# Zur Parameteridentifikation für das Spriggs-6-Parametermodell aus Spinnprozessen

Oleg Smirnow, Roland Lipp, Ernst-Otto Reher

### 1. Einführung

Zur Beschreibung viskoelastischen Fließverhaltens, welches bei polymeren Flüssigkeiten beobachtet wird, sind rheologische Zustandsgleichungen vom OLDROYD-Typ und insbesondere deren Verallgemeinerung zu Spektralmodellen geeignet. Zu letzteren zählt das Spriggs-Modell. Für die Kinematik der einfachen Scherung wurden Differentialgleichungen für  $\tau_{12}^i$ ,  $\tau_{11}^i - \tau_{22}^i$  und  $\tau_{22}^i - \tau_{33}^i$  erhalten. Unter der Kinematik der Dehnung ergeben sich Differentialgleichungen der Normalspannungsdifferenzen  $\tau_{11}^i - \tau_{22}^i$  und  $\tau_{33}^i - \tau_{22}^i$ , [1].

Diese Differentialgleichungssysteme sind in der Rheometrie und für die Prozeßmodellierung anwendbar.

Bei der Parameteridentifikation in der Rheometrie wird so vorgegangen, daß entsprechend den Verläufen der gemessenen Materialfunktionen zuerst geeignete rheologische Zustandsgleichungen ausgewählt werden. (Es wird hier vorausgesetzt und kann auch gezeigt werden, daß das Spriggs-Modell die gemessenen Materialfunktionen qualitativ richtig widergibt.)

Danach erfolgt die Anwendung von Ausgleichsverfahren, um die Modellparameter zu bestimmen.

Die Parameteridentifikation aus der stationären Scherströmung ist weit verbreitet. Um Dehnungsprozesse in Verarbeitungsmaschinen qualitativ und quantitativ richtig beschreiben zu können, werden in zunehmendem Maße Anstrengungen unternommen, die rheologischen Parameter aus der Dehnung zu bestimmen. Diese Arbeiten wurden bisher dadurch erschwert, daß die Materialfunktionen viskoelastischer Flüssigkeiten nicht vollständig bekannt waren. Auf die Parameteridentifikation aus der Dehnung wird für Spriggs-Modelle nachfolgend näher eingegangen.

Das Spriggs-Modell lautet:

$$\tau = \sum_{i=1}^{\infty} \tau^{i} ,$$

$$\tau^{i} (1 + \lambda^{i} F_{1+k}, \frac{2}{3} (1+k), 0) = 2 \eta_{o}^{i} (1 + \Phi F_{1+\delta}, \frac{2}{3} (1+\delta), 0) e,$$

$$\lambda^{i} = \lambda i^{-\beta}, \quad \eta_{o}^{i} \cdot i^{\beta} \cdot Z(\beta) = \eta_{o}, \quad Z(\beta) = \sum_{i=1}^{\infty} i^{-\beta}.$$
(1)

Die rheologischen Parameter sind  $\eta_0$ ,  $\lambda$ ,  $\Phi$ ,  $\beta$ , k und  $\delta$ . Die zur Parameteridentifikation in der einachsigen Dehnung zu verwendende Materialfunktion hat die Gestalt:

$$p_{4,1} = p_4 = \sum_{i=1}^{\infty} p_4^i = \sum_{i=1}^{\infty} \tau_{11}^i - \tau_{22}^i$$

$$(\lambda^{i})^{2} \ddot{p}_{4}^{i} + (2 - \lambda^{i} ((1 - k) \dot{\epsilon} + \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}})) \lambda^{i} \dot{p}_{4}^{i} +$$

$$+ (1 - \lambda^{i} ((1 + k) \dot{\epsilon} - \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}})) p_{4}^{i} = 3 \eta_{0}^{i} \dot{\epsilon} (1 - \Phi ((1 + \delta) \dot{\epsilon} + \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}}))$$

$$+ \lambda^{i} \Phi \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}} + \Phi \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}} (2 - \lambda^{i} ((1 + \delta) \dot{\epsilon} - \frac{\ddot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}})). \tag{2}$$

## 2. Die Parameteridentifikation für Spriggs-Modelle aus Spinnströmungen

Die Parameteridentifikation aus Scherströmungen fand in zahlreichen Veröffentlichungen ihren Niederschlag. Auch für Spriggs-Modelle sind die Vorgehensweisen zur Parameterbestimmung aus der stationären, einfachen Scherströmung bekannt, [2].

Schwierigkeiten bereitete bisher die Parameterbestimmung aus der Dehnung und dabei insbesondere von niedrigviskosen Polymerlösungen.

Für diesen Fall wurde die Spinnströmung (einachsige Dehnung) als spezielle Dehnströmung ausgewählt, um die Parameteridentifikation vorzunehmen.

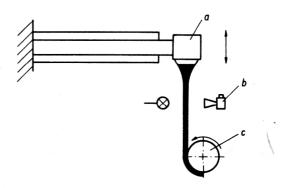


Bild 1

Aufbau der Dehnungsmeßeinrichtung

a – Düse, b – Kamera, c – Abzugswalze

An einem Dehnrheometer, dessen prinzipiellen Aufbau Bild 1 zeigt, wurden die Messungen der Materialfunktionen durchgeführt.

Die Meßsubstanz wird an der Dehnungsmeßeinrichtung durch eine Düse gedrückt, bildet eine Spinnströmung und wird durch eine Abzugswalze abgezogen. Die Kraftmessung erfolgt über die elastisch gelagerte Düse. Über die Abzugswalze können die Abzugsgeschwindigkeiten in einem weiten Bereich verändert werden. Der Dickenverlauf und damit die Deformationsbedingungen werden auf fotografischem Wege erfaßt, [3].

In Bild 2 ist die Spinnströmung schematisch dargestellt. Zur Parameterbestimmung wird der Dehnungsverlauf vom Dickenmaximum beginnend in z-Richtung gemessen und ausgewertet. Der Verlauf des Durchmessers, d, eines Strahles konnte bei den vorliegenden Prozeßbedingungen durch folgende Funktion approximiert werden

$$d(z) = \frac{p5}{(z+c_6)^5}$$
(3)

p 5 stellt in Gleichung (3) ein Polynom fünften Grades dar.

Wird die Kontinuitätsgleichung angewendet und der Durchsatz V durch

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{4\dot{\mathbf{V}}}{\pi}$$

ausgedrückt, dann lassen sich die Geschwindigkeitskomponenten in der Spinnströmung wie folgt ausdrücken:

$$v = \begin{pmatrix} v_{x} \\ v_{y} \\ v_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \dot{q} \frac{d'(z)}{d^{3}(z)} \\ y \dot{q} \frac{d'(z)}{d^{3}(z)} \\ \dot{q} d^{-2}(z) \end{pmatrix}$$
(4)

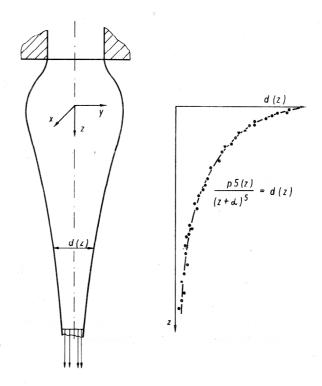


Bild 2 Schematische Darstellung der Spinnströmung

Der Deformationsgeschwindigkeitstensor e kann in allgemeiner Form dargestellt werden durch

$$\frac{\dot{q} \frac{d'(z)}{d^{3}(z)}}{0} \qquad \frac{1}{2} \cdot \frac{x \dot{q}}{d^{3}(z)} (d''(z) - 3 \frac{d'^{2}(z)}{d(z)})$$

$$\frac{\dot{q} \frac{d'(z)}{d^{3}(z)}}{\frac{1}{2} \cdot \frac{y}{d^{3}} \dot{q} (d'' - 3 \frac{d'^{2}(z)}{d(z)})$$

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{x \dot{q}}{d^{3}(z)} (d''(z) - 3 \frac{d'^{2}(z)}{d(z)})$$

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\dot{q} \dot{q}}{d^{3}(z)} (d''(z) - 3 \frac{d'^{2}(z)}{d(z)})$$

Und im Rotationstensor ω sind die Elemente

$$\omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{23} \\ -e_{31} & -e_{32} & 0 \end{pmatrix}$$

(6)  $\frac{d}{4} \left( \frac{d''}{d'} - 3 \frac{d'}{d} \right)$ 

enthalten.

Um die Materialfunktionen der einachsigen Dehnung auf die Spinnströmung anzuwenden, ist zu zeigen, daß Scheranteile vernachlässigt werden können. D. h. es gilt

$$\frac{e_{13}}{e_{11}}$$
 ,  $\frac{e_{23}}{e_{11}}$   $\ll$  1

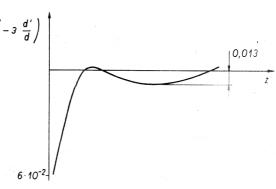


Bild 3 Funktionsverlauf zu Gleichung (7)

Dazu wird die Funktion

$$\max \frac{e_{13}}{e_{11}} , \max \frac{e_{23}}{e_{11}} = \frac{d}{4} \left( \frac{d''}{d'} - 3 \frac{d'}{d} \right)$$
 (7)

untersucht.

Bild 3 verdeutlicht den Funktionsverlauf gemäß Gleichung (7) für die untersuchten Dehnungsbedingungen. Aus der Darstellung ist erkennbar, daß Scheranteile vernachlässigt werden können.

Zur Parameterbestimmung aus dem Dehnungsverlauf der Spinnströmung ist das vollständige Prozeßmodell auszuwerten. Aus diesem Grund wird neben der Kontinuitätsgleichung und der Materialfunktion noch der Impulssatz einbezogen.

Dieser lautet für die Spinnströmung

$$\dot{p}_4 = -2 \frac{d'}{d} p_4 - \rho \left( \frac{32 \dot{V}^2}{\pi^2} d' d^{-5} + g \right) - 4 \sigma \frac{d'}{d^2}$$
 (8)

Das letzte Glied beschreibt den Anteil der Oberflächenspannung auf den Spannungsverlauf. Es konnte bei den Berechnungen im vorliegenden Fall vernachlässigt werden.

Für die Verläufe der Normalspannungsdifferenz und der Deformationsgesehwindigkeit werden bei viskoelastischen Flüssigkeiten qualitative Unterschiede gegenüber newtonschen Substanzen erwartet. Für newtonsche Flüssigkeiten ist z. B. ein monotones Wachstum der Spannung und der Deformationsgeschwindigkeit charakteristisch.

Die Parameteridentifikation für die Spektralmodelle, zu denen das Spriggs-Modell zählt, erfordert die Kenntnis der Anfangsbedingungen

$$p_4^i(0)$$
 und  $p_4^i(0)$  [4].

Die Normalspannung  $p_4$  (0) und deren Ableitung  $\dot{p}_4$  (0) sind bestimmbar. Zur Ermittlung der i-ten Komponenten der Spannungen müssen gesonderte Betrachtungen angestellt werden. Dazu werden Aussagen zur Prozeßvorgeschichte postuliert. Es wird angenommen, daß die zur Zeit t=0 (Prozeßbeginn, z=0) vorliegende Normalspannungsdifferenz sich in einem Prozeß konstanter Dehnbeanspruchung  $\dot{e}_v$  aufgebaut haben (Bild 4).

Die Zeitdauer dieses Prozesses ist  $t_v$ . Für den Punkt t=0 wird Stetigkeit und Differenzierbarkeit des Spannungsverlaufes gefordert.

$$p_4(0-) = p_4(0+)$$
  
 $\dot{p}_4(0-) = \dot{p}_4(0+)$ 

Auf der Grundlage dieser Modellvorstellung ist die Bestimmung der Anfangswerte der Normalspannungsanteile möglich. Dazu wird zuerst die allgemeine Materialfunktion (2) für vorstehend genannte Bedingungen gelöst. Wie aus Gleichung (9) ersichtlich ist, kann die Lösung zur Bestimmung der Größen  $\dot{\varepsilon}_v$  und  $t_v$  verwendet werden.

$$p_{4v} = \frac{3 \eta_{o} \dot{\epsilon}_{v}}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i\beta}} \sum_{i=1}^{n} \frac{1 - \exp\left[\frac{t_{v}}{y} \left(\lambda \left(1+k\right) \dot{\epsilon}_{v} - i^{\beta}\right)\right]}{i^{\beta} - \lambda \left(1+k\right) \dot{\epsilon}_{v}}$$
(9)

$$\dot{\mathbf{p}}_{4v} = \frac{3\eta_{o}\dot{\epsilon_{v}}}{\lambda\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{i^{\beta}}}\sum_{i=1}^{n} \exp\left[\frac{\mathbf{t}_{v}}{\lambda}\left(\lambda(1+k)\dot{\epsilon_{v}}-i^{\beta}\right)\right]$$

Mit den erhaltenen Hilfsgrößen  $\dot{\epsilon}_{\rm v}$  und  ${\rm t}_{\rm v}$  wird im zweiten Schritt die Ermittlung der  ${\rm p}_4^{\rm i}$  (0) und  $\dot{\rm p}_4^{\rm i}$  (0) vorgenommen. Das nichtlineare Gleichungssystem für ein 4-Parametermodell lautet:

$$p_{4}^{i}(0) = \frac{3 \eta_{o} \dot{\epsilon}_{v}}{\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i\beta}} \cdot \frac{1 - \exp\left[\frac{t_{v}}{\lambda} (\lambda(1+k) \dot{\epsilon}_{v} - i^{\beta})\right]}{i^{\beta} - \lambda(1+k) \dot{\epsilon}_{v}}$$

$$\dot{p}_{4}^{i}(0) = \frac{3 \eta_{o} \dot{\epsilon}_{v}}{\lambda \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{i\beta}} \cdot \exp\left[\left(-\frac{i^{\beta}}{\lambda} + (1+k) \dot{\epsilon}_{v}\right) t_{v}\right]$$
(10)

 $i = 1 \dots n$ 

Nach der Bestimmung der Anfangsbedingungen ist die Parameteridentifikation aus der Materialfunktion und dem Impulssatz möglich. Zur Lösung der Differentialgleichungen (2) wird eine Umwandlung in ein System von Gleichungen erster Ordnung vorgenommen. Dieses hat die Form (11).

$$\dot{\mathbf{z}}^{i} = \dot{\mathbf{z}}^{i}$$

$$\dot{\mathbf{z}}^{i} = \frac{i^{2}\beta}{\lambda^{2}} \left\{ 3\eta_{0} \frac{1}{i^{\beta} \sum_{i=1}^{n} i^{-\beta}} \left[ \left( 1 - \Phi \left( (1 + \delta) e + \frac{\dot{e}}{e} \right) \right) e + \dot{e} \left( \Phi \frac{\lambda}{i^{\beta}} \ddot{e} + \Phi \left( 2 - \frac{\lambda}{i^{\beta}} \left( (1 + \delta) e + \frac{\dot{e}}{e} \right) \right) \right] \right.$$

$$\left. - \frac{\lambda}{i^{\beta}} \mathbf{z} \left( 2 - \frac{\lambda}{i^{\beta}} \left( (1 + k) e + \frac{\dot{e}}{e} \right) \right) - \mathbf{y} \left( 1 - \frac{\lambda}{i^{\beta}} \left( (1 + k) e + \frac{\dot{e}}{e} \right) \right) \right\}$$

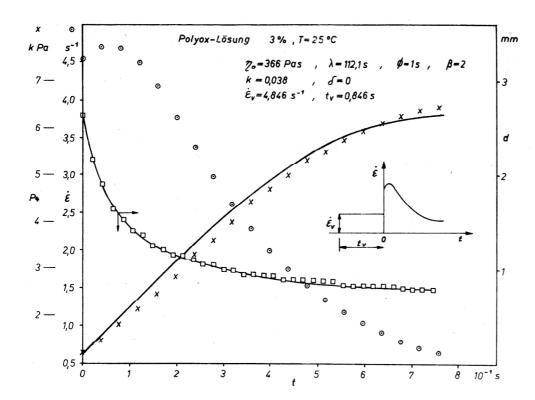
Die rheologischen Parameter werden danach über die Minimierung der Fehlerquadratsumme K,

$$K = \sum_{i=1}^{N} [p_{4j} - \sum_{i=1}^{n} p_{4}^{i}(t_{j})]^{2}, \qquad (12)$$

erhalten.

Dieses Programm wurde zur Parameterbestimmung angewendet. Als Meßsubstanzen dienten Lösungen verschiedener Konzentration. Untersucht wurden Polyethylenoxid-Wasserlösungen, Polyacrylamidlösungen und Lösungen von Polyisobuthylen in Dekalin.

Die Dickenverläufe der Spinnstrahlen wurden gemessen und durch die Gleichung (3) approximiert. Außerdem



Rild 4 Verläufe eines einachsigen Dehnungsprozesses einer Polyox-Lösung

wurde die Anfangskraft gemessen und daraus p4 (0) berechnet. Nach der Bestimmung der Anfangsbedingungen wurden die Parameter des Spriggs-Modells aus der Ausgleichsrechnung gewonnen. Die Güte des Ausgleiches wurde mit statistischen Kennzahlen bewertet. Ein Ergebnis ist in Bild 4 dargestellt.

Die erhaltenen Modellparameter wurden mit Ergebnissen der Parameteridentifikation aus der Scherung verglichen. Dabei wurden Unterschiede besonders in den Parametern  $\eta_o$  und  $\lambda$  sichtbar. Zur Erkläfung dieser Unterschiede müssen folgende Aspekte beachtet werden. Bei der Dehnungsmessung wurde nur ein geringer Bereich der Deformationsgeschwindigkeit erfaßt. Im vorliegenden Fall zwischen  $\dot{\epsilon} = 0.1$  und  $10 \text{ s}^{-1}$ . Demgegenüber wurde am Scherviskosimeter im Intervall  $\dot{\gamma} = 0.016$  $-16.000 \,\mathrm{s}^{-1}$  gemessen.

Aus der Darstellung der Scherviskositätsfunktion ist erkennbar, daß die Nullscherviskosität noch nicht erreicht werden konnte. Um Parametervergleiche aus Scher- und Dehnungsmessungen durchführen zu können, muß eine annähernde Übereinstimmung der Deformationsgeschwindigkeitsbereiche, für die die Parameter bestimmt werden, vorliegen. Eine Erweiterung des auszuwertenden Deformationsgeschwindigkeitsbereiches ist für die Dehnung möglich, wenn mehrere Dehnungsmessungen (z. B. für verschiedene Abzugsgeschwindigkeiten) simultan zur Ausgleichsrechnung herangezogen werden.

#### Symbolverzeichnis

Strahldurchmesser

Deformationsgeschwindigkeitstensor

 $F_{a,b,c}$ Operator

Normalspannungsdifferenz P4

Geschwindigkeitsvektor

Volumenstrom

Reibungsspannungstensor

 $\eta_{o}$ ,  $\lambda$ ,  $\Phi$ ,  $\beta$ , k,  $\delta$ rheologische Parameter

### LITERATUR

- Lipp, R.; Smirnow, O.; Reher, E.-O.: Technische Mechanik 4 (1983) Heft 3, 12 - 16
- Spriggs, T. W.; Huppler, J. D.; Bird, R. B.: Transactions of the society of rheology 10:1,191-213 (1966).
- Reher, E.-O.; Kärmer, R.; Lipp, R.: Rheol. Acta 21, 641 - 643 (1982).
- Bergmann, J.; Lipp, R.: Zur Modellierung von Dehnströmungen V, Spektralmodelle, Plaste und Kautschuk im Druck.

Anschrift der Verfasser:

Dipl.-Ing. Oleg Smirnow, Dr. Roland Lipp, Prof. Dr. Ernst-Otto Reher Technische Hochschule "Carl Schorlemmer" Sektion Verfahrenstechnik

4200 Merseburg Geusaer Straße