

# Über die mathematische Modellierung eines Vibrorheometers für den Fall nichtlinearen Materialverhaltens am Beispiel der rheologischen Zustandsgleichung 3. Ordnung

Christian Friedrich

## 1. Einleitung

Der Rheometrie kommt im Rahmen der rheologischen Forschung eine immer größere Bedeutung zu. Das ist nicht nur eine Folge der Anwendung (Transport, Verarbeitung) immer komplizierterer Stoffsysteme (Polymerlösungen, Schmelzen, Suspensionen), sondern ist auch mit den ständig steigenden Forderungen bezüglich einer stärker differenzierenden Charakterisierung der Fluideigenschaften verbunden. Das führt dazu, daß die zu bestimmenden Materialfunktionen, wie zum Beispiel die dynamische Viskosität  $\eta^*(\omega, \gamma)$  für den sich ausdehnenden Frequenz- und Deformationsbereich  $(\omega, \gamma)$  und solche Parameter, wie Druck und Temperatur, mit immer höherer Genauigkeit bestimmt werden müssen.

Große Bedeutung kommt den rheologischen Eigenschaften bei kleinen Deformationsgeschwindigkeiten  $\dot{\gamma}$  zu. Diese spielen eine Rolle bei der Betrachtung von Prozessen mit freier Oberfläche (Stabilitätsuntersuchungen) sowie bei der Korrelation der rheologischen Eigenschaften mit molekularen Daten der Fluide.

Unter solchen kinematischen Bedingungen (kleine  $\dot{\gamma}$ -Werte) lassen sich viele Fluide (Newtonsche Anfangsviskosität  $\eta_0$  ist bei  $\dot{\gamma} = 0$  endlich) mit einer rheologischen Zustandsgleichung vom rate-Typ ausreichend gut beschreiben.

In dieser Arbeit soll gezeigt werden, wie für die rheologische Zustandsgleichung 3. Ordnung die Koeffizienten dieser Gleichung aus einem Experiment, bei dem eine periodische Deformation mit überkritischer Amplitude realisiert wird, bestimmt werden können.

## 2. Theorie

### 2.1. Die harmonische Scherströmung und die entsprechenden Materialfunktionen für ein Fluid 3. Ordnung

Von einer harmonischen Scherströmung spricht man in dem Fall, wenn auf ein Fluid eine sich mit der Frequenz  $\omega$  ändernde cosinus- oder sinusförmige Deformation  $\gamma$  mit der Deformationsamplitude  $\gamma_0$  einwirkt. In Analogie zur stationären Scherströmung (vgl. z. B. [1]) werden die Materialfunktionen der harmonischen Scherströmungen durch Einführung der komplexen Scherspannungsamplitude  $\tau_1^*$  (hochgestellte Sterne weisen auf komplexe Größen hin), der komplexen Deformationsgeschwindigkeitsamplitude  $\dot{\gamma}_0^*$  und der komplexen Amplituden der ersten und zweiten Normalspannungsdifferenz  $N_{1/2}^*$  definiert.

$$\eta^*(\omega) = \frac{\tau_1^*}{\dot{\gamma}_0^*} = \eta'(\omega) - i\eta''(\omega) \quad (1)$$

$$\psi_{1/2}^*(\omega) = \frac{N_{10/20}^c}{|\dot{\gamma}_0^*|^2} + \frac{N_{1/2}^*}{\dot{\gamma}_0^{*2}} = \psi_{10/20}^c + \psi'_{1/2d} + i\psi''_{1/2d} \quad (2)$$

Dabei sind  $\eta'(\omega)$  und  $\eta''(\omega)$  der Real- bzw. Imaginärteil der (komplexen) dynamischen Viskosität, die die Fähigkeit des Fluids zur Energiedissipation bzw. Energieakkumulation zum Ausdruck bringen.  $\psi_{1/2}^*$  sind die (komplexen) dynamischen Koeffizienten der ersten bzw. zweiten Normalspannungsdifferenz,  $\psi'_{1/2d}$  bzw.  $\psi''_{1/2d}$  der Real- bzw. Imaginärteil des rein dynamischen Anteils von  $\psi_{1/2}^*$  und  $\psi_{10/20}^c$  der konstante Anteil, der entsteht, weil die Normalspannungen im dynamischen Fall um einen stationären Mittelwert  $N_{10/20}^c$  schwingen. Da sich die erste und zweite Normalspannungsdifferenz bei harmonischer Beanspruchung nur äußerst schwierig messen lassen, wird oft nur Gleichung (1) zur rheologischen Charakterisierung von Fluiden herangezogen.

Es muß erwähnt werden, daß die Gleichung (1) nur für eine Deformationsamplitude gilt, die kleiner als der kritische Wert  $\gamma_{krit}$  ist, der den Übergang vom linearen zum nichtlinearen viskoelastischen Materialverhalten kennzeichnet. Für die sich anschließenden Deformationsamplitudenbereiche  $\gamma_{krit} < \gamma_0 < \gamma_{nl}$  (Übergangsbereich) und  $\gamma_0 > \gamma_{nl}$  (Bereich des ausgeprägten nichtlinearen Materialverhaltens) ergeben sich für Gleichung (1) die Beziehungen (1') und (1'')

$$\eta^*(\omega, \gamma_0) = \eta'(\omega, \gamma_0) - i\eta''(\omega, \gamma_0) \quad (1')$$

$$\eta^*(\Omega, \gamma_0) : \eta_1^*(\omega, \gamma_0), \eta_3^*(3\omega, \gamma_0) \dots \quad (1'')$$

Die Gleichung (1') deutet auf die Deformationsabhängigkeit der komplexen Viskosität im Übergangsbereich hin. Für den nichtlinearen Deformationsbereich existiert keine weitere Verallgemeinerung der Gleichungen (1) oder (1'). Die Beziehung (1'') deutet vielmehr auf die Tatsache hin, daß bei monofrequenter Erregung des Fluids mit einer Kreisfrequenz  $\omega$  und einer Deformationsamplitude  $\gamma_0 > \gamma_{nl}$  die Antwortschwingung ein Frequenzspektrum  $\Omega$  aufweist und deformationsabhängig ist. Im weiteren sollen nun die Folgerungen für eine Flüssigkeit 3. Ordnung, wie sie sich für die Beziehungen (1), (1') und (1'') ergeben, betrachtet werden.

Die Flüssigkeit n-ter Ordnung (im speziellen 3.er) stellt die Entwicklung des Funktionals der Deformationsge-

schichte als allgemeinste Formulierung einer rheologischen Zustandsgleichung nach einer retardierten Deformationsgeschichte (eigentlich die Deformationsgeschichte der Ruhe) mit dem Retardationsparameter  $r$  dar. Jenachdem Grad der Entwicklung (z. B.  $n$ ) nimmt der Reibungsspannungstensor  $\underline{\underline{T}}$  die folgende Form an [2]:

$$\underline{\underline{T}} = \sum_{i=1}^n \underline{\underline{T}}_i + 0(r^{n+1}); \quad r \rightarrow 0 \quad (3)$$

Für  $n = 3$  erhält man die rheologische Zustandsgleichung 3. Ordnung mit folgenden  $\underline{\underline{T}}_i$ -Ausdrücken:

$$\underline{\underline{T}}_1 = 2 \eta_0 \underline{\underline{D}}^{(1)} \quad (4)$$

$$\underline{\underline{T}}_2 = 2 \alpha_1 \underline{\underline{D}}^{(2)} + 4 \alpha_2 [\underline{\underline{D}}^{(1)}]^2 \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}_3 = & 2 \beta_1 \underline{\underline{D}}^{(3)} + 8 \beta_2 (S_p \underline{\underline{D}}^{(2)}) \underline{\underline{D}}^{(1)} \\ & + 4 \beta_3 (\underline{\underline{D}}^{(2)} \underline{\underline{D}}^{(1)} + \underline{\underline{D}}^{(1)} \underline{\underline{D}}^{(2)}) \end{aligned} \quad (6)$$

Dabei sind  $\eta_0, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \beta_3$  die rheologischen Konstanten  $\underline{\underline{D}}^{(1)}$  bzw.  $\underline{\underline{D}}^{(2)}$  und  $\underline{\underline{D}}^{(3)}$  der Deformationsgeschwindigkeitstensor und seine höhere Ableitung, die folgendermaßen zu bilden sind [1]:

$$\underline{\underline{D}}^{(1)} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^T); \quad \underline{\underline{L}} = \underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{V}} \quad (7)$$

$$\underline{\underline{D}}^{(n+1)} = \underline{\underline{D}}^{(n)} + \underline{\underline{D}}^{(n)} \cdot \underline{\underline{V}} + \underline{\underline{L}}^T \cdot \underline{\underline{D}}^{(n)} + \underline{\underline{D}}^{(n)} \cdot \underline{\underline{L}} \quad (8)$$

$\underline{\underline{V}}$  ist der Geschwindigkeitsvektor und  $\underline{\underline{\nabla}}$  der Nablaoperator. Der Punkt über den Großbuchstaben deutet auf die partielle Zeitableitung hin und das hochgestellte T zeigt den transponierten Vektor oder Tensor an. Die Bezeichnung  $S_p$  erklärt die Operation der Spurbildung eines Tensors. Legt man eine eindimensionale Scherströmung in dem Koordinatensystem  $x, y, z$  (vgl. Bild 1) zugrunde, bei der als äußere Erregung eine Verschiebung  $\kappa_R^*$  (es sei nochmals vermerkt, daß die physikalisch meßbaren Größen als Realteil  $Re$  der entsprechend komplex eingeführten und mit einem Stern versehenen Größen zu verstehen sind)

$$\kappa_B^* = \kappa_{Bo}^* e^{i\omega t} \quad \text{bei } y = 0$$

angreift, so wird sich im Fluid ein im allgemeinen nicht-lineares Verzerrungs- und damit Deformations- und Geschwindigkeitsfeld aufbauen. Berücksichtigt man dabei die 1. und 3. Harmonische (die geradzahigen Harmonischen verschwinden auf Grund der Isotropiebedingung),

$$\kappa^* = \kappa_1^*(y, t) e^{i\omega t} + \kappa_3^*(y) e^{3i\omega t} \quad (9)$$

so ergibt sich für die Deformationsgeschwindigkeit über die Beziehungen

$$\underline{\underline{V}}_x^* = \frac{\partial}{\partial t} \kappa^*, \quad \underline{\underline{\gamma}}^* = \frac{\partial}{\partial y} \underline{\underline{V}}_x^* \quad (10)$$

die Gleichung (11).

$$\underline{\underline{\gamma}}^* = \underline{\underline{\gamma}}_1^* e^{i\omega t} + \underline{\underline{\gamma}}_3^* e^{3i\omega t} \quad (11)$$

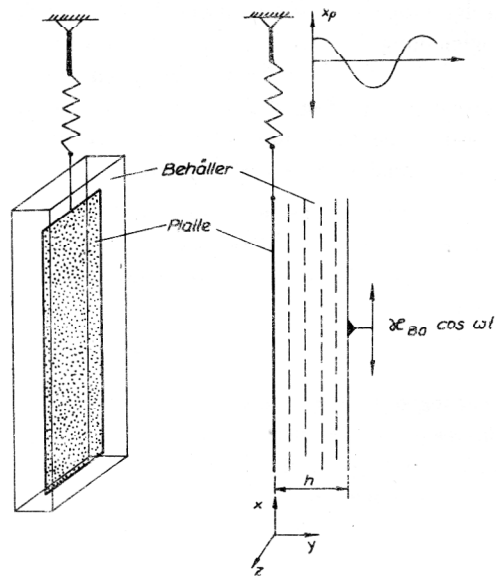


Bild 1  
Schematische Darstellung der Strömungsgeometrie mit ange deuteten Umrissen eines Schwingungsreometers

Die Scherspannungsantwort ist entsprechend zu formulieren.

$$\tau^* = \tau_1^* e^{i\omega t} + \tau_3^* e^{3i\omega t} \quad (12)$$

Setzt man nun die Gleichungen (10) und (11) in die rheologische Zustandsgleichung (Gleichungen (4) bis (8)) ein und vergleicht die dabei erhaltene Scherspannung mit Gleichung (12), so ergeben sich für ein 3. Ordnungs-Modell folgende Ausdrücke für die Materialfunktion (1'):

$$\eta^*(\omega, \gamma_0) = \eta_0 - \beta_1 \omega^2 + \frac{3}{2} (\beta_2 + \beta_3) \gamma_0^2 \omega^2 + i \alpha_1 \omega \quad (13)$$

Für die Beziehung (1'') lassen sich keine dem 3. Ordnungs-Modell entsprechenden Gleichungen angeben, da kein einheitliches, überzeugendes Konzept existiert, wie mit den höheren Harmonischen zu verfahren ist. Es gibt einzelne Ansätze [3] bis [7], die zu unterschiedlichen Formulierungen von materialspezifischen Funktionen führen. Deshalb ist es sinnvoll, die Materialkonstanten der betrachteten rheologischen Zustandsgleichung durch Anpassung der für eine bestimmte Gerätekonfiguration theoretisch berechneten Schwingung an die experimentell dafür aufgenommene Antwortschwingung vorzunehmen. Dieses mathematische Modell soll im folgenden dargestellt werden.

## 2.2. Mathematisches Modell eines Vibrorreometers

Bei der Entwicklung des mathematischen Modells eines Vibrorreometers soll von einer Gerätekonfiguration ausgegangen werden, wie sie in Bild 1 schematisch dargestellt ist. Es befindet sich eine elastisch aufgehängte Platte bei  $y = y_p = h$  in einem mit dem zu untersuchenden Fluid gefüllten Behälter, von dem die eine Wand bei  $y = y_B = 0$  harmonisch erregt wird. Diese Erregung wird durch das Fluid auf die Platte übertragen, die dann ihrer-

seits entsprechend der Fluideigenschaften schwingt. Demzufolge muß das mathematische Modell aus der Bewegungsgleichung für das Fluid und der Bewegungsgleichung für das Platte-Feder-System bestehen. Es soll davon ausgegangen werden, daß sich zwischen Platte und Behälterwand eine Viskosimeterströmung ausbildet, wobei folgende Annahmen zugrunde liegen:

1. die Haftbedingung zwischen Fluid und Wand
2. Randeffekte sind vernachlässigbar
3. die Bewegung ist von den Anfangsbedingungen unabhängig

$$V_x(t) = V_x(t + 2\pi\omega^{-1})$$

Die Bewegung des Fluids wird durch die Impulsbilanz in Bewegungsrichtung in der Form, wie sie schon von Landau, Lifschitz [8] und Schlichting [9] als mathematisches Modell einer oszillierenden Scherströmung verwendet wurde, beschrieben.

$$\rho \frac{\partial V_x}{\partial t} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \quad (14)$$

Die Größe  $\rho$  stellt die Dichte des Fluids dar.

Für die Bewegung der Platte  $x_p$  wird die Gleichung des linearen Oszillators angesetzt, der durch die spezifische Scherkraft  $f_{SCH}$  zur Schwingung angeregt wird.

$$\ddot{x}_p + 2\delta_o \dot{x}_p + \omega_o^2 x_p = f_{SCH} \quad (15)$$

Die Größen  $\delta_o$  und  $\omega_o$  sind die Dämpfung bzw. die Eigenfrequenz des Platte-Feder-Systems und die Punkte über  $x_p$  zeigen die Zeitableitungen an. Die spezifische Scherkraft ergibt sich aus der an der gesamten Plattenfläche PF angreifenden Scherspannung  $\tau_{xy}$  und der Masse  $m$  des Platte-Feder-Systems wie folgt:

$$f_{SCH} = \frac{PF}{m} \tau_{xy} \Big|_{y=h} \quad (16)$$

Da die Scherspannung entsprechend Gleichung (12) aus der Grundharmonischen und der 3. Harmonischen besteht, kann man als Lösung für die Bewegungsgleichung (15) den Ansatz

$$x_p^* = x_{p1}^* e^{i\omega t} + x_{p3}^* e^{3i\omega t} \quad (17)$$

verwenden. Die Amplitudenwerte der Harmonischen in den Gleichungen (17) und (9) lassen sich wie folgt darstellen:

$$x_{p1}^* = x_{p10} + i x_{p11}; \quad x_{p3}^* = x_{p30} + i x_{p31} \quad (18)$$

$$a_1^* = a_{10} + i a_{11}; \quad a_3^* = a_{30} + i a_{31} \quad (19)$$

Setzt man die Gleichungen (16), (17) und (18) in Gleichung (15) ein, so erhält man nach Koeffizientenvergleich 4 Gleichungen für  $X_{p10}$ ,  $X_{p11}$ ,  $X_{p30}$  und  $X_{p31}$ . Das die Bewegung des Fluids beschreibende Rechenmodell ergibt sich, wenn die aus den Gleichungen (3) – (8) erhaltene Scherspannungskomponente  $\tau_{xy}$  in Gleichung (14) unter Berücksichtigung von (9) und (10) substituiert wird. Da die Amplitudenwerte im Ansatz (9) ortsabhängig sind, erhält man ebenfalls nach Koeffizientenver-

gleich ein System von 4 gewöhnlichen nichtlinearen Differentialgleichungen 2. Ordnung für die Größen  $a_{10}$ ,  $a_{11}$ ,  $a_{30}$  und  $a_{31}$ . Bei der Berechnung des nichtlinearen Scherspannungsanteils (entspricht  $\gamma^3$ ) wurde von der Beziehung

$$RE Z_1 \cdot RE Z_2 \cdot RE Z_3 = \frac{1}{4} RE (Z_1 Z_2 Z_3 + \bar{Z}_1 Z_2 Z_3 + Z_1 \bar{Z}_2 Z_3 + Z_1 Z_2 \bar{Z}_3)$$

Gebrauch gemacht, wobei  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $Z_3$  beliebige komplexe Zahlen und  $\bar{Z}_1$ ,  $\bar{Z}_2$ ,  $\bar{Z}_3$  die entsprechenden komplex konjugierten Zahlen sind. Die Koeffizienten des so erhaltenen Gleichungs- bzw. Differentialgleichungssystems sind Funktionen der Frequenz, Dämpfung, Eigenfrequenz sowie der zu bestimmenden rheologischen Parameter (vgl. Anhang A 1).

In ähnlicher Weise wurde von Walters bei der Berechnung der oszillierenden Platte-Platte-Torsionsströmung vorgegangen, jedoch führte dort der nichtlineare Ansatz zu 4 einfachen linearen, homogenen Differentialgleichungen 2. Ordnung, für die eine analytische Lösung angegeben werden kann [1].

Das hier erhaltene System von 4 Differentialgleichungen 2. Ordnung wird auf ein System von 8 Gleichungen 1. Ordnung zurückgeführt und läßt sich zusammen mit den Bewegungsgleichungen für die Platte in allgemeiner Form folgendermaßen darstellen ( $f_1 - f_8$  sind nicht-lineare Funktionen – vgl. Anhang A 2):

$$\left. \begin{aligned} u_1' &= u_2 \\ u_2' &= f_1(u_1, u_2, u_3, u_4, u_4') \\ u_3' &= u_4 \\ u_4' &= f_2(u_1, u_2, u_3, u_4, u_2') \\ u_5' &= u_6 \\ u_6' &= f_3(u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_7, u_4') \\ u_7' &= u_8 \\ u_8' &= f_4(u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_7, u_2') \\ x_{p10} &= f_5(u_{2h}, u_{4h}) \\ x_{p11} &= f_6(u_{2h}, u_{4h}) \\ x_{p30} &= f_7(u_{2h}, u_{4h}, u_{6h}, u_{8h}) \\ x_{p31} &= f_8(u_{2h}, u_{4h}, u_{6h}, u_{8h}) \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Dabei sind die  $u_{jh}$  die Werte der Funktionen  $u_j$  an der Stelle  $y = h$ . Die Randbedingungen für die 8 Differentialgleichungen erhält man über die Haftbedingung aus den Beziehungen

$$\begin{aligned} \kappa^*(0) &= a_1^*(0) \exp(i\omega t) + a_3^*(0) \exp(3i\omega t) = \kappa_B^* = \kappa_{BO}^* \exp(i\omega t) \text{ und} \\ \kappa^*(h) &= a_1^*(h) \exp(i\omega t) + a_3^*(h) \exp(3i\omega t) = x_D^* = x_{D1}^* \exp(i\omega t) + \end{aligned}$$

$x_{p3}^* \exp(3i\omega t)$ . Spaltet man diese Beziehungen in Real- und Imaginärteil auf, so ergeben sich

$$\begin{aligned} u_1(0) &= \text{Re}(a_1^*(0)) = \kappa_{BO} & u_1(h) &= x_{p10} \\ u_2(0) &= \lambda_1 & u_2(h) &= u_{2h} \\ u_3(0) &= \text{Im}(a_1^*(0)) = 0 & u_3(h) &= x_{p11} \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
u_4(0) &= \lambda_2 & u_4(h) &= u_{4h} \\
u_5(0) &= \operatorname{Re}(a_3(0)) = 0 & u_5(h) &= x_{p30} \\
u_6(0) &= \lambda_3 & u_6(h) &= u_{6h} \\
u_7(0) &= \operatorname{Im}(a_3^*(0)) = 0 & u_7(h) &= u_{p31} \\
u_8(0) &= \lambda_4 & u_8(h) &= u_{8h}
\end{aligned}$$

Den  $\lambda_i$ -Werten entsprechen die unbekanntenen Deformationen. Die Funktionen  $u_i$  an der Stelle  $y = h$  sind ebenfalls unbekannt. Damit macht es sich notwendig, diese Randwertaufgabe auf eine Anfangswertaufgabe zurückzuführen. Mittels der sogenannten Schießmethode (vgl. z. B. [10]) werden die  $\lambda_i$ -Werte so bestimmt, daß die Funktionen  $\varphi_i$

$$\begin{aligned}
\varphi_1(\lambda) &= u_{1h} - x_{p10} = 0 \\
\varphi_3(\lambda) &= u_{3h} - x_{p11} = 0 \\
\varphi_5(\lambda) &= u_{5h} - x_{p30} = 0 \\
\varphi_7(\lambda) &= u_{7h} - x_{p31} = 0
\end{aligned}$$

im Laufe der  $\lambda$ -Iteration gegen Null gehen.

Zur Lösung der Anfangswertaufgabe und damit zur Bestimmung der  $u_{1h}$ ,  $u_{3h}$ ,  $u_{5h}$  und  $u_{7h}$ -Werte wird ein Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren 5. Ordnung eingesetzt. Die Bestimmung des  $\lambda^{(n+1)}$ -Vektors, für die das Gleichungssystem (23)  $\varphi(\lambda) = 0$  (die Unterstreichung deutet auf die entsprechenden Vektoren hin) mit einer vorgegebenen Fehlerschranke erfüllt wird, basiert auf dem von Schmidt [11] vorgeschlagenen Regula-falsi-Verfahren MR 2 (siehe Gleichung (24)).

$$\underline{\varphi}(\underline{\lambda}^{(n)}) + \underline{\delta F} \cdot (\underline{\lambda}^{(n+1)} - \underline{\lambda}^{(n)}) = 0 \quad (24)$$

$\underline{\delta F}$  ist dabei eine Matrix, die nach der in [11] angegebenen Vorgehensweise zu bilden ist. Als Startwerte sind 3 Vektoren  $\underline{\lambda}^{(0)}$ ,  $\underline{\lambda}^{(1)}$  und  $\underline{\lambda}^{(2)}$  vorzugeben. In diesem Fall hat das Verfahren MR 2 den höchsten Wirkungsgrad (vgl. [11]).

Die Lösung des linearen Gleichungssystems (24) mit den bekannten Standardmethoden liefert dann die gesuchte  $n+1$ -te Näherung für den  $\lambda$ -Vektor. Damit wird es möglich, bei gegebenen rheologischen und apparativen Konstanten das Strömungsproblem (direkte Aufgabe) zu lösen. Da die Aufgabe der Rheometrie in der Lösung der inversen Aufgabe besteht, muß aus der Bewegung der Platte auf die rheologischen Parameter geschlossen werden. Dies geschieht wie folgt.

Geht man davon aus, daß die aufgezeichnete (experimentell bestimmte) Bewegung der Platte  $x_{pE}$  nach reeller Fourieranalyse folgendermaßen

$$x_{pE} = A_E \cos \omega t + B_E \sin \omega t + C_E \cos 3\omega t + D_E \sin 3\omega t \quad (25)$$

dargestellt werden kann, besteht eine Möglichkeit der Bestimmung des Parametervektors der rheologischen Konstanten  $\underline{\alpha} = (\eta_0, \alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$  darin, daß man, wie schon erwähnt, das modellmäßig erhaltene Ausgangssignal (Gleichungssystem (21)) an Gleichung (25) durch Minimierung des Differenzsignals nach der MKQ-

Methode anpaßt. Das dabei entstehende Gütekriterium  $\Phi_1$  ist in Gleichung (26) dargestellt.

$$\Phi_1(\underline{\alpha}) = \sum_{t_i} (X_P(t_i) - X_{PE}(t_i))^2 \longrightarrow \min \quad (26)$$

Eine weitere Möglichkeit der Parameterbestimmung beruht auf der Abwandlung von Gleichung (26) in eine andere Form. Wenn man davon ausgeht, daß die Differenz zwischen den gemessenen (siehe Gleichung (25)) und den modellmäßig gegebenen und vom gesuchten Parametervektor  $\underline{\alpha}$  abhängigen Fourier-Koeffizienten A, B, C und D Null werden soll, so kann man das Gleichungssystem (27) formulieren.

$$\begin{aligned}
\Phi_{21}(\underline{\alpha}) &= A_E - A = 0 \\
\Phi_{22}(\underline{\alpha}) &= B_E - B = 0 \\
\Phi_{23}(\underline{\alpha}) &= C_E - C = 0 \\
\Phi_{24}(\underline{\alpha}) &= D_E - D = 0
\end{aligned} \quad (27)$$

Mit anderen Worten, es wird der Parametervektor  $\underline{\alpha}^{(n)}$  gesucht, für den  $\Phi_2(\underline{\alpha})$  Null ist. Auf diese Art und Weise lassen sich nur 4 Elemente von  $\alpha$  bestimmen. Dies ist jedoch ausreichend, da thermodynamische Gesichtspunkte (Forderung nach positiver Dissipationsfunktion) die Beziehung

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 0 \quad (28)$$

fordern, die Parameter  $\beta_2$  und  $\beta_3$  immer als Summe auf-tauchen und zu einem Parameter

$$\beta_2 + \beta_3 = \beta_{n1} \quad (29)$$

zusammengefaßt werden können. Im weiteren soll die rechentechnische Realisierung der vorgestellten Algorithmen und die Ergebnisse beschrieben werden.

### 3. Numerische Realisierung und Diskussion der Ergebnisse

Die numerische Realisierung der vorher vorgestellten Methoden basiert auf dem erwähnten Runge-Kutta-Fehlberg-Integrationsverfahren 5. Ordnung zur Lösung des Differentialgleichungssystems (20). Für die hier gewählte Variante des Schießverfahrens sind 3 Startvektoren  $\underline{\lambda}^{(0)}$ ,  $\underline{\lambda}^{(1)}$  und  $\underline{\lambda}^{(2)}$  notwendig, die nach numerischen Experimenten wie folgt formuliert werden können:

$$\begin{aligned}
\underline{\lambda}^{(0)} &= (\kappa_{BO} h^{-1}; 0; 0; 0) \\
\underline{\lambda}^{(1)} &= 0,5 (\kappa_{BO} h^{-1}; 10^{-4}; 10^{-4}; 10^{-4}) \\
\underline{\lambda}^{(2)} &= 0,5 \underline{\lambda}^{(1)}
\end{aligned}$$

Bei dieser Wahl der Startvektoren wird im allgemeinen im  $n=6$ ten oder  $n=7$ ten Schritt das Abbruchkriterium

$$\left| \frac{\varphi_i(\lambda^{(n)})}{u_{ih}} \right| \leq 0,01 \quad \text{für } i = 1, 3, 5, 7$$

erfüllt. Die zur Berechnung eines neuen  $\lambda$ -Vektors notwendige Lösung des linearen Gleichungssystems (24) wird auf der Basis des im VOPP Numerik enthaltenen Programmes GELG (Gaußalgorithmus mit vollständiger

Pivotisierung) berechnet. Hier sei noch erwähnt, daß das Programm ab dem n=5ten Schritt mit der doppelgenauen Version DGELG arbeitet. Damit ist die numerische Realisierung des Funktionsprogrammes gegeben, das zur Berechnung des Parametervektors  $\underline{\alpha}$  gebraucht wird.

Die Minimierung des Gütefunktional der Gleichung (26) wird mit Hilfe der Subroutine OPSN 12 durchgeführt. Diese Subroutine realisiert das Simplexverfahren nach Nelder und Mead, wobei ein Startvektor sowie eine untere und obere Schranke für den Parametervektor  $\underline{\alpha}$  vorzugeben sind.

Bei der Bestimmung von  $\underline{\alpha}$  mit Hilfe des Gleichungssystems (27) kann wie im Falle der  $\lambda$ -Iteration auf das schon erwähnte Verfahren MR 2 zurückgegriffen werden, es wird aber mit den minimal möglichen 2 Startvektoren gestartet und dann zu der mit maximalem Wirkungsgrad arbeitenden Variante übergegangen [11]. Als Abbruchkriterium wird die Erfüllung folgender Beziehung

$$\left| \frac{\alpha_i^{(n+1)} - \alpha_i^{(n)}}{\alpha_i^{(n+1)}} \right| \leq 0,01 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

angenommen.

Beide Varianten werden nun bei der Diskussion eines Modellbeispiels verglichen. Die erforderlichen Geräte- und Fluidparameter sind folgende:

$$\omega = 0,1 \text{ s}^{-1}; \quad \omega_0 = 35 \text{ s}^{-1}; \quad \delta_0 = 1 \text{ s}^{-1}; \quad \rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3};$$

$$\text{PF} = 17,5 \text{ cm}^2; \quad \kappa_{\text{BO}} = 1 \text{ mm}; \quad h = 2 \text{ mm}.$$

In einer direkten Hinrechnung wurden für ein Modellfluid mit den durch die Beziehungen (28) und (29) reduzierten Parametervektor  $\underline{\alpha}_{\text{MR}} = (\eta_0; \alpha_1; \beta_{\text{nl}}; \beta_1) = (2; -15; -210; 25)$  die folgenden Fourierkoeffizienten  $A_E = -1,077 \cdot 10^{-5}$ ,  $B_E = -7,628 \cdot 10^{-6}$ ,  $C_E = 8,486 \cdot 10^{-8}$  und  $D_E = -2,1407 \cdot 10^{-6}$  bestimmt. Diese Parameter dienen nun als Ausgangspunkt für die Lösung der inversen Aufgabe zur Überprüfung der Leistungsfähigkeit und für den Vergleich beider Verfahren.

Für das auf der Lösung von (27) basierende Verfahren kann generell festgestellt werden, daß die Newtonsche Lösung als einer der zwei Startvektoren ungeeignet ist, da in diesem Falle das Verfahren divergiert. Da jedoch auf der Basis der Viskositätsfunktion für das zu untersuchende Fluid relativ einfache Angaben über die Größe von  $\eta_0$  und die Größenordnung von  $\beta_{\text{nl}}$  gemacht werden können und die Vorzeichen der Werte physikalisch determiniert sind, sind folgende beide Startvektoren relativ einfach zu erstellen:

$$\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(0)} = (1,9; -10; -200; 20)$$

$$\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(1)} = (2,1; -20; -2000; 30)$$

Das mit diesen Vektoren gestartete Verfahren bricht im 5ten Schritt ab und liefert als Lösung

$$\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(5)} = (2,69; -14,99; -212,4; 86,16).$$

Dazu sind 25 Funktionsaufrufe (Lösungen des Differentialgleichungssystems) notwendig. Eine Verbesserung des Lösungsvektors kann durch wiederholte Abarbeitung des Algorithmus erzielt werden, wenn mit  $\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(0)}$  und  $\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(1)} = \underline{\alpha}_{\text{R}}^{(5)}$  gestartet wird.

Ein anderes Paar von Startvektoren  $\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(0)} = (1,5; -10; -170; 30)$  und  $\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(1)} = (2,0; -15; -200; 50)$  führt nach 21 Berechnungen des Differentialgleichungssystems zu dem Lösungsvektor  $\underline{\alpha}_{\text{R}}^{(6)} = (1,79; -14,99; -210,8; -5,66)$ . Diese zwei Beispiele und andere, nicht angeführte Rechnungen zeigen, daß die Bestimmung der ersten 3 Komponenten von  $\underline{\alpha}$  von der Wahl der Startvektoren relativ unabhängig ist. Die Größe  $\beta_1$  hängt demgegenüber sehr stark von den Startvektoren ab und ist auch für die starke Empfindlichkeit des Fourierkoeffizienten C gegenüber den Ausgangswerten verantwortlich. Während bei allen Rechnungen die Fourierkoeffizienten A, B und D mit einem relativen Fehler kleiner 1 Prozent bestimmt werden konnten, schwankt dieser Fehler für C in großen Grenzen (100 % bis 300 %).

## Anhang

### Anhang A 1:

Parameter des Differentialgleichungssystems (20)

$$A_1 = \alpha_1 \omega, \quad A_2 = \eta_0 - \beta_1 \omega^2, \quad A_3 = \eta_0 - 9\beta_1 \omega^2$$

$$\beta_{\text{nl}} = \beta_2 + \beta_3, \quad B_1 = \beta_{\text{nl}} \omega^2, \quad B_2 = \frac{\text{PF}}{\omega}$$

$$W_1 = \omega_0^2 - \omega^2, \quad W_2 = \delta_0 \omega, \quad W_3 = \omega_0^2 - 9\omega^2$$

$$L_{10}^2 = -\rho\omega \frac{A_1}{A_1^2 + A_2^2}, \quad L_{11}^2 = -\rho\omega \frac{A_2}{A_1^2 + A_2^2}$$

$$L_{30}^2 = -9\rho\omega \frac{A_1}{9A_1^2 + A_3^2}, \quad L_{31}^2 = -3\rho\omega \frac{A_3}{9A_1^2 + A_3^2}$$

$$K_{10} = -1,5\beta_{\text{nl}}\omega^2 \frac{A_2}{A_1^2 + A_2^2}, \quad K_{11} = 1,5\beta_{\text{nl}}\omega^2 \frac{A_1}{A_1^2 + A_2^2}$$

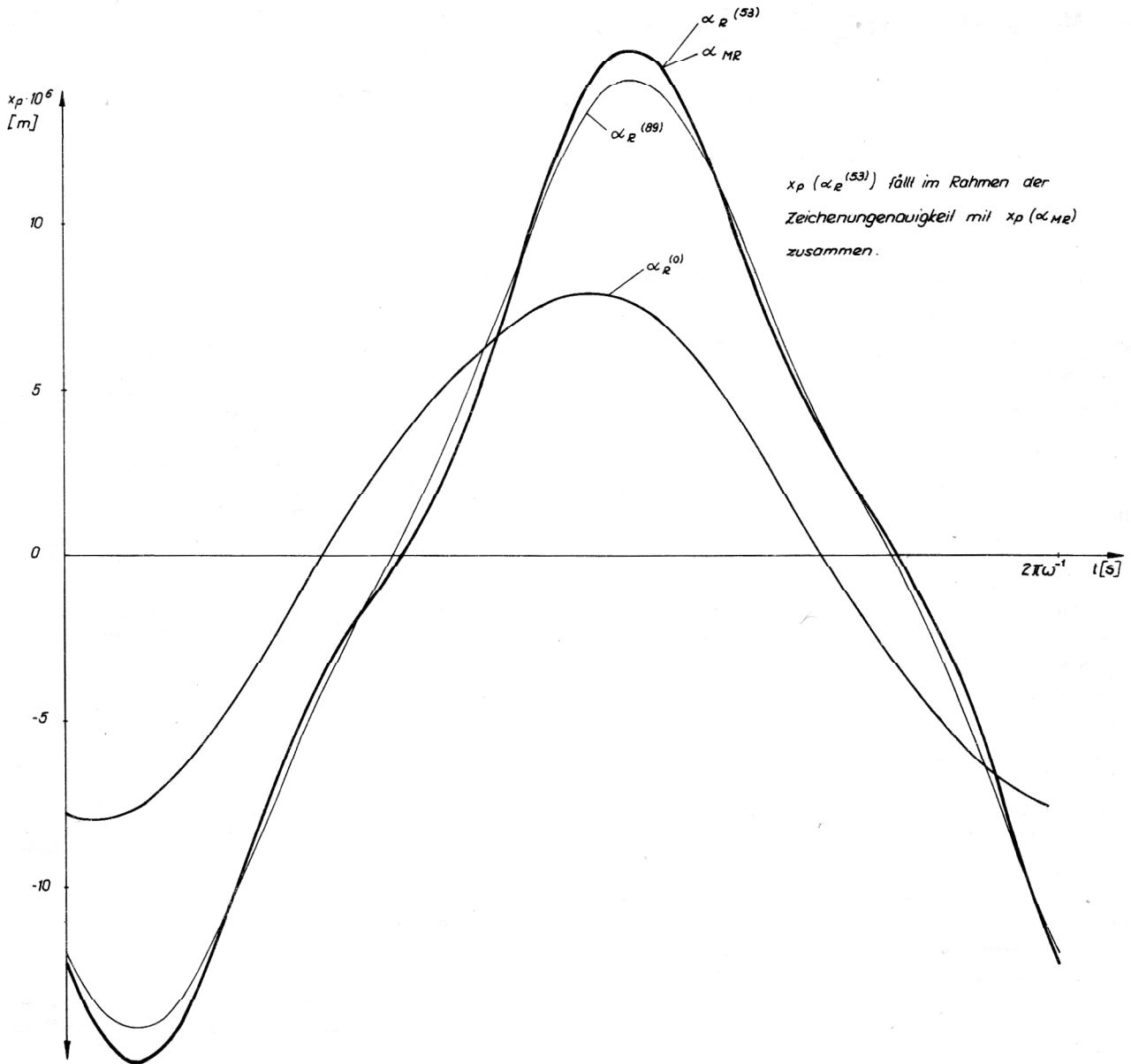
$$K_{30} = 0,5B_1 \frac{A_3}{9A_1^2 + A_3^2}, \quad K_{31} = 1,5B_1 \frac{A_1}{9A_1^2 + A_3^2}$$

$$M_{10} = 2B_2 \frac{W_2 A_2 - W_1 A_1}{W_1^2 + W_2^2}, \quad M_{11} = 2B_2 \frac{W_2 A_1 + A_2 W_1}{W_1^2 + W_2^2}$$

$$M_{30} = 18B_2\omega \frac{W_2 A_2 - A_1 W_3}{W_3^2 + 9W_2^2}, \quad M_{31} = 6B_2\omega \frac{9A_1 W_2 + A_2 W_3}{W_3^2 + 9W_2^2}$$

$$N_{10} = 3B_2\omega \frac{B_1 W_2}{W_1^2 + W_2^2}, \quad N_{11} = 3B_2\omega \frac{B_1 W_1}{W_1^2 + W_2^2}$$

$$N_{30} = 18B_2\omega \frac{A_2 W_2 - A_1 W_3}{W_3^2 + 9W_2^2}, \quad N_{31} = 6B_2\omega \frac{9A_1 W_2 + A_2 W_3}{W_3^2 + 9W_2^2}$$



**Bild 2**

Graphische Darstellung der Plattenschwingung  $x_p(t)$  in Abhängigkeit von verschiedenen Parametervektoren. Dabei entspricht der Parametervektor

$\underline{\alpha}_{MR} = (1; -15; -210; 25)$  dem Modellfluid und die Parametervektoren  $\underline{\alpha}_R^{(0)} = (1,5, -100; -100; -100)$ ,

$\underline{\alpha}_R^{(89)} = (1,58; -14,91; -134; 5,76)$  und

$\underline{\alpha}_R^{(53)} = (1,88; -14,98; -210,3; 2,63)$ , der Startnäherung, der Lösung nach einmaliger Anwendung des Simplexverfahrens und der Lösung nach wiederholter Anwendung des Simplexverfahrens, wobei  $\underline{\alpha}_R^{(89)}$  als Startvektor diente.

Auch für das auf Gleichung (26) beruhende Verfahren kann festgestellt werden, daß der Startvektor, der der Newtonschen Näherung entspricht ( $\underline{\alpha}_R^{(0)} = (2, 0, 0, 0)$ ) zur Divergenz des Verfahrens führt. Es zeigt sich aber, daß eine sehr grobe Schätzung der Parameter, die für das nicht-Newton'sche Materialverhalten verantwortlich zeichnen, zu einer vernünftigen Näherung führt. Mit  $\underline{\alpha}_R^{(0)} = (1,5; -100; -100; -100)$  gelangt man nach 89 Funktionsaufrufen (Lösungen des Differentialgleichungssystems) zu  $\underline{\alpha}_R^{(89)} = (1,58; -14,91; -134; 5,76)$ . Benutzt man diesen Vektor als Startvektor, so erhält man  $\underline{\alpha}_R^{(53)} = (1,88; -15,98; -210,3; 2,63)$ . Die den Parametervektoren  $\underline{\alpha}_{MR}$ ,  $\underline{\alpha}_R^{(89)}$  und  $\underline{\alpha}_R^{(53)}$  entsprechende

### Anhang A 2:

Darstellung der Funktionen  $f_1 - f_8$

$$f_1 = \frac{L_{11}^2 u_3 - L_{10}^2 u_1 + u_4' (2K_{10} u_2 u_4 - K_{11} (u_2^2 + 3u_4^2))}{1 + 2K_{11} u_2 u_4 - K_{10} (3u_2^2 + u_4^2)}$$

$$f_2 = \frac{-L_{11}^2 u_1 - L_{10}^2 u_3 + u_2' (2K_{10} u_2 u_4 + K_{11} (3u_2^2 + u_4^2))}{1 - 2K_{11} u_2 u_4 - K_{10} (u_2^2 + 3u_4^2)}$$

$$f_3 = L_{31}^2 u_7 - L_{30}^2 u_5 + u_2' (K_{30} (u_2^2 - u_4^2) - 2K_{31} u_2 u_4) - u_4' (K_{31} (u_2^2 - u_4^2) + 2K_{30} u_2 u_4)$$

$$f_4 = -L_{31}^2 u_5 - L_{30}^2 u_7 + u_2' (K_{31} (u_2^2 - u_4^2) + 2K_{30} u_2 u_4) + u_4' (K_{30} (u_2^2 - u_4^2) - 2K_{31} u_2 u_4)$$

$$f_5 = M_{10} u_{2h} - M_{11} u_{4h} + (u_{2h}^2 + u_{4h}^2) (N_{10} u_{2h} - N_{11} u_{4h})$$

$$f_6 = M_{10} u_{4h} + M_{11} u_{2h} + (u_{2h}^2 + u_{4h}^2)(N_{10} u_{4h} + N_{11} u_{2h})$$

$$f_7 = M_{30} u_{6h} - M_{31} u_{8h} + N_{30} u_{2h} (u_{2h}^2 - 3u_{4h}^2) - N_{31} u_{4h} (u_{4h}^2 + 3u_{2h}^2)$$

$$f_8 = M_{30} u_{8h} + M_{31} u_{6h} + N_{30} u_{4h} (u_{4h}^2 + 3u_{2h}^2) + N_{31} u_{2h} (u_{2h}^2 - 3u_{4h}^2)$$

$$U_{ih} = U_i(h); \quad i = 2, 4, 6, 8$$

Schwingung der Platte  $x_p$  ist im Bild 2 graphisch dargestellt. Es ist zu erkennen, daß zwischen  $x_p(\alpha_{MR}, t)$  und  $x_p(\alpha_R^{(53)}, t)$  kaum noch ein Unterschied besteht, wohingegen sich die anderen Schwingungen deutlich von  $x_p(\alpha_{MR}, t)$  abheben. Auch hier (und an weiteren Testbeispielen) zeigt es sich, daß besonders der Parameter  $\beta_1$  stark von der Wahl der Ausgangsnäherung abhängt und zu starken Schwankungen des Fourierkoeffizienten  $C$  führt.

Der Vergleich beider Vorgehensweisen zeigt, daß das mit einem Vektor zu startende Verfahren zu besseren Lösungen im Sinne kleinerer mittlerer relativer Fehler des Parametervektors führt, obwohl weniger Information über die Anfangsnäherungen erbracht werden muß. Dieser Vorteil wird durch eine 3 bis 4fach höhere Rechenzeit erkauft. Für das auf der Lösung des Gleichungssystems (27) beruhende Verfahren wurde je nach Wahl der Startvektoren 70 – 90 Sekunden CPU-Zeit auf der IBM-Anlage 370 benötigt, wohingegen für das andere Verfahren 250 – 300 Sekunden benötigt werden. Da Rechenzeiten in dieser Größenordnung akzeptabel sind, wird dem Verfahren, das nur einen Startvektor benötigt, der Vorrang gegeben.

Der Autor möchte hiermit Frau G. Palm vom ORZ der Technischen Hochschule Leuna-Merseburg für die Unterstützung bei den umfangreichen Programmierarbeiten Dank sagen.

#### LITERATUR

- [1] Astarita, G., Marrucci, G.: *Principles of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, London, Mc Graw-Hill, 1974.
- [2] Truesdell, C.: *A First Course in Rational Continuum Mechanics*. The Johns Hopkins University Baltimore, Maryland, 1972.
- [3] Ziprin, M. G.: Nelinejnaja sdvigovaja reakzia tekucich polimerov na periodičeskoe deformirovanie. *Mechanika Polimerov*, 1977, Nr. 6, S. 1093 – 1100.
- [4] Ziprin, M. G.: Garmoničeskie iskaženija pri nelinejnom periodičeskom deformirovanii tekucich polimerov. *Mechanika Polimerov*, 1978, Nr. 5, S. 893 – 898.
- [5] Parker, N. S., Hibberd, G. E.: The interpretation of dynamic measurements of non-linear viscoelastic materials. *Rheol. Acta* 13 (1974), S. 910 – 915.
- [6] Tee, T.-T., Dealy, J. M.: Non linear Viscoelasticity of Polymer Melts. *Trans. Soc. Rheol.* 19 (1975), S. 595 – 615.
- [7] Davis, W. M., Macosko, C. W.: Non linear Dynamic Moduli for Polycarbonate and PMMA. *J. Rheol.* 22 (1978), S. 53 – 71.
- [8] Landau, L. O., Lifschitz, E. M.: *Lehrbuch der theoretischen Physik – Hydrodynamik*, Akademie-Verlag Berlin, 1970.
- [9] Schlichting, H.: *Grenzschichttheorie*, Verlag K. Braun Karlsruhe, 1954.
- [10] Walters, K.: *Rheometry*, Chapman and Hall, London, 1975.
- [11] Schmidt, J. W.: Überlinear konvergente Mehrschrittverfahren vom Regula falsi- und Newton-Typ. *ZAMM* 53 (1973), S. 103 – 114.

Anschrift des Verfassers:

Dr.-Ing. Christian Friedrich  
Akademie der Wissenschaften der DDR  
Institut für Mechanik  
9010 Karl-Marx-Stadt  
PSF 408