirtschaftlich sein, da bei dieser Methode für jeden Integrationspunkt eines FE Netzes eines technischen Bauteils ein RVE betrachtet und mit einer weiteren FEA gelöst werden muss.

Der enorme numerische Aufwand der FE^2 -Methode könnte durch den Einsatz neuronaler Netze verringert werden. Mit neuronalen Netzen ist es möglich, komplexe mathematische Zusammenhänge durch sehr schnell auswertbare Funktionen zu approximieren. Voraussetzung dafür ist eine ausreichend große Menge an Daten über die zu approximierenden Zusammenhänge.

Die Modellierung der Compositeigenschaften durch neuronale Netze scheint daher sinnvoll zu sein. So kann die Rechenzeit für technische Komponenten im Vergleich zu einem FE^2 -Ansatz erheblich reduziert werden. Die Compositeigenschaften können damit schnell berechnet werden und basieren auf detaillierten RVEs, die im Vergleich zu klassischen Homogenisierungsmethoden, wie der Methode von Mori-Tanaka, weniger Annahmen erfordern.

Kürzlich wurden mehrere Studien vorgestellt, die die Materialeigenschaften oder die Materialmodellierung von Compositen mit Hilfe neuronaler Netze untersuchen. In [139] verwenden Liu et al. linear-elastische, zweidimensionale RVEs für generische Composite, um eine Datenbank zu erstellen. Anschließend wird ein neuronales Netz verwendet, um die Daten zu rekonstruieren. In [140] untersuchen Chen et al. die Vorhersage der Festigkeit von Metall-Matrix-Verbundwerkstoffen durch neuronale Netze, die ebenfalls auf zweidimensionalen RVEs basieren. Rao und Liu zeigen, dass es mit gefalteten neuronalen Netzen (eng. convolution neural networks, CNN) möglich ist, die resultierende Steifigkeit für bestimmte Anordnungen von kugelförmigen Einschlüssen vorherzusagen [141]. In [142] werden nichtlineare Spannungs-Dehnungs-Beziehungen von (binären) RVEs von Yang et al. als Datenbasis für ein neuronales Netz verwendet. Ein viskoelastisches, eindimensionales Materialmodell wird in [143] von Jung und Ghaboussi untersucht.

Auch eine elasto-plastische Modellierung findet sich in einigen Untersuchungen. Eine Proof-of-Concept-Studie wird in [144] durchgeführt. Es wird gezeigt, dass es möglich ist, die Spannungs-Dehnungs-Beziehung eines von Mises-Materials durch ein neuronales Netzmodell zu

beschreiben. Ein Vergleich zwischen einem klassischen mesoskaligen konstitutiven Modell, einer sogenannten Hyper-Reduktion und neuronalen Netzen wird in [145] vorgestellt. Es wird festgestellt, dass neuronale Netze sehr schnell sind und allgemeine Spannungszustände reproduzieren können. Des Weiteren können neuronale Netze erneut trainiert werden, um zusätzliche Daten zu erlernen. Es wird jedoch darauf hingewiesen, dass neuronale Netze eine geeignete Architektur und ein entsprechendes Training erfordern. Weiter sind sie für eine Extrapolation der Daten nicht gut geeignet.

Wu et al. analysieren die Implementierung eines neuronalen Netzes für zyklische und nicht-proportionale Lastpfade [146]. Ghavamian und Simone modellieren in [147] Viskoplastizität auf der Mikroskala mit rekurrenten neuronalen Netzen (RNN). Eine anisotrope, elastoplastische Modellierung wird von Settast et al. für zweidimensionale Schaumstrukturen in [148] und in [149] sowie eine mehrachsige, wegabhängige Modellierung von zweidimensionalen Schaumstrukturen in [150] von Gorji und Mozaffar vorgestellt. Auch Eigenschaften, die durch Transformationsprozesse der Mikrostruktur bestimmt werden, können modelliert werden [151]. Elektrische und elektromechanisch gekoppelte Eigenschaften werden in [152] und [153] für Kohlenstoff-Nanoröhren-Composite untersucht.

All diese Untersuchungen zeigen, dass neuronale Netze zur präzisen Vorhersage komplexer Materialeigenschaften verwendet werden können, wenn eine ausreichende Datenbasis vorhanden ist. In dieser Arbeit wird ebenfalls ein neuronales Netzwerk entwickelt, um die linear-elastischen Eigenschaften kurzfaserverstärkter Kunststoffe mit geringer Berechnungsdauer zu bestimmen. Dabei wird nicht nur der effektive Steifigkeitstensor verwendet, sondern auch das in Abschnitt 8.9 abgeleitete Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium. Da letzteres formal als Steifigkeitstensor behandelt werden kann, wird die Entwicklung lediglich anhand des effektiven Steifigkeitstensors vorgestellt. Die Umsetzung für das Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium ergibt sich analog. Grundlage der hier verwendeten neuronalen Netzwerke ist eine Datenbasis, welche durch die Auswertung von RVEs generiert wird. Das Ziel in den folgenden Unterabschnitten ist es zunächst ein optimales neuronales Netz unter den Gesichtspunkten der absoluten Genauigkeit, der Robustheit und des Rechenaufwandes zu entwerfen. Abschließend erfolgt die Berechnung eines Beispielbauteils.

9.1 Datenerstellung

Für die Erstellung eines neuronalen Netzes zur Berechnung der linear-elastischen Eigenschaften von kurzfaserverstärkten Kunststoffen wird zunächst eine Datenbasis mittels RVEs erstellt. Jedes einzelne RVE bildet dabei einen Datenpunkt der Datenbasis. Als Eingangsparameter werden die Parameter zur Beschreibung der Mikrostruktur des RVEs verwendet, der Ausgangsparameter ist der vollständige effektive Steifigkeitstensor des RVEs sowie die Tensoren zur Berechnung der Auslastungswahrscheinlichkeit.

Eine erste Annahme für die Erstellung der neuronalen Netze ist, dass die einzelnen Datenpunkte gleichmäßig verteilt sein sollen. Aus diesem Grund wird jeder Eingangsparameter für jedes RVE in einem Intervall zufällig ausgewählt. Zu den Eingabeparametern gehören der E-Modul und die Querkontraktionszahl der Matrix, das Aspektverhältnis, der Faservolumenanteil und der Faserorientierungstensor \mathbf{a}_2 in Diagonalform. Um die Eingangsparameter zu reduzieren, werden in dieser Arbeit nur Glasfasern berücksichtigt. Daher werden die mechanischen Eigenschaften der Fasern mit einem E-Modul von 70000MPa und einer Querkontraktionszahl von 0,2 als konstant angenommen. Für die Rotation der Fasern innerhalb des Volumens eines RVE ist eine ODF erforderlich. Daher wird die ODF aus dem Eingangsparameter \mathbf{a}_2 mit der Methode der maximalen Entropie rekonstruiert. Für die Generierung von gleichverteilten \mathbf{a}_2 Tensoren ist die Normalisierungseigenschaft der Einträge a_{ii} zu berücksichtigen. Unabhängige Zufallszahlen für alle drei Einträge würden zu einer Überrepräsentation des isotropen Falls führen. Daher werden die Einträge durch

$$a_{ii} = A_i \cdot (1 - s_1) + B_i \cdot (1 - r_2) \cdot s_1 + C_i \cdot r_2 \cdot s_1 \quad (\text{Gl.9-1})$$

mit

$$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} = [1,0,0], [0,1,0], [0,0,1] \quad (\text{Gl.9-2})$$

und

$$s_i = \sqrt{r_i} \quad (\text{Gl.9-3})$$

erstellt. r_i ist dabei eine Zufallsvariable, welche gleichverteilt ist im Intervall [0;1]. Als weitere Vereinfachung wird das Aspektverhältnis beziehungsweise die Faserlänge jeder Faser eines RVEs gleich gewählt. Das hat zur Folge, dass der Effekt einer Faserlängenverteilung auf die Spannungsverteilung hier nicht weiter berücksichtigt wird. Durch die Wahl des Wurzelmittelswertes für die Fasern ist jedoch der Mittelwert der effektiven Compositesteifigkeit unbeeinflusst dieser Annahme.

Die Abbildung 9-1 zeigt das Beispiel von vier verschiedenen RVEs mit zufälligen, unterschiedlichen Eingangsparametern. Dabei besteht jedes RVE aus 100 Fasern. Bei unterschiedlichen Faservolumenanteilen und einer identischen Anzahl von Fasern kann das Volumen des RVE daher sehr unterschiedlich sein. Auf der Grundlage der Konvergenzstudie (vgl. Abschnitt A 8) ist die verwendete Netzgröße der FEA der RVEs jedoch immer identisch. Bei gleicher Netzgröße und verschiedenen Volumengrößen ergibt sich jedoch eine sehr unterschiedliche Anzahl von Elementen. So werden z.B. bei niedrigem Aspektverhältnis und hohem Faservolumenanteil etwa 100000Knoten pro RVE benötigt, während bei hohem Aspektverhältnis und niedrigem Faservolumenanteil etwa 4000000 Knoten und mehr notwendig sein können. Dies

bedeutet auch, dass die Berechnungsdauer für jeden Datenpunkt unterschiedlich hoch ist. Daher mag es sinnvoll erscheinen, Kombinationen von Eingangsparametern zu bevorzugen, die zu einem geringeren Rechenaufwand führen, z. B. die Vermeidung eines niedrigen Volumenanteils in Kombination mit einem hohen Aspektverhältnis. Dies steht jedoch im Widerspruch zu der Forderung nach einer gleichmäßigen Verteilung der Datenpunkte. Daher wird in dieser Arbeit ebenfalls untersucht, ob Datensätze zufällig verteilt werden müssen oder ob sie vorteilhaft zusammengestellt werden können, um Rechenzeit zu sparen, ohne dass die Vorhersagequalität des neuronalen Netzes geringer wird.

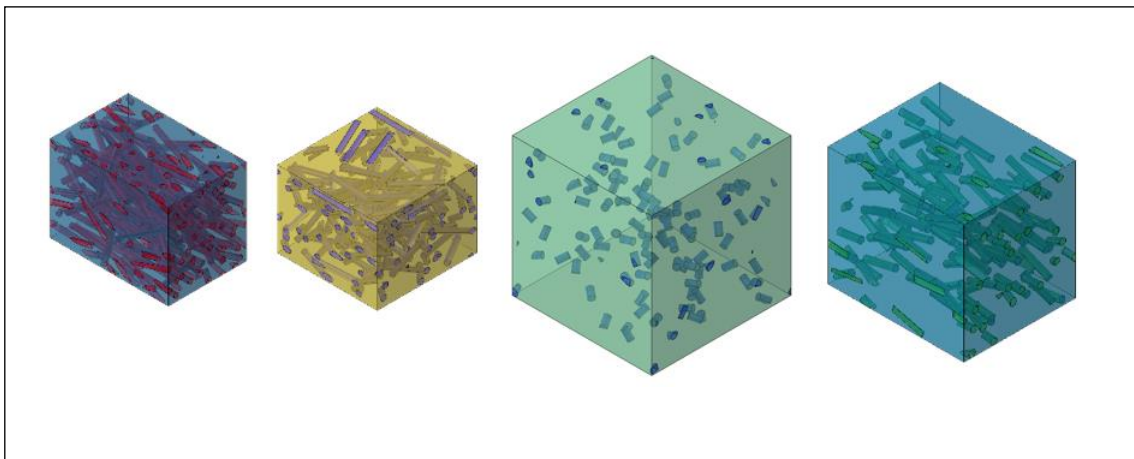


Abbildung 9-1: Vier RVEs mit jeweils 100 Fasern und zufälligen Eingangsparametern.

Im Rahmen dieser Arbeit werden drei Datensätze erzeugt, in denen die Eingangsparameter wie beschrieben gleichmäßig, aber mit unterschiedlichen Grenzen verteilt sind. Die Tabelle 9-1 fasst die Eingabeparameter zusammen und listet die Grenzwerte auf. Mit den ersten zwei Datensätzen wird gezeigt, dass für das elastische Verhalten von kurzfaserverstärkten Kunststoffen viel Rechenzeit für die Erstellung der Datenbasis eingespart werden kann. Die Entwicklung eines optimalen neuronalen Netzwerkes und der Vergleich mit klassischen Methoden zur Berechnung der effektiven Compositesteifigkeit basiert dabei ebenfalls nur auf den ersten beiden Datensätzen. Der dritte Datensatz wird ausschließlich zur Erweiterung, für die Berechnung eines Beispielbauteils verwendet.

Wie bereits identifiziert, hat der Faservolumenanteil den größten Einfluss auf die Berechnungszeit. Daher wird der Faservolumenanteil für die Untersuchung der Erweiterbarkeit ausgewählt. Im ersten Datensatz wird der Faservolumenanteil zwischen 0,01 bis 0,2 variiert, für den zweiten Datensatz wird der minimale Faservolumenanteil auf 0,05 angehoben. Des Weiteren wird mit den beiden Datensätzen der Fall demonstriert, dass ein bestehender Datensatz um einen weiteren Eingabeparameter erweitert wird. Im ersten Datensatz ist die Querkontraktion konstant, während sie im zweiten Datensatz zufällig verteilt ist. Der betrachtete Fall der Erweiterung eines bestehenden Datensatzes ist dabei sehr wichtig, da die Datensatzerstellung extrem zeitaufwändig ist. Eine Erweiterung eines bestehenden Datensatzes würde

daher für neue Untersuchungen einen enormen Zeitvorteil bieten, wenn weniger neue Daten erstellt werden müssen.

Tabelle 9-1: Eingangsparmeter für die beiden verwendeten Datensätze.

Parameter	Datensatz 1	Datensatz 2	Datensatz 3
E_M	500 bis 2 000 MPa	500 bis 2 000 MPa	2 000 bis 3 000 MPa
ν_M	0,42	0,1 bis 0,45	0,1 bis 0,45
a_R	1 bis 20	1 bis 20	1 bis 20
ν_F	0,01 bis 0,2	0,05 bis 0,2	0,05 bis 0,2
a_{ii}	0 bis 1	0 bis 1	0 bis 1

In Abbildung 9-2 sind alle Datenpunkte der drei Datensätze als Korrelationsdiagramm zwischen jedem Parameterpaar dargestellt. Auf der Diagonale befindet sich außerdem ein Histogramm des jeweiligen Parameters. Beide schließen eine direkte Korrelation zwischen zwei Eingabeparametern pro Datensatz aufgrund einer fehlerhaften RVE-Erstellung aus. Dies wäre hier durch leere Bereiche in den Korrelationsplots zu erkennen. Es ist dabei zu beachten, dass eine Gleichverteilung von a_{ii} eine Dreiecksform hat, da diese nicht unabhängig voneinander sind (vgl. Abbildung 5-2). Die Unterschiede zwischen den beiden Datensätzen sind auch in der Abbildung sichtbar. Die konstante Querkontraktionszahl von Datensatz 1 ist ebenso zu erkennen wie die fehlenden Datenpunkte mit einem Faservolumenanteil von weniger als 0,05 in Datensatz 2. Insgesamt werden 1 523 einzelne RVEs untersucht, von denen 596 in Datensatz 1, 419 in Datensatz 2 und 508 in Datensatz 3 enthalten sind.

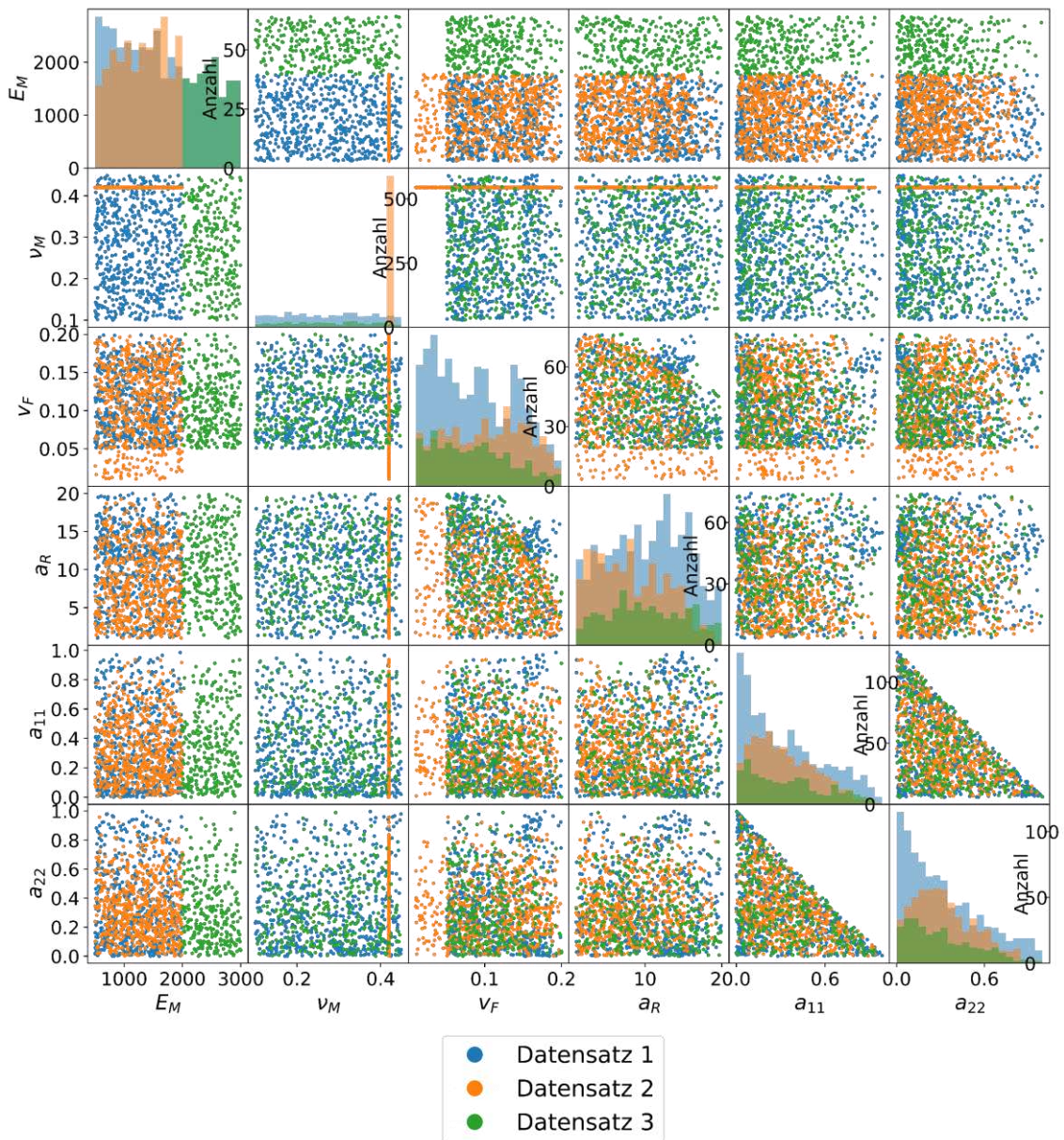


Abbildung 9-2: Korrelationsdiagramm zwischen allen Eingangsparametern der RVEs für drei verschiedene Datensätze. Datensatz 1 zeichnet sich durch eine konstante Querkontraktionszahl des Matrixmaterials aus, während Datensatz 2 einen höheren minimalen Faservolumenanteil aufweist. Datensatz 3 hat einen anderen E-Modul Raum.

9.2 Definition neuronaler Netzwerke

Die hier verwendeten neuronalen Netze werden mit Keras 2.7.1 [154] basierend auf Tensorflow 2.6.0 [155] umgesetzt.

Im Allgemeinen besteht ein neuronales Netz aus j Layern, die jeweils aus einem Satz von Neuronen bestehen. Jedes Neuron repräsentiert einen numerischen Wert v_i^j . Die Anzahl der Neuronen pro Layer kann dabei unterschiedlich sein. Das erste Layer wird üblicherweise als Input-Layer mit dem Input x_i bezeichnet. Hier werden die Parameter für die Mikrostruktur der RVEs als Eingabeparameter verwendet. Das letzte Layer wird als Output-Layer mit dem Output y_i

bezeichnet. Die Layer dazwischen werden als Hidden-Layer bezeichnet. Diese können so gestaltet werden, dass beliebige mathematische Funktionen approximiert werden können. Der prinzipielle Aufbau ist in Abbildung 9-3 schematisch dargestellt.

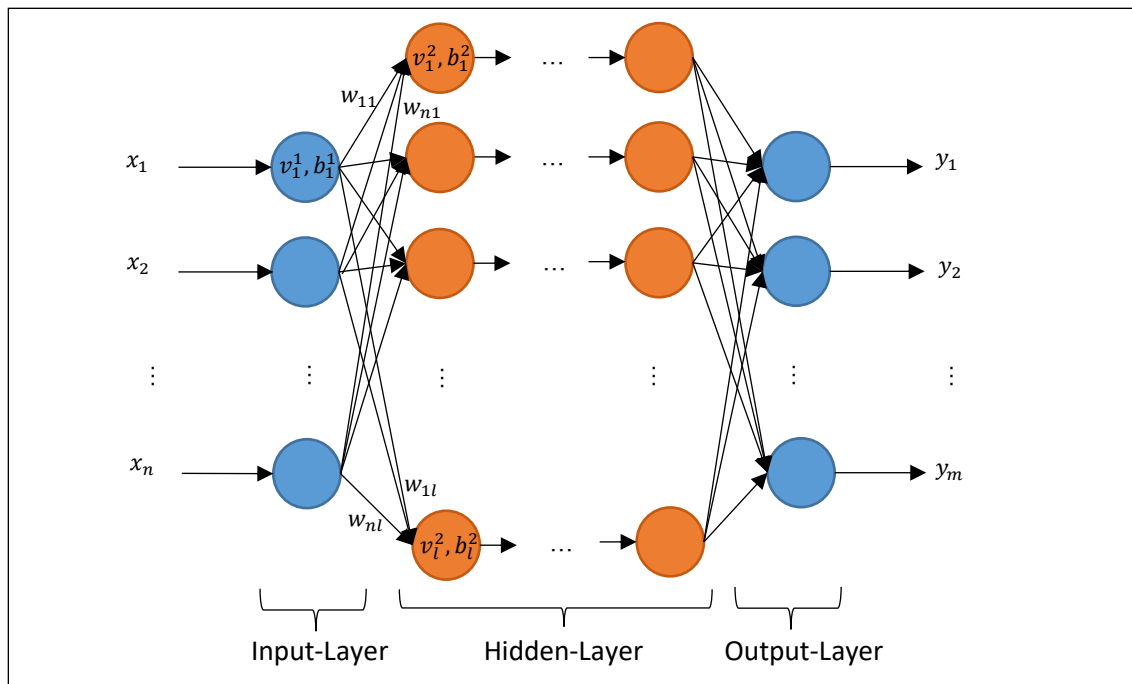


Abbildung 9-3: Prinzipieller Aufbau der hier verwendeten neuronalen Netze.

In dieser Arbeit werden nur sogenannte *dense* Layer verwendet, bei denen der Wert eines Neurons v_i^j in einem Layer mit allen Neuronen v_k^{j-1} des vorherigen Layers verknüpft ist. Die Berechnung von v_i^j erfolgt durch eine Aktivierungsfunktion f_A^j mit den Gewichten w_{ik}^j und b_k^j [153, 154]:

$$v_i^j = f_A^j(w_{ik}^j v_k^{j-1} + b_i^j). \quad (\text{Gl.9-4})$$

Die Gewichte w_{ik}^j und b_i^j sind ebenfalls mit einem Neuron verbunden. Diese Gewichte können durch numerische Algorithmen so angepasst werden, dass eine Verlustfunktion f_T minimiert wird. Dieses Verfahren wird als Training bezeichnet. In dieser Arbeit wird der *NAdam* Algorithmus [23] verwendet, wobei die numerischen Parameter auf $\beta_1 = 0,8$ und $\beta_2 = 0,9$ gesetzt werden. Der mittlere quadratische Fehler zwischen den Vorhersagen y_i^{pred} und den von den RVEs gelieferten Daten y_i^{data} wird als Verlustfunktion verwendet [23]:

$$f_T = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^{data} - y_i^{pred})^2. \quad (\text{Gl.9-5})$$

Diese Verlustfunktion ist so gewählt, dass sie eine auf den Mittelwerten basierende Vorhersage der Zielgröße, also der Steifigkeit des Composites, ermöglicht.

Wie in Abschnitt 8 gezeigt unterliegt die effektive Steifigkeit statistischen Schwankungen aufgrund der Faserensembles, was einem Rauschen der Datenbasis entspricht. Durch die gewählten Zielfunktion wird mittels Regression ein Mittelwert der effektiven Steifigkeit in Abhängigkeit der Eingangsparameter trainiert.

Des Weiteren muss ein sogenanntes Overfitting vermieden werden. Als Overfitting wird das numerische Verhalten bezeichnet, bei dem Trainingsdaten vom neuronalen Netz sehr gut reproduziert werden können, neue Daten jedoch nicht. Eine Technik zur Überprüfung und Kontrolle des Overfittings besteht darin, alle Daten in Trainings- und Validierungsdaten aufzuteilen. Nur die Trainingsdaten werden für die numerische Anpassung der Gewichte verwendet. Die Bewertung der Verlustfunktion wird für beide getrennt durchgeführt. In dieser Arbeit werden alle Daten im Verhältnis 3/4 in Trainingsdaten und 1/4 in Validierungsdaten aufgeteilt. Außerdem wird die Aufteilung nach dem Zufallsprinzip (für jeden Datenpunkt) vorgenommen, um bei Bedarf unterschiedliche Sätze von Trainings- und Validierungsdaten zu erstellen. Alle Ausgaben werden außerdem auf das Intervall $[0;1]$ normiert, gemäß:

$$y_i^{data} = \frac{y_i^{data} - y_i^{min}}{y_i^{max} - y_i^{min}} \quad (\text{Gl.9-6})$$

Dieser Schritt ist notwendig, um die verschiedenen Einträge des Steifigkeitstensors gleich zu behandeln. Andernfalls könnte das Training für Einträge mit höheren Steifigkeiten wie die Normalenrichtungen C_{11} im Vergleich zu anderen Einträgen, z. B. C_{12} , bevorzugt werden.

Für die Aktivierungsfunktion wird

$$f_A(x) = \begin{cases} \alpha \cdot (\exp(x) - 1) & | x < 0 \\ x & | x > 0 \end{cases} \quad (\text{Gl.9-7})$$

in allen Hidden Layer verwendet, welche sich in Vorversuchen als vielversprechend herausgestellt hat. Dabei steht α für einen Skalar und x für die Eingabe eines Neurons. Diese Funktion wird als "Elu" [154, 156] bezeichnet. Für die Input- und Output-Layer werden lineare Aktivierungsfunktionen verwendet. Für den Input-Layer werden 6 Neuronen gemäß der Datenbank für die Eingabeparameter $E_M, nu_M, a_R, v_F, a_{11}, a_{22}$ verwendet. Beim ersten neuronalen Netz werden für die Ausgabe 9 Neuronen für die Steifigkeitswerte $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{22}, C_{23}, C_{33}, C_{44}, C_{55}, C_{66}$ verwendet. Diese Reduzierung wird aufgrund der symmetrischen Steifigkeitstensoren und der vernachlässigbaren Zug-Scher-Kopplung durchgeführt. Für die Auslastungswahrscheinlichkeit wird die Reduzierung analog vorgenommen.

9.3 Optimales neuronales Netzwerk

In diesem Abschnitt wird zunächst eine optimale Architektur des neuronalen Netzwerkes erarbeitet. Zur Erläuterung ist zunächst ein typisches Trainingsverhalten für ein neuronales Netz mit einem Hidden-Layer mit neun Neuronen in Abbildung 9-4 dargestellt. Die Bewertungen

der Zielfunktion sind für die Trainingsdaten (Verlust) und die Validierungsdaten (Validationsverlust) in doppelt logarithmischer Darstellung aufgetragen. Zu erkennen ist, dass ab etwa 10^3 Epochen der Lernerfolg deutlich schwieriger und insbesondere der Validationsverlust starken Schwankungen pro Epoche unterliegt. Ein Overfitting kann hier jedoch nicht erkannt werden.

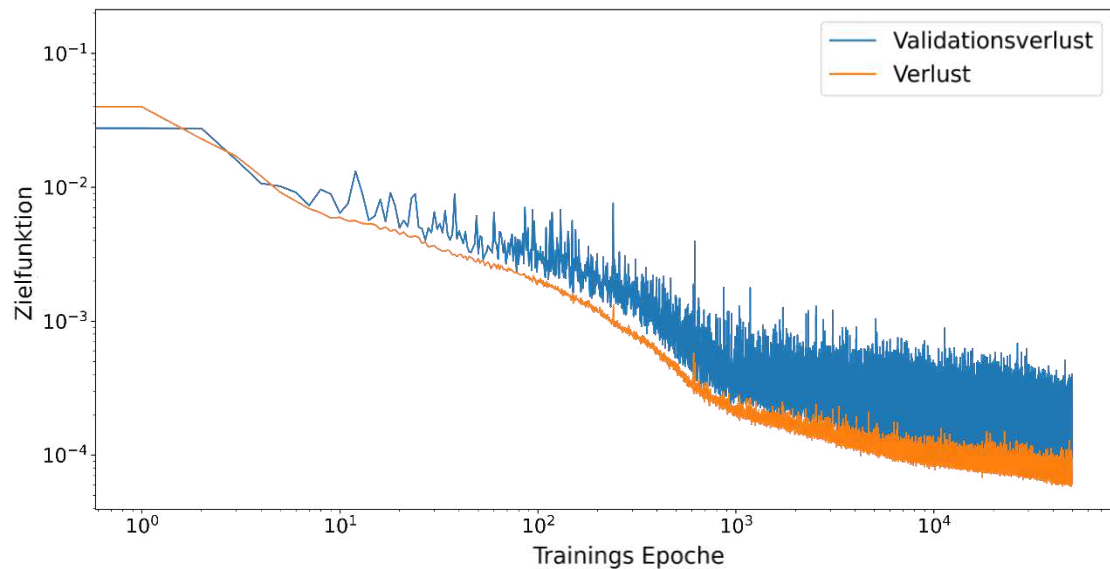


Abbildung 9-4: Trainingsverhalten des neuronalen Netzes für jede Trainingsepoche. Das neuronale Netz wird anhand der Zielfunktion für die Trainingsdaten (Verlust) und die Validierungsdaten (Validationsverlust) bewertet.

Im Allgemeinen ist die Architektur des neuronalen Netzes einer der wichtigsten Faktoren, die die Vorhersagegenauigkeit, numerische Robustheit und Auswertungszeit bestimmt. Ein neuronales Netz mit mehr Schichten und mehr Neuronen führt zu einem geringeren Verlust und einer höheren Trainingszeit. Wenn zu viele Schichten und Neuronen verwendet werden, kann ein Overfitting zu Problemen führen. Daher wird in dieser Arbeit eine vollfaktorielle Versuchsplanung (DOE) durchgeführt, um eine optimale Architektur des neuronalen Netzes zu entwickeln. Die Anzahl der Hidden-Layer wird mit 1, 2, 3 und 5 Schichten variiert, ebenso wie die Anzahl der Neuronen pro Hidden-Layer mit 9, 12, 15 und 18. Für jede Architektur werden insgesamt 10^5 Epochen trainiert. Für die Auswertung der DOE wird die Epoche verwendet, in der das absolute Minimum des Validationsverlustes erreicht wird. Aufgrund der zufälligen Aufteilung in Trainings- und Validierungsdaten und der zufälligen Anfangsgewichte [154] wird jede Architektur für die DOE in insgesamt 10 Wiederholungen trainiert und bewertet. Die Abbildung 9-5 zeigt das Ergebnis der DOE als Boxplot des minimalen Validationsverlustes für jede neuronale Netzarchitektur. Außerdem ist jeder Boxplot mit dem Median der Trainingszeit pro Epoche farbkodiert. Das Training findet auf einer Nvidia Tesla T4 16 GB statt.

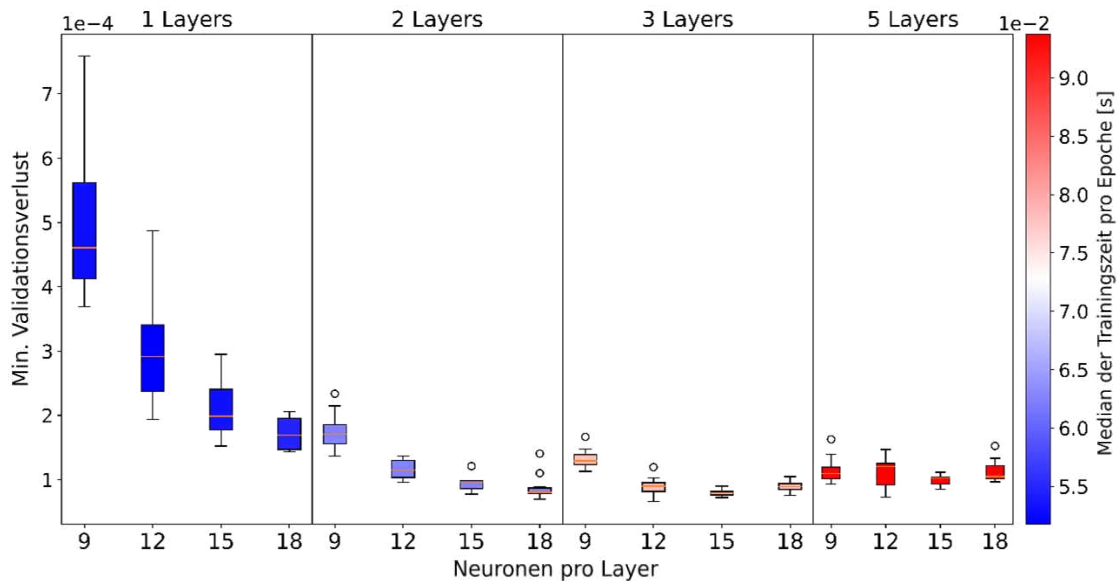


Abbildung 9-5: Boxplot des minimalen Validationsverlustes und Median der benötigten Trainingszeit jeder Epoche für die verschiedenen Architekturen der neuronalen Netze. Datengrundlage sind die Datensätze 1 und 2.

Für eine und zwei Schichten lässt sich feststellen, dass mehr Neuronen zu einem geringeren minimalen Validationsverlust führen. Mit mehr Schichten wird die Anzahl der Neuronen weniger wichtig. Außerdem ist nicht nur der Mittelwert des minimalen Validierungsverlusts bei einer Schicht deutlich höher als bei mehreren Layern, sondern auch die Varianz. Die Schlussfolgerung ist, dass das Netz mit mehr Layern robuster und genauer wird. Außerdem kann gezeigt werden, dass hier nur die Anzahl der Schichten und nicht die Anzahl der Neuronen einen signifikanten Einfluss auf die Trainingszeit hat. Als optimal wird hier ein neuronales Netz mit zwei Hidden-Layer und jeweils 18 Neuronen gewählt.

9.4 Vergleich mit klassischen Methoden

In diesem Abschnitt wird die Vorhersagegenauigkeit des neuronalen Netzes für die Compositesteifigkeit mit der der Vorhersage einer „klassischen“ Methode verglichen. Hierfür wird das optimale neuronale Netzwerk, mit zwei Hidden-Layer und 18 Neuronen je Hidden-Layer verwendet. Als klassische Methode wird eine zweistufige Homogenisierung des Pseudo-Grain Ansatzes verwendet. Im ersten Schritt wird die Methode von Mori-Tanaka (Gleichung 3-19) verwendet. Im zweiten Schritt wird die Steifigkeit des Verbundes aus den Steifigkeiten für die einzelnen Richtungen einer ODF nach dem Voigt-Ansatz (Gleichung 3-15) zusammengesetzt. Für die ODF wird, wie bei der Erstellung der RVEs, die Methode der maximalen Entropie verwendet. Die Methode des neuronalen Netzes wird im Folgenden mit NN und die der Pseudo-Grain Ansatz als PG abgekürzt.

Die Abbildung 9-6 zeigt die Vorhersagen von NN und PG im Vergleich zu den Validierungsdaten. Im Idealfall sollten die Vorhersagen auf einer Linie liegen. Zur besseren Sichtbarkeit der

Datenpunkte ist ein kleiner Ausschnitt aus der Mitte vergrößert dargestellt. Im Allgemeinen lässt sich feststellen, dass sowohl NN als auch PG die Werte der RVEs mit einem geringen Fehler wiedergeben können. Systematische Fehler, wie z.B. eine größere Abweichung bei höherer Steifigkeit, können nicht festgestellt werden.

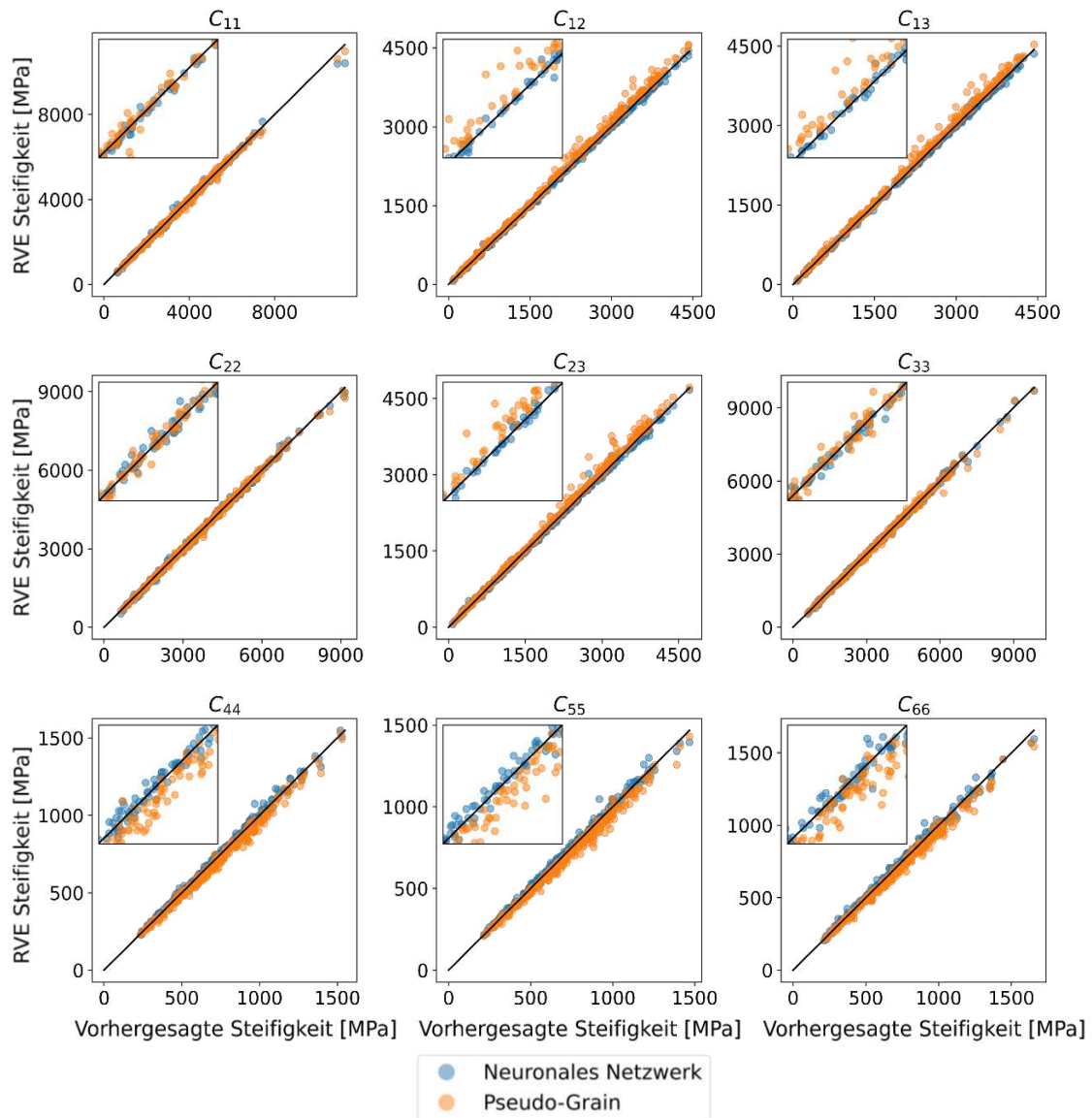


Abbildung 9-6: Vergleich der Steifigkeiten des RVEs und den Vorhersagen des neuronalen Netzwerkes (NN) und des Pseudo-Grain Ansatzes (PG). Datengrundlage sind die Datensätze 1 und 2.

Eine weitere Analyse über die Genauigkeit der NN-Methode im Vergleich zum PG-Ansatz wird durch die Abbildung 9-7 vorgenommen. Hier ist für jeden Steifigkeitseintrag ein Boxplot mit dem relativen Fehler

$$E_{rel} = \frac{C^{data} - C^{pre}}{C^{data}} \quad (\text{Gl.9-8})$$

gezeigt. C^{data} entspricht den Steifigkeitswerten, die mittels RVEs bestimmt werden. Weiter werden ausschließlich die Validierungsdaten verwendet.

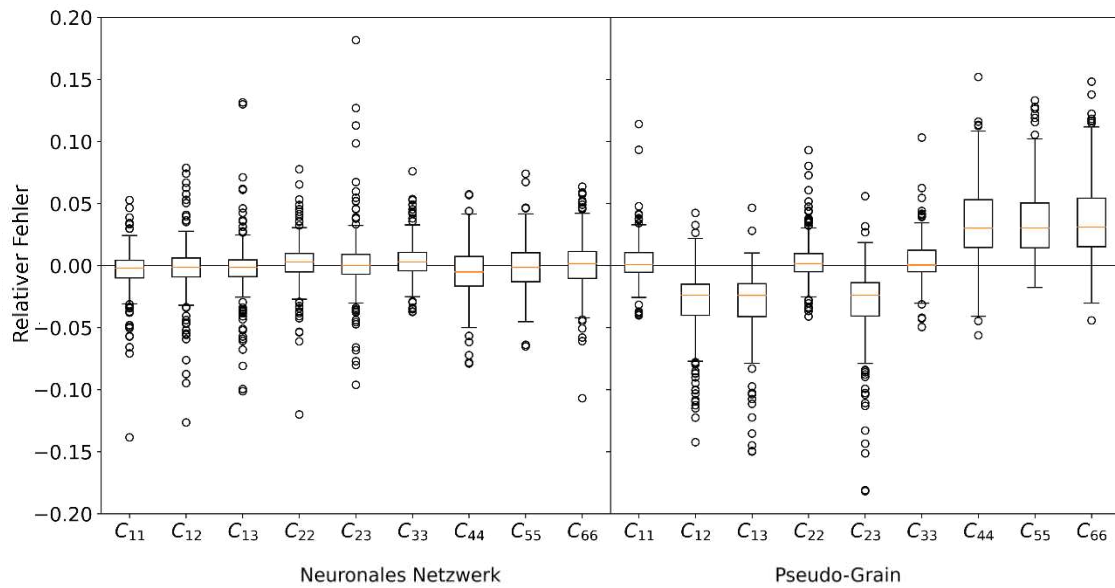


Abbildung 9-7: Boxplot des relativen Fehlers mit NN und PG. Datengrundlage für den Vergleich sind die Datensätze 1 und 2.

Bei der NN-Methode ist der Median aller relativen Fehler fast null, der Interquartilsabstand liegt zwischen 1,5% und 2,2%. Einige Ausreißer liegen im Bereich von 2,5% bis 15%. Es ist zu beachten, dass die statistische Verteilung der relativen Fehler nicht auf einer unzureichenden Vorhersage beruht, sondern auch auf der statistischen Abweichung der RVEs. Daraus lässt sich schließen, dass NN sehr gut geeignet ist, die mittlere Steifigkeit von kurzfaserverstärkten Kunststoffen vorherzusagen.

Mit PG beträgt der absolute Wert des Medians der relativen Fehler für die Einträge der Nebendiagonale (C_{12}, C_{13}, C_{23}) und die Schub-Einträge (C_{44}, C_{55}, C_{66}) etwa 3%. Während die Werte der Nebendiagonale zu hoch sind, sind sie für die Scher-Einträge zu niedrig. Außerdem sind die Interquartilsabstände mit 3,6% bis 4,4% für die Schereinträge deutlich größer als die der Haupteinträge (C_{11}, C_{22}, C_{33}) mit 1,4% bis 1,6%. Wie beim NN liegen auch hier die Ausreißer in einem Bereich von 5% bis 20%. Vergleicht man beide Methoden miteinander, so zeigt sich, dass NN im Durchschnitt präziser ist als PG. Außerdem gibt es bei NN keine systematische Abweichung für den Medianfehler. In den Diagonaleinträgen schneiden beide Methoden vergleichbar ab. Die Streuung ist bei beiden Methoden ähnlich groß, was dadurch begründet ist, dass die Streuung auf der Einzigartigkeit der Faserensembles beruht und nicht auf Vorhersagen von NN oder PG.

Ein weiterer Vergleich in Form einer Vergleichsmatrix zeigt den Unterschied zwischen den Vorhersagen von NN und PG. Dabei werden die Steifigkeitswerte C_{11}, C_{12}, C_{22} und C_{44} in Abhängigkeit der Eingangsparametern $E_M, \nu_M, a_R,$ und ν_F analysiert. Die Eingangsparameter sind für den gesamten Vergleich mit der Ausnahme konstant, dass je Spalte ein Eingangsparameter

variiert wird. Die Faserorientierung wird so gewählt, dass sie durch drei typische Orientierungen repräsentiert wird (nahezu transversale Isotropie, planare Isotropie und Isotropie). Die konstanten Eingabeparameter für die Vorhersage sind in Tabelle 9-2 aufgeführt.

Tabelle 9-2: Eingangsparameter für die Vergleichsmatrix

Parameter	Konstanter Wert
E_M	1 500 MPa
ν_M	0,42
a_R	15
ν_F	0,15
$eig(\mathbf{a}_2)$	(0,8 0,5 0,33)

Die Abbildung 9-8 zeigt die Vergleichsmatrix. Es ist zu erkennen, dass beide Methoden nahezu identische Vorhersagen für die Steifigkeitseinträge C_{11} und C_{22} für alle Eingangsparameter liefern. Größere Unterschiede sind für C_{12} in Abhängigkeit vom Aspektverhältnis a_R und dem Faservolumenanteil ν_F zu beobachten. In beiden Fällen ist der berechnete Steifigkeitswert von PG größer als der von NN. Eine mögliche Erklärung für die Unterschiede könnten die Annahmen der Methode von Mori-Tanaka sein. Einerseits könnte die ellipsoide Fasergeometrie, insbesondere bei kleinen Aspektverhältnissen zu der Abweichung von PG für C_{12} führen. Zum anderen ist die Annahme einer homogenen Matrixspannung eine Erklärung für die Unterschiede mit zunehmendem Faservolumengehalt. Interessant ist hier jedoch, dass dies für die Einträge der Nebendiagonale viel stärker ausgeprägt ist als für die anderen Steifigkeitseinträge. Weitere Unterschiede sind in C_{44} zu finden. Hier ist, abgesehen von E_M , generell ein Unterschied festzustellen, wobei der PG Ansatz in der Regel die höheren Werte aufweist. Eine Ausnahme bildet die Vorhersage für das Aspektverhältnis bei planar isotroper Faserorientierung.

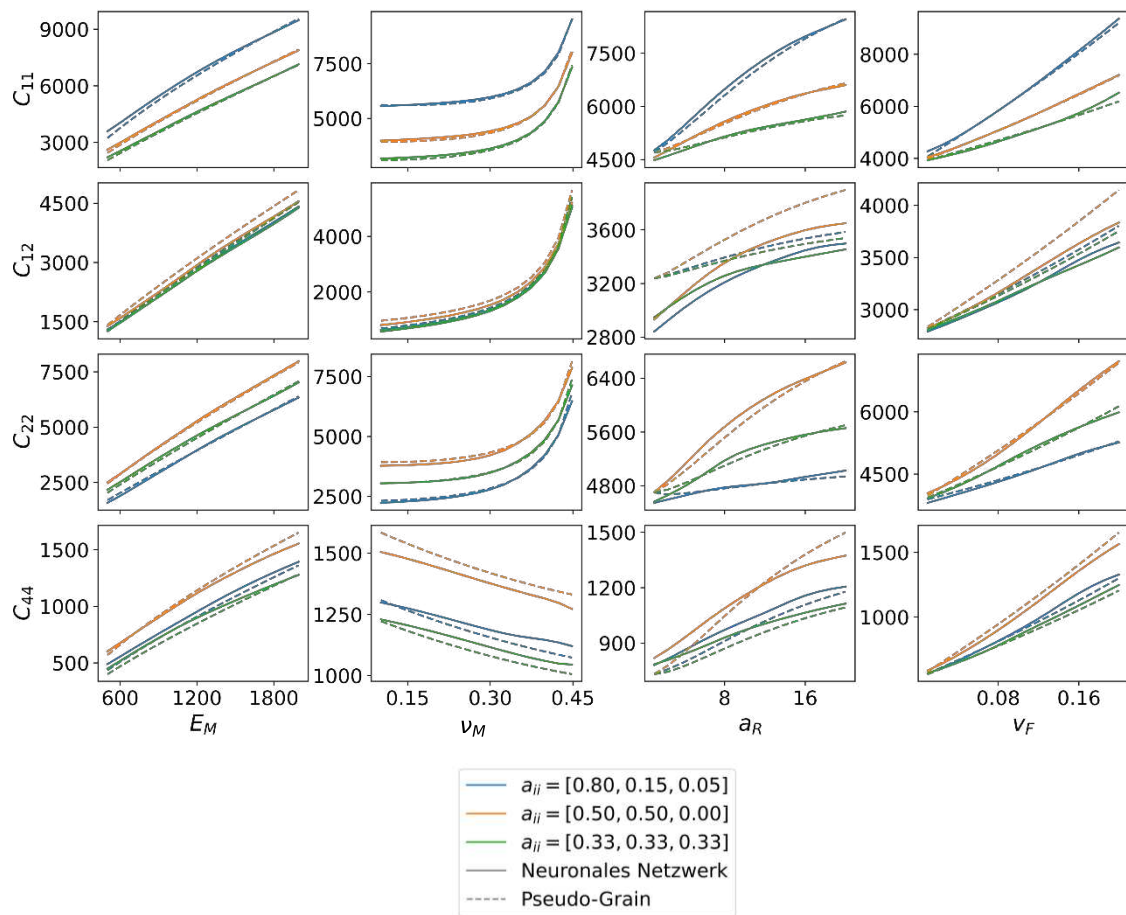


Abbildung 9-8: Direkter Vergleich zwischen den Vorhersagen mit NN und MT für verschiedene Inputparameter. Alle Inputparameter sind dabei konstant (vgl. Tabelle 9-2), außer die, die in einer Spalte variiert werden. Datengrundlage sind die Datensätze 1 und 2.

Abschließend kann die Frage beantwortet werden, ob ein kombinierter Datensatz anwendbar ist. Weder in Abbildung 9-6 noch in Abbildung 9-7 sind systematische Fehler des NN zu erkennen. Dies deutet darauf hin, dass bei einer Querkontraktionszahl von 0,42 kein Overfitting zu Lasten anderer Querkontraktionen auftritt. Dies wird auch durch die Abbildung 9-8 unterstützt. Nur für den Schubeintrag C_{44} sind größere Abweichungen zu erkennen. Diese sind jedoch eher auf die generelle Abweichung (im Vergleich zu den RVEs) der MT-Vorhersage zurückzuführen. Darüber hinaus lassen sich keine statistisch signifikanten Abweichungen der NN bei einem Faservolumenanteil von weniger als 0,05 feststellen. Es kann daher bestätigt werden, dass ein bestehender Datensatz um einen weiteren Eingabeparameter erweitert werden kann und numerisch aufwendige Kombinationen von Eingabeparametern vermieden werden können, wenn bereits genügend Daten vorhanden sind.

9.5 Beispielbauteil

Anhand eines Beispielbauteiles wird der Unterschied zwischen einer Berechnung mit neuronalem Netzwerk und klassischen Methoden in diesem Abschnitt weiter ausgearbeitet. Hierzu

wird zunächst das Training des neuronalen Netzwerks mit den Datensätzen 1 bis 3 durchgeführt. Die optimale Architektur mit 2 Hidden Layer mit jeweils 18 Neuronen bleibt unverändert.

Das neuronale Netzwerk und die klassischen Methoden werden anhand experimenteller Versuche bewertet. Hierzu wird ein Spritzgussbauteil entworfen, welches typische Merkmale, wie Bohrungen und Rippen aufweist. Weiter wird das Bauteil derart entworfen, dass mittels uniaxialer Zugprüfung des Bauteils ein komplexer Beanspruchungszustand im Werkstoff entsteht. Die Abbildung 9-9 zeigt das entworfene Bauteil. Der Anguss wird an einem Ende des Bauteils vorgesehen, ausgeführt als Filmanguss. Ins Spritzgusswerkzeug werden zwei Formnester eingebracht. Weiter dargestellt sind zwei Belastungsfälle, die für die Untersuchung verwendet werden. Beiden Belastungsfällen ist gemein, dass die Belastung über in den Bohrungen eingesetzte Stahlstifte eingebracht wird. Im ersten Fall werden die äußeren beiden Bohrungen über die Stahlstifte mit einer v-förmigen, 5 mm dicken Stahlplatte verbunden. Weiter werden die Stahlplatten über einen Stift fixiert, die Verschiebung wird über einen vierten Stift in der Mitte des Bauteils aufgebracht. In dem zweiten Belastungsfall wird ein äußerer Stahlstift fest eingespannt, der zweite wird in Längsrichtung des Bauteils gezogen.

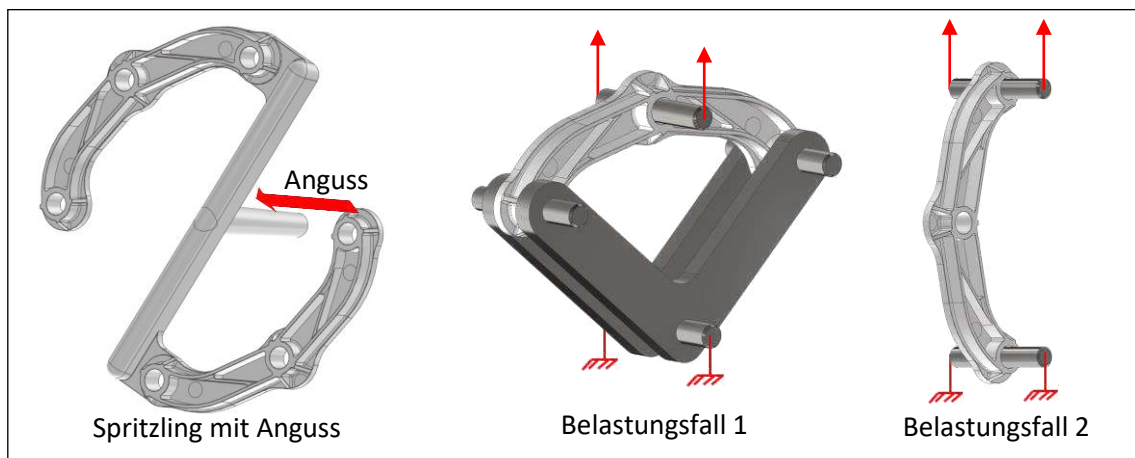


Abbildung 9-9: Randbedingungen der numerisch und experimentell durchgeführten Bauteilversuche.

Für die Struktursimulation notwendige Mikrostrukturgrößen werden als erstes die Faserorientierung und die Faserlänge mittels Spritzgussimulation numerisch bestimmt. Es wird hierzu die kommerzielle Software Moldex3D verwendet, die Parameter hierfür sind im Anhang in der Tabelle A-3 aufgelistet.

Das Ergebnis für die Faserlänge ist in der Abbildung 9-10 dargestellt. Es wird hier das approximierte Wurzelmittel $L_{\sqrt{V}}$ eingesetzt. Es ist zu erkennen, dass die Faserlänge in Angussnähe größer ist als angussfern. Zusätzlich sind zwei Schnittansichten abgebildet, die die Faserlänge über den jeweiligen Querschnitt zeigen.

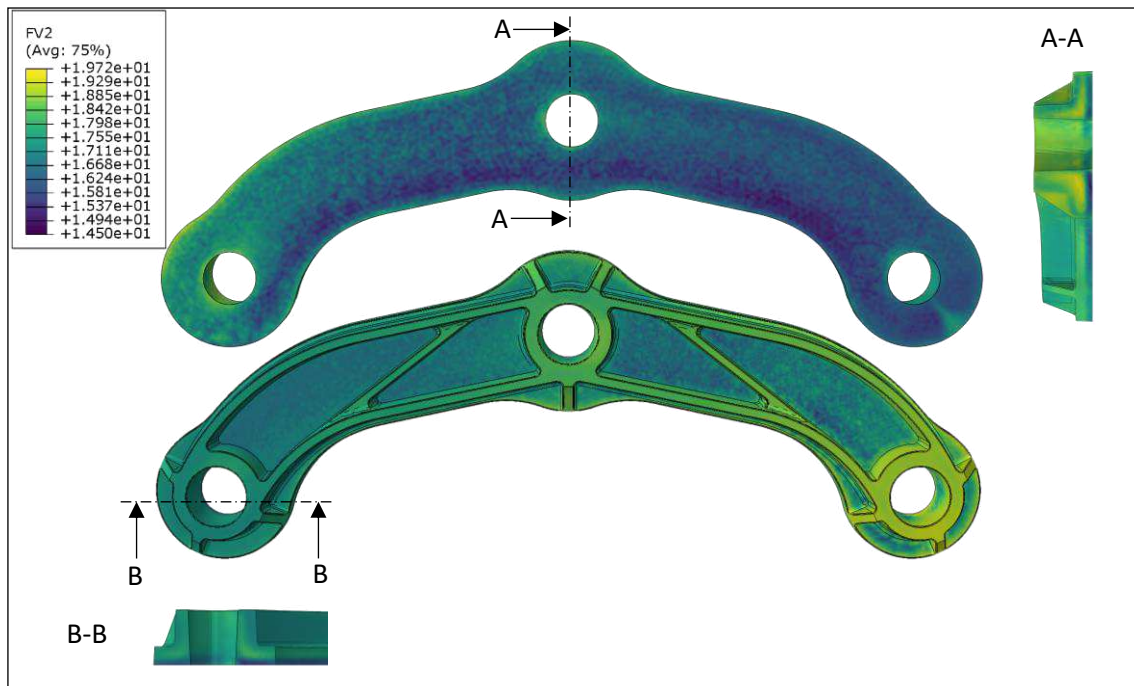


Abbildung 9-10: Mittels Spritzgusssimulation bestimmte Faserlänge (approximierte Wurzellänge) auf FE-Netz der Struktursimulation interpoliert.

Neben der Faserlänge wird ebenfalls die Faserorientierung durch die Spritzgusssimulation bestimmt. Diese ist in Abbildung 9-11 in Form des ersten Eigenwertes und Eigenvektors dargestellt. Der Eigenwert ist hierbei als Farbdarstellung abgebildet, der Eigenvektor als Pfeildarstellung. Im angussnahen Bereich ist der Eigenwert größer als angussfern. Der Unterschied in den Rippen ist weniger stark ausgeprägt. Generell ist festzustellen, dass die Eigenvektoren qualitativ in Fließrichtung der Schmelze zeigen.

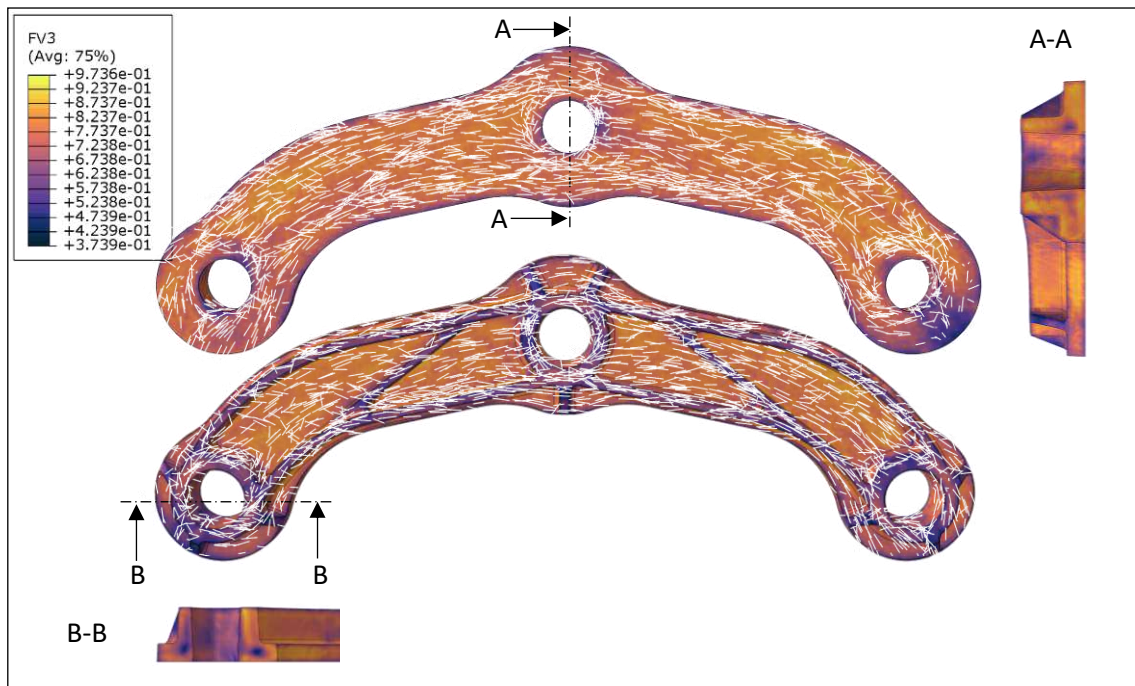


Abbildung 9-11: Mittels Spritzgussimulation bestimmte Faserorientierung (\mathbf{a}_{11}), Farbdarstellung für Eigenwert, Pfeildarstellung für Eigenvektor.

Analog zum ersten Eigenwert ist in der Abbildung 9-12 ebenfalls der zweite Eigenwert und der zweite Eigenvektor dargestellt. Hier ist kein Unterschied zwischen angussnah und angussfern zu erkennen, jedoch ein Unterschied zwischen Rippen und Grundkörper des Bauteils. Darüber hinaus sind die Bereiche der Bindenähte rechts der Bohrungen gut anhand des Eigenwertes zu erkennen.

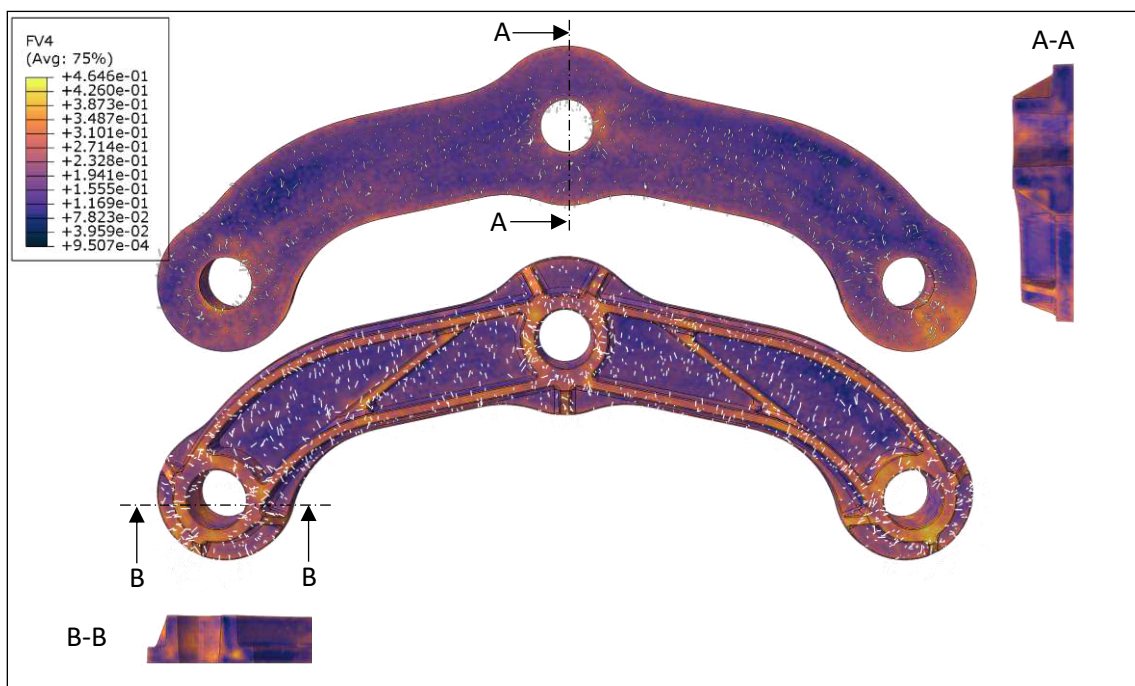


Abbildung 9-12: Mittels Spritzgussimulation bestimmte Faserorientierung (\mathbf{a}_{22}), Farbdarstellung für Eigenwert, Pfeildarstellung für Eigenvektor.

Für die Finite-Elemente Struktursimulation werden Beispielbauteil, Stahlstifte und im Belastungsfall 1 die v-förmigen Stahlbleche modelliert. Für die Stahlbauteile wird ein linear-elastisches Materialmodell mit $E = 210\,000$ MPa und $\nu = 0,35$. Zwischen den einzelnen Bauteilen werden *Penalty* Kontaktbedingungen mit einem Steifigkeitsskalierungsfaktor von 1,0 verwendet. Für das Beispielbauteil werden unterschiedliche Materialmodelle verwendet. Zum einen das neuronale Netzwerk und zum anderen die klassischen Homogenisierungsmethoden. Darunter fällt zum einen der Pseudo-Grain (PG) Ansatz und der Full-Mori-Tanaka (FMT) Ansatz. Darüber hinaus werden für die klassischen Homogenisierungsmethoden unterschiedliche Rekonstruktionsvarianten der ODF verwendet, um den Einfluss der Rekonstruktion auch anhand des Beispielbauteils aufzeigen zu können. Verwendet werden zum einen die Methode der maximalen Entropie und zum anderen die Kugelflächenfunktionen. Da die Unterschiede der Varianten der Kugelflächenfunktionen gering sind, wenn nur der zweistufige Faserorientierungstensor bekannt ist, werden hier nur zwei Varianten verwendet. Zum einen wird ausschließlich der zweistufige Faserorientierungstensor verwendet und zum anderen wird mit der Hybrid Closure der vierstufige Faserorientierungstensor berechnet und ebenfalls für die Rekonstruktion berücksichtigt. Alle verwendeten Materialmodelle für das Beispielbauteil sind in Tabelle 9-3 mit der im Folgenden verwendeten Abkürzung aufgelistet.

Tabelle 9-3: Übersicht über die verwendeten Materialmodellierungen des Beispielbauteils.

Abkürzung	Rekonstruktion der ODF	Homogenisierung
NN	ME	RVEs
PG-ME	ME	Pseudo-Grain
PG-SH4HY	SH4HY	Pseudo-Grain
PG-SH2	SH2	Pseudo-Grain
FMT-ME	ME	Full-Mori-Tanaka
FMT-SH4HY	SH4HY	Full-Mori-Tanaka
FMT-SH2	SH2	Full-Mori-Tanaka

In der Abbildung 9-13 ist das Ergebnis von Struktursimulation und experimenteller Untersuchung dargestellt. Die Abbildung ist gegliedert in den Kraft-Weg-Verlauf (oben), den tangentialen Bauteilsteifigkeits-Weg-Verlauf (mittig) und der Differenz zwischen Experiment und Simulationen (unten). Links angeordnet ist das Ergebnis des Belastungsfalls 1 und rechts das Ergebnis des Belastungsfalls 2.

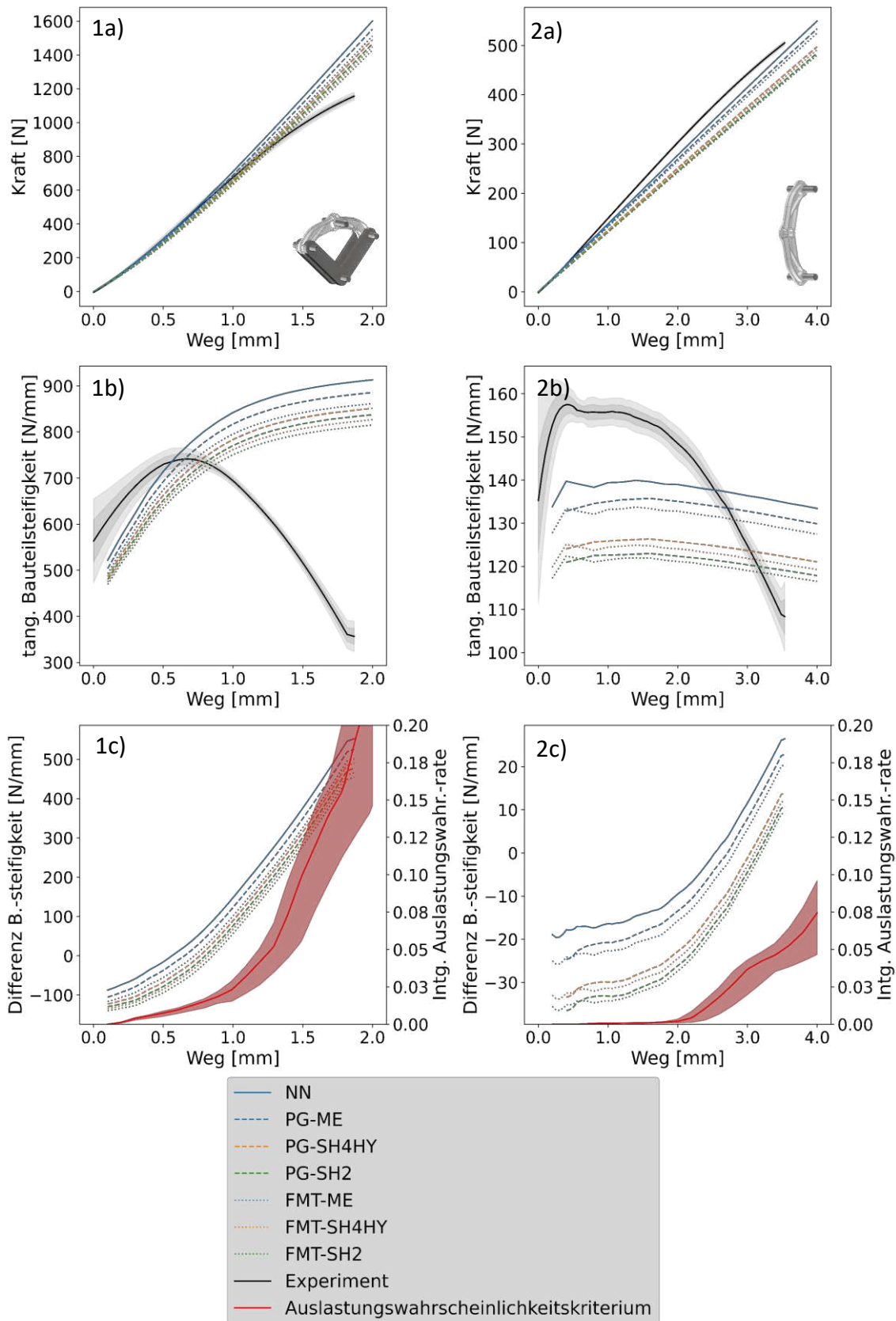


Abbildung 9-13: Vergleich des experimentell gemessenen und berechneten Kraft-Weg- (a), des Tangentenbauteilsteifigkeit-Weg- (b) und Differenz des Tangentenbauteilsteifigkeits-Weg-Verlaufs (c). Links Belastungsfall1, rechts Belastungsfall 2.

Beim Belastungsfall 1 ist im Teilbild 1a zu erkennen, dass der Kraft-Weg-Verlauf aller Simulationen qualitativ mit der des Experiments bis zu einem Weg von ca. 1,0 mm bis 1,3 mm übereinstimmt. Ab dem Wert von 1,3 mm fällt der Kraft-Weg-Verlauf des Experiments deutlich gegenüber den Simulationen ab, mutmaßlich durch plastisches Fließen und oder Schädigung. Da alle Simulationen nur linear-elastisches Werkstoffverhalten abbilden, kann der Kraftabfall durch plastisches Fließen prinzipiell nicht abgebildet werden. Für die Güte der Simulationen ist entsprechend einzig die Übereinstimmung dieser im linear-elastischen Bereich des Experiments als Bewertungskriterium anzulegen.

In Teilbild 1b ist dazu die tangentielle Bauteilsteifigkeit dargestellt, welche aus der Wegableitung des Kraft-Weg-Verlaufs berechnet wird. Generell ist zunächst festzuhalten, dass das Beispielbauteil beim Belastungsfall 1 eine wegabhängige Bauteilsteifigkeit aufweist. Durch die Winkeländerung des Beispielbauteils unter der Belastung ist eine Steigerung der Steifigkeit vorhanden. Es handelt sich dabei entsprechend um einen geometrischen Effekt. Der Verlauf der tangentialen Bauteilsteifigkeit des Experiments weist anfänglich ebenfalls diesen Effekt auf, wird aber überlagert durch die Abnahme der Steifigkeit durch plastisches Fließen und/oder Schädigung. Die maximale tangentielle Bauteilsteifigkeit ist bei einem Weg von ca. 0,6 mm zu beobachten. Im Vergleich zum Kraft-Weg-Verlauf ist der Effekt des nicht-linearen-Werkstoffverhaltens qualitativ deutlich früher festzustellen. Dies zeigt, dass durch die Überlagerung von geometrischen und werkstofflichen Nichtlinearitäten das Finden eines linear-elastischen Bereichs nicht offensichtlich ist.

Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment kann schließlich anhand von Teilbild 1c analysiert werden. Hier ist die Differenz zwischen den einzelnen Simulationen und dem Experiment dargestellt. Dieser Darstellung kann entnommen werden, dass der Differenzverlauf aller Simulationen qualitativ gleich ist. Initial ist eine negative Differenz vorhanden, das heißt die initiale Steifigkeit des Bauteils wird unterschätzt. Der Verlauf der Differenz ist dann streng monoton steigend, ohne anfängliches Plateau. Das zeigt, dass der linear-elastische Bereich des Experiments hier sehr gering ist, weshalb die Güte der Simulation ausschließlich anhand der initialen Steifigkeit bewertet werden kann.

Mit den neuronalen Netzen ist die betragsmäßige Differenz der initialen Steifigkeit am geringsten, das heißt die Simulation weist die höchste Güte auf. Die klassischen Homogenisierungsmethoden haben dagegen eine geringere Güte. Dabei sind die Differenzen der Varianten mit einer Rekonstruktion auf Basis der Methode der maximalen Entropie betragsmäßig geringer. Die Varianten mit der Rekonstruktion auf Basis der Kugelflächenfunktionen liefern die Simulationen mit der geringsten Übereinstimmung. Der Unterschied mit und ohne Hybrid Closure ist dabei deutlich geringer als der Unterschied zwischen den Kugelflächenfunktionen und

der Methode der maximalen Entropie. Die Homogenisierungsmethoden mit Pseudo-Grain Ansatz liefern die bessere Übereinstimmung als mit dem Full-Mori-Tanaka Ansatz. Generell ist bei den klassischen Homogenisierungsmethoden der Einfluss der Rekonstruktionsmethode als deutlich höher einzuschätzen als der Einfluss der Homogenisierungsmethode selbst.

Das bereits bei geringem Weg einsetzende plastische Fließen kann durch das im Abschnitt 8.9 erarbeitete Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium bestätigt werden. Das als lokale Zustandsgröße berechnete Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium wird zunächst über das Bauteil mit Gleichung 7-2 aufintegriert. Weiter wird die Wegableitung gebildet, sodass die integrale Auslastungswahrscheinlichkeitsrate vorliegt. Diese wird neben der Differenz der Tangentenbauteilsteifigkeit abgebildet. Der Bereich markiert dabei die 5 % bis 95 % Auslastungswahrscheinlichkeit.

Qualitativ stimmt der Verlauf der integralen Auslastungswahrscheinlichkeitsrate und der Differenz der tangentialen Bauteilsteifigkeit überein. Hieraus kann geschlossen werden, dass der Abfall der Bauteilsteifigkeit des Experiments auf plastisches Fließen zurückzuführen ist. Es sei angemerkt, dass der Effekt eines lokal plastifizierten Materials und damit einer möglichen Lokalisierung nicht berücksichtigt wird und daher die qualitativen Unterschiede zwischen Differenz der Bauteilsteifigkeit und integraler Auslastungswahrscheinlichkeitsrate mit zunehmendem Weg größer werden müssen.

In der rechten Hälfte der Abbildung 9-13 sind die Verläufe für den zweiten Belastungsfall dargestellt. Bei dem Kraft-Weg-Verlauf (Teilbild 2a) liegt der Verlauf des Experiments bis zum Bruch über denen der Simulationen.

In Teilbild 2b ist der tangentiale Bauteilsteifigkeits-Weg-Verlauf dargestellt. Anhand der Simulationen ist zu erkennen, dass der Geometrieeffekt hier nicht streng monoton wachsend ist, sondern in einem Bereich von 0,5 mm bis 1,5 mm maximal ist, mit einem anschließend fallenden Verlauf. Der Verlauf des Experiments wird analog zum Belastungsfall 1 überlagert mit der Abnahme der Steifigkeit durch plastisches Fließen.

Die Simulationsgüte wird erneut anhand der Differenz zwischen Simulation und Experiment erläutert, welche in Teilbild 2c dargestellt ist. Generell ist auch in diesem Belastungsfall die Differenz aller Simulationen zunächst negativ, das heißt die initiale Steifigkeit wird in allen Simulationen unterschätzt. Der Verlauf der Differenz ist auch in diesem Belastungsfall monoton steigend, jedoch mit einem ausgeprägten Plateau bis zu einem Weg von 1,5 mm. Das neuronale Netzwerk zeigt erneut die geringste betragsmäßige initiale Differenz, gefolgt von den Methoden mit maximaler Entropie. Der Einfluss der Rekonstruktion ist in diesem Belastungsfall deutlicher als im ersten Belastungsfall. Die Rekonstruktion ist entsprechend entscheidend, die Homogenisierungsmethode hat hingegen weniger Einfluss. Der Unterschied zwischen

Pseudo-Grain und Full-Mori-Tanaka ist gering, mit einer leicht besseren Güte der Simulationen mit Pseudo-Grain Ansatz. Der qualitative Verlauf der Differenz lässt sich auch in diesem Belastungsfall auf plastisches Fließen zurückführen. Dies lässt sich erneut mit der integralen Auslastungswahrscheinlichkeitsrate belegen, welche qualitativ den gleichen Verlauf aufweist wie die Differenzen der tangentialen Bauteilsteifigkeiten.

Es kann aus den Ergebnissen der beiden Belastungsfälle geschlussfolgert werden, dass die initiale Steifigkeit mit dem neuronalen Netz mit der größten Übereinstimmung berechnet werden kann. Dazu trägt wesentlich die Rekonstruktion auf Basis der Methode der maximalen Entropie bei. Die Verwendung der leistungsfähigeren Rekonstruktionsmethode (vgl. Abschnitt 6) wird als entscheidend identifiziert. Der Unterschied durch die Homogenisierungsmethode ist zwar geringer, ist jedoch insgesamt nicht zu vernachlässigen und trägt damit ebenso für eine präzise Vorhersagegüte der Simulation bei.

Dass die initiale Steifigkeit von keiner der Methoden exakt getroffen wird, kann mehrere Gründe haben. Zunächst ist hier die Prozesssimulation zu nennen. Abweichungen der Faserorientierung und Faserlänge können entsprechend zu nicht exakten Vorhersagen der Steifigkeit führen. Weiter kann aus den Abschnitten 8.6 und 8.7.1 abgeleitet werden, dass sowohl die Modellierung einer Interphase als auch die Modellierung der Matrix als linear-viskoelastisch eine Steigerung der Steifigkeit zur Folge hat. In keiner der hier genutzten Methoden werden beide Effekte berücksichtigt.

Weiter kann mithilfe des Auslastungswahrscheinlichkeitskriteriums ein Maß berechnet werden, dass proportional zum plastischen Fließen ist. Dabei basiert das Kriterium auf einer linear-elastischen Simulation. Das bedeutet zwar, dass das globale Bauteilverhalten weiterhin nur in engen Grenzen kleiner Deformationen berechnet werden kann, dafür jedoch ohne den numerischen Aufwand einer plastischen Modellierung des Composites und den genannten Vorteilen gegenüber einem vollständig phänomenologischen Modell wie das Tsai-Wu-Kriterium (vgl. Abschnitt 8.9).

Das Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium soll im Weiteren genauer analysiert werden. Hierzu werden zunächst die Risse der experimentell geprüften Bauteile grob anhand der Abbildung 9-14 erfasst.

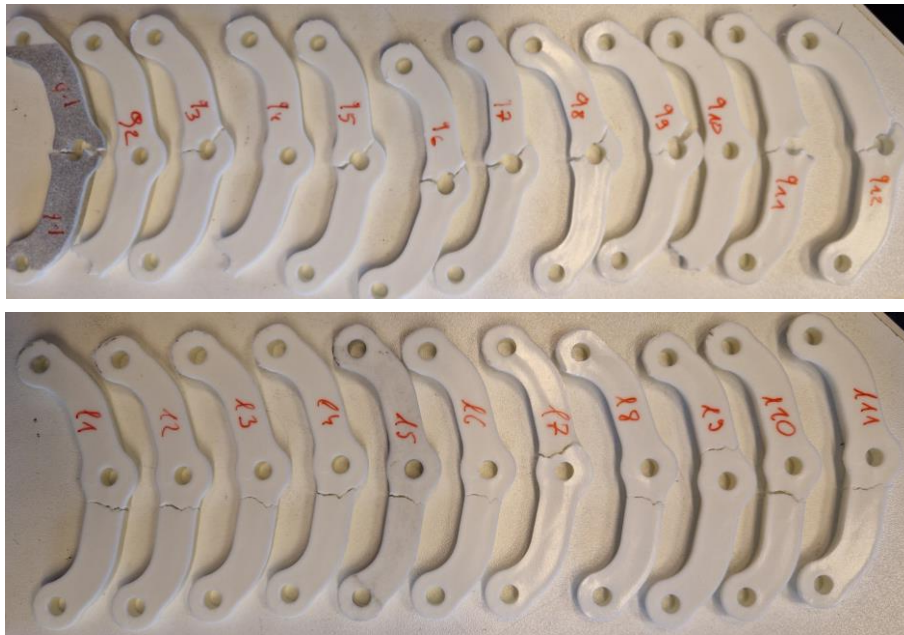


Abbildung 9-14: Probekörper nach Bauteilprüfung. Oben: Belastungsfall 1, unten Belastungsfall 2.

Weiter wird das Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium, zunächst für den Belastungsfall 1, in der Abbildung 9-15 dargestellt. Der dafür verwendete Zeitschritt der Simulation entspricht einem Weg von 2,0mm und ist damit identisch mit dem Mittelwert des Weges, bei dem ein Bruch im Experiment detektiert wird. Es ist eine hohe Wahrscheinlichkeit der Auslastung an unterschiedlichen Stellen des Bauteils zu erkennen, insbesondere an allen Bohrungen und an einigen Übergängen von Rippen zu Grundkörper. Es ist auffällig, dass Bereiche mit einer Wahrscheinlichkeit von 95% anteilmäßig dominieren. Dabei fällt auf, dass die Risse dort auftreten, wo eine Stelle mit hoher Auslastung angrenzt. Die Größe der Fläche mit hoher Auslastung scheint dagegen in keinem Zusammenhang mit dem Riss zu stehen.

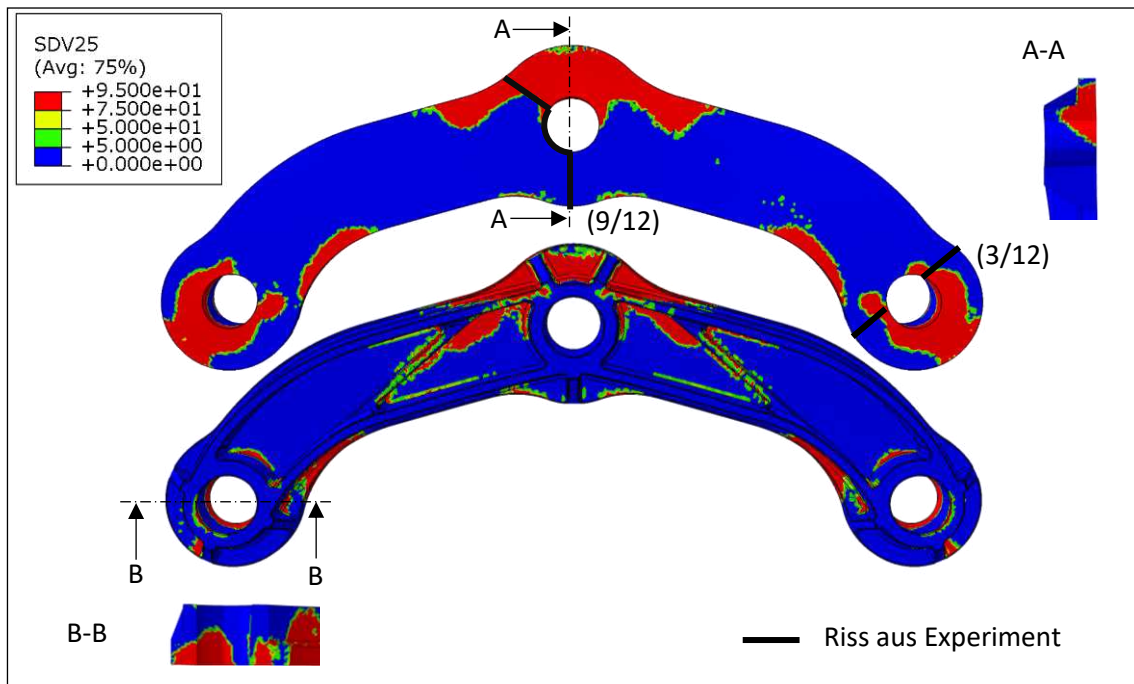


Abbildung 9-15: Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium für den Belastungsfall 1 bei einer globalen Verschiebung von 2,0 mm.

Analog ist die Von-Mises Vergleichsspannung für den Belastungsfall 1 in Abbildung A 30 im Anhang dargestellt. Es ist im Vergleich mit der Abbildung 9-15 gut zu erkennen, dass eine hohen Auslastungswahrscheinlichkeit mit einer hohen Spannung korreliert.

In der Abbildung 9-16 ist das Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium für den Belastungsfall 2 zu einem Zeitschritt dargestellt, bei dem die globale Verschiebung 3,8 mm beträgt. Dies entspricht dem Mittelwert des Weges, bei dem in den Experimenten der Bruch detektiert wird. Die höchsten Werte werden hier an den beiden äußeren Bohrungen, am unteren Rand des Grundkörpers und an einigen Übergängen zwischen Rippen und Grundkörper festgestellt. Die Risse aus den Experimenten sind ebenfalls mit eingezeichnet. Analog zum vorherigen Belastungsfall treten die Risse quer zur Belastungsrichtung angrenzend zu hohen Werten des Auslastungswahrscheinlichkeitskriteriums auf. Die Von-Mises Vergleichsspannung für den Belastungsfall 2 ist erneut im Anhang in der Abbildung A 31 dargestellt.

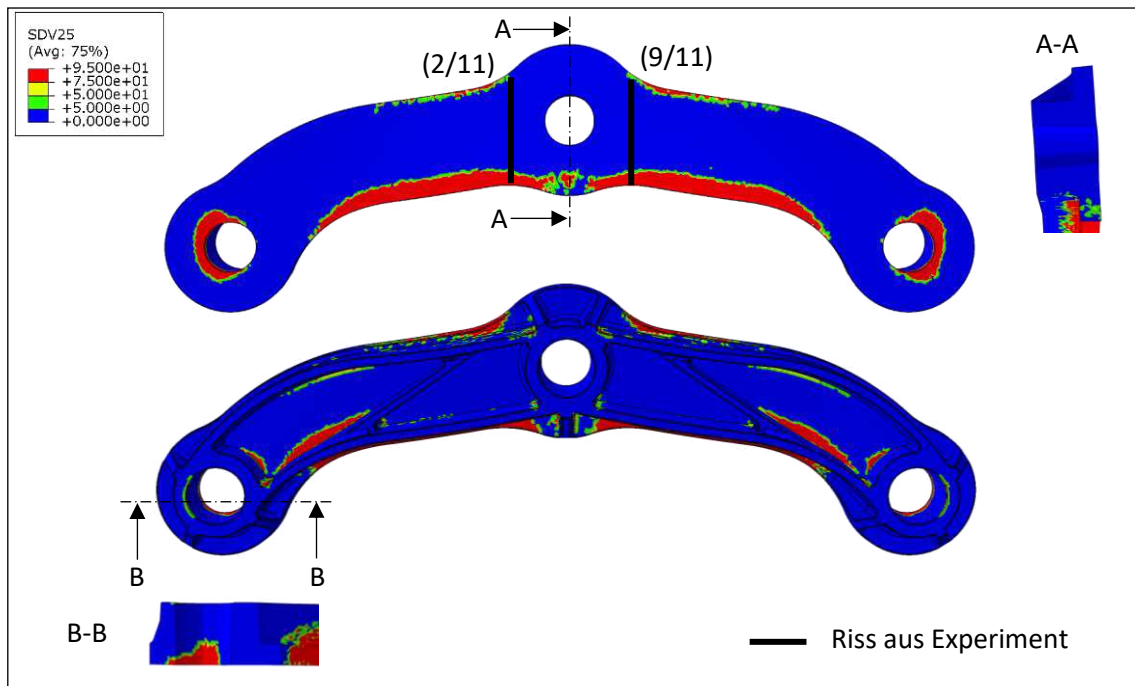


Abbildung 9-16: Auslastungswahrscheinlichkeitskriterium für den Belastungsfall 2 bei einer globalen Verschiebung von 3,8 mm.

Zwar kann die integrale Auslastungswahrscheinlichkeitsrate mit der integralen plastischen Deformation korreliert werden, jedoch ist eine Vorhersage des Totalversagens anhand des Auslastungswahrscheinlichkeitskriteriums hier noch nicht ohne weitere Modifikation und Forschungsarbeit möglich. Die Gründe hierfür sind zum einen die fehlende Berücksichtigung des nicht-linearen Materialverhaltens innerhalb der Simulation und der damit einhergehenden Lokalisierung von Belastungen. Darüber hinaus berücksichtigt die Definition des Auslastungswahrscheinlichkeitskriteriums nur die wahrscheinliche Auslastung des Composites in Folge der Matrixbeanspruchung. Faserbeanspruchung und Faser-Matrix Grenzhaftung werden hier nicht berücksichtigt.

Es sei jedoch betont, dass die Ausarbeitung des Kriteriums der Auslastung als Wahrscheinlichkeit hier als weiterhin sehr sinnvoll erachtet wird. Die Risse treten je Belastungsfall an unterschiedlichen Stellen mit unterschiedlicher Häufigkeit auf. Ein Wahrscheinlichkeitskriterium kann dies prinzipiell abbilden, ein rein mittelwertbasiertes Kriterium hingegen nicht.

Als Anregung für zukünftige Arbeiten ist hier weiter festzuhalten, dass die Risse in beiden Belastungsfällen quer zur Ausdehnung der hohen Auslastungswahrscheinlichkeit ausgerichtet sind. Naheliegender ist daher die Hypothese, dass die Risse mit dem örtlichen Gradienten des Auslastungswahrscheinlichkeitskriteriums korrelieren.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Modellierung kurzfaserverstärkter Kunststoffe und der daraus folgenden Berechnung effektiver Compositeigenschaften. Die grundlegende Idee für alle Untersuchungen in dieser Arbeit ist, dass eine gesteigerte Information auf Mikrostrukturebene zu einer besseren Vorhersage der effektiven Compositeigenschaften führt. Welche Informationen und wie sie genutzt und verarbeitet werden, wird in dieser Arbeit eingehend analysiert und bewertet.

Insbesondere steht dabei die Information über die Faserorientierung im Vordergrund der durchgeführten Untersuchungen. Zur Berechnung effektiver Compositeigenschaften werden Rekonstruktionen einer Faserorientierungsverteilung aus Faserorientierungstensenoren benötigt. Die Rekonstruktionen sind dabei insbesondere notwendig, da mittels Prozesssimulation nur Faserorientierungstensenoren in vertretbarer Zeit berechnet werden können. Unterschiedliche Rekonstruktionsmethoden sind in der Literatur bekannt und werden in dieser Arbeit untersucht. Durch einen Vergleich zwischen experimentell gemessenen ODFs und rekonstruierten ODFs kann eindeutig gezeigt werden, dass die Methode der maximalen Entropie wesentlich besser geeignet ist als Kugelflächenfunktionen. Dies liegt darin begründet, dass die Rekonstruktionen mit Kugelflächenfunktionen generell zu breit sind, insbesondere dann, wenn die Anzahl der verwendeten Momente zu gering ist. Weiter konnte ausgearbeitet werden, dass die Verwendung von Closures zur Erhöhung der Anzahl der Momente in der Regel nicht zu einer Verbesserung der Rekonstruktionsgüte beiträgt.

Die Leistungsfähigkeit der Methode der maximalen Entropie hat jedoch ebenfalls zur Folge, dass eine deutlich exaktere Vorhersage des Faserorientierungstensors in der Prozesssimulation notwendig wird. Dies liegt darin begründet, dass die Methode der maximalen Entropie eine Abweichung zwischen realem und vorhergesagtem Faserorientierungstensor an die rekonstruierte ODF vollumfänglich weitergeben kann, während die Kugelflächenfunktionen hingegen die Unterschiede nicht oder nur geringfügig abbilden können.

Neben der Faserorientierung werden weitere Informationen über die Mikrostruktur hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf die effektiven Compositeigenschaften untersucht. Hierzu werden zahlreiche mögliche Mikrostrukturen als Repräsentative Volumen Elemente mit veränderlichen Modellierungsparametern mit der Finite-Elemente Methode analysiert. Es kann zunächst gezeigt werden, dass eine einzigartige Faserkonstellation auch zu einzigartigen effektiven Compositeigenschaften führt. Dies hat zur Konsequenz, dass effektive Compositeigenschaften eines finiten Volumens streuen und dass die Streuung abhängig ist von dem betrachteten Volumen. Je größer das Volumen, desto geringer die Streuung. Für ganze Bauteile bedeutet dies, dass das globale Bauteilverhalten unabhängig von der Streuung ist, jedoch das

lokale Werkstoffverhalten nicht. Dieses wird maßgeblich durch die Streuung der Compositeeigenschaften beeinflusst. Mit hochaufgelösten DIC Aufnahmen des Dehnungsfeldes von Zugprobekörpern kann dies eindeutig bestätigt werden.

In dieser Arbeit konnte herausgearbeitet werden, dass ein aufgrund der einzigartigen Faserkonstellation lokal unterschiedliches Werkstoffverhalten ebenfalls bedeutet, dass eine Auslegung auf der Grundlage von Mittelwerten nicht in der Lage ist, die lokalen Schwankungen zu berücksichtigen. Dies birgt das Risiko, dass ein Bauteil nicht ausreichend sicher gegen mechanisches Versagen ausgelegt werden kann. Aus diesem Grund wird hier ein Konzept einer Auslastungswahrscheinlichkeit, auf Basis der Verteilung von Zustandsgrößen, erarbeitet. In der Verteilung von Zustandsgrößen ist die Information über Mittelwert und Streuung enthalten, sodass ein solches Kriterium eine Wahrscheinlichkeit abbilden kann.

Da die Streuung der Compositeeigenschaften eine werkstofflich wichtige Kenngröße ist, wird bei der Auswertung der RVEs eine statistische Betrachtung des Composites durchgeführt. Entsprechend werden die untersuchten Modellierungsparameter nicht nur hinsichtlich des Mittelwerts der effektiven Compositeeigenschaften analysiert. Darüber hinaus wird auch die Streuung der effektiven Compositeeigenschaften und auch die Verteilung der Zustandsparameter, wie Spannung und Dehnung der einzelnen Phasen betrachtet.

Die Tabelle 10-1 gibt die verwendeten Modellierungsparameter an und deren Einfluss auf Mittelwert, Verteilung und Streuung der effektiven Compositeeigenschaften. Die qualitative Einschätzung in dieser Tabelle basiert auf den hier durchgeführten Studien.

Tabelle 10-1: Zusammenfassung des Einflusses der Modellierungsparameter.

Parameter	Mittelwert	Verteilung*	Streuung
Rekonstruktionsmethode	Hoch	K.A.	Hoch
Fasergeometrie	Gering bis Mittel	Hoch	K.A.
Faseranbindung	Gering	Gering	K.A.
Faserensemble	Gering bis Mittel	Hoch	Hoch
Faserorientierungsverteilung	Gering***	Hoch	Mittel
Faserlängenverteilung	Keiner bis Hoch**	Hoch	Mittel
Statistischer Faseranteil	Keiner	Keiner	Hoch
Faseranteil	Hoch	K.A.	Gering bis Mittel
Phasenkontrast	Hoch	K.A.	Gering bis Mittel
Interphase	Hoch	Hoch	Gering
Viskoelastische Matrix	Mittel bis Hoch	Mittel	Mittel bis Hoch
Plastische Matrix	Abh. von Dehnung	Hoch	Mittel

*	Spannungs- bzw. Dehnungsverteilung der einzelnen Phasen bei Analyse der effektiven Steifigkeit
**	Im Vergleich zur Verwendung mittelwertbasierter Modellierung, stark abhängig von der Wahl des Mittelwerts.
***	Im Vergleich zur Verwendung zweistufiger Homogenisierung
K.A.	Keine Angabe

Die Tabelle 10-1 zeigt weiter, dass viele der hier untersuchten Modellierungsparameter einen hohen Einfluss auf die effektiven Compositeigenschaften aufweisen und daher berücksichtigt werden sollten. Die genaue Modellierung mittels kombinierter Simulation auf der Mikro- und Makroebene (FE²-Methode) ist dabei jedoch aufgrund der notwendigen Berechnungszeit nicht möglich. Um diesen Konflikt aufzulösen, bedarf es einer Entkopplung der hochgenauen Modellierung der Compositeigenschaften und Bauteilauslegung. Ein Konzept hierfür bieten neuronale Netzwerke, mit welchen komplexe mathematische Beziehungen durch schnell auswertbare Funktionen approximiert werden können. In dieser Arbeit wird ein neuronales Netz auf Basis der Datengrundlage von RVEs erarbeitet und vorgestellt. Hierzu werden RVEs mit zufällig gewählten Inputparametern erstellt und ausgewertet. Die RVEs unterscheiden sich dabei durch ihre Faserorientierung, Faserlänge, Faservolumenanteil und durch die verwendeten Eigenschaften der Matrix. Es wird eindeutig gezeigt, dass das neuronale Netz im Mittel die Ergebnisse der RVEs besser approximieren kann als eine zweistufige Homogenisierung auf Basis der Methode von Mori-Tanaka. Der Zielkonflikt zwischen genauerer Modellierung und schnellerer Bauteilauslegung kann mit dem vorgestellten Vorgehen somit deutlich entschärft werden.

Ein beispielhaft entworfenen komplexes Bauteil mit Rippen und Bohrungen, kann die Überlegenheit des neuronalen Netzwerks weiter belegen. Weiter kann an dem Beispielbauteil der Effekt der Rekonstruktionsmethoden auf die effektive Compositesteifigkeit gezeigt werden. Die Rekonstruktionsmethode hat einen signifikant größeren Einfluss auf das Ergebnis als die Wahl der Homogenisierungsmethode.

Weiter sind auf Grundlage der hier durchgeführten Untersuchungen und Erkenntnisse Möglichkeiten aufgelistet, welche für zukünftige Forschungsarbeiten lohnenswert erscheinen.

Die Prozesssimulation als solche wurde in der Arbeit zwar bewertet, es kann jedoch der Schluss gezogen werden, dass die Vorhersagen präzise sein müssen, damit infolgedessen die Berechnung effektiver Compositeigenschaften korrekt sind. Dies gilt insbesondere dann, wenn Ansätze verwendet werden, wie die Methode der maximalen Entropie, die fehlerhafte Vorhersagen der Prozesssimulation vollständig an die Struktursimulation durchreichen. Damit eine Rekonstruktion nicht mehr notwendig ist, kann langfristig die Berechnung der ODF über

die Fokker-Planck Gleichung Abhilfe schaffen. Hierzu bedarf es aber entweder deutlich effizienterer numerischer Löser oder deutlich mehr verfügbarer Rechenleistung.

Eine noch detailliertere Modellierung der Mikrostruktur für zukünftige Untersuchungen ist eine folgerichtige Überlegung. Dies bezieht sich sowohl auf die geometrische als auch auf die werkstoffliche Modellierung. Geometrisch könnte so zum Beispiel der Effekt gekrümmter Fasern untersucht werden, welche insbesondere bei langfaserverstärkten Kunststoffen häufig vorkommen. Werkstofflich könnte sowohl die Materialmodellierung der einzelnen Phasen als auch die Anbindung dazwischen untersucht werden. Naheliegend ist vor allem eine weitere nicht-lineare Materialmodellierung der Matrix. Insbesondere plastisches sowie viskoplastisches Verhalten drängt sich für eine weitere Untersuchung auf. Hierbei ist besonders der Spannungszustand um ein Faserende herum interessant. An einem Faserende einer beliebigen Faserkonstellation mehrerer Fasern liegt ein komplexer Spannungszustand vor. Fließgrenzen, die anhand uniaxialer Zugversuche von makroskopischen Probekörpern aus homogenem Matrixmaterial gewonnen werden, könnten für die Modellierung daher ungeeignet sein. Daher sind Forschungen über das Fließverhalten des Matrixwerkstoffs bei komplexer mehraxialer Beanspruchung sinnvoll. Auch ist die Modellierung von Schädigung sowohl für die Matrix als auch für die Anbindung von Faser und Matrix vorstellbar. Die genannten erweiterten Modellierungen der Matrix sollten darüber hinaus auf der Mikroebene untersucht werden. Ein Skaleneffekt sollte insbesondere bei nicht-linearem Werkstoffverhalten überprüft werden.

Der weiter zunehmende Detaillierungsgrad der Modellierung kann zwar Vorhersagen präzisieren, jedoch wird der Rechenaufwand weiter zunehmen. Das große Potential der neuronalen Netzwerke kann hier für Abhilfe sorgen. In zukünftigen Arbeiten könnten die neuronalen Netzwerke weiter ausgearbeitet und erweitert werden, beispielweise unter Einbezug einer plastischen oder viskoelastischen Matrixmodellierung. Für diese Beispiele ist es notwendig die Zeithistorie, im Speziellen hier die Dehnungshistorie, dem neuronalen Netzwerk zur Verfügung zu stellen. Die spezielle Klasse der rekurrenten neuronalen Netzwerke könnten hierfür verwendet werden.

Literaturverzeichnis

1. IPCC: Climate Change 2021. The Physical Science Basis. Contribution of. Summary for Policymakers (2021)
2. European Environment Agency: Environmental pressures from European consumption and production. A study in integrated environmental and economic analysis. EEA technical report, no. 2/2013. Publications Office of the European Union, Luxembourg (2013)
3. Martin Vogt: Bestandsaufnahme Leichtbau in Deutschland (2015)
4. Henning, F., Moeller, E.: Handbuch Leichtbau. Methoden, Werkstoffe, Fertigung, 2nd edn. Hanser eLibrary. Hanser, München (2020)
5. Bonnet, M.: Kunststofftechnik. Grundlagen, Verarbeitung, Werkstoffauswahl und Fallbeispiele, 3rd edn. Springer Vieweg, Wiesbaden (2016)
6. Gandhi, U.N., Goris, S., Osswald, T.A., Song, Y.-Y. (eds.): Discontinuous Fiber-Reinforced Composites. Hanser (2020)
7. Lanxess: Pocan B3215 000000. https://techcenter.lanxess.com/scp/emea/de/products/datasheet/LANXESS_Pocan_B3215_000000_ISO_DE.pdf?docId=31438184 (2021)
8. Lanxess: Pocan B3225 000000. https://techcenter.lanxess.com/scp/emea/de/products/datasheet/LANXESS_Pocan_B3225_000000_ISO_DE.pdf?docId=31438334 (2021)
9. Lanxess: Pocan B3235 000000. https://techcenter.lanxess.com/scp/emea/de/products/datasheet/LANXESS_Pocan_B3235_000000_ISO_DE.pdf?docId=31438484 (2021)
10. Lanxess: Pocan B1305 000000. https://techcenter.lanxess.com/scp/emea/de/products/datasheet/LANXESS_Pocan_B1305_000000_ISO_DE.pdf?docId=31437584 (2021)
11. Osswald, T.A., Menges, G.: Materials Science of Polymers for Engineers, 1st edn. Carl Hanser Fachbuchverlag, s.l. (2012)
12. Fu, S.: Effects of fiber length and fiber orientation distributions on the tensile strength of short-fiber-reinforced polymers. *Composites Science and Technology* (1996). [https://doi.org/10.1016/S0266-3538\(96\)00072-3](https://doi.org/10.1016/S0266-3538(96)00072-3)
13. Gupta, V.B., Mittal, R.K., Sharma, P.K., Mennig, G., Wolters, J.: Some studies on glass fiber-reinforced polypropylene. Part I: Reduction in fiber length during processing. *Polym. Compos.* (1989). <https://doi.org/10.1002/pc.750100103>
14. Huang, D., Zhao, X.: Novel modified distribution functions of fiber length in fiber reinforced thermoplastics. *Composites Science and Technology* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107749>
15. Huang, D., Zhao, X.: A generalized distribution function of fiber orientation for injection molded composites. *Composites Science and Technology* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2020.107999>

16. Inoue, A., Morita, K., Tanaka, T., Arao, Y., Sawada, Y.: Effect of screw design on fiber breakage and dispersion in injection-molded long glass-fiber-reinforced polypropylene. *Journal of Composite Materials* (2013). <https://doi.org/10.1177/0021998313514872>
17. Schoßig, M. (ed.): *Schädigungsmechanismen in faserverstärkten Kunststoffen*. Vieweg+Teubner, Wiesbaden (2011)
18. Thomason, J.L.: Glass fibre sizing: A review. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2019.105619>
19. Jeffery, G.B.: The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (1922). <https://doi.org/10.1098/rspa.1922.0078>
20. David Abram Jack: *Advanced Analysis of short fiber polymer composite material behavior*, University of Missouri
21. Risken, H.: *The Fokker-Planck equation. Methods of solution and applications*, 2nd edn. Springer series in synergetics, vol. 18. Springer, Berlin (1996)
22. Einstein, A.: Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen [AdP 17, 549 (1905)]. *Ann. Phys.* (2005). <https://doi.org/10.1002/andp.200590005>
23. Férec, J., Heniche, M., Heuzey, M.C., Ausias, G., Carreau, P.J.: Numerical solution of the Fokker–Planck equation for fiber suspensions. Application to the Folgar–Tucker–Lipscomb model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (2008). <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2008.04.004>
24. Onat, E.T., Leckie, F.A.: Representation of Mechanical Behavior in the Presence of Changing Internal Structure. *J. Appl. Mech.* (1988). <https://doi.org/10.1115/1.3173630>
25. Folgar, F., Tucker, C.L.: Orientation Behavior of Fibers in Concentrated Suspensions. *Journal of Reinforced Plastics and Composites* (1984). <https://doi.org/10.1177/073168448400300201>
26. Hand, G.L.: A theory of anisotropic fluids. *J. Fluid Mech.* (1962). <https://doi.org/10.1017/S0022112062000476>
27. Advani, S.G., Tucker, C.L.: The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites. *Journal of Rheology* (1987). <https://doi.org/10.1122/1.549945>
28. Doi, M.: Molecular dynamics and rheological properties of concentrated solutions of rod-like polymers in isotropic and liquid crystalline phases. *J. Polym. Sci. Polym. Phys. Ed.* (1981). <https://doi.org/10.1002/pol.1981.180190205>
29. Marrucci, G., Grizzuti, N.: Predicted effect of polydispersity on rodlike polymer behaviour in concentrated solutions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (1984). [https://doi.org/10.1016/0377-0257\(84\)80039-7](https://doi.org/10.1016/0377-0257(84)80039-7)

30. Altan, M.C., Subbiah, S., Güçeri, S.I., Pipes, R.B.: Numerical prediction of three-dimensional fiber orientation in Hele-Shaw flows. *Polym Eng Sci* (1990). <https://doi.org/10.1002/pen.760301408>
31. Agboola, B.O., Jack, D.A., Montgomery-Smith, S.: Effectiveness of recent fiber-interaction diffusion models for orientation and the part stiffness predictions in injection molded short-fiber reinforced composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* (2012). <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2012.06.015>
32. Montgomery-Smith, S., HE, W.E.I., Jack, D.A., SMITH, D.E.: Exact tensor closures for the three-dimensional Jeffery's equation. *J. Fluid Mech.* (2011). <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.165>
33. Montgomery-Smith, S., HE, W.E.I., Jack, D.A., SMITH, D.E.: Exact tensor closures for the three-dimensional Jeffery's equation. *J. Fluid Mech.* (2011). <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.165>
34. Montgomery-Smith, S., Jack, D., SMITH, D.E.: The Fast Exact Closure for Jeffery's equation with diffusion. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2010.12.010>
35. V. Chaubal, C., Leal, L.: A closure approximation for liquid-crystalline polymer models based on parametric density estimation. *Journal of Rheology - J RHEOL* (1998). <https://doi.org/10.1122/1.550887>
36. Cintra, J.S., Tucker, C.L.: Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *Journal of Rheology* (1995). <https://doi.org/10.1122/1.550630>
37. Frahan, H.H. de, Verleye, V., Dupret, F., Crochet, M.J.: Numerical prediction of fiber orientation in injection molding. *Polym Eng Sci* (1992). <https://doi.org/10.1002/pen.760320405>
38. Jack, D.A., Schache, B., SMITH, D.E.: Neural network-based closure for modeling short-fiber suspensions. *Polym. Compos.* (2010). <https://doi.org/10.1002/pc.20912>
39. Qadir, N.u., Jack, D.A.: Modeling fibre orientation in short fibre suspensions using the neural network-based orthotropic closure. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* (2009). <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2009.06.010>
40. J. Feng, C. V. Chaubal, and L. G. Lea: Closure approximations for the Doi theory: Which to use in simulating complex flows of liquid-crystalline polymers?
41. Hinch EJ and Leal LG: Constitutive equations in suspension mechanics. Part 2. Approximate forms for a suspension of rigid particles affected by Brownian rotations. *J. Fluid Mech.* **1976**, 187–208
42. Chung, D.H., Kwon, T.H.: Invariant-based optimal fitting closure approximation for the numerical prediction of flow-induced fiber orientation. *Journal of Rheology* (2002). <https://doi.org/10.1122/1.1423312>

43. Jack, D.A., Smith, D.E.: An invariant based fitted closure of the sixth-order orientation tensor for modeling short-fiber suspensions. *Journal of Rheology* (2005). <https://doi.org/10.1122/1.2000970>
44. Moldex3D: Fiber Function Overview. http://support.moldex3d.com/r15/en/sync/sync-for-nx/functionoverview_1.html (2017). Accessed 15 January 2019
45. Autodesk Simulation: Moldflow's fiber orientation models (Theory). <http://help.autodesk.com/view/MFIWS/2014/ENU/?guid=GUID-6B3A7386-DE57-450E-BF94-B10BD629EC9B> (2013). Accessed 15 January 2019
46. Phelps, J.H., Abd El-Rahman, A.I., Kunc, V., Tucker, C.L.: A model for fiber length attrition in injection-molded long-fiber composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing* (2013). <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.04.002>
47. Voigt, W.: Ueber die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper. *Ann. Phys.* (1889). <https://doi.org/10.1002/andp.18892741206>
48. Reuss, A.: Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle. *Z. angew. Math. Mech.* (1929). <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>
49. Hill, R.: A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1965). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(65\)90010-4](https://doi.org/10.1016/0022-5096(65)90010-4)
50. Dietmar, G., Seeling, T.: *Fracture mechanics. With an introduction to micromechanics. Mechanical engineering series.* Springer, Cham (2018)
51. Hashin, Z., Shtrikman, S.: A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1963). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90060-7](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90060-7)
52. Eshelby, J.D.: The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proc R Soc Lon Ser-A*, 376–396 (1957)
53. Meng, C., Heltsley, W., Pollard, D.D.: Evaluation of the Eshelby solution for the ellipsoidal inclusion and heterogeneity. *Computers & Geosciences* (2012). <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2011.07.008>
54. Qu, M., Jiang, D., Lu, L.X.: An optimal scheme for numerical evaluation of Eshelby tensors and its implementation in a MATLAB package for simulating the motion of viscous ellipsoids in slow flows. *Computers & Geosciences* (2016). <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2016.08.005>
55. William J. Parnell: The Hill and Eshelby tensors for ellipsoidal inhomogeneities in
56. Mori, T., Tanaka, K.: Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica* (1973). [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(73\)90064-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3)

57. Raju, B., Hiremath, S.R., Roy Mahapatra, D.: A review of micromechanics based models for effective elastic properties of reinforced polymer matrix composites. *Composite Structures* (2018). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.07.125>
58. Tandon, G.P., Weng, G.J.: The effect of aspect ratio of inclusions on the elastic properties of unidirectionally aligned composites. *Polym. Compos.* (1984). <https://doi.org/10.1002/pc.750050413>
59. Tandon, G., Weng, G.: Stress Distribution in and Around Spheroidal Inclusion and Voids at Finite Concentration. *Journal of Applied Mechanics-transactions of The Asme - J APPL MECH* (1986). <https://doi.org/10.1115/1.3171804>
60. Weng, G.J.: Some elastic properties of reinforced solids, with special reference to isotropic ones containing spherical inclusions. *International Journal of Engineering Science* (1984). [https://doi.org/10.1016/0020-7225\(84\)90033-8](https://doi.org/10.1016/0020-7225(84)90033-8)
61. Zhao, Y.H., Weng, G.J.: Effective Elastic Moduli of Ribbon-Reinforced Composites. *J. Appl. Mech.* (1990). <https://doi.org/10.1115/1.2888297>
62. Klusemann, B., Böhm, H.J., Svendsen, B.: Homogenization methods for multi-phase elastic composites with non-elliptical reinforcements. Comparisons and benchmarks. *European Journal of Mechanics - A/Solids* (2012). <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2011.12.002>
63. Kachanov, M., Tsukrov, I., Shafiro, B.: Effective Moduli of Solids With Cavities of Various Shapes. *Appl. Mech. Rev.* (1994). <https://doi.org/10.1115/1.3122810>
64. Eroshkin, O., Tsukrov, I.: On micromechanical modeling of particulate composites with inclusions of various shapes. *International Journal of Solids and Structures* (2005). <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2004.06.045>
65. Hori, M., Nemat-Nasser, S.: Double-inclusion model and overall moduli of multi-phase composites. *Mechanics of Materials* (1993). [https://doi.org/10.1016/0167-6636\(93\)90066-Z](https://doi.org/10.1016/0167-6636(93)90066-Z)
66. Schöneich, M., Dinzart, F., Sabar, H., Stéphan Berbenni, Stommel, M.: Reformulated double-inclusion homogenization scheme for viscoelastic composites with interphase (2015)
67. Schöneich, M., Dinzart, F., Sabar, H., Berbenni, S., Stommel, M.: A coated inclusion-based homogenization scheme for viscoelastic composites with interphases. *Mechanics of Materials*, 2017, 89–98
68. Tsai, S.W., Wu, E.M.: A General Theory of Strength for Anisotropic Materials. *Journal of Composite Materials* (1971). <https://doi.org/10.1177/002199837100500106>
69. Puck, A., Schürmann, H.: FAILURE ANALYSIS OF FRP LAMINATES BY MEANS OF PHYSICALLY BASED PHENOMENOLOGICAL MODELS¹This article represents the authors'

- contributions to a world-wide exercise to confirm the state-of-the-art for predicting failure in composites, organised by Hinton and Soden.[24]1. Composites Science and Technology (1998). [https://doi.org/10.1016/S0266-3538\(96\)00140-6](https://doi.org/10.1016/S0266-3538(96)00140-6)
70. Osswald, P.V., Osswald, T.A.: A strength tensor based failure criterion with stress interactions. *Polym. Compos.* (2018). <https://doi.org/10.1002/pc.24275>
71. Benveniste, Y., Dvorak, G.J., Chen, T.: On diagonal and elastic symmetry of the approximate effective stiffness tensor of heterogeneous media. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1991). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(91\)90012-D](https://doi.org/10.1016/0022-5096(91)90012-D)
72. Camacho, C.W., Tucker, C.L., Yalvaç, S., McGee, R.L.: Stiffness and thermal expansion predictions for hybrid short fiber composites. *Polym. Compos.* (1990). <https://doi.org/10.1002/pc.750110406>
73. Pierard, O., Friebel, C., Doghri, I.: Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites. A general framework and its validation. *Composites Science and Technology* (2004). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2003.11.009>
74. Jain, A., Lomov, S., Abdin, Y., Verpoest, I., van Paepegem, W.: Pseudo-grain discretization and full Mori Tanaka formulation for random heterogeneous media: Predictive abilities for stresses in individual inclusions and the matrix. *Composites Science and Technology* (2013). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.08.009>
75. Hill, R.: Elastic properties of reinforced solids. Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1963). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-X](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-X)
76. Drugan, W.J., Willis, J.R.: A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1996). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(96\)00007-5](https://doi.org/10.1016/0022-5096(96)00007-5)
77. Bargmann, S., Klusemann, B., Markmann, J., Schnabel, J.E., Schneider, K., Soyarslan, C., Wilmers, J.: Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review. *Progress in Materials Science* (2018). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.003>
78. Gusev, A.A.: Representative volume element size for elastic composites: A numerical study. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1997). [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(97\)00016-1](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(97)00016-1)
79. Dirrenberger, J., Forest, S., Jeulin, D.: Towards gigantic RVE sizes for 3D stochastic fibrous networks. *International Journal of Solids and Structures* (2014). <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.10.011>
80. Huet, C.: Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1990). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(90\)90041-2](https://doi.org/10.1016/0022-5096(90)90041-2)

81. Hazanov, S., Huet, C.: Order relationships for boundary conditions effect in heterogeneous bodies smaller than the representative volume. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1994). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(94\)90022-1](https://doi.org/10.1016/0022-5096(94)90022-1)
82. Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., Jeulin, D.: Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures* (2003). [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(03\)00143-4](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00143-4)
83. Okereke, M.I., Akpoyomare, A.I.: A virtual framework for prediction of full-field elastic response of unidirectional composites. *Computational Materials Science* (2013). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.12.036>
84. Nguyen, V.-D., Béchet, E., Geuzaine, C., Noels, L.: Imposing periodic boundary condition on arbitrary meshes by polynomial interpolation. *Computational Materials Science* (2012). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.10.017>
85. H. Moulinec, Pierre Suquet: A fast numerical method for computing the linear and non-linear mechanical properties of composites. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences. Série II. Mécanique, physique, chimie, astronomie*, 1994
86. Moulinec, H., Suquet, P.: A FFT-Based Numerical Method for Computing the Mechanical Properties of Composites from Images of their Microstructures. In: Pyrz, R. (ed.) *IUTAM Symposium on Microstructure-Property Interactions in Composite Materials*, Dordrecht, 1995, pp. 235–246. Springer Netherlands, Dordrecht (1995)
87. Moulinec, H., Suquet, P.: A numerical method for computing the overall response of non-linear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (1998). [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(97\)00218-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(97)00218-1)
88. Michel, J.C., Moulinec, H., Suquet, P.: Effective properties of composite materials with periodic microstructure. A computational approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (1999). [https://doi.org/10.1016/S0045-7825\(98\)00227-8](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(98)00227-8)
89. Brisard, S., Dormieux, L.: FFT-based methods for the mechanics of composites: A general variational framework. *Computational Materials Science* (2010). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2010.06.009>
90. Staub, S., Andrä, H., Kabel, M.: Fast FFT based solver for rate-dependent deformations of composites and nonwovens. *International Journal of Solids and Structures* (2018). <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.12.014>
91. Schneider, M., Merkert, D., Kabel, M.: FFT-based homogenization for microstructures discretized by linear hexahedral elements. *Int. J. Numer. Meth. Engng* (2017). <https://doi.org/10.1002/nme.5336>
92. Schneider, M., Ospald, F., Kabel, M.: Computational homogenization of elasticity on a staggered grid. *Int. J. Numer. Meth. Engng* (2016). <https://doi.org/10.1002/nme.5008>

93. Vinogradov, V., Milton, G.W.: An accelerated FFT algorithm for thermoelastic and non-linear composites. *Int. J. Numer. Meth. Engng* (2008). <https://doi.org/10.1002/nme.2375>
94. Stommel, M., Stojek, M., Korte, W.: FEM zur Berechnung von Kunststoff- und Elastomerbauteilen. Hanser, München (2011)
95. Deutsches Institut für Normung: DIN EN ISO 6721-1:2019-09, Kunststoffe - Bestimmung dynamisch-mechanischer Eigenschaften - Teil_1: Allgemeine Grundlagen (ISO_6721-1:2019); Deutsche Fassung EN_ISO_6721-1:2019. Beuth Verlag GmbH, Berlin
96. Bonten, C.: Kunststofftechnik. Einführung und Grundlagen, 2nd edn. Hanser, München (2016)
97. Price, D., Duncan, J.: Thermomechanical, Dynamic Mechanical and Dielectric Methods. In: pp. 164–213 (2016)
98. Adusumalli, R.B., Venkateshan, K.C., Kunchi, C., Vadlamani, S.R.: Tensile testing of single fibres. *Procedia Structural Integrity* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2019.05.020>
99. Jan Pristavok: Mikromechanische Untersuchungen an Epoxidharz-GlasfaserVerbundwerkstoffen unter zyklischer Wechselbelastung. Dissertation, Technische Universität Dresden (2005)
100. Krause, M., Hausherr, J., Burgeth, B., Herrmann, C., Krenkel, W.: Determination of the fibre orientation in composites using the structure tensor and local X-ray transform. *Journal of Materials Science* (2010). <https://doi.org/10.1007/s10853-009-4016-4>
101. Weber, B., Kenmeugne, B., Clement, J.C., Robert, J.L.: Improvements of multiaxial fatigue criteria computation for a strong reduction of calculation duration. *Computational Materials Science* (1999). [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(98\)00129-3](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(98)00129-3)
102. Andreas Kahler: Creating an icosphere mesh in code. <http://blog.andreaskahler.com/2009/06/creating-icosphere-mesh-in-code.html> (2009)
103. Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T.E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burrows, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S.J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K.J., Mayorov, N., Nelson, A.R.J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C.J., Polat, İ., Feng, Y., Moore, E.W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E.A., Harris, C.R., Archibald, A.M., Ribeiro, A.H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P.: SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature methods* (2020). <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>
104. Scott, D.W.: Multivariate Density Estimation. Wiley (1992)
105. Kriwet, A., Stommel, M.: The Impact of Fiber Orientation on Structural Dynamics of Short-Fiber Reinforced, Thermoplastic Components—A Comparison of Simulative and Experimental Investigations. *J. Compos. Sci.* (2022). <https://doi.org/10.3390/jcs6040106>
106. Huang, T.S., Kohonen, T., Schroeder, M.R., Lotsch, H.K.V., Wu, N.: The Maximum Entropy Method, vol. 32. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (1997)

107. Johannes Budday: Numerik von Maximum Entropie Momentenproblemen in der Texturanalyse. Dissertation, Universität Konstanz (2014)
108. Shannon, C.E.: A Mathematical Theory of Communication. Bell System Technical Journal (1948). <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>
109. Hine, P.J., Lusti, H.R., Gusev, A.A.: On the possibility of reduced variable predictions for the thermoelastic properties of short fibre composites. Composites Science and Technology (2004). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2003.09.007>
110. Müller, V.: Micromechanical modeling of short-fiber reinforced composites. Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie (KIT); Karlsruher Institut für Technologie. <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:0072-507608>
111. Grechuk, B., Molyboha, A., Zabaranin, M.: Maximum Entropy Principle with General Deviation Measures. Math. Oper. Res. (2009). <https://doi.org/10.1287/moor.1090.0377>
112. Nocedal, J., Wright, S.J.: Numerical Optimization. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer Science+Business Media LLC, New York, NY (2006)
113. Jack, D.A., SMITH, D.E.: Elastic Properties of Short-fiber Polymer Composites, Derivation and Demonstration of Analytical Forms for Expectation and Variance from Orientation Tensors. Journal of Composite Materials (2008). <https://doi.org/10.1177/0021998307086388>
114. S. Kullback, R. A. Leibler: On Information and Sufficiency. The Annals of Mathematical Statistics **1951**, 79–86 (1951)
115. David Eberly: Intersection of Cylinders. <https://www.geometrictools.com/Documentation/IntersectionOfCylinders.pdf>. Accessed 13 April 2021
116. Freedman, D., Diaconis, P.: On the histogram as a density estimator: L² theory. Z. Wahrscheinlichkeitstheorie verw Gebiete (1981). <https://doi.org/10.1007/BF01025868>
117. Caillerie, D.: Homogenization in elasticity. In: Sanchez-Palencia, E., Zaoui, A. (eds.) Homogenization Techniques for Composite Media, Berlin, Heidelberg, 1987, pp. 1–13. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (1987)
118. Wang, R., Zhang, L., Hu, D., Liu, C., Shen, X., Cho, C., Li, B.: A novel approach to impose periodic boundary condition on braided composite RVE model based on RPIM. Composite Structures (2017). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.12.032>
119. Segurado, J., Llorca, J.: A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. Journal of the Mechanics and Physics of Solids (2002). [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(02\)00021-2](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00021-2)
120. Tyrus, J.M., Gosz, M., DeSantiago, E.: A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models. International Journal of Solids and Structures (2007). <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.08.040>

121. Jacques, S., Baere, I. de, van Paepegem, W.: Application of periodic boundary conditions on multiple part finite element meshes for the meso-scale homogenization of textile fabric composites. *Composites Science and Technology* (2014). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2013.11.023>
122. David Garoz Gomez, Francisco Gilabert, Ruben Dirk Sevnois, Wim Van Paepegem, Ali Rezaei, Siebe Willem Frank Spronk: Definition of periodic boundary conditions in explicit dynamics simulations of micro-or meso-scale unit cells with conformal and non conformal meshes, München, 2016
123. Akpoyomare, A.I., Okereke, M.I., Bingley, M.S.: Virtual testing of composites. Imposing periodic boundary conditions on general finite element meshes. *Composite Structures* (2017). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2016.10.114>
124. Larsson, F., Runesson, K., Saroukhani, S., Vafadari, R.: Computational homogenization based on a weak format of micro-periodicity for RVE-problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2011). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.06.023>
125. Berthelsen, R., Menzel, A.: Computational homogenisation of thermo-viscoplastic composites: Large strain formulation and weak micro-periodicity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.12.032>
126. Reis, F.J.P., Andrade Pires, F.M.: A mortar based approach for the enforcement of periodic boundary conditions on arbitrarily generated meshes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2014). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.01.029>
127. Rodrigues Lopes, I.A., Ferreira, B.P., Andrade Pires, F.M.: On the efficient enforcement of uniform traction and mortar periodic boundary conditions in computational homogenisation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2021). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113930>
128. Advanced Finite Element Methods (ASEN 6367) Course Material. <https://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/AFEM.d/>. Accessed 16 February 2018
129. Gitman, I.M., Askes, H., Sluys, L.J.: Representative volume. Existence and size determination. *Engineering Fracture Mechanics* (2007). <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2006.12.021>
130. Drugan, W.J., Willis, J.R.: A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (1996). [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(96\)00007-5](https://doi.org/10.1016/0022-5096(96)00007-5)
131. Krishna Mohan, P.R., Anil Kumar, M., Mohite, P.M.: Representative volume element generation and its size determination for discontinuous composites made from chopped prepregs. *Composite Structures* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112633>

132. Sambale, A., Schöneich, M., Stommel, M.: Influence of the Processing Parameters on the Fiber-Matrix-Interphase in Short Glass Fiber-Reinforced Thermoplastics. *Polymers* (2017). <https://doi.org/10.3390/polym9060221>
133. Song, W., Krishnaswamy, V., Pucha, R.V.: Computational homogenization in RVE models with material periodic conditions for CNT polymer composites. *Composite Structures* (2016). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2015.11.013>
134. Schöneich, M.: Charakterisierung und Modellierung viskoelastischer Eigenschaften von kurzfaserverstärkten Thermoplasten mit Faser-Matrix Interphase. Dissertation, Universität des Saarlandes (2016)
135. Kaiser, T.: Computational modelling of non-simple and anisotropic materials. Dissertation, Technische Universität Dortmund (2019)
136. Kaiser, J.-M.: Beitrag zur mikromechanischen Berechnung kurzfaserverstärkter Kunststoffe - Deformation und Versagen. Dissertation, Universität des Saarlandes (2013)
137. van Loock, F., Brassart, L., Pardoën, T.: Implementation and calibration of a mesoscale model for amorphous plasticity based on shear transformation dynamics. *International Journal of Plasticity* (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2021.103079>
138. Feyel, F.: Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science* (1999). [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(99\)00077-4](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(99)00077-4)
139. Liu, Z., Wu, C.T., Koishi, M.: A deep material network for multiscale topology learning and accelerated nonlinear modeling of heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.09.020>
140. Chen, G., Wang, H., Bezold, A., Broeckmann, C., Weichert, D., Zhang, L.: Strengths prediction of particulate reinforced metal matrix composites (PRMMCs) using direct method and artificial neural network. *Composite Structures* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.110951>
141. Rao, C., Liu, Y.: Three-dimensional convolutional neural network (3D-CNN) for heterogeneous material homogenization. *Computational Materials Science* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109850>
142. Yang, C., Kim, Y., Ryu, S., Gu, G.X.: Prediction of composite microstructure stress-strain curves using convolutional neural networks. *Materials & Design* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.108509>
143. Jung, S., Ghaboussi, J.: Neural network constitutive model for rate-dependent materials. *Computers & Structures* (2006). <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2006.02.015>
144. Zhang, A., Mohr, D.: Using neural networks to represent von Mises plasticity with isotropic hardening. *International Journal of Plasticity* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102732>

145. Rocha, I.B.C.M., Kerfriden, P., van der Meer, F.P.: Micromechanics-based surrogate models for the response of composites: A critical comparison between a classical mesoscale constitutive model, hyper-reduction and neural networks. *European Journal of Mechanics - A/Solids* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2020.103995>
146. Wu, L., van Nguyen, D., Kilinger, N.G., Noels, L.: A recurrent neural network-accelerated multi-scale model for elasto-plastic heterogeneous materials subjected to random cyclic and non-proportional loading paths. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113234>
147. Ghavamian, F., Simone, A.: Accelerating multiscale finite element simulations of history-dependent materials using a recurrent neural network. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112594>
148. Settgast, C., Hütter, G., Kuna, M., Abendroth, M.: A hybrid approach to simulate the homogenized irreversible elastic–plastic deformations and damage of foams by neural networks. *International Journal of Plasticity* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.11.003>
149. Settgast, C., Abendroth, M., Kuna, M.: Constitutive modeling of plastic deformation behavior of open-cell foam structures using neural networks. *Mechanics of Materials* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2019.01.015>
150. Gorji, M.B., Mozaffar, M., Heidenreich, J.N., Cao, J., Mohr, D.: On the potential of recurrent neural networks for modeling path dependent plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.103972>
151. Zhang, X., Garikipati, K.: Machine learning materials physics: Multi-resolution neural networks learn the free energy and nonlinear elastic response of evolving microstructures. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* (2020). <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113362>
152. Matos, M.A.S., Pinho, S.T., Tagarielli, V.L.: Predictions of the electrical conductivity of composites of polymers and carbon nanotubes by an artificial neural network. *Scripta Materialia* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.03.003>
153. Matos, M.A.S., Pinho, S.T., Tagarielli, V.L.: Application of machine learning to predict the multiaxial strain-sensing response of CNT-polymer composites. *Carbon* (2019). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.02.001>
154. Chollet, F., others: Keras. <https://keras.io> (2015)
155. Martín Abadi, Ashish Agarwal, Paul Barham, Eugene Brevdo, Zhifeng Chen, Craig Citro, Greg S. Corrado, Andy Davis, Jeffrey Dean, Matthieu Devin, Sanjay Ghemawat, Ian Goodfellow, Andrew Harp, Geoffrey Irving, Michael Isard, Yangqing Jia, Rafal Jozefowicz, Lukasz Kaiser, Manjunath Kudlur, Josh Levenberg, Dandelion Mané, Rajat Monga, Sherry Moore, Derek Murray, Chris Olah, Mike Schuster, Jonathon Shlens, Benoit Steiner, Ilya Sutskever,

- Kunal Talwar, Paul Tucker, Vincent Vanhoucke, Vijay Vasudevan, Fernanda Viégas, Oriol Vinyals, Pete Warden, Martin Wattenberg, Martin Wicke, Yuan Yu, Xiaoqiang Zheng: TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems. <https://www.tensorflow.org/> (2015)
156. Clevert, D.-A., Unterthiner, T., Hochreiter, S.: Fast and Accurate Deep Network Learning by Exponential Linear Units (ELUs). ICLR, 23 November 2015, 1–14. <http://arxiv.org/pdf/1511.07289v5>
157. Klein, B.: FEM. Grundlagen und Anwendungen der Finite-Element-Methode im Maschinen- und Fahrzeugbau, 10th edn. Lehrbuch. Springer Vieweg, Wiesbaden (2015)
158. M. Bernard Charlès: Abaqus documentation. <http://help.3ds.com>. (2022). Accessed 17 March 2022

Anhang

A 1 Verschiebungsfaktoren

Tabelle A-1: Verschiebungsfaktoren des ZTVs für PBT

Temperatur [°C]	Verschiebungsfaktor	Temperatur [°C]	Verschiebungsfaktor
-20	30,4033558	50	-25,6575697
-18	29,449549	52	-26,6575454
-16	28,3863684	54	-27,6020043
-14	27,3023903	56	-28,5172107
-12	26,1800884	58	-29,3802838
-10	24,9999441	60	-30,2171027
-8	23,8173816	62	-31,0496564
-6	22,5742415	64	-31,8301802
-4	21,3056991	66	-32,610897
-2	19,9588508	68	-33,3612454
0	18,6394894	70	-34,0870639
2	17,2212028	72	-34,7972319
4	15,8418323	74	-35,5021585
6	14,5351687	76	-36,197087
8	13,1173957	78	-36,8822069
10	11,7094141	80	-37,5572122
12	10,3804963	82	-38,2310041
14	8,90845761	84	-38,9073445
16	7,46333767	86	-39,5867867
18	6,05208009	88	-40,2598467
20	4,48728586	90	-40,9290053
22	2,8625834	92	-41,6067753
24	1,01572215	94	-42,2900803
26	-1,01572215	96	-42,9911134
28	-3,34144179	98	-43,7007571
30	-6,01954376	100	-44,4436751
32	-9,02032947		
34	-11,9832095		
36	-14,7807911		
38	-17,2100205		
40	-19,2806375		
42	-20,95285		
44	-22,3121988		
46	-23,5220002		
48	-24,6210105		

A 2 Spritzgusssimulationen

Tabelle A-2: Prozessparameter der Spritzgusssimulation

Parameter	Einfache Platte			Konstante Platte		Konvergente	Divergente
	2mm	4mm		2mm	4mm		
Werkstoff	Pocan	Pocan	Pocan	Pocan	Pocan	Pocan	Pocan
	B3215	B3225	B3235	B3225	B3225	B3225	B3225
	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000
Temperatur Schmelze [°C]	260	260	270	295	295	295	295
Werkzeugtemperatur [°C]	85	85	85	85	85	85	85
Spritzdruck	140	140	140	110	110	100	100
Füllzeit [s]	1,36	1,36	1,59	1,08	1,86	0,72	0,64
Nachdruckprofil [s: bar]	8,1: 63	8,1: 63	6,5: 74	0,7: 80	0,7: 50	0,7: 60	0,7: 75
	4: 58	4: 58	2: 70	4: 75	5: 45	4: 55	4: 70
	3: 50	3: 50	3: 50	2: 2,7	1: 2,7	2: 2,7	2: 2,7
	1: 2,7	1: 2,7	1: 2,7				
Modellierung				iARD-RPR			
Faser-Faser Inter. C_i				0,005			
Faser-Matrix Inter. C_m				0,1			
Verlangsamungs-koef. α				0,7			
Closure				IBOF			

Tabelle A-3: Prozessparameter für die Spritzgusssimulation des Beispielbauteils

Parameter	
Werkstoff	Pocan B3225 000000
Temperatur Schmelze [°C]	295
Werkzeugtemperatur [°C]	85
Spritzdruck	110
Füllzeit [s]	1,08
Nachdruckprofil [s: bar]	0,7: 80
	4: 75
	2: 2,7
Modellierung	iARD-RPR
Faser-Faser Inter. C_i	0,005
Faser-Matrix Inter. C_m	0,1
Verlangsamungskoeff. α	0,7
Closure	IBOF

A 3 Positionen der Faserorientierungsanalyse

Tabelle A-4: Positionen der Faserorientierungsanalyse für die vier unterschiedlichen Geometrien im Probeeigenen Koordinatensystem

Probekörpergeometrie	Positionsbezeichnung	Probekörperkoordinatensystem	
		X [mm]	Y [mm]
Einfache Platte	1-1	64,00	7,0
Einfache Platte	5-1	0,00	7,00
Einfache Platte	2-2	48,0	32,0
Einfache Platte	4-2	16,0	32,0
Einfache Platte	3-3	32,0	57,0
Einfache Platte	2-4	48,0	82,0
Einfache Platte	4-4	16,0	82,0
Einfache Platte	1-5	64,0	107,0
Einfache Platte	5-5	0,0	107,0
Konstante Platte	1-1	52,0	2,5
Konstante Platte	1-5	0,0	2,5
Konstante Platte	3-2	39,5	31,5
Konstante Platte	3-4	13,5	31,5
Konstante Platte	5-3	26,5	60,5
Konstante Platte	7-2	39,5	89,5
Konstante Platte	7-4	13,5	89,5
Konstante Platte	9-1	52,0	118,5
Konstante Platte	9-5	0,0	118,5
Konvergente Platte	1-1	46,6	14,3
Konvergente Platte	1-5	0,0	5,0
Konvergente Platte	4-1	29,3	55,8
Konvergente Platte	4-5	0,0	50,0
Konvergente Platte	6-1	17,8	83,6
Konvergente Platte	6-5	0,0	80,0
Konvergente Platte	7-1	12,0	97,4
Konvergente Platte	7-3	0,0	95,0
Konvergente Platte	8-1	6,2	111,2
Konvergente Platte	8-2	0,0	110,0
Divergente Platte	1-1	10,5	7,0
Divergente Platte	1-3	0,0	9,0
Divergente Platte	2-1	16,3	20,8
Divergente Platte	2-5	0,0	24,0
Divergente Platte	3-1	22,0	34,4
Divergente Platte	3-5	0,0	38,8
Divergente Platte	5-1	33,6	62,3
Divergente Platte	5-5	0,0	69,0
Divergente Platte	7-1	45,1	90,0
Divergente Platte	7-5	0,0	99,0
Divergente Platte	8-5	0,0	114,0
Divergente Platte	9-1	56,7	117,7

A 4 Ergebnisse der Faserorientierungsanalyse

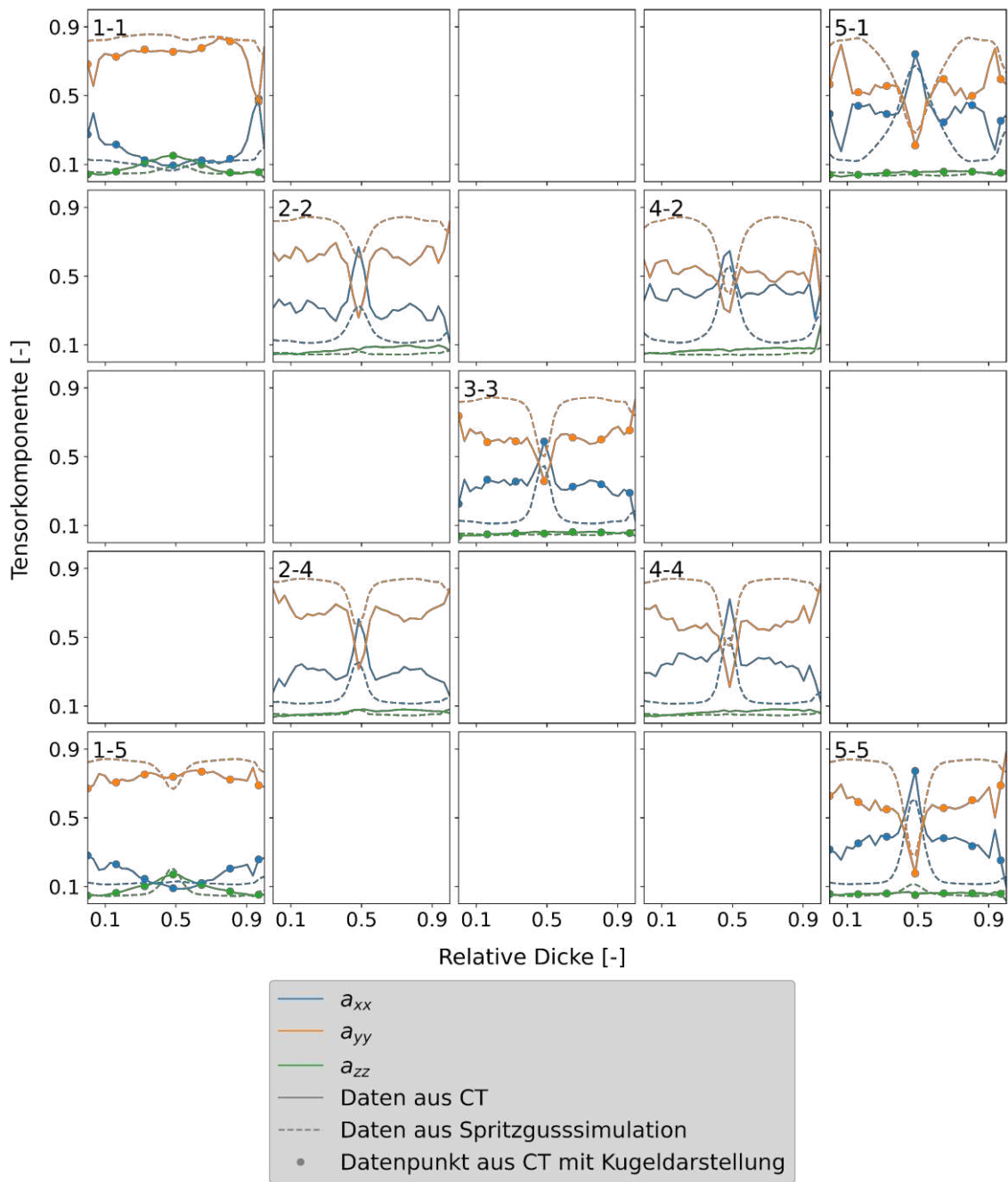


Abbildung A-1: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors sowie der Spritzgussimulation der einfachen Platte, aus PBT-GF10.

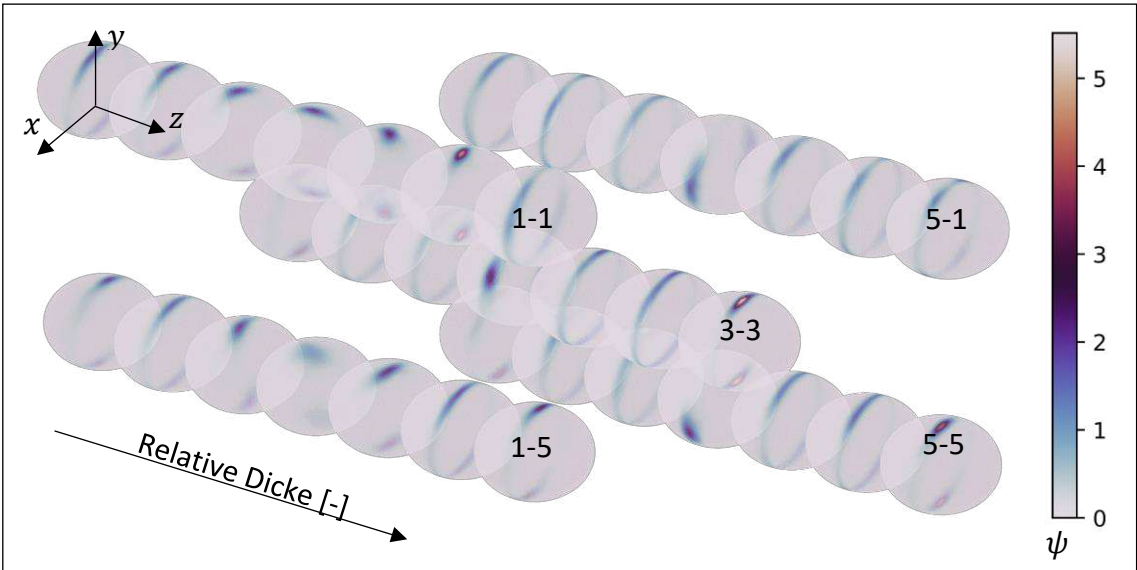


Abbildung A-2: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der einfachen Platte, aus PBT-GF10.

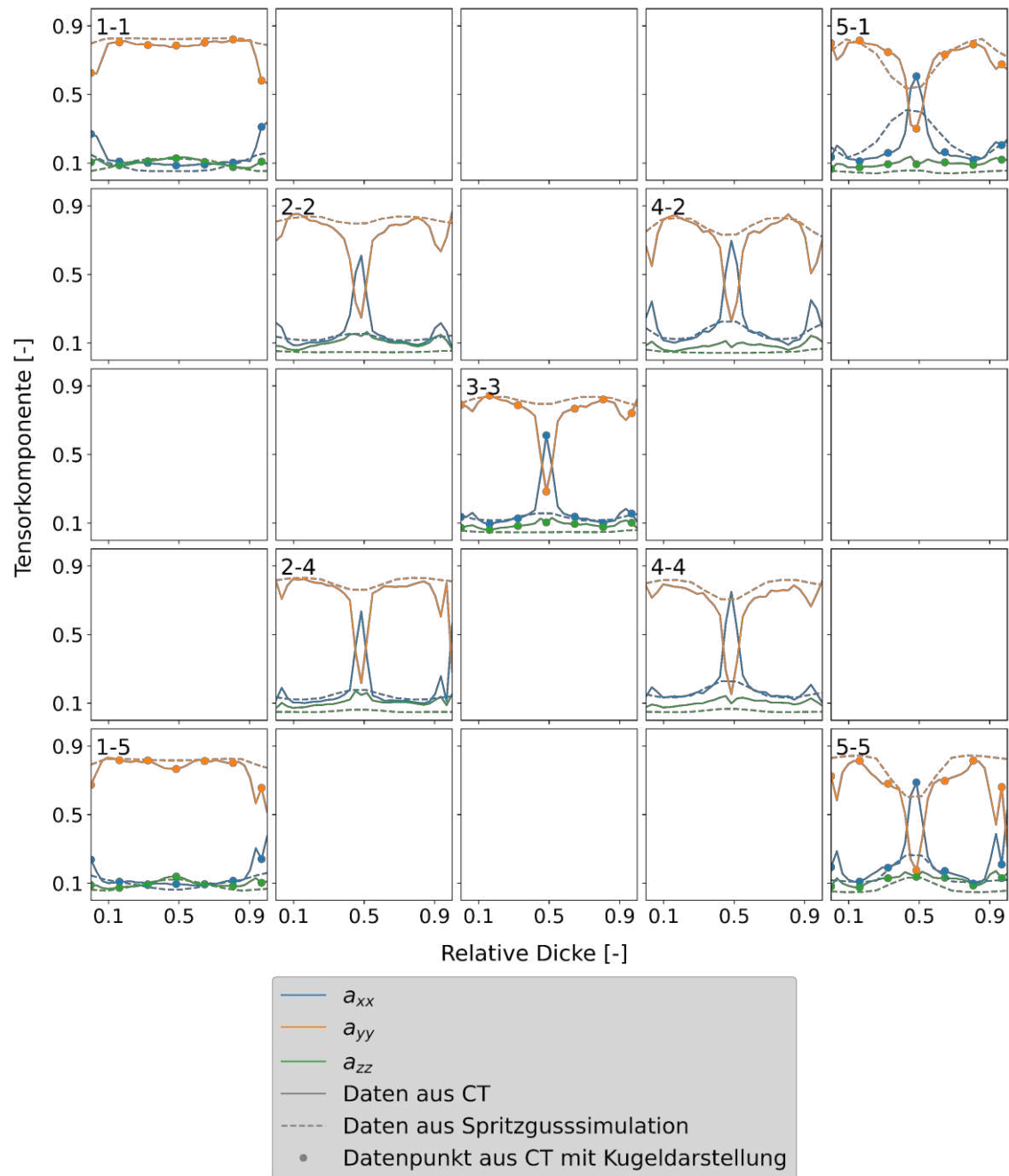


Abbildung A-3: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors der einfachen Platte, aus PBT-GF30.

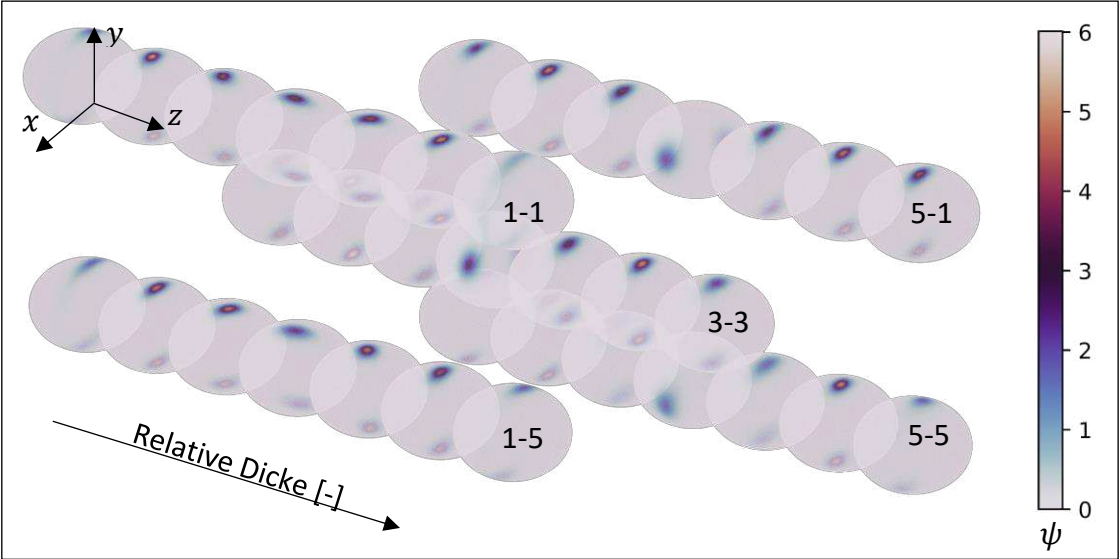


Abbildung A-4: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der einfachen Platte, aus PBT-GF30.

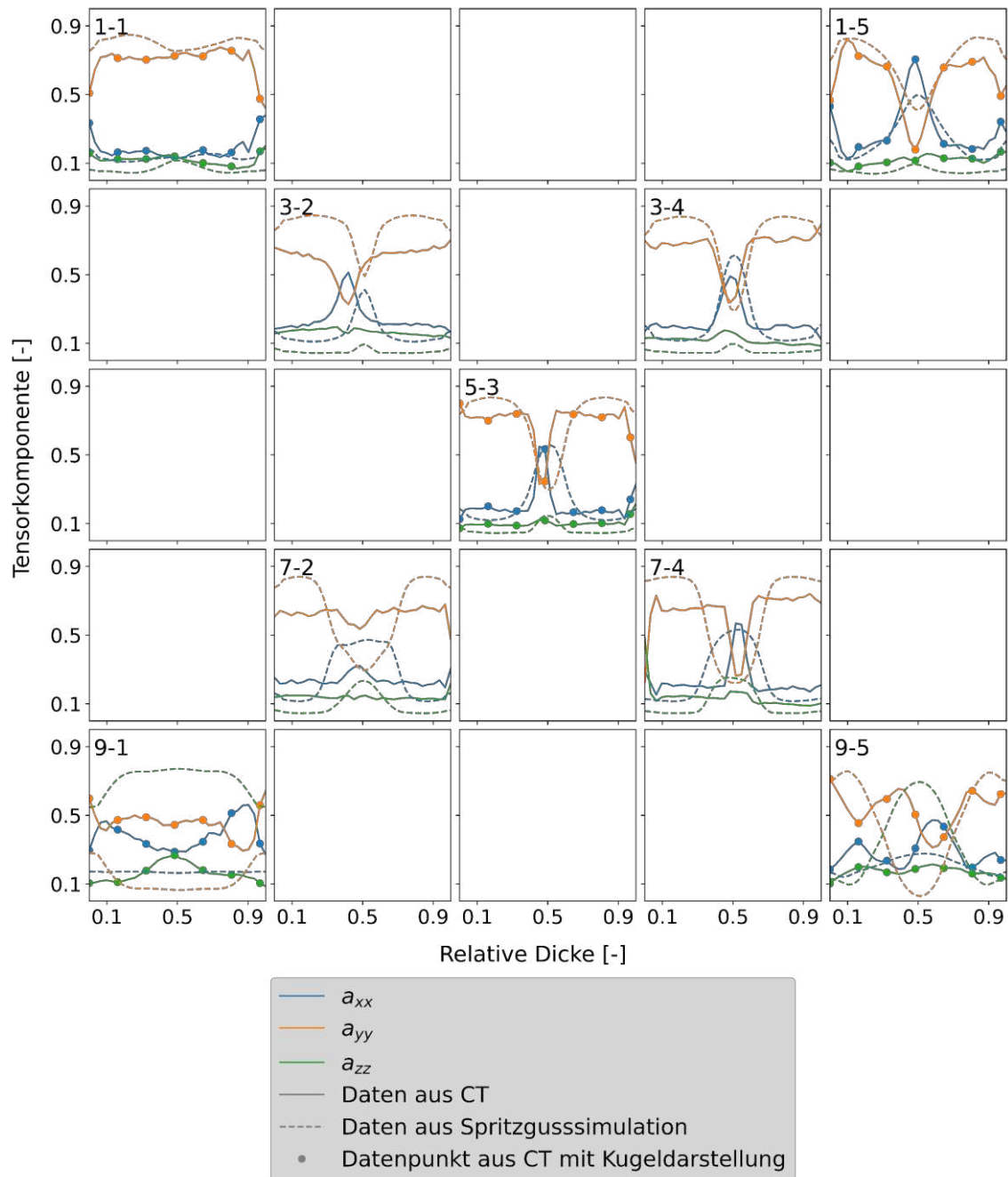


Abbildung A-5: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors der konstanten, 2mm dicken Platte, aus PBT-GF20.

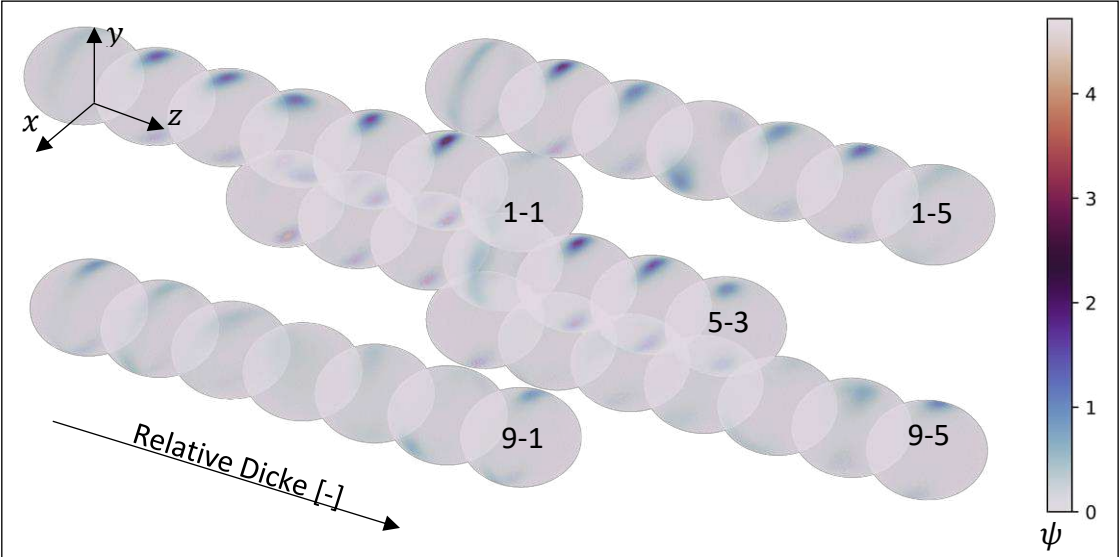


Abbildung A-6: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der konstanten, 2mm dicken Platte, aus PBT-GF20.

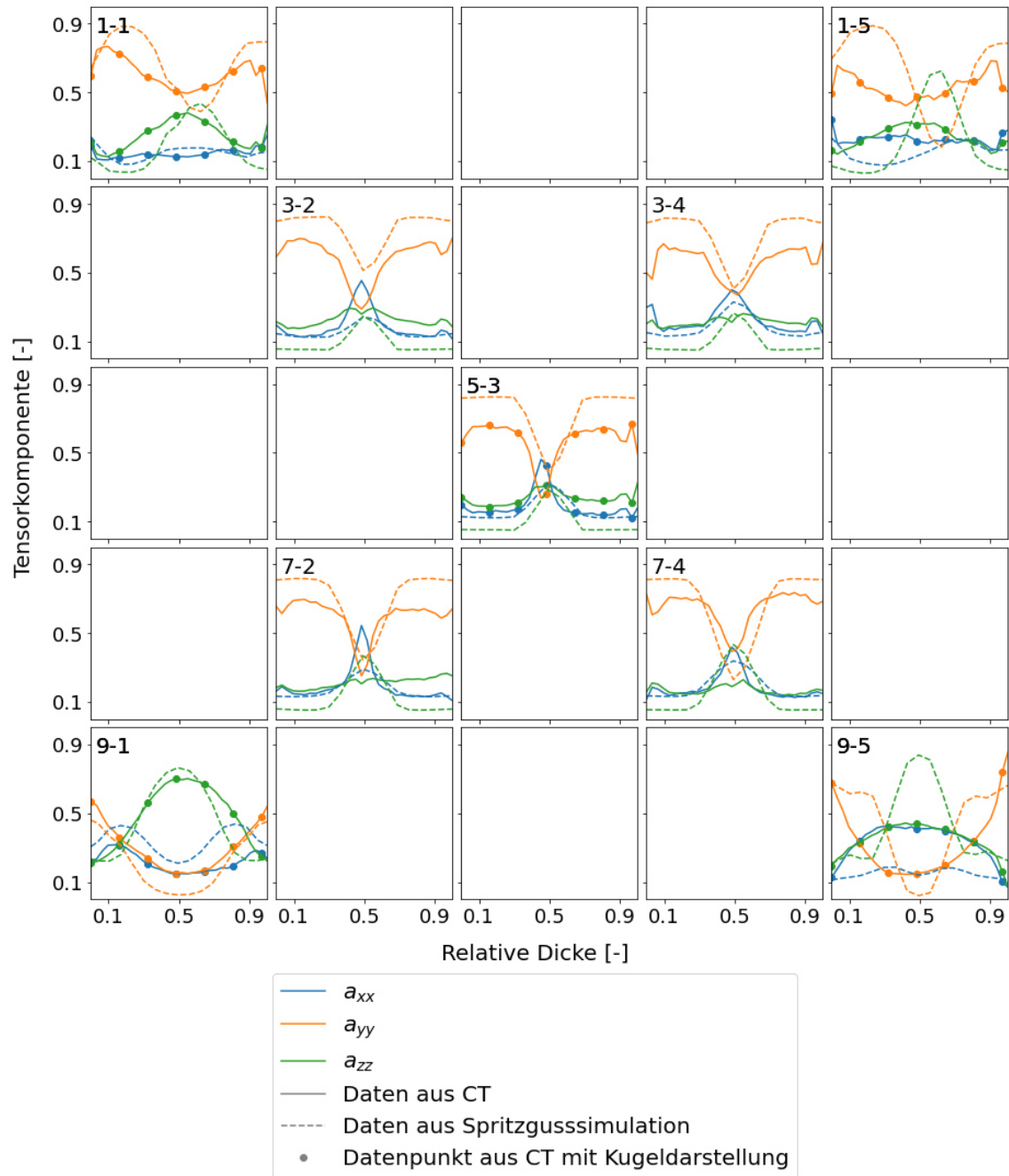


Abbildung A-7: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors der konstanten, 4mm dicken Platte, aus PBT-GF20.

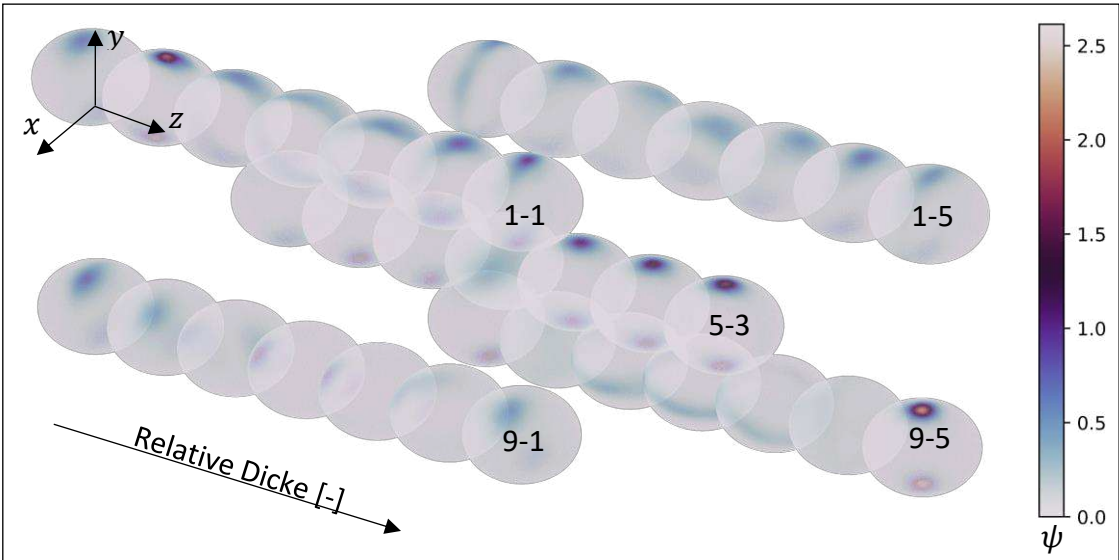


Abbildung A-8: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der konstanten, 4mm dicken Platte, aus PBT-GF20.

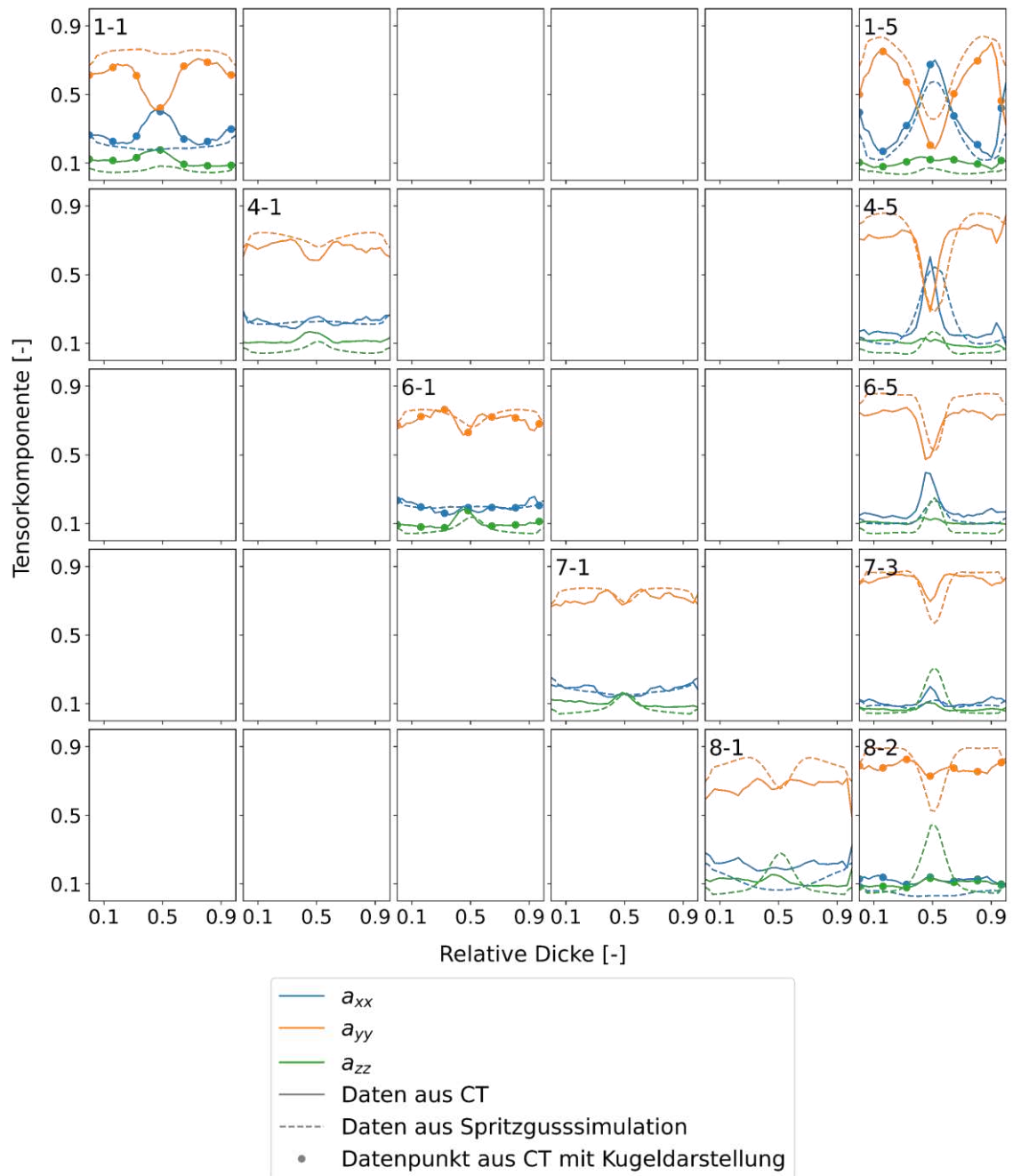


Abbildung A-9: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors der konvergenten Platte, aus PBT-GF20.

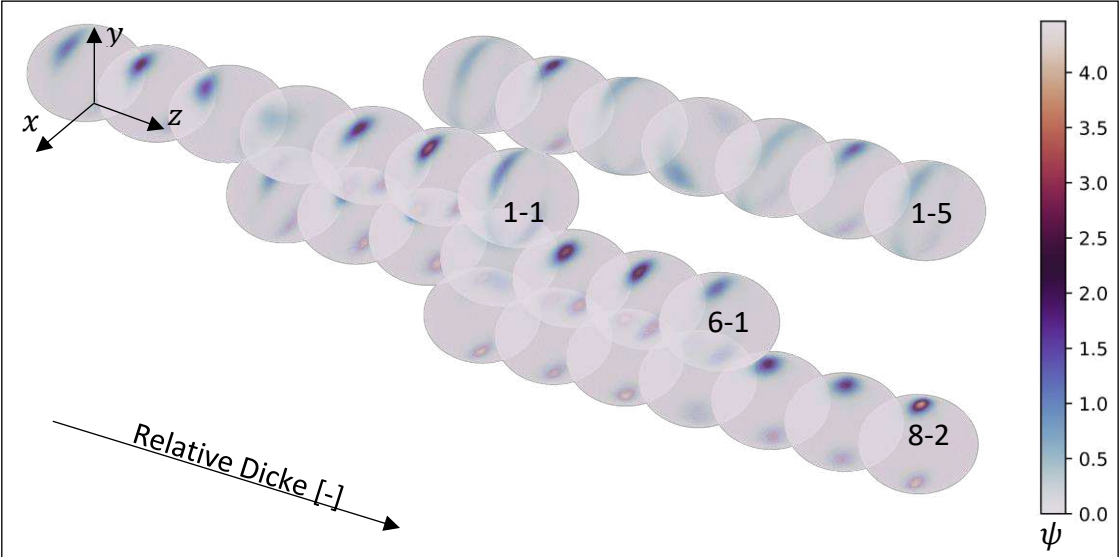


Abbildung A-10: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der konvergenten Platte, aus PBT-GF20.

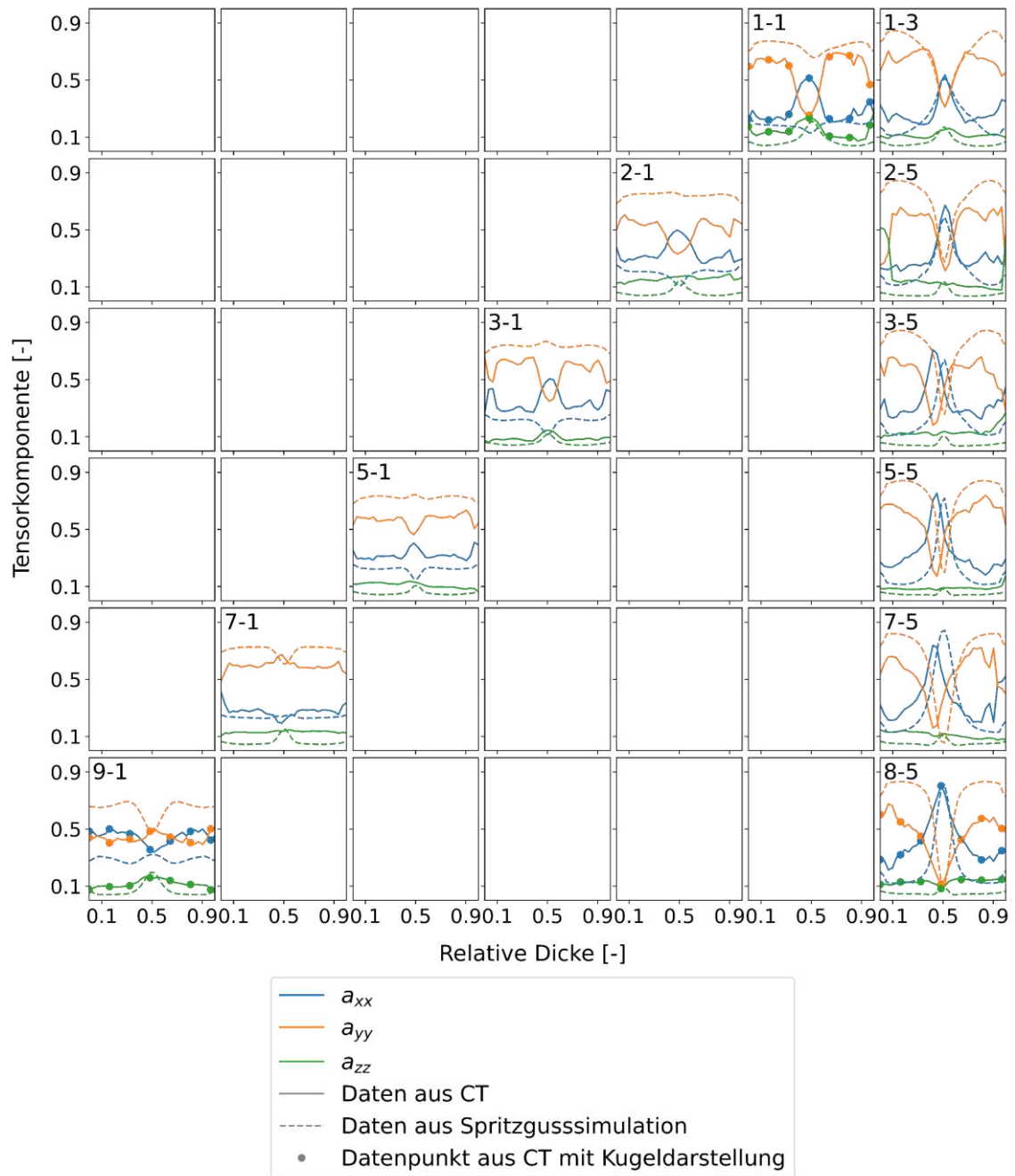


Abbildung A-11: Darstellung der Komponenten des experimentell ermittelten Faserorientierungstensors der divergenten Platte, aus PBT-GF20.

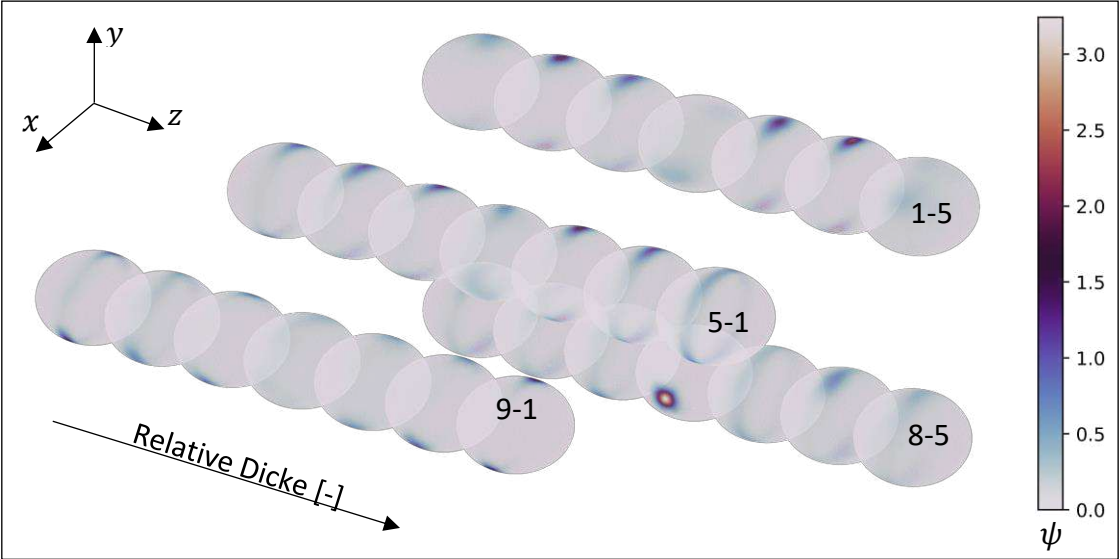


Abbildung A-12: Darstellung der experimentell ermittelten ODFs der divergenten Platte, aus PBT-GF20.

A 5 Vergleich der Rekonstruktionsmethoden

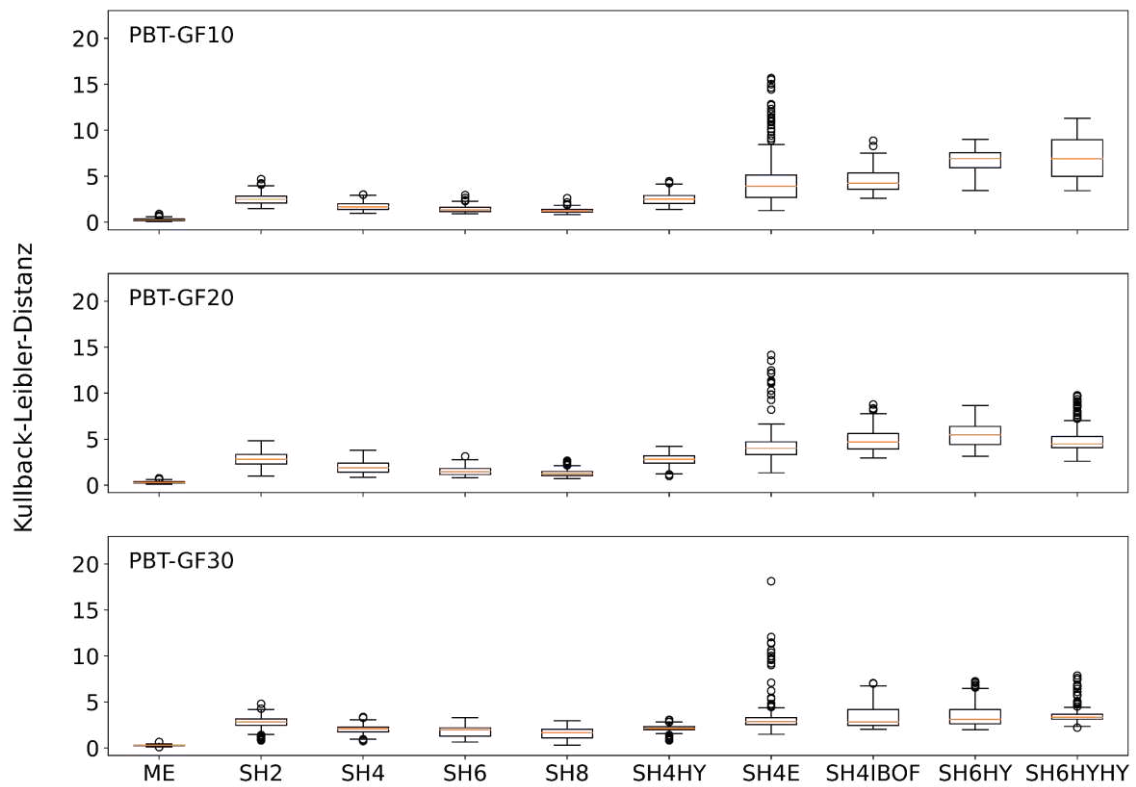


Abbildung A-13: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen der einfachen Platte für alle Rekonstruktionsmethoden. Aufteilung nach Faservolumengehalt.

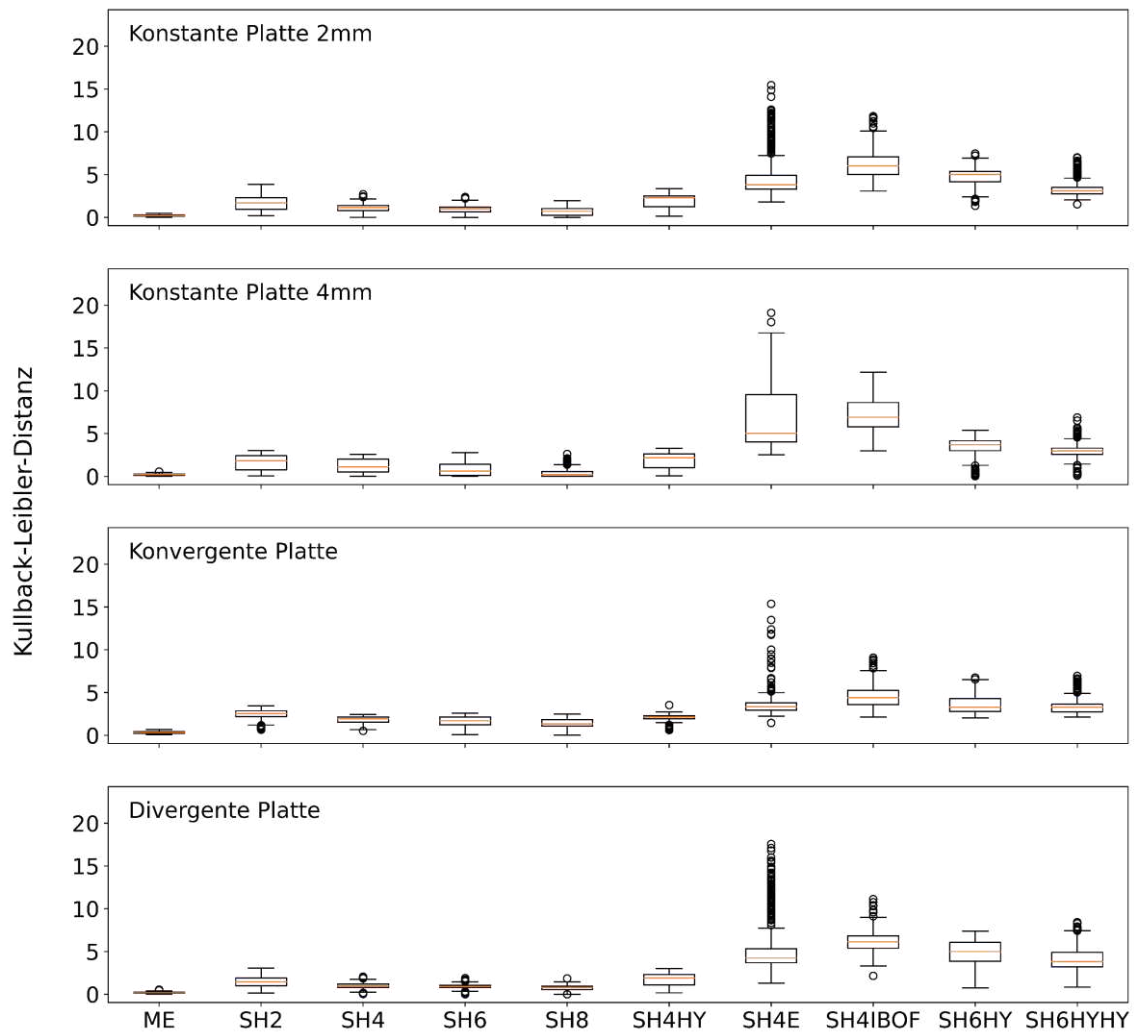


Abbildung A-14: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen der zweiten Stufe (unterschiedliche Geometrien) für alle Rekonstruktionsmethoden.

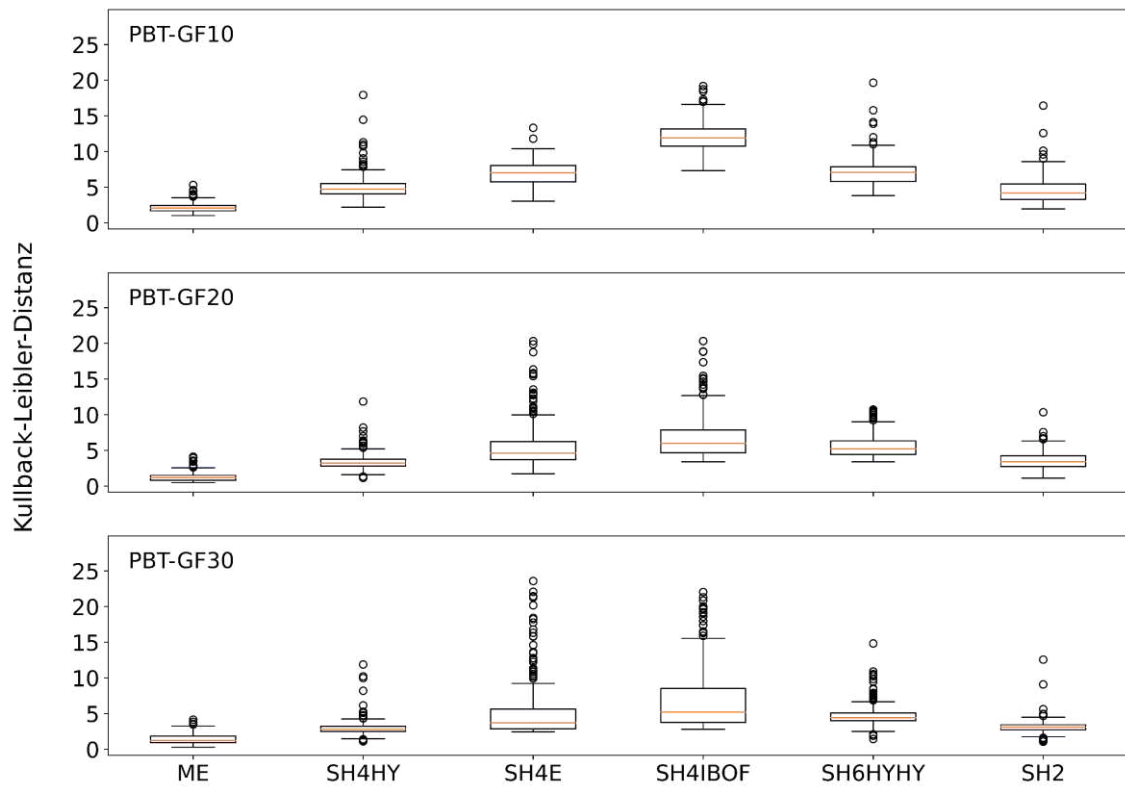


Abbildung A-15: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen mittels Spritzgussimulation berechneten Faserorientierungstensen der einfachen Platte für die hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Aufteilung nach Faservolumengehalt.

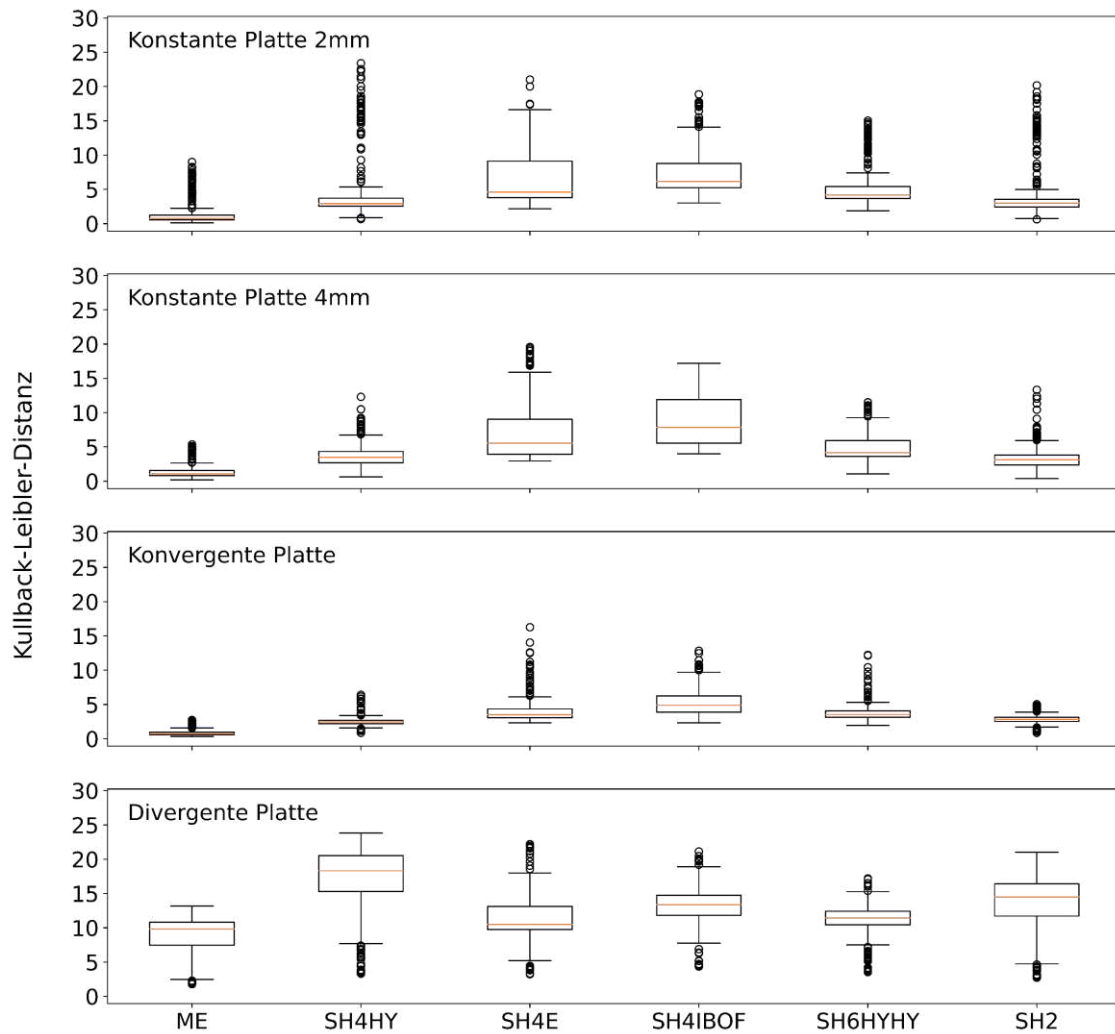


Abbildung A-16: Boxplot der Kullback-Leibler-Distanz zwischen gemessenen ODFs und Rekonstruktionen mittels Spritzgussimulation berechneten Faserorientierungstensenoren für die hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Aufteilung für die unterschiedlichen Geometrien.

A 6 Einfluss der Rekonstruktion auf die Compositesteifigkeit

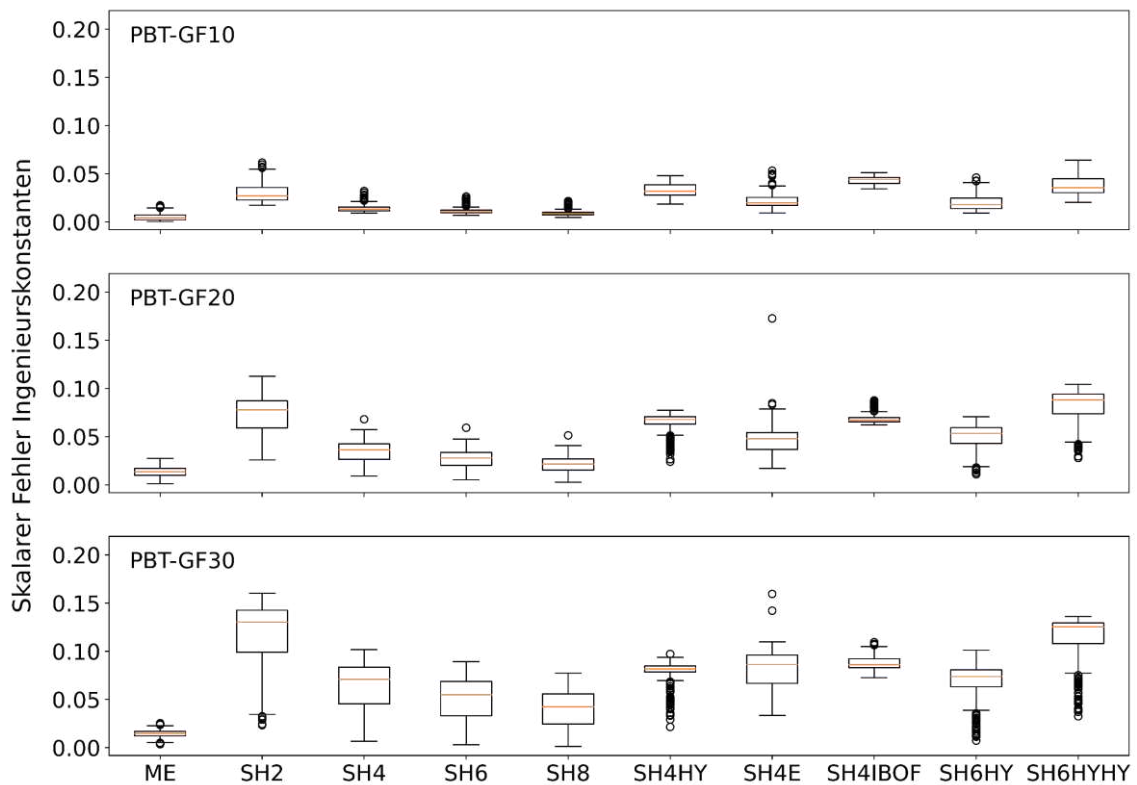


Abbildung A-17: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-Voigt) für alle Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessene Faserorientierungstensoren.

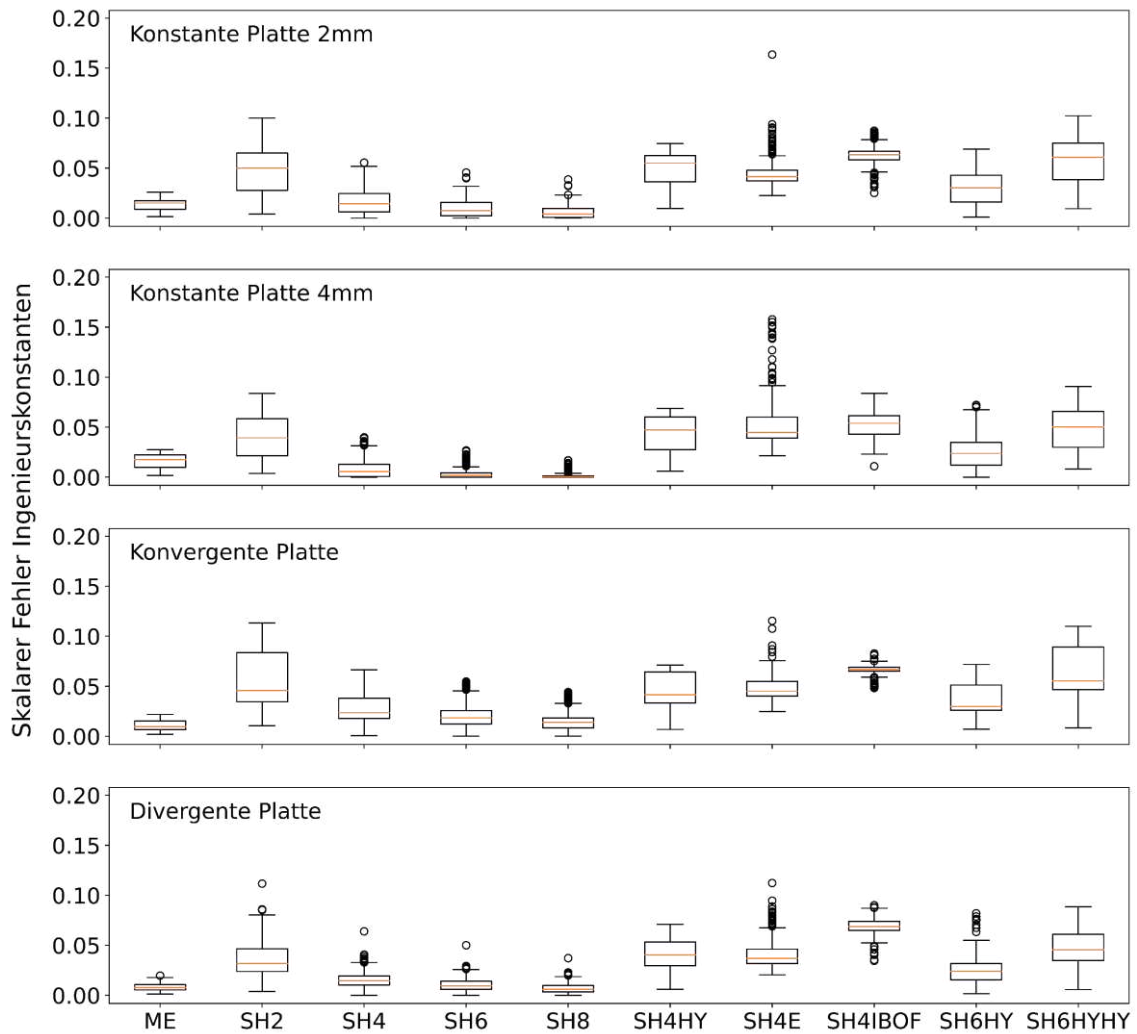


Abbildung A-18: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die exakten, experimentell gemessene Faserorientierungstensoren.

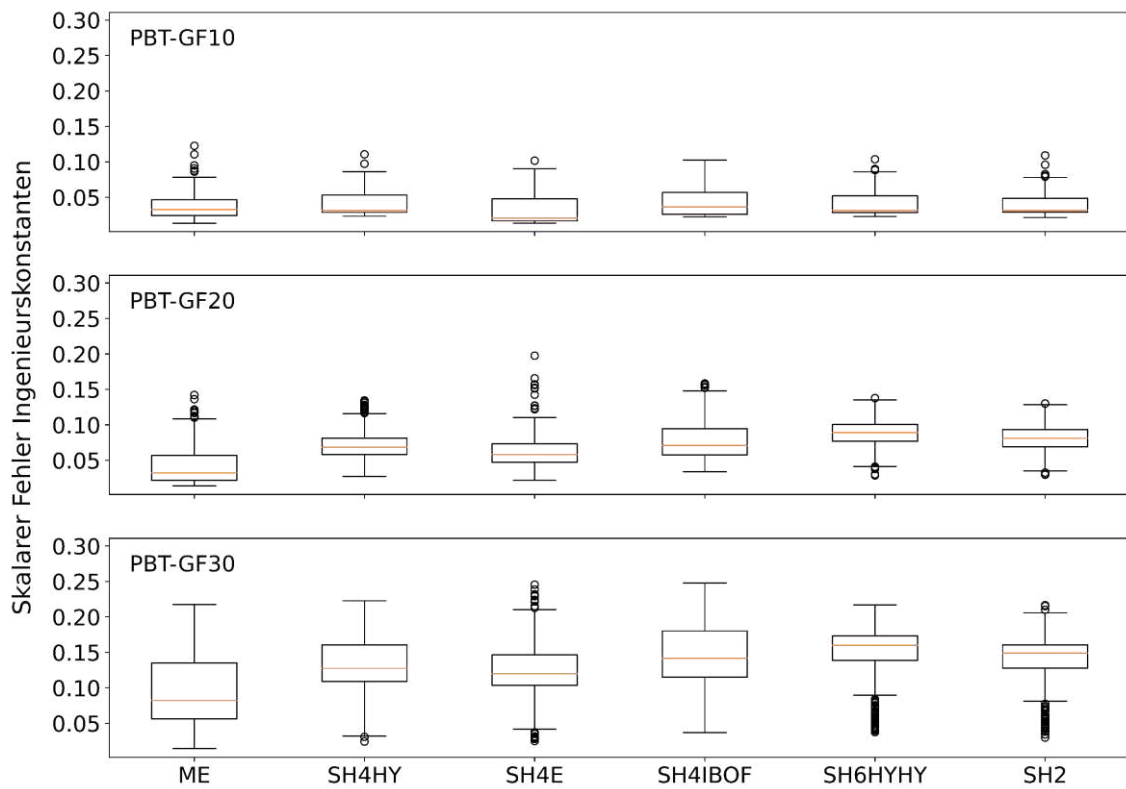


Abbildung A-19: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für alle hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die berechneten Faserorientierungstensoren. Aufteilung nach Faservolumengehalt.

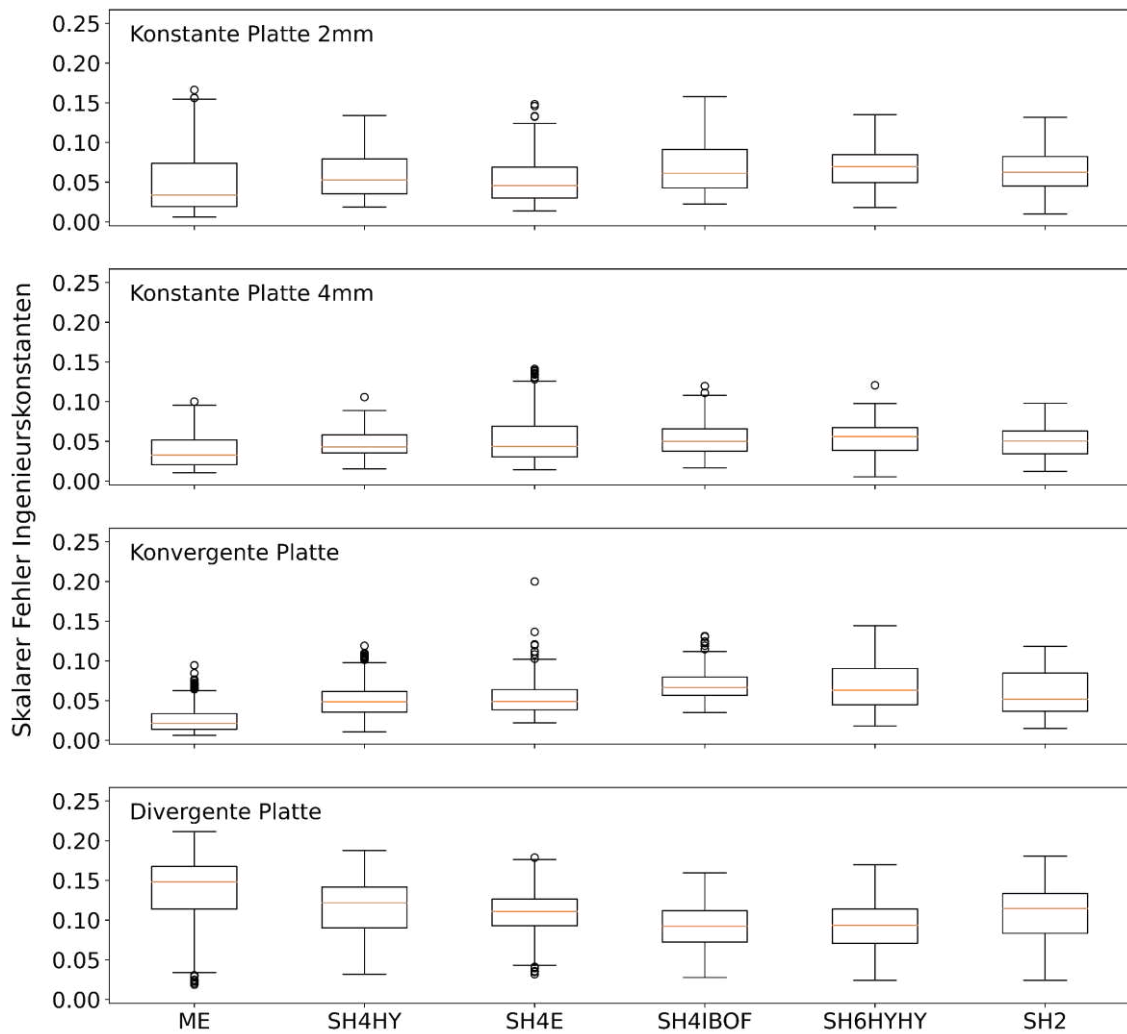


Abbildung A-20: Euklidische Norm des relativen Fehlers der effektiven Compositesteifigkeit nach zwei-stufiger Homogenisierung (MT-PG) für hier möglichen Rekonstruktionsmethoden. Grundlage der Rekonstruktion sind die berechneten Faserorientierungstensoren. Aufteilung nach Probekörpergeometrie.

A 7 Faserplatzierungsalgorithmen

Die Platzierung der Fasern im RVE erfolgt für alle Faserensembles in dieser Arbeit zufällig nach einer Gleichverteilung. Das heißt, es wird keine spezielle Verteilungsfunktion für die Fasern im Raum definiert. Weiter werden die Fasern so platziert, dass ein periodisches Faserensemble entsteht. Das heißt, ragt eine Faser aus dem vordefinierten Volumen heraus, so wird sie auf der gegenüberliegenden Seite periodisch wieder eingefügt. In der Abbildung A-21 ist der Ablauf zur Erstellung einer periodischen Faser dargestellt. Zunächst wird eine Faser im Raum platziert und es werden die Seiten identifiziert, an denen die Faser die Seiten des RVEs schneidet. Anschließend wird die Faser kopiert und in die Richtung der identifizierten Seiten verschoben. Dieser Vorgang wird mit den neu erstellten Fasern so lange wiederholt, bis keine neue Überschneidung mehr von Faser und Seitenfläche stattfindet. Dieses rekursive Vorgehen ist dabei notwendig, um eine vollständig periodische Geometrie zu erzeugen.

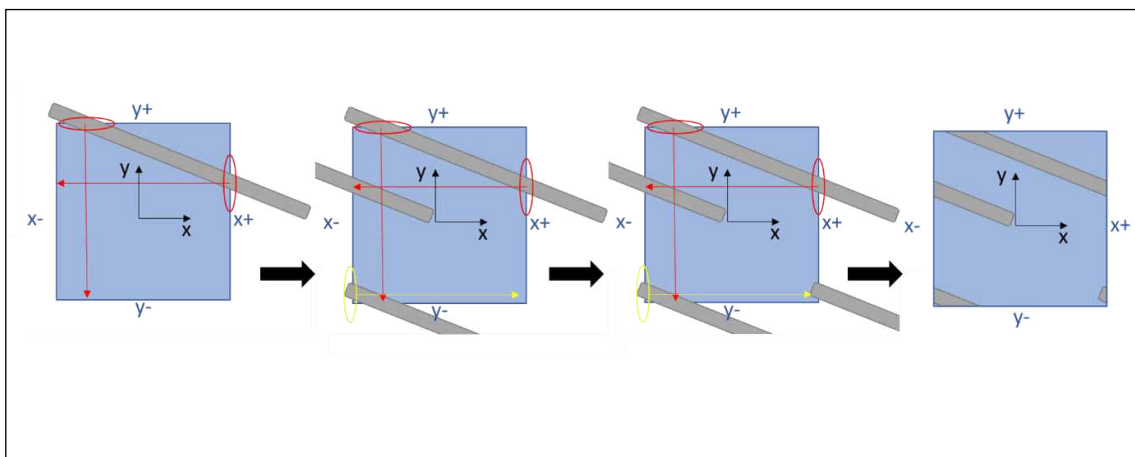


Abbildung A-21: Periodische RVE Struktur mit rekursivem Faserplatzierungsalgorithmus.

Für die Erstellung eines Faserensembles muss geprüft werden, ob sich Fasern schneiden. Hierfür kommen mehrere Algorithmen infrage, von denen zwei vorgestellt werden und hinsichtlich ihrer Rechendauer untersucht werden. Beiden Algorithmen ist gemein, dass die Fasern einzeln nacheinander platziert werden. Falls eine Überschneidung mit einer anderen Faser festgestellt wird, so wird die Position der zu platzierenden Faser so lange verändert, bis keine Überschneidung mehr existiert.

Der erste verwendete Algorithmus basiert auf der Berechnung einer Verschneidung von Netzgittern (vgl. Abbildung A-22). Dieser kann bei jeder beliebigen Faser- oder Einschlussgeometrie verwendet werden. Daher wird dieser Algorithmus im Folgenden als allgemeiner Verschneidungsalgorithmus bezeichnet. Hierbei wird zunächst jede Faser als Netzgitter approximiert und anschließend wird eine Verschneidung der Netzgitter berechnet. Die Erstellung der Netzgitter und die anschließende Berechnung der Verschneidung wird im Rahmen dieser Arbeit durch Abaqus interne Funktionen realisiert.

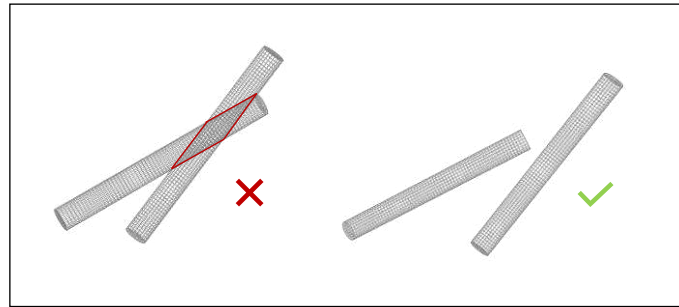


Abbildung A-22: Allgemeiner Verschneidungsalgorithmus auf Basis von Netzgittern.

Der zweite Algorithmus basiert auf einem Separationsachsenverfahren, vorgestellt in [115]. Im Unterschied zum ersten Algorithmus können hier nur konvexe Geometrien als Einschlussgeometrie verwendet werden. Das Separationsachsenverfahren kann weiter die Verschneidung zweier Einschlüsse nicht direkt bestimmen, sondern nur, ob eine Überschneidung existiert. Für die Erstellung der Faserensembles ist dies jedoch ausreichend. Das Separationsachsenverfahren funktioniert dabei wie folgt (vgl. Abbildung A-22): Zunächst werden die Kanten der Fasern in eine Richtung auf eine Linie, die Separationsachse, projiziert. Auf dieser Linie wird geprüft, ob eine Überschneidung der Projektionen vorhanden ist. Kann eine Separationsachse gefunden werden, auf der keine Überschneidung vorhanden ist, so ist auch keine Überschneidung der Einschlüsse vorhanden. Weitere Details über das Separationsachsenverfahrens kann [115] entnommen werden.

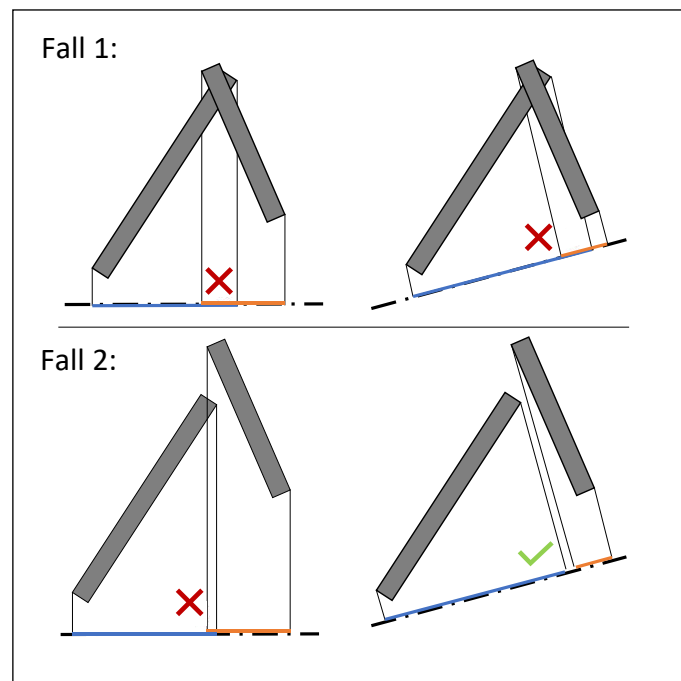


Abbildung A-23: Schematische Darstellung des Algorithmus mit primitiven Zylindern auf Basis des Separationsachsenverfahrens von [115].

In der Abbildung A-24 ist ein Vergleich der beiden Verschneidungsalgorithmen dargestellt. In der Abbildung wird die benötigte Zeit in Abhängigkeit der verwendeten Faseranzahl zum Erstellen des Faserensembles gezeigt. Weiter ist die zusätzliche Zeit, die für die weitere Erstellung benötigt wird, als *Abaqus* Overhead mit aufgeführt. Diese beinhaltet zum Beispiel das Erstellen der Matrix oder das Verschneiden zwischen den Fasern und der Matrix. Für die Erstellung des Vergleichs werden Faserensembles erstellt mit einem Faservolumengehalt von 11,6%, einer Faserlänge von 100 μm und einer ODF, die mit der Methode der maximalen Entropie des Faserorientierungstensors \mathbf{a}_2 mit $\text{eig}(\mathbf{a}_2) = [0,8 \ 0,15 \ 0,05]$ rekonstruiert wird. Je verwendeter Faseranzahl werden 10 Wiederholungen durchgeführt. Die Berechnung wird auf einer *AMD Ryzen 3600* CPU mit 32 GB Ram, in der *Abaqus*-Version 6.21 durchgeführt. In der Abbildung ist zu erkennen, dass der Algorithmus mit den primitiven Zylindern deutlich schneller ist. Dies gilt für alle Faseranzahlen. Bei 100 Fasern ist der Algorithmus mit den primitiven Zylindern fast eine Größenordnung schneller als der allgemeine Verschneidungsalgorithmus.

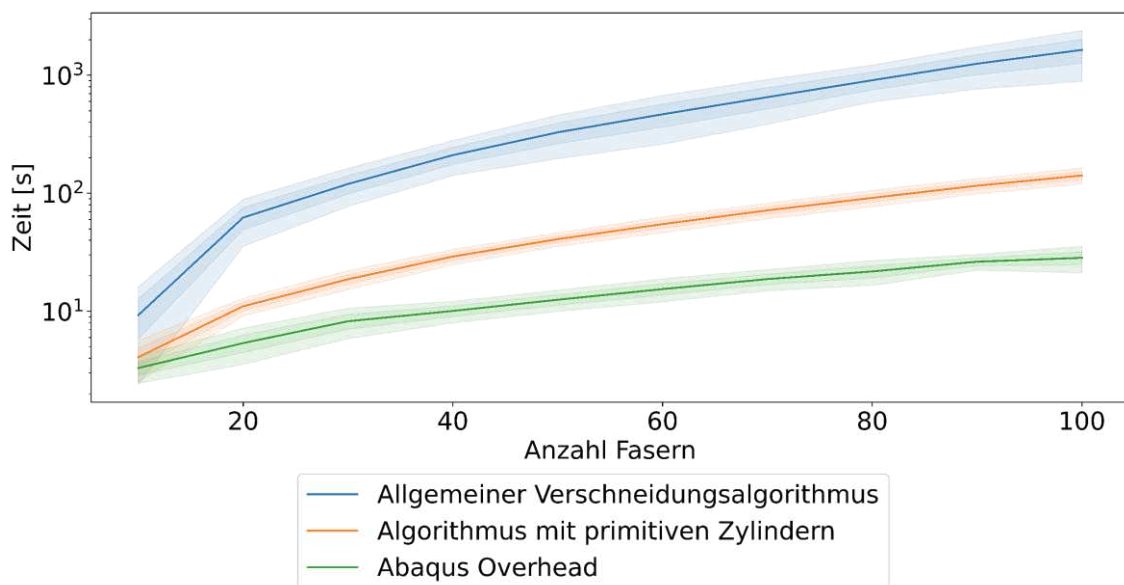


Abbildung A-24: Vergleich der benötigten Rechenzeit für die Erstellung von Faserensembles mit den beiden unterschiedlichen Algorithmen.

Die benötigte Zeit für die Erstellung der Faserensembles hängt dabei nicht nur davon ab wie schnell ein Algorithmus eine Faserüberschneidung berechnen kann, sondern auch davon, wie viele Berechnungen der Algorithmus ausführen muss. Letzteres ist bedingt durch die zu erstellenden Faserensembles. Bei einem Faserensemble mit einem hohen Faservolumenanteil ist es wahrscheinlicher, dass beim Platzieren einer Faser eine Überschneidung vorhanden ist als bei einem Faserensemble mit niedrigerem Faservolumenanteil. Weiter besitzen die Faserlänge und die Faserorientierung ebenfalls einen Einfluss auf die Wahrscheinlichkeit einer verschneidungsfreien Platzierung. Eine längere Faser hat wahrscheinlich öfter eine Verschneidung mit

anderen Fasern als eine kürzere. Bei einer unidirektionalen Faserorientierung kommen Verschneidungen weniger häufig vor als bei isotropen Faserorientierungen.

Je nach verwendeten Parametern für Faservolumengehalt, Faserlängen und Faserorientierung kann es sein, dass die Erstellung der Faserensembles äußerst lang ist oder gar nicht mehr funktioniert, da keine freien Stellen für die Fasern gefunden werden können. In den für diese Arbeit erstellten Faserensembles liegt der erstellbare Faservolumenanteil bei ca. 20%, bei den hier verwendeten typischen Faserorientierungen (vgl. Abschnitt 6.2.2) und Faserlängenverteilung (vgl. Abschnitt 4.3).

Zur Erstellung von Faserensembles mit einem höheren Faservolumenanteil wird ein zusätzlicher Kontraktionsalgorithmus verwendet. Bei diesem werden die bereits platzierten Fasern an einer Stelle des Volumens maximal zusammengezogen, ohne dabei die Orientierung der einzelnen Fasern zu verändern. Die Funktionsweise ist in der Abbildung A-25 dargestellt. Um weiterhin eine annähernde Gleichverteilung der Fasern im Volumen zu erreichen, werden nicht alle Fasern auf einen Punkt gezogen, sondern nur eine Teilmenge aller Fasern auf unterschiedliche Punkte. Durch das Zusammenziehen entstehen Lücken, in denen neue Fasern platziert werden können. Hierdurch können bis zu 25% Faservolumenanteil bei den hier typischen Faserorientierungs- und Faserlängenverteilungen erreicht werden.

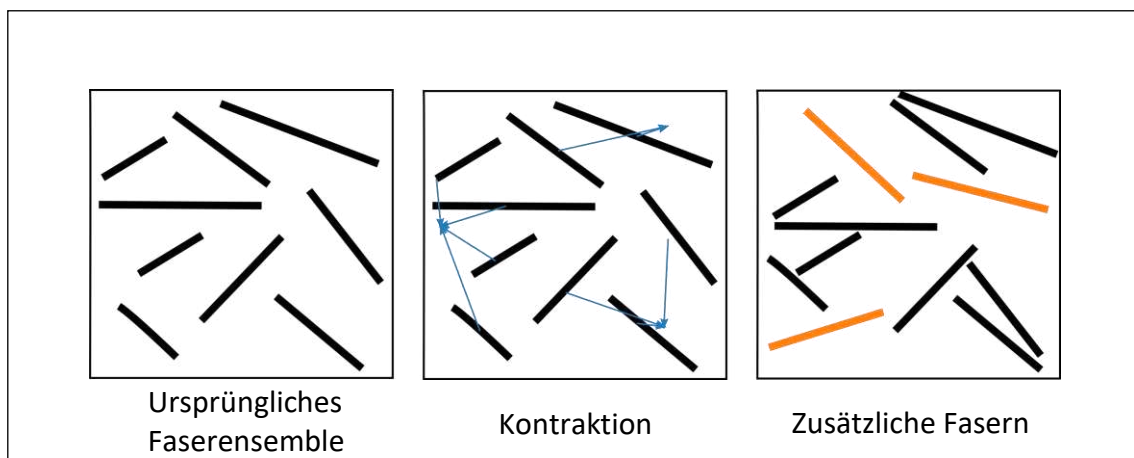


Abbildung A-25: Schema des Kontraktionsalgorithmus zur Erstellung höherer Faservolumenanteile.

A 8 Rechenzeitbetrachtungen

Eine detailliertere oder umfangreichere Modellierung der RVEs hat eine höhere Rechenzeit zur Folge. Bei gegebener Rechenleistung sind daher die Modellierungsmöglichkeiten begrenzt. Aus diesem Grund ist eine genauere Analyse und vor allem eine Optimierung sinnvoll, um die Grenzen der Modellierungsmöglichkeiten abzuschätzen und falls möglich dadurch zu erweitern.

Zunächst werden die Interpolationsansätze aus Abschnitt 7.1 untersucht. Hierzu werden Einzelsimulationen 5 verschiedener Faserensembles mit den unterschiedlichen Interpolationsansätzen und mit unterschiedlichen Netzgrößen durchgeführt. Für die Faserensembles werden jeweils 10 Fasern verwendet, mit einer mittleren Faserlänge von 100 μm . Für die Faserorientierung wird die ODF mittels Methode der maximalen Entropie und dem Tensor \mathbf{a}_2 mit $\text{eig}(\mathbf{a}_2) = [0,8 \ 0,15 \ 0,05]$ rekonstruiert. Als Deformationszustand wird $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}^s(1, \text{UNSET}, \text{UNSET}, \text{UNSET}, \text{UNSET}, \text{UNSET})$ gewählt, mit einer vorgeschriebenen Dehnung $\bar{\varepsilon}_j^*$ von 0,1%. Die Matrix wird als linear-elastisch modelliert, mit einem E-Modul der Matrix von $E_M = 2000 \text{ MPa}$ und einer Querkontraktionszahl von $\nu_M = 0,42$.

Die Berechnung wird auf 6 Kernen einer *AMD Epyc 7601* CPU mit 512 GB Ram in der *Abaqus*-Version 6.21 durchgeführt. Als Fehlerabschätzung wird an dieser Stelle die Konvergenz des effektiven Moduls in Belastungsrichtung verwendet (vgl. Gleichung 7-3). Darüber hinaus wird der berechnete Modul E^* normiert durch eine Referenzlösung E_{ref}^* mit

$$E = 1 - \frac{E^*}{E_{ref}^*}. \quad (\text{Gl.A-1})$$

Als Referenzlösung wird diejenige mit quadratischer Interpolationsmethode und feinstem Netz gewählt. Die Normierung ist dabei für die Darstellung vorteilhaft, da hierdurch die Streuung des effektiven Moduls bedingt durch eine zufällige Faseranordnung innerhalb eines Faserensembles aufgehoben wird (vgl. auch Abschnitt 8.1).

Für jede Simulation wird die Knotendichte durch n_{int}/V_{RVE} bestimmt, also dem in Bezug setzen von Anzahl der Knoten n_{int} und dem Volumen des RVEs V_{RVE} . Die Auswertung der Konvergenz sowie einer Rechenzeitbetrachtung ist in der Abbildung A-26 dargestellt.

Die Betrachtung des Konvergenzverhaltens zeigt, dass die relativen Fehler mit allen drei Interpolationsmethoden bei größer werdender Knotendichte geringer werden und gegen einen jeweiligen Grenzwert streben. Dabei ist die maximale Differenz der unterschiedlichen Grenzwerte zwischen den einzelnen Interpolationsmethoden mit 0,8 % relativ gering. Anhand der relativen Zeit ist ersichtlich, dass die Wahl der Interpolationsmethode die benötigte Rechenzeit maßgeblich beeinflussen kann. Hier liegt die maximale Differenz zwischen quadratischer

Interpolation und dem nächsten Knoten Ansatz bei 31 %. Der Unterschied liegt darin begründet, dass beim quadratischen Ansatz mehr Knoten in den *linear constraint equations* verwendet werden und das Lösen des globalen FE-Gleichungssystem damit schwieriger wird.

Streng betrachtet ist es ohne Kenntnis einer analytisch bestimmten Referenzlösung nicht möglich, mithilfe der Konvergenzstudie die numerischen Fehler der Interpolationsmethoden miteinander zu vergleichen und zu bewerten. Weiter einschränkend zur Konvergenzstudie ist festzuhalten, dass die hier verwendete Fehlerdefinition auf homogenisierten Eigenschaften basiert. Das heißt, der relative Fehler ist proportional zum Verhältnis von Gesamtknotenanzahl zu Oberflächenknotenanzahl (siehe auch Abbildung 7-4). Der geringe Unterschied von 0,8 % des relativen Fehlers bedeutet daher nicht, dass der lokale Unterschied auf der Oberfläche ebenfalls genauso gering ist. Gerade vor dem Hintergrund von Untersuchungen, bei denen die lokalen Belastungen analysiert werden, ist dies als kritisch zu bewerten. Daher wird die quadratische Interpolation für alle Simulationen in dieser Arbeit verwendet, basierend auf der Überlegung in Abschnitt 7.1, dass nur die quadratische Interpolation exakte Werte der Verschiebungsfunktion an den Interpolationspunkten liefert. Der Vorteil der geringeren relativen Zeit bei gleicher Knotendichte der anderen Interpolationsmethoden wird daher hier nicht genutzt.

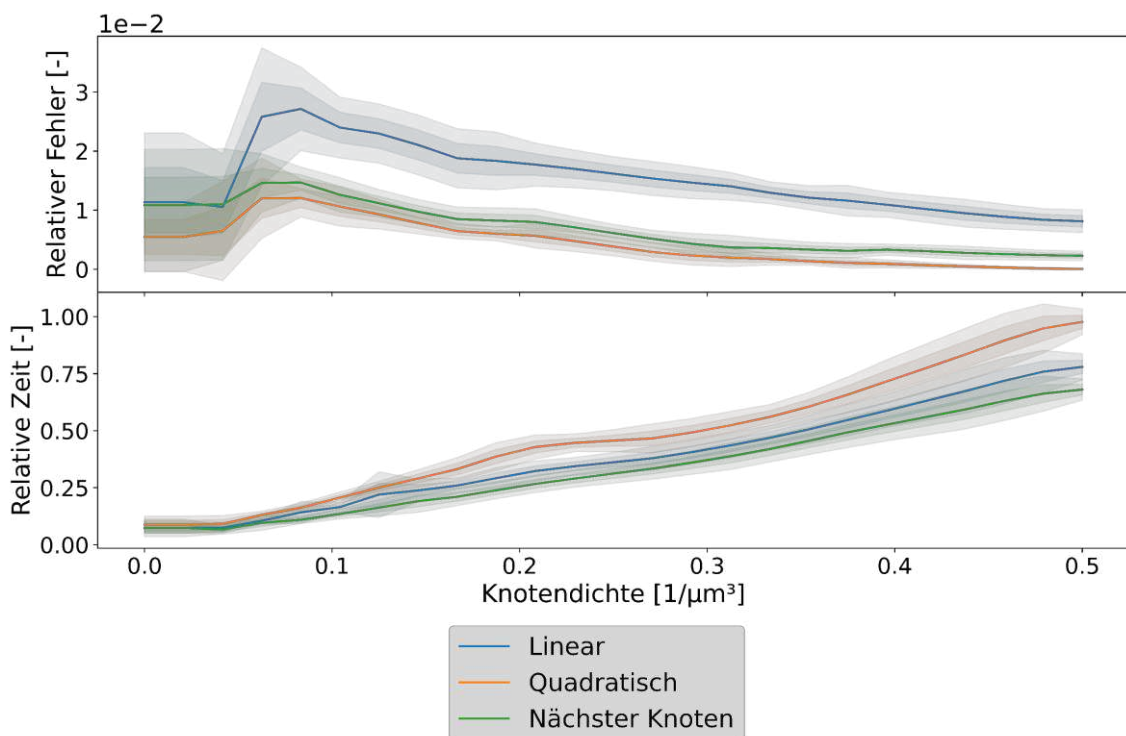


Abbildung A-26: Konvergenzanalyse der Interpolationsmethoden für periodische Randbedingungen bei nicht periodischen Netzen.

Ein FE-Modell, wie das eines RVEs mit periodischen Randbedingungen wird mathematisch dargestellt als Randwertproblem. Die Auswertung der schwachen Formulierung der Grundgleichung liefert in dem Netz mit den entsprechenden Ansatzfunktionen folgendes Gleichungssystem:

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (\text{Gl.A-2})$$

mit \mathbf{K} als Gesamtsteifigkeitsmatrix, \mathbf{u} als Verschiebungsvektor und \mathbf{f} als resultierendem Kraftvektor [157]. Diese Gleichung wird in der Software Abaqus mittels geeigneter Lösungsverfahren (Solver) gelöst. Zur Verfügung stehen ein *Direct*- und ein *Iterative Solver*. Bei dem *Direct Solver* wird durch ein Gauß-Eliminierungsverfahren die Gleichung Gl.A-2 gelöst, während bei dem *Iterative Solver* ein iteratives Verfahren Anwendung findet. Dieses iterative Verfahren basiert auf der Krylov Methode. Beide Methoden besitzen ihre Vor- und Nachteile. Generelle Aussagen tendieren zu einer schnelleren Berechnung mittels *Iterative Solver* für blockartige Strukturen mit dicht besetzter Gesamtsteifigkeitsmatrix [158].

Der *Iterative Solver* scheint aufgrund des angegebenen Vorteils für die hier verwendeten RVEs besser geeignet. Zur Bestätigung soll eine Analyse zeigen welcher Solver schneller ist. Hierfür werden RVEs mit unterschiedlicher Faseranzahl erstellt, mit beiden Solvern gelöst und ausgewertet. Verwendet werden je Faseranzahl 10 RVEs mit einheitlicher Faserlänge von 100 μm und unidirektionaler Faserorientierung. Es wird der vollständige Steifigkeitstensor berechnet, dafür werden insgesamt je RVE und Solver 6 Simulationen durchgeführt. Die Berechnung wird auf 6 Kernen einer *AMD Epyc 7601* CPU mit 512 GB RAM in der *Abaqus*-Version 6.12 durchgeführt. Die benötigte mittlere Zeit je Simulation sowie die Standardabweichung ist in der Abbildung A-27 dargestellt. Hier kann gezeigt werden, dass der *Iterative Solver* dem *Direct Solver* in diesem Anwendungsfall deutlich überlegen ist. Die benötigte Berechnungszeit ist bei 100 Fasern um eine Größenordnung niedriger, selbst bei weniger Fasern ist der Zeitvorteil deutlich. Ergänzend zur Berechnungszeit sind zwei weitere Arbeitsschritte mit in der Abbildung aufgenommen. Zum einen die Zeit für die Vernetzung zusammen mit der Zeit für die Aufprägung der Randbedingungen und zum anderen die Zeit für die Auswertung mit der Homogenisierung. Beide Arbeitsschritte benötigen deutlich weniger Zeit als das Lösen der FE-Grundgleichung.

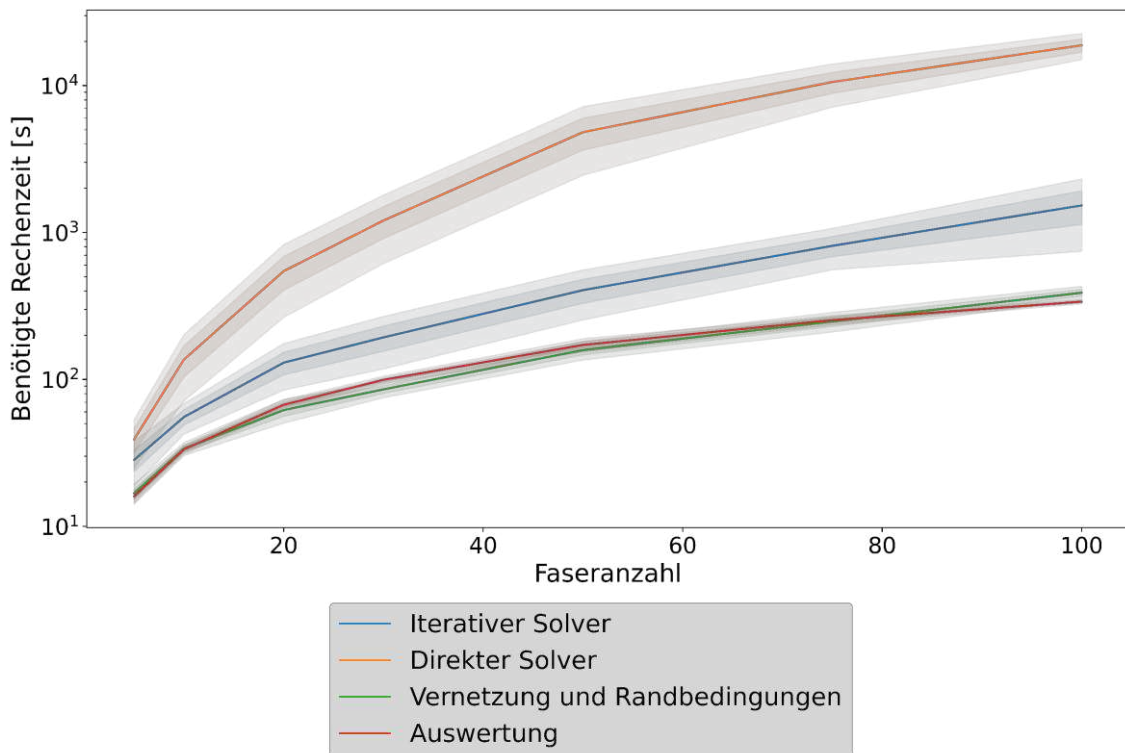


Abbildung A-27: Rechenzeitanalyse der einzelnen Schritte einer Simulation und Vergleich von unterschiedlichen Lösungsverfahren.

Ein weiterer Benchmark klärt den Zusammenhang zwischen Anzahl der verwendeten Kerne und der Berechnungsdauer. Verwendet werden dazu RVEs mit 100 Fasern, einer Faserlängenverteilung nach Abbildung 4-12 und einer ODF die mittels Methode der maximalen Entropie aus dem Tensor \mathbf{a}_2 mit $\text{eig}(\mathbf{a}_2) = (0,8 \ 0,15 \ 0,005)$ rekonstruiert wird. Die Berechnung wird auf einer *AMD Epyc 7601* CPU mit 512 GB Ram durchgeführt. Die Berechnung wird mit einer unterschiedlicher Kernanzahl wiederholt. Die Abbildung A-28: zeigt den gemessenen Zusammenhang zwischen benötigter Rechenzeit für den *Iterative Solver* in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Kerne. Der Verlauf des Zusammenhangs ist zwar monoton fallend, jedoch stark degressiv. Das bedeutet, dass mehr Kerne zwar eine Steigerung des Berechnungsdurchsatzes bewirken, der Effekt jedoch immer weiter abnimmt. Aus diesem Grund kann es je nach verfügbarem Rechner sinnvoller sein, mehrere RVEs mit wenigen Kernen gleichzeitig zu berechnen, statt ein RVE mit vielen Kernen. So werden zum Beispiel auf dem genannten Rechner generell 3 RVEs gleichzeitig mit jeweils 6 Kernen berechnet, um einen möglichst großen Durchsatz zu erzielen.

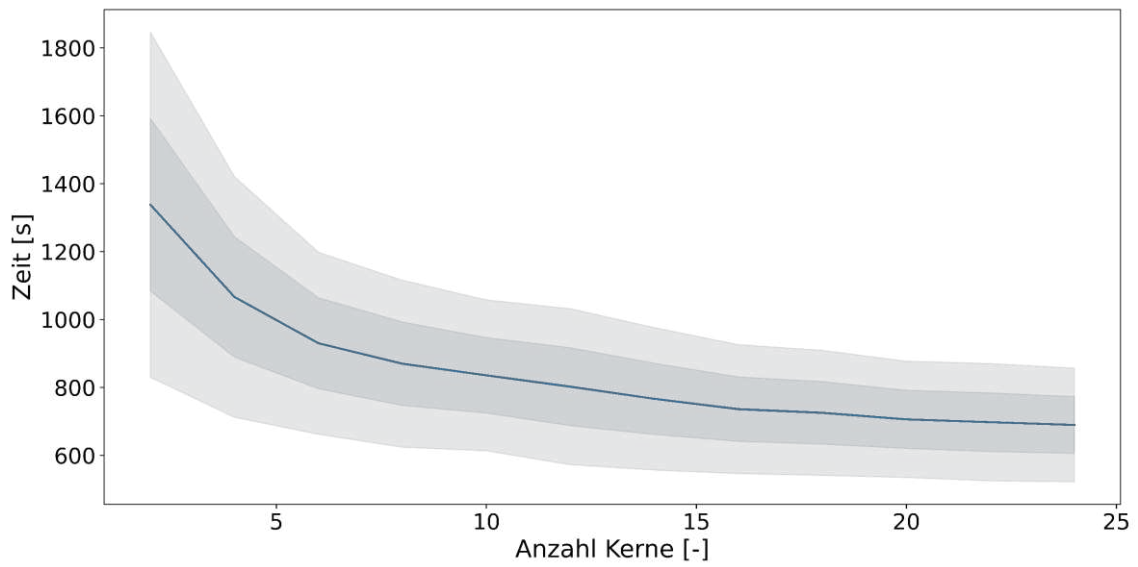


Abbildung A-28: Rechenzeitanalyse für die Anzahl der eingesetzten Kerne auf einer *AMD Epyc 7601* CPU mit 512 GB Ram in der *Abaqus*-Version 6.21.

A 9 Modellverhalten Faserensembles

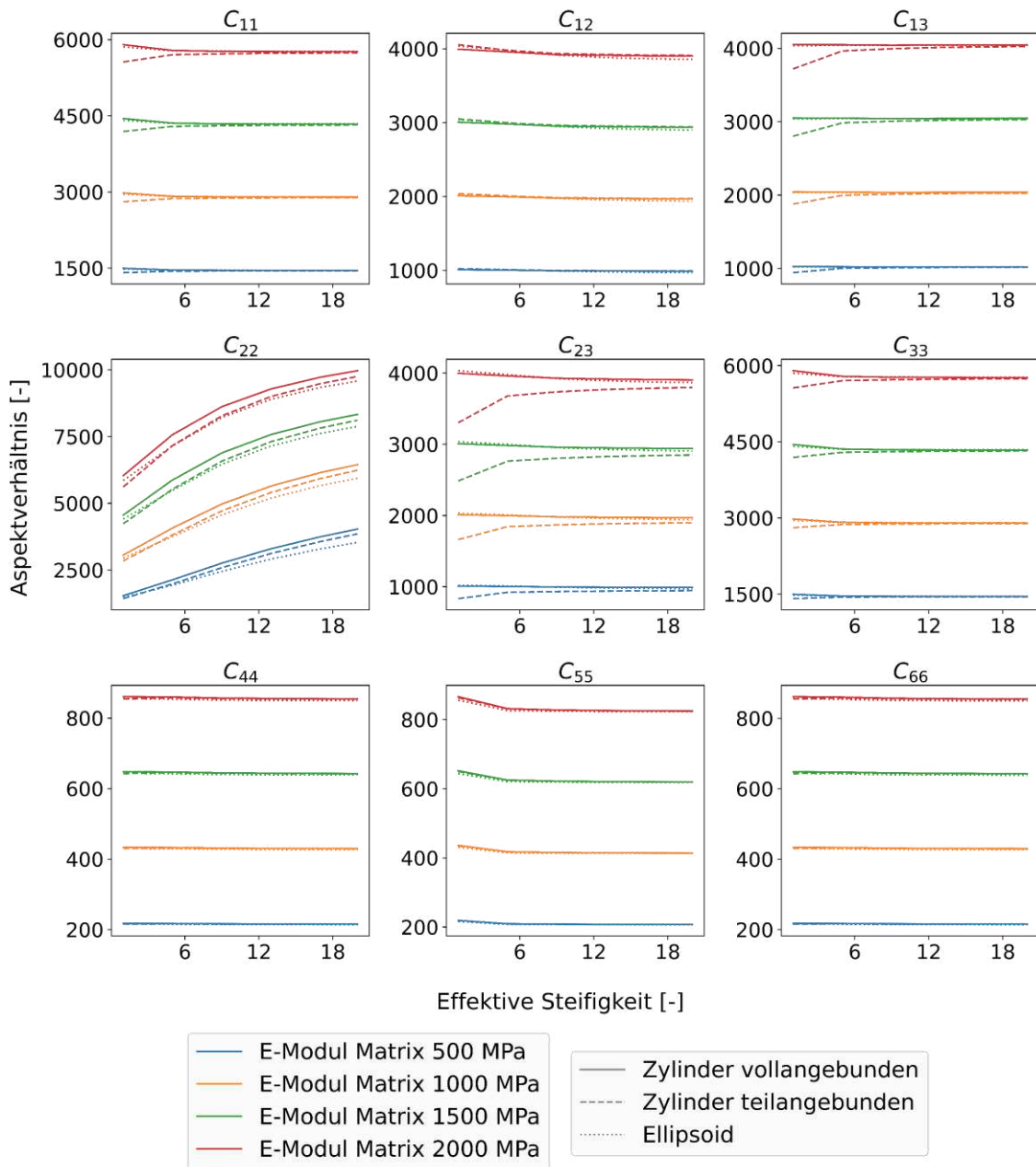


Abbildung A-29: Verlauf der effektiven Steifigkeit in Abhängigkeit der Modellparameter für die unterschiedlichen Fasergeometrien.

A 10 Simulationsübersicht

Tabelle A-5: Übersicht über alle Batches mit deren Parametern

Batch	Ensembles		Modellierung Fasern				Modellierung Matrix		
Nr.	Defini- tion	An- zahl	Belastung	Anzahl	Anteil (vol. %)	Orientierung	Länge	Materialmodell	Interphase
1	Offset, RVE	>70	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	1 bis 200	0,116	Unidirektio- nal in 1-Rich- tung	Konstant: 165 μm	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	keine
2	Offset, RVE	133	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 2	Konstant: 165 μm	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	Keine
3	Offset, RVE	69	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 2	Konstant: 200 μm	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	Keine
4	Offset, RVE	70	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 2	Konstant: 236 μm	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	keine
5	Offset, RVE	89	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	keine
6	Offset, SVE	270	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	keine
7	Offset, SVE	>30	$\varepsilon_S = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0.058 bis 0.141	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2\,000, \nu_M = 0,42$	keine
8	Offset, SVE	179	$\varepsilon_S = 0,001$ 1-Richtung	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 100 \text{ bis } 10\,000,$ $\nu_M = 0,42$	keine

9	Offset, SVE	16	$\varepsilon_s = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2000, \nu_M = 0,42$	0,5 μm Dicke, Isotrop, linear-elastisch: $E_I = 2000$ und 10000 $\nu_I = 0,42$
10	Offset, SVE	49	$\varepsilon_s = 0,001$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Isotrop, linear-viskoelastisch (vgl. Abbildung 8-20)	keine
11	Offset, SVE, Netzstudie	1	$\varepsilon_s = 0,02$ 1-Richtung	10	0,116	Unidirektional in 1-Richtung	Konstant: 165 μm	Von-Mises Plastizität, nach Abbildung 8-24, Initiale Steifigkeit: $E_M = 2000, \nu_M = 0,42$	keine
12	Ensembles aus Batch 6	15	$\varepsilon_s = 0,02$ 6 unabh. Richt.	100	0,116	ODF 1	Verteilung 1	Von-Mises Plastizität, nach Abbildung 8-24, Initiale Steifigkeit: $E_M = 2000, \nu_M = 0,42$	keine
13	Offset, SVE	270	$\varepsilon_s = 0,0123$ $\varepsilon_s = 0,014$ $\varepsilon_s = 0,0157$ 1-Richtung	100	0,116	ODF 2	Verteilung 1	Isotrop, linear-elastisch: $E_M = 2000, \nu_M = 0,42$	Keine

ODF 1	ME-Rekonstruktion von $a_2 =$	0,8	0	0
		0	0,15	0
		0	0	0,05

ODF 2	ME-Rekonstruktion von $a_2 =$	0,75	0	0
		0	0,225	0
		0	0	0,225

Verteilung 1 Faserlängenverteilung nach Abbildung 4-12

A 11 Experimentelle Untersuchung der Streuung der Compositesteifigkeit

Tabelle A-6: Parameter der DIC

Parameter	Wert
Räumliche Filterung	Mittelwertfilter, Stufe 5
Zeitliche Filterung	Smoothing Spline, Stufe 5
Toleranzquelle	Keine Toleranzen

A 12 Von-Mises Vergleichsspannung Beispielbauteil

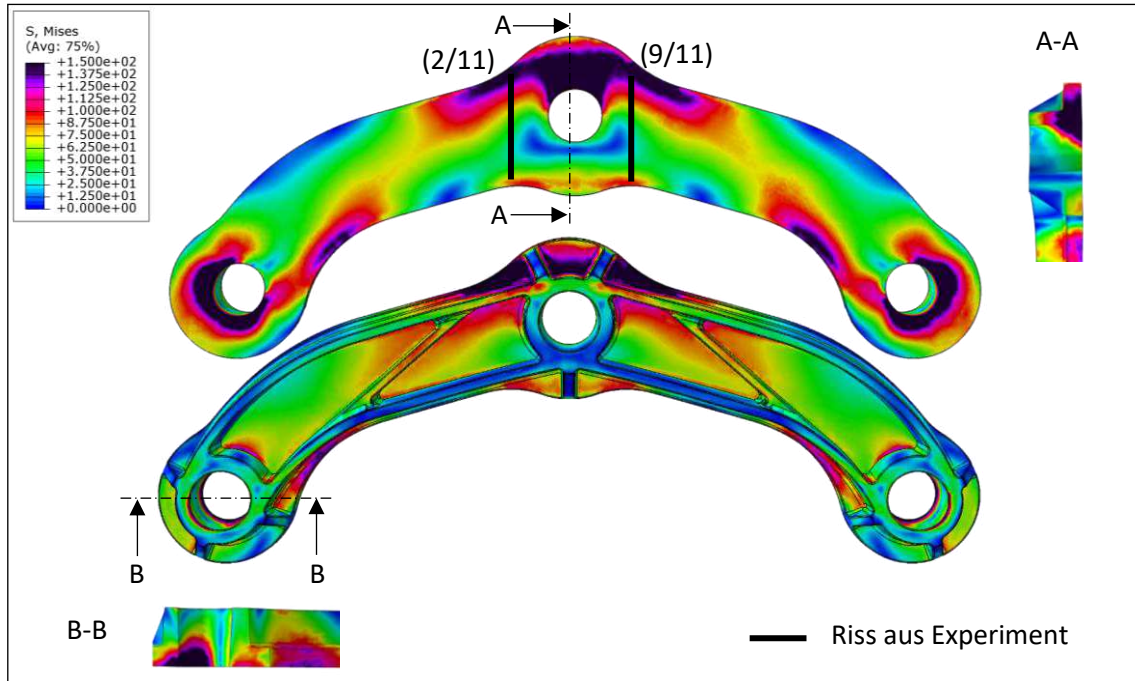


Abbildung A 30: Von-Mises Vergleichsspannung für den Belastungsfall 1 bei einer globalen Verschiebung von 2,0 mm.

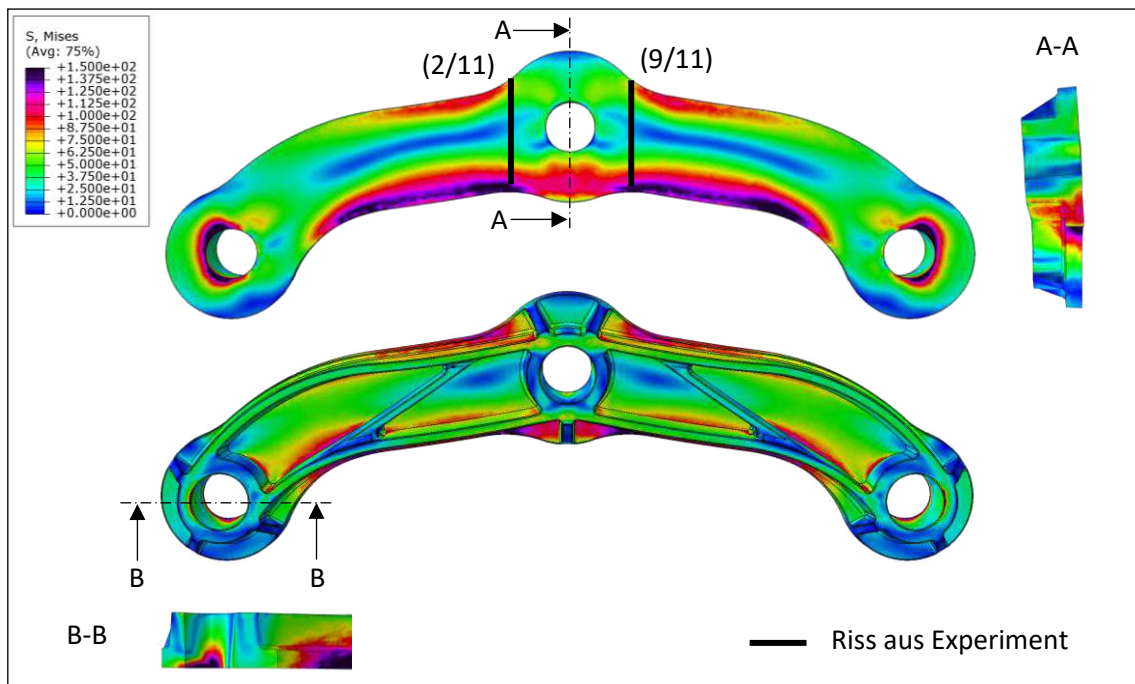


Abbildung A 31: Von-Mises Vergleichsspannung für den Belastungsfall 2 bei einer globalen Verschiebung von 3,8 mm.