

Technische Universität Berlin

Institut für Mechanik
Fachgebiet Kontinuumsmechanik und Materialtheorie

Projekt Simulationstools und ihre Anwendung

**Messung und Parameteridentifikation eines
viskoelastischen Materials**

von

Jan Willem Uittenbogaard (313982)

Lennart Dankelmann (319790)

Tobias Johannsen (319975)

Betreuer:

Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang H. Müller

B. Emek Abali, *M.Sc*

Februar 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	3
2	Grundlagen der Kontinuumsmechanik	3
2.1	Lagrange Darstellung	3
2.2	Massenbilanz	4
2.3	Impulsbilanz	5
3	Messungen	6
3.1	Das Rheometer	7
3.2	Versuchsaufbau	7
3.3	Versuchsdurchführung	8
3.4	Wie das Rheometer misst	9
3.5	Messergebnisse.....	11
4	Materialmodelle und Parameteridentifizierung	11
4.1	Lineares Materialgesetz.....	11
4.2	Herschel-Bulkley Modell	12
5	Simulation.....	14
5.1	Zeitdiskretisierung.....	15
5.2	Raumdiskretisierung.....	16
5.3	Berechnung und die Randbedingungen.....	17
6	Fazit und Ausblick.....	18
7	Literaturverzeichnis	19
8	Anhang.....	20
8.1	Quellcode: Lineares Materialgesetz	20
8.2	Quellcode: Herschel-Bulkley Modell.....	22
8.3	Quellcode: Simulation	24

1 Einleitung

Bereits in den 1960er Jahren wurden die ersten Rheometer für dehnungsgesteuerte Messungen entwickelt. Elektrisch angetriebene Rheometer werden seit den 1980er Jahren kommerziell vertrieben [3]. Seitdem wurden bereits in verschiedenen Arbeiten viskoelastische Materialien auf ihr Bewegungsverhalten hin untersucht.

So wurde u.a. das Materialverhalten von verschiedenen Senfsorten untersucht. Es wurden Fließkurven für dehnungsgesteuerte Experimente aufgestellt und die Temperaturabhängigkeit des Materialverhaltens untersucht. Ebenfalls wurde das dynamische Verhalten für unterschiedliche Frequenzen und Parameter für rheologische Modelle ermittelt [6].

Auch für Süßkartoffelpüree wurden mittels dynamischer Messungen Parameter für rheologische Modelle ermittelt. Die gewonnenen Messdaten konnten in diesem Fall sehr gut mit dem Modell nach Herschel-Bulkley beschrieben werden [2]. Desweiteren finden sich Arbeiten über das rheologische Verhalten anderer Materialien wie Ketchup-Schmelzkäse Mischungen [8] oder Lebensmittelemlusionen wie z.B. Eis, Margarine, Butter, Soßen, Salatdressings oder Mayonnaise [4].

In der vorliegenden Arbeit wird ein Haarwachs der Drogeriekette Rossmann betrachtet. Ziel ist es, die Bewegungsgleichungen mittels Massenbilanz und Impulsbilanz zu finden. Um die Gleichungen zu schließen, werden konstitutive Relationen, sog. Materialgleichungen, benötigt. Dazu soll das Haarwachs zunächst mit einem Rheometer untersucht werden. Mit der Regressionsanalyse nach *Levenberg-Marquardt* wird anschließend ein passendes Materialmodell bestimmt. Dies ermöglicht eine numerische Simulation in FEniCS mit welcher das Materialmodell verifiziert werden kann.

2 Grundlagen der Kontinuumsmechanik

Die Bewegungsgleichungen können aus der Massen- und der Impulsbilanz berechnet werden. Dies wird im folgenden Abschnitt gezeigt. Zuvor wird die in dieser Arbeit verwendete *Lagrange Darstellung* erläutert.

2.1 Lagrange Darstellung

Die Lagrange Darstellung dient der Beschreibung der räumlichen Lage und der Abmessungen eines Körpers und der materiellen Punkte aus denen er besteht. Die Deformation eines solchen Körpers lässt sich durch die Verschiebung seiner einzelnen Punkte in Folge dieser Deformation darstellen. Abbildung 1 zeigt einen Quader \mathcal{B}_0 im unverformten Zustand (der sogenannten Referenz- oder auch Anfangskonfiguration) und im deformierten Zustand \mathcal{B} (aktuelle Konfiguration). Im weiteren Verlauf der Arbeit kennzeichnet der Index „0“ den Bezug auf die Referenzkonfiguration. Wird dieser Index weggelassen, handelt es sich um eine Größe des Körpers in der aktuellen Konfiguration. Der Vektor \vec{u} kennzeichnet die Verschiebung des Punktes in Folge der Deformation. Der Punkt hat den Ortsvektor \vec{X} bzw. $\vec{x}(t)$, in der Referenz- bzw. in der aktuellen Konfiguration.

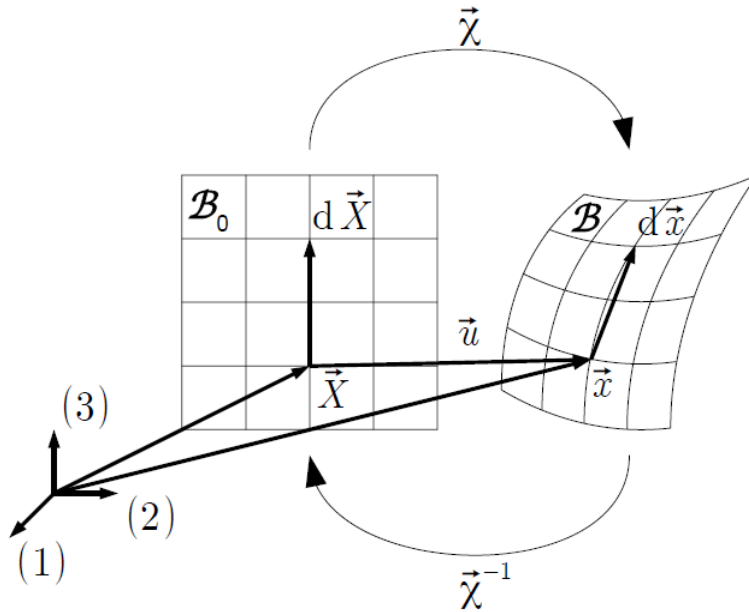


Abbildung 1: Referenzkonfiguration und aktuelle Konfiguration ([7], S.3)

Die Vektoren $d\vec{X}$ und $d\vec{x}$ beschreiben den Abstand zweier Punkte des Körpers vor und nach der Deformation. Die Längenänderung des Abstandes wird als Deformationsgradient F_{ij} bzw. $(F^{-1})_{ij}$ bezeichnet mit

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j}, \quad (F^{-1})_{ij} = \frac{\partial X_i}{\partial x_j}. \quad (1)$$

2.2 Massenbilanz

Dieser Erhaltungssatz beschreibt die Massenänderung eines Körpers \mathcal{B} . Die Masse des Körpers sei über die Zeit konstant:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{B}} \rho dV = 0. \quad (2)$$

Durch Umformen der Bilanzgleichung lässt sich ein Zusammenhang zwischen der Dichte ρ_0 und der Dichte ρ in der aktuellen Konfiguration bestimmen. Zunächst wird die Zeitableitung in das Integral gezogen:

$$\int_{\mathcal{B}} \frac{d\rho}{dt} dV + \int_{\mathcal{B}} \rho (d\dot{V}) = 0, \quad (3)$$

mit $(d\dot{V}) = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} dV$, wobei in allen doppelt vorkommenden Indizes die Einsteinsche Summenkonvention angewandt wird:

$$\int_{\mathcal{B}} \left(\dot{\rho} + \rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) dV = 0. \quad (4)$$

Es wird die Jacobi-Determinante

$$J = \det(F_{ij}) = \det\left(\frac{\partial x_i}{\partial X_j}\right) \quad (5)$$

in die Gleichung eingesetzt. Sie stellt ein Maß für die örtliche Volumenänderung dar. Es ergibt sich die Massenbilanz in ihrer lokalen Form:

$$\dot{\rho} + \rho \frac{\dot{J}}{J} = 0. \quad (6)$$

Um Gleichung (6) zu lösen, wird zunächst durch die Dichte ρ geteilt und anschließend integriert:

$$\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{\dot{J}}{J} = 0 \Leftrightarrow \frac{d\rho}{dt \rho} = -\frac{dJ}{dt J} \Leftrightarrow \frac{d\rho}{\rho} = -\frac{dJ}{J}, \quad (7)$$

$$\ln(\rho) = -\ln(J) + \text{const.} \Leftrightarrow \ln(\rho) + \ln(J) = \text{const.}, \quad (8)$$

$$\Rightarrow \ln(\rho J) = \text{const.} \Leftrightarrow \rho J = \text{const.}, \quad (9)$$

$$\rho_0 = \rho J. \quad (10)$$

Gleichung (10) ist die Lösung der Massenbilanz für die Referenzkonfiguration. [1]

2.3 Impulsbilanz

Die zeitliche Impulsänderung eines Körpers ist die Summe der Oberflächenvektoren t_i und der Volumenkräfte f_i :

$$\frac{d}{dt} \int_B \rho v_i dV = \oint_{\partial B} t_i dA + \int_B f_i dV \quad \text{mit} \quad t_i = n_j \sigma_{ji} \quad \text{und} \quad f_i = 0. \quad (11)$$

Unter der Annahme eines vernachlässigbar kleinen Einflusses der Volumenkräfte im Vergleich zu den Oberflächenkräften werden die Volumenkräfte nicht weiter berücksichtigt. Um den Bezug zur Anfangskonfiguration herzustellen, werden folgende Zusammenhänge in Gleichung (11) eingesetzt:

$$dV = J dV_0 \quad \text{und} \quad n_j dA = J (F_{jk})^{-1} N_k dA_0. \quad (12)$$

Daraus folgt:

$$\frac{d}{dt} \int_{B_0} \frac{\rho_0}{J} v_i J dV_0 = \oint_{\partial B_0} \sigma_{ji} J (F_{jk})^{-1} N_k dA_0, \quad (13)$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \int_{B_0} \rho_0 v_i dV_0 = \oint_{\partial B_0} N_k P_{ki} dA_0, \quad (14)$$

mit dem ersten Piola-Kirchhoff Spannungstensor: $P_{ki} = \sigma_{ji} J (F_{jk})^{-1}$. Zieht man auf der linken Seite von (14) die Zeitableitung in das Integral und formt das rechte Integral unter Zuhilfenahme des Gaußschen Integralsatzes in ein Volumenintegral um, ergibt sich die örtliche Impulsbilanzgleichung inklusive der Massenbilanz (10) zu:

$$\rho_0 \frac{\partial v_i}{\partial t} - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} = \rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - \frac{\partial P_{ki}}{\partial X_k} = 0. \quad (15)$$

Da der erste Piola-Kirchhoff-Spannungstensor P_{ki} nicht symmetrisch ist, wird aus Objektivitätsgründen der zweite (symmetrische) Piola-Kirchhoff-Spannungstensor S_{ij} in (15) eingesetzt:

$$S_{ij} = (F_{in})^{-1} P_{jn}, \quad (16)$$

$$\Rightarrow P_{jn} = F_{jn} S_{in}, \quad (17)$$

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - \frac{\partial (F_{jn} S_{in})}{\partial X_j} = 0. \quad (18)$$

Jetzt sind alle Variablen in der Differentialgleichung von der Verschiebung u abhängig. Allerdings sind durch den Term $F_{jn} S_{in}$ hochgradige Nichtlinearitäten in der Gleichung enthalten. Da der Deformationsgradient F_{jn} mit

$$F_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial X_j} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial X_j} \quad (19)$$

gegeben ist, kann dieses Problem aber numerisch in FEniCS gelöst werden.

Zur Lösung der Differentialgleichung (18) fehlt demnach lediglich noch der Zusammenhang zwischen Spannung S_{ij} und der Verschiebung u_k . Dieser soll nun in den folgenden Abschnitten bestimmt werden. Dazu wird zunächst ein Materialmodell gesucht, mit dem ein eindimensionaler Spannungszustand beschrieben werden kann, um dieses anschließend in den gesuchten Spannungstensor $S_{ij}(u_k)$ zu überführen.

3 Messungen

Um erste Aussagen über das Materialverhalten treffen zu können, wird das Haarwachs mit Hilfe eines Rheometers untersucht. Für dieses Experiment wird ein weggesteuerter Frequenztest durchgeführt.

Im folgenden Abschnitt werden Versuchsaufbau und Versuchsdurchführung beschrieben. Zudem wird erklärt wie das Rheometer die Messwerte ermittelt.

3.1 Das Rheometer

Für die Messungen findet das Rheometer AR1000 des Herstellers TA Instruments Verwendung. Bei einem Rheometer handelt es sich um ein Messgerät, mit dem das Verformungs- und Fließverhalten von Materialien untersucht wird.



Abbildung 2: Das Rheometer

Des Weiteren bietet dieses Rheometer die Möglichkeit, die Temperatur, unter der die Messungen durchgeführt werden, mittels eines Peltier-Elements stufenlos zu regulieren [10]. Die gewonnenen Messdaten werden über eine Schnittstelle an einen Rechner weitergegeben, der diese für die weitergehende Analyse ablegt.

3.2 Versuchsaufbau

Das zu untersuchende Material wird zwischen zwei Platten aufgetragen. Die Bodenplatte ist starr. In ihr befindet sich das Peltier-Element zur Temperaturregulierung. Die obere Platte ist in einer Art Futter arretiert, das drehbar gelagert über einen Motor angetrieben und so mit einem Moment beaufschlagt werden kann. Aus diesem Moment resultiert eine Dehnung ε des Materials. In das Futter können verschiedene Platten eingespannt werden. Für die Messungen wurde eine Platte mit leichter Kegelform gewählt ($\alpha = 2^\circ$). Durch die Kegelform ist gewährleistet, dass die im Material aufgebrachte Dehnung vom Radius unabhängig ist, d.h. über den gesamten Radius sind die Dehnungen im Material konstant [1]. Der Radius der Kegelplatte beträgt $R = 30$ mm.

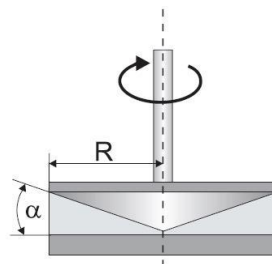


Abbildung 3: Aufbau des Rheometers ([11], S.12)

3.3 Versuchsdurchführung

Zunächst werden in der Benutzeroberfläche der Rheometersteuerung eine Temperatur von $T = 30^\circ\text{C}$ eingestellt und die Kegelgeometrie der oberen Platte ($R = 30\text{ mm}$, $\alpha = 2^\circ$) vermerkt. Anschließend muss das Rheometer kalibriert werden. Dies geschieht in zwei Schritten. Im *Mapping* dreht das Rheometer die obere Platte einmal herum und misst dabei das benötigte Torsionsmoment und speichert dessen Schwankungen [10], um diese bei der späteren Messung herausrechnen zu können. Durch *Zero Geometry Gap* wird ein definiertes Nullniveau vorgegeben. In dieser Einstellung wird ein Wert von $54\text{ }\mu\text{m}$ eingesetzt. Dies ist die vom Hersteller gegebene Abweichung, die die aus Fertigungsgründen abgeflachte Kegelspitze der eingespannten Platte zur idealen Kegelform aufweist [10].

Um die Abhängigkeit des Materials von der Dehnungsrate, $\dot{\varepsilon}$, untersuchen zu können, wird eine oszillierende Messung durchgeführt, bei der die Oszillationsfrequenz variiert wird. Die Kegelplatte dreht sich um einen vorgegebenen Dehnungsbetrag sowohl im, als auch gegen den Uhrzeigersinn. Die Frequenz bzw. Kreisfrequenz der Dehnung wird dabei linear schrittweise erhöht. Daraus folgt, dass die Dehnungsrate mit steigender Kreisfrequenz ebenfalls ansteigt. Im Gegensatz zu einer kontinuierlichen Messung, bei der die Kegelplatte nicht oszilliert, kann so auch eine Aussage über das Materialverhalten in Abhängigkeit der Dehnungsrate getroffen werden. Durch die konstante Dehnungsamplitude ist der Verdrehwinkel des Rheometers vorgegeben, die Frequenz der Dehnung wird variiert.

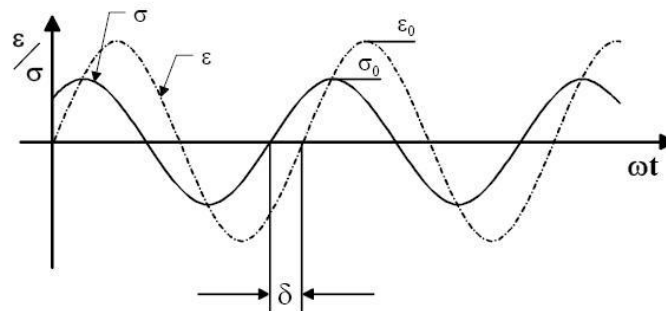


Abbildung 4: Spannung und Dehnung über der Kreisfrequenz aufgetragen ([5], S.6)

Die vorgegebene Dehnung oszilliert sinusförmig:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \sin(\omega t). \quad (20)$$

Dadurch ist nach der linearen Theorie auch eine sinusförmige Spannung im Material als Antwort zu erwarten:

$$\sigma = \sigma_0 \sin(\omega t + \delta). \quad (21)$$

Die Phasenverschiebung δ trägt der Massenträgheit des Materials Rechnung. Die Beanspruchung infolge der Dehnung erfolgt demnach zeitverzögert.

Es wird eine Dehnung mit einer Dehnungsamplitude von $\varepsilon_0 = 0,1$ und einer Kreisfrequenz von $\omega = 2\pi f$; $f = 1 \dots 100\text{ Hz}$ in 200 Teilschritten vorgegeben. Die Frequenz der oszillierenden Belastung wird dabei drei Sekunden lang konstant gehalten (*Sampling Time*), d.h. für jede Messung wird drei Sekunden lang gemessen. Zudem soll der Kegel nach jedem Frequenzschritt drei Sekunden verharren (*Conditioning Time*). Für diese Messreihe werden demnach 200 Messungen aufgenommen.

Sind alle Einstellungen getätigt, wird das Haarwachs mit einem kleinen Spatel auf die Bodenplatte aufgetragen. Die obere Platte fährt auf das definierte Nullniveau herunter und führt einige Umdrehungen aus. Dieser Prozess ist notwendig um, die Reproduzierbarkeit der Messergebnisse zu gewährleisten. Zum einen wird so sichergestellt, dass die Platten vollständig vom Material benetzt sind. Zum anderen können während der Lagerung des Haarwachses Inhomogenitäten entstehen. Das Verrühren des Haarwachses hilft, dieses wieder zu homogenisieren. Es wurde nicht untersucht wie lange und wie intensiv das Material durchmischt werden muss. Zur Sicherheit sollten zwei Proben gemessen werden, um das Experiment zu verifizieren.

Nachdem das überschüssige Material im Umfeld der Kegelplatte entfernt wurde, kann die Messung gestartet werden.

3.4 Wie das Rheometer misst

Bevor die Messergebnisse diskutiert werden, soll zunächst erklärt werden, was während der Messung im Rheometer geschieht.

Das Rheometer misst die für die geforderte Dehnung aufgebrauchte Energie [7]:

$$E = E_{diss} + E_{gesp} = V \int_t \sigma \dot{\varepsilon} dt. \quad (22)$$

Diese setzt sich aus einem dissipierten, also dem Verlustanteil, und einem gespeicherten Anteil zusammen. Das Volumen V , die Zeit t und die Dehnungsrate $\dot{\varepsilon}$ sind bekannt. Da Dehnung und Spannung auch kosinusförmig eingebracht werden können, gilt für (20) und (21) in der komplexen Darstellung allgemein betrachtet:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_0 e^{i\omega t} \quad \text{und} \quad \hat{\sigma} = \sigma_0 e^{i(\omega t + \delta)}. \quad (23)$$

Der Imaginärteil beschreibt den sinusförmigen und der Realteil den cosinusförmigen Verlauf. Ergänzt um $\varepsilon_0/\varepsilon_0$ kann die Spannung in Abhängigkeit des komplexen Schubmoduls G^* dargestellt werden. Dieses setzt sich aus dem Speichermodul G' und dem Verlustmodul G'' zusammen [7].

$$\hat{\sigma} = G^* \hat{\varepsilon} = (G' + iG'') \hat{\varepsilon} = \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0} (\cos(\delta) + i\sin(\delta)) \hat{\varepsilon}, \quad (24)$$

$$\sigma = G' \varepsilon + \frac{G''}{\omega} \dot{\varepsilon}. \quad (25)$$

Die beiden Module G' und G'' sind die Parameter die von der Steuereinheit des Rheometers aus der gemessenen Energie errechnet und dem Anwender ausgegeben werden.

In der Rheologie werden diese beiden Kenngrößen benutzt, um das Verhalten viskoelastischer Materialien zu beschreiben. Diesen Materialien kann in ihrem Verhalten unter Belastung sowohl ein elastischer, als auch ein viskoser Anteil zugerechnet werden. Analog zur klassischen Physik kann das Speichermodul G' als Elastizitätsmodul E nach dem Hookeschen Federgesetz betrachtet werden. Das Verlustmodul G'' geteilt durch die Frequenz ω ergibt sich als Äquivalent zur dynamischen Viskosität η eines Dämpfers.

Die Bezeichnung der Größen resultiert aus ihrer Verwendung, das Speichermodul berücksichtigt den Anteil der Energie, der bei eingebrachter Belastung gespeichert und nach Lösen der Belastung wieder abgegeben wird. Das Verlustmodul hingegen steht für den dissipierten Anteil der eingebrachten Energie, der nach dem Aufbringen der Belastung nicht mehr zur Verfügung steht, sondern in Form von Wärme dem System verloren geht [7].

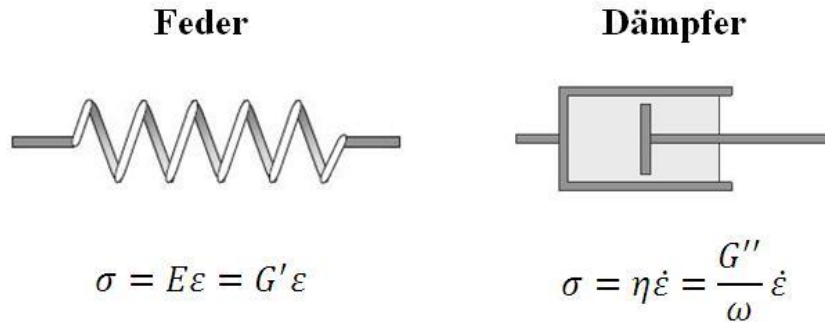


Abbildung 5: Ersatzmodelle für Speicher- und Verlustmodul ([11], S.6)

Mit (22) und (25) werden die beiden Module von der Auswertungssoftware berechnet:

$$E = V \int_t \left(G'\varepsilon + \frac{G''}{\omega}\dot{\varepsilon} \right) \dot{\varepsilon} dt. \quad (26)$$

Zunächst wird über eine ganze Periode $\tau = 2\pi/\omega$ integriert, wodurch der Anteil der gespeicherten Energie zu null wird. Zudem wird die für das Experiment gewünschte Dehnung eingesetzt:

$$E_\tau = E_{diss} = V \int_0^{2\pi} \left(G'\varepsilon_0^2 \omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) + G''\omega\varepsilon_0^2 \cos^2(\omega t) \right) dt. \quad (27)$$

Die Lösung des Integrals liefert eine Gleichung aus der das Verlustmodul G'' bestimmt werden kann:

$$E_\tau = VG''\varepsilon_0^2\pi. \quad (28)$$

Analog dazu wird die Energie einer Viertelperiode berechnet

$$E_{\tau/4} = V \int_0^{\pi/2} \left(G'\varepsilon_0^2 \omega \sin(\omega t) \cos(\omega t) + G''\omega\varepsilon_0^2 \cos^2(\omega t) \right) dt \quad (29)$$

$$= V \left(\frac{1}{2}\varepsilon_0^2 G' + \frac{1}{4}\varepsilon_0^2 \pi G'' \right) \quad (30)$$

$$= \frac{1}{4}E_{gesp} - \frac{1}{4}E_{diss}. \quad (31)$$

Aus (31) folgt für das Speichermodul G' :

$$E_{\tau/4} - \frac{1}{4}E_{diss} = \frac{1}{2}V\varepsilon_0^2 G'. \quad (32)$$

Nach Gleichung (28) und (32) berechnet die Auswertungssoftware die Werte für G' und G'' .

3.5 Messergebnisse

In Abbildung 6 sind die Messergebnisse des Versuchs dargestellt. Es sind die Verläufe vom Speichermodul G' und Verlustmodul G'' über der variierten Kreisfrequenz aufgetragen.

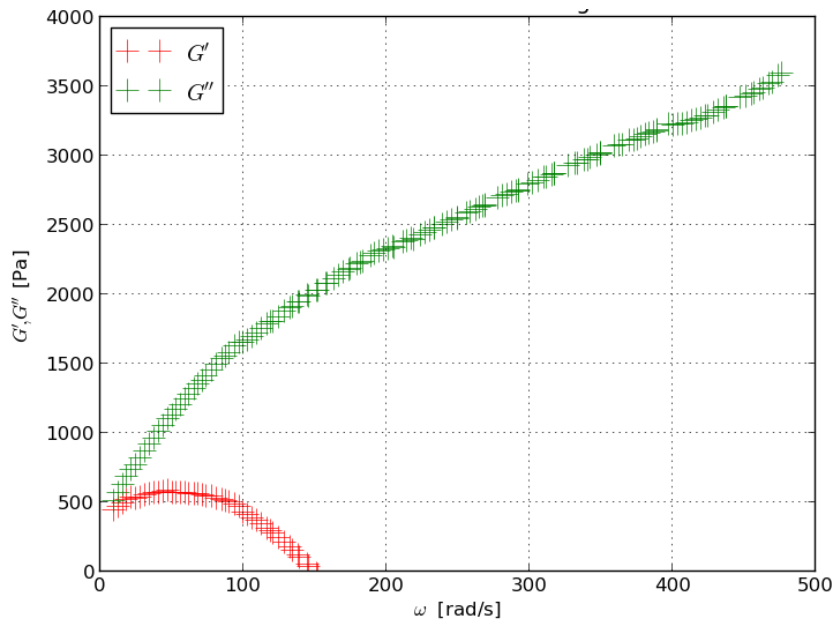


Abbildung 6: Messergebnisse

4 Materialmodelle und Parameteridentifizierung

Mit dem Levenberg-Marquard Verfahren für nicht-lineare Regression sollen jetzt Materialparameter aus den gemessenen Daten bestimmt werden. Um Materialparameter bestimmen zu können, müssen Gleichungen aufgestellt werden, die die Materialparameter aus G' und G'' in Abhängigkeit von ω bestimmen lassen.

4.1 Lineares Materialgesetz

Der allgemeine lineare Ansatz beschreibt das Verhalten von Materialien, wobei ein linearer Zusammenhang zwischen Spannung, Spannungsrate, Dehnung und Dehnungsrate vorhanden ist [7]:

$$\sigma + a\dot{\sigma} = b\varepsilon + c\dot{\varepsilon}. \quad (33)$$

Mithilfe der komplexen Darstellung können die Parameter a, b, c aus der Differentialgleichung (33) nach G' und G'' umgestellt werden. Mit (23) und (24) in (33):

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} + a\dot{\hat{\sigma}} &= b\hat{\varepsilon} + c\dot{\hat{\varepsilon}} \\ \hat{\sigma} + i\omega a\hat{\sigma} &= b\hat{\varepsilon} + i\omega c\hat{\varepsilon} \\ \hat{\sigma} &= \frac{b + i\omega c}{1 + i\omega a} \hat{\varepsilon} \\ &= \frac{b - iab\omega + i\omega c + ac\omega^2}{1 + a^2\omega^2} \hat{\varepsilon} \\ &= \left(\underbrace{\frac{b + ac\omega^2}{1 + a^2\omega^2}}_{=G'} + i \underbrace{\frac{(c - ab)\omega}{1 + a^2\omega^2}}_{=G''} \right) \hat{\varepsilon} \end{aligned} \quad (34)$$

Somit erhalten wir Gleichungen für G' und G'' in Abhängigkeit von a, b, c und ω :

$$G' = \frac{b + ac\omega^2}{1 + a^2\omega^2} \quad (35)$$

$$G'' = \frac{(c - ab)\omega}{1 + a^2\omega^2} \quad (36)$$

Durch die Methode der kleinsten Quadrate ergeben sich die gesuchten Koeffizienten zu (vgl. Anhang 8.1):

$$a = -2,80 \cdot 10^{-3}, b = 6,29 \cdot 10^2 \text{ und } c = 10,20.$$

Abbildung 7 zeigt das Ergebnis der Regressionsanalyse.

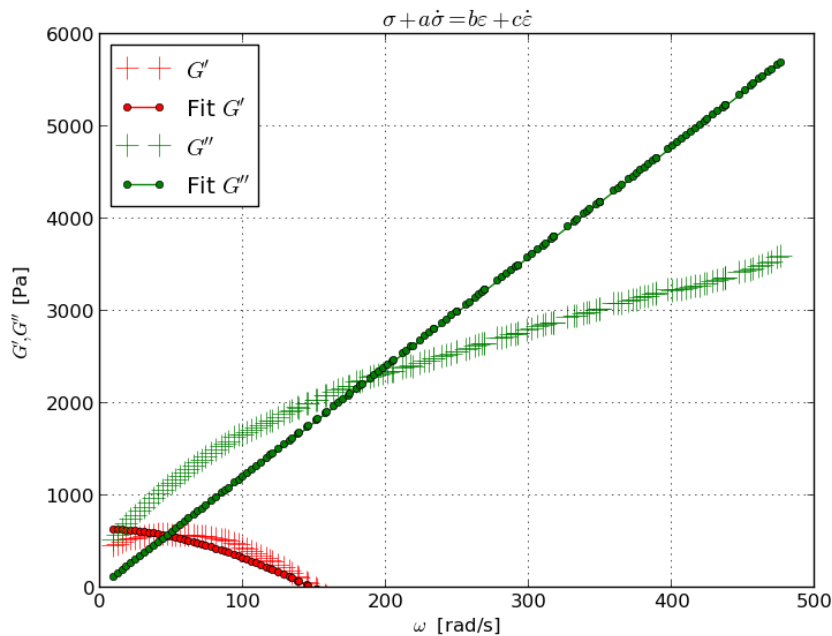


Abbildung 7: Fit mit allgemeinem linearen Ansatz

Es ist zu erkennen dass das Materialverhalten sich nicht gut mit dem linearen Modell beschreiben lässt. Zudem ist in Abbildung 7 zu erkennen, dass G' negative Werte annimmt, was sich nicht erklären lässt. Der Grund für den negativen Verlauf liegt in der Berechnung von G' . Wie in Abschnitt 3.4 beschrieben, misst das Rheometer das Speichermodul nicht direkt, sondern die Auswertungssoftware berechnet es über die in das Material eingebracht Energie. Dabei geht die Software von einem linearen Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnung aus (vgl. Gleichung (25)). Die Vermutung liegt nahe, dass es sich bei dem untersuchten Haarwachs um ein nichtlineares Material handelt, das Rheometer aber weiterhin linear rechnet.

4.2 Herschel-Bulkley Modell

Im Folgenden wird das Materialmodell nach Herschel-Bulkley untersucht:

$$\sigma = a\dot{\epsilon}^b \quad (37)$$

Der Koeffizient b wird Fließindex genannt und beschreibt die Abweichung vom Newtonschen Verhalten [8]. Mit Hilfe der zuvor gefundenen Messwerte können die Koeffizienten a und b bestimmt werden. Dazu muss eine Abhängigkeit zwischen dem Herschel-Bulkley Modell und den Modulen G' und G'' hergestellt werden, sodass die Methode der kleinsten Quadrate nach *Levenberg-Marquardt* angewandt werden kann. Der Zusammenhang wird über die Energiedichte w hergestellt (vgl. Abschnitt 3.4):

$$w_\tau = w_{diss} = \pi \varepsilon_0^2 G'' = \frac{1}{2} \int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = \int_0^\tau \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} dt = \int_0^\tau S_{12} \dot{\varepsilon} dt. \quad (38)$$

Mit $\varepsilon = \varepsilon_0 \sin(\omega t)$ und (37) ergibt sich der Zusammenhang mit dem Verlustmodul G'' :

$$\begin{aligned} w_\tau &= \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} a \dot{\varepsilon}^{b+1} dt \\ &= \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} a (\omega \varepsilon_0 \cos(\omega t))^{b+1} dt \\ &= a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b+1} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \operatorname{sgn}(\cos(\omega t)) |\cos(\omega t)|^{b+1} dt \\ &= a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b+1} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \operatorname{sgn}(\cos(\omega t)) \cos(\omega t) |\cos(\omega t)|^b dt \\ &= a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b+1} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt = \pi \varepsilon_0^2 G''. \end{aligned} \quad (39)$$

Analog dazu wird der Zusammenhang mit dem Speichermodul G' gefunden:

$$w_{\tau/4} = \frac{1}{2} \varepsilon_0^2 G' + \frac{1}{4} \pi \varepsilon_0^2 G'' = \frac{1}{2} \varepsilon_0^2 G'' + \frac{1}{4} E_{diss} = \int_0^{\frac{\tau}{4}} \sigma \dot{\varepsilon} dt \quad (40)$$

$$\begin{aligned} w_{\tau/4} &= \int_0^{\frac{\pi}{2\omega}} a \dot{\varepsilon}^{b+1} dt \\ &= a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b+1} \int_0^{\frac{\pi}{2\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt = \frac{1}{2} \varepsilon_0^2 G' + \frac{1}{4} w_\tau. \end{aligned} \quad (41)$$

Mit Gleichung (39) und (41) erhalten wir für G' und G'' :

$$G'' = \frac{a}{\pi} \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b-1} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt \quad (42)$$

$$\begin{aligned} G' &= 2a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b-1} \int_0^{\frac{\pi}{2\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt - \frac{1}{2} \pi G'' \\ &= 2a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b-1} \int_0^{\frac{\pi}{2\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt - \frac{1}{2} a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b-1} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt \\ &= a \omega^{b+1} \varepsilon_0^{b-1} \left(2 \int_0^{\frac{\pi}{2\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt - \frac{1}{2} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} |\cos(\omega t)|^{b+1} dt \right) \end{aligned} \quad (43)$$

Durch die Methode der kleinsten Quadrate ergeben sich die gesuchten Koeffizienten zu (vgl. Anhang 8.2):

$$a = 47,45 \text{ und } b = 0,49$$

Abbildung 8 zeigt den Fit der Messwerte mit Herschel-Bulkley. Es ist zu erkennen, dass das Verlustmodul G'' sehr gut durch das gewählte Modell beschrieben wird. Das Speichermodul G' ist über alle Frequenzen null. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass das Speichermodul durch das gewählte Materialmodell nicht berücksichtigt wird.

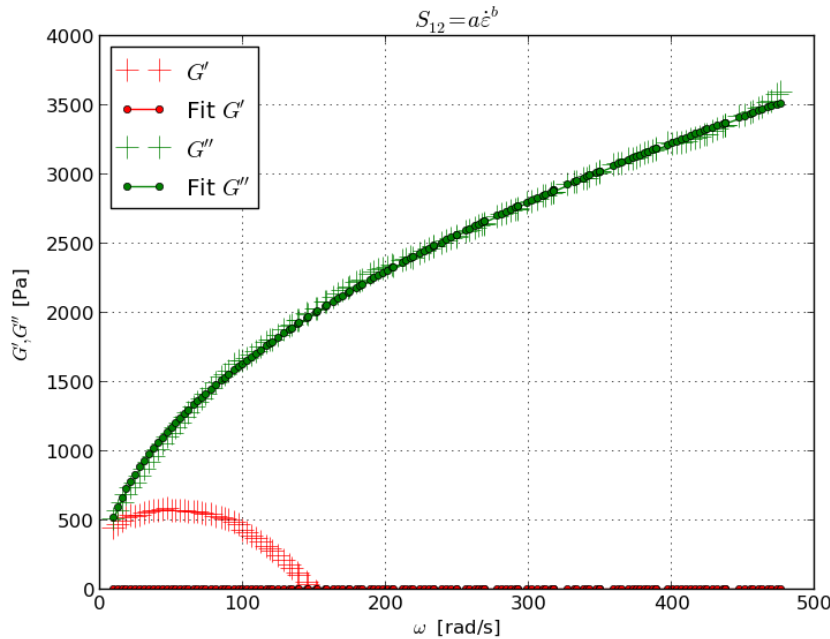


Abbildung 8

Da zudem das Verlustmodul sehr gut durch das Herschel-Bulkley Modell beschrieben wird, wird angenommen, dass das Materialmodell für die folgenden Berechnungen verwendet werden kann. Das gefundene Materialmodell nach Herschel-Bulkley ergibt sich folglich zu:

$$\sigma = 47,45 \dot{\epsilon}^{0,49}. \quad (44)$$

5 Simulation

Das gefundene Materialmodell wird nun anhand einer Simulation überprüft. Dazu soll ein spannungsgesteuertes, kontinuierliches Experiment simuliert werden.

Um das Materialverhalten mit FEniCS simulieren zu können, muss die gefundene Spannung σ in einen Spannungstensor S_{ij} (hier am 2D Beispiel gezeigt) überführt werden. Unter Annahme, dass eine Deformation in eine Richtung nur eine Spannung in genau derselben Richtung verursachen kann, man spricht hier auch von Kollinearität, muss der Spannungstensor folgende Form haben:

$$S_{ij} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots & a \dot{\epsilon}_{12}^b \\ \dots & \dots \end{bmatrix} \Rightarrow S_{ij} = \begin{bmatrix} a \dot{\epsilon}_{11}^b & a \dot{\epsilon}_{12}^b \\ a \dot{\epsilon}_{21}^b & a \dot{\epsilon}_{22}^b \end{bmatrix} \quad (45)$$

Da die Deformationsrate $\dot{\varepsilon}_{ij}$ nicht einfach mit b potenziert werden kann, sodass jeder Eintrag des Spannungstensors S_{ij} mit b potenziert wird, muss eine geeignete Darstellung gefunden werden. Dazu wird die zweite Invariante nach Cayley-Hamilton angewendet und S_{ij} mit der normierten Deformationsrate $\dot{\varepsilon}_{ij}$ multipliziert [1]:

$$S_{ij} = a(II)^{\frac{b-1}{2}} \dot{\varepsilon}_{ij} \quad \text{mit } II = \frac{1}{2} \dot{\varepsilon}_{ij} \dot{\varepsilon}_{ji}. \quad (46)$$

Dass die Parameter a und b genau den in Kapitel 4.2 ermittelten Parametern entsprechen, kann leicht überprüft werden, in dem die Deformationsrate eingesetzt wird. Diese ist bekannt, da eine weggesteuerte Messung durchgeführt wurde. Mit $\dot{\varepsilon}_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & \dot{\varepsilon} \\ \dot{\varepsilon} & 0 \end{bmatrix}$ in Gleichung (46):

$$S_{ij} = a \left(\frac{1}{2} 2\dot{\varepsilon}^2 \right)^{\frac{b-1}{2}} \begin{bmatrix} 0 & \dot{\varepsilon} \\ \dot{\varepsilon} & 0 \end{bmatrix} = a\dot{\varepsilon}^{b-1} \begin{bmatrix} 0 & \dot{\varepsilon} \\ \dot{\varepsilon} & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & a\dot{\varepsilon}^b \\ a\dot{\varepsilon}^b & 0 \end{bmatrix}. \quad (47)$$

Der Spannungstensor S_{ij} ist somit in der gewünschten Form vorhanden. Die Hauptspannungen sind null, da das Haarwachs im Versuch ausschließlich geschert wurde, demnach können auch nur Scherspannungen im Material auftreten.

5.1 Zeitdiskretisierung

Ziel ist es, für jedem Zeitschritt die Deformation aus der Impulsbilanz in der Anfangskonfiguration

$$\int_{B_0} \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho_0 v_i - \frac{\partial}{\partial X_j} (F_{jn} S_{in}) \right) dV_0 = 0 \quad (48)$$

zu bestimmen. Für die Zeitableitung wird ein finite Diferenzen-Schema eingesetzt:

$$v_i(x_i, t) = \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial x_i}{\partial t} = \frac{x_i - x_i^0}{t_j - t_{j-1}} = \frac{1}{\Delta t} (x_i - x_i^0), \quad (49)$$

wobei x_i die Lage in der aktuelle Konfiguration zum Zeitpunkt t_j bezeichnet und x_i^0 die Lage zum Zeitpunkt t_{j-1} . Die Zeitschritte $\Delta t = t_j - t_{j-1}$ werden für die Berechnung konstant gewählt. Die Deformation eines Partikels X_i folgt aus der Bewegung u_i in die neue Position x_i :

$$u_i = x_i - X_i. \quad (50)$$

Die diskretisierte Verschiebungsrage ist die Geschwindigkeit:

$$v_i(X_j, t) = \frac{du_i}{dt} = \frac{(x_i - X_i) - (x_i^0 - X_i)}{t - t^0} = \frac{1}{\Delta t} (u_i - u_i^0). \quad (51)$$

Für die Zeitableitung der Geschwindigkeit wird ein weiteres Mal diskretisiert:

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{v_i - v_i^0}{\Delta t} = \frac{(u_i - u_i^0) - (u_i^0 - u_i^{00})}{\Delta t \Delta t} = \frac{u_i - 2u_i^0 + u_i^{00}}{\Delta t^2} \quad (52)$$

Für die Berechnung von S_{ij} muss die Dehnungsrate ebenfalls diskretisiert werden:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0}{\Delta t} \quad (53)$$

$$\text{mit } \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right), \quad \varepsilon_{ij}^0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^0}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j^0}{\partial X_i} \right).$$

5.2 Raumdiskretisierung

Für die Raumdiskretisierung wird die finite Elemente Methode mit linearen Elementen verwendet. Mit Gleichung (52) in (48) und der Testfunktion δu_i ergibt sich das Problem in der variationellen Form zu:

$$\int_{B_0} \left(\frac{\rho_0(u_i - 2u_i^0 + u_i^{00})}{\Delta t \Delta t} - \frac{\partial}{\partial X_j} (F_{jn} S_{in}) \right) \delta u_i dV_0 = 0. \quad (54)$$

Weil S_{in} die Terme $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right)$ enthält, wird bei der Verwendung von linearen Elementen $\partial S_{in} / \partial X_j$ in dieser Formulierung für jeden Zeitschritt zu null. Mittels partieller Integration kann dieses Problem umgangen werden:

$$\begin{aligned} & \int_{B_0} \frac{\partial (F_{jn} S_{in} \delta u_i)}{\partial X_j} dV_0 = \int_{B_0} \frac{\partial (F_{jn} S_{in})}{\partial X_j} \delta u_i dV_0 + \int_{B_0} (F_{jn} S_{in}) \frac{\partial \delta u_i}{\partial X_j} dV_0 \\ \Rightarrow & \int_{B_0} \frac{\partial (F_{jn} S_{in})}{\partial X_j} \delta u_i dV_0 = - \int_{B_0} (F_{jn} S_{in}) \frac{\partial \delta u_i}{\partial X_j} dV_0 + \int_{B_0} \frac{\partial (F_{jn} S_{in} \delta u_i)}{\partial X_j} dV_0 \\ \Leftrightarrow & \int_{B_0} \frac{\partial (F_{jn} S_{in})}{\partial X_j} \delta u_i dV_0 = - \int_{B_0} (F_{jn} S_{in}) \frac{\partial \delta u_i}{\partial X_j} dV_0 + \int_{\partial B_0} F_{jn} S_{in} \delta u_i N_j dA_0 \end{aligned} \quad (55)$$

Mit Gleichung (55) in (54) ergibt sich die variationelle Form zu:

$$\int_{B_0} \frac{\rho_0(u_i - 2u_i^0 + u_i^{00})}{\Delta t \Delta t} \delta u_i + \int_{B_0} (F_{jn} S_{in}) \frac{\partial \delta u_i}{\partial X_j} dV_0 - \int_{\partial B_0} F_{jn} S_{in} \delta u_i N_j dA_0 = 0 \quad (56)$$

mit $S_{in} = a(II)^{\frac{b-1}{2}} \dot{\varepsilon}_{ij}$, $\dot{\varepsilon}_{ij} = (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) / \Delta t$ und $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} \right)$. Gleichung (56) ist im Code implementiert (vgl. Anhang 8.3). Für die enthaltenen Nichtlinearitäten wird, wie in [9] beschrieben, eine abstrakte Linearisierung durchgeführt. Die transiente partielle Differentialgleichung wird in der Zeit gelöst.

5.3 Berechnung und die Randbedingungen

Ein spannungsgesteuertes kontinuierliches Experiment am Rheometer wird im 2-dimensionalen Raum simuliert. Hierbei wird eine Scherbelastung mit vorgegebener Spannung kontinuierlich in X_1 -Richtung auf das Material aufgebracht. Die Geometrie der Kegelplatte ist in Abschnitt 3.2 beschrieben. In der Simulation wird die Außenschale des gescherten Materials betrachtet und auf eine 2-dimensionale Fläche projiziert. Abbildung 9 zeigt eine schematische Darstellung.

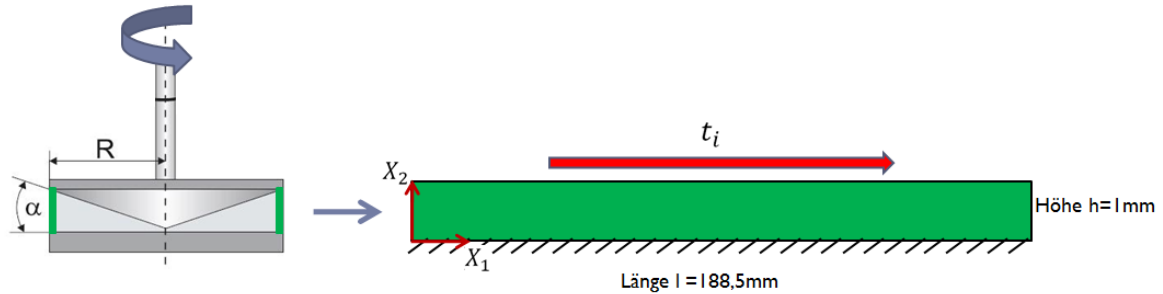


Abbildung 9: Außenschale des gescherten Materials

Die Spannung, t_i , wird in 60 Sekunden linear von 0 auf 200 Pa erhöht. Zur Verifizierung der berechneten Werte wurde dieses Experiment ebenfalls am Rheometer durchgeführt.

Damit die Fläche die Außenschale einen rotationssymmetrischen Körper beschreibt, werden die Verschiebungen am rechten Rand gleichgesetzt mit den Verschiebungen am linken Rand:

$$u_i(L, X_2) = u_i(0, X_2). \quad (57)$$

Es wird angenommen dass die Geschwindigkeiten bzw. Verschiebungen an dem unteren Rand null sind:

$$u_i(X_1, 0) = (0, 0). \quad (58)$$

Am oberen Rand wird die Belastung eingebracht:

$$\int_{\partial B_0} F_{jn} S_{in} \delta u_i N_j dA_0 = \frac{200}{60} t, \quad t \in [0, 60]. \quad (59)$$

Die Bewegung in X_2 Richtung am oberen Rand wird aufgrund der vorhandenen Kegelplatte verhindert:

$$u_i(X_1, h) = (u_1, 0). \quad (60)$$

Abbildung (10) zeigt die mit der FEM berechneten Werte für S_{12} aufgetragen über die Dehnungsrate, zusammen mit den Messdaten aus dem Experiment.

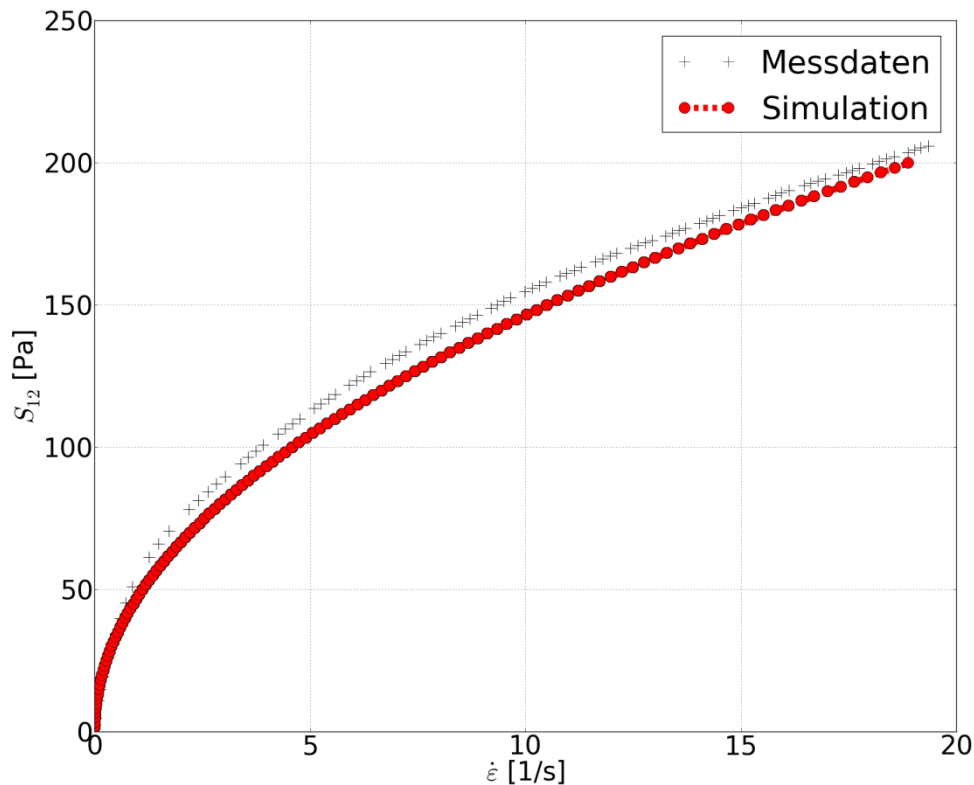


Abbildung 10: Simulation vs. Messung

Es ist zu erkennen, dass die berechneten Werte gut mit den gemessenen Werten übereinstimmen.

6 Fazit und Ausblick

Mit diesem Projekt wurden die Materialwissenschaften mit der Kontinuumsmechanik zusammengebracht. Es wurden eigenständig Messungen mit dem Rheometer durchgeführt, die Parameter der rheologischen Modelle eigenständig ermittelt und zusätzlich zur Verifizierung mit FEniCS simuliert.

Der Zusammenhang zwischen dem multiaxialen Spannungstensor S_{ij} und dem Verschiebungsfeld $u_k(X, t)$ ist mit

$$S_{ij} = 47,45(II)^{-0,255} \dot{\epsilon}_{ij} \quad (61)$$

jetzt bekannt. Damit stellt diese Arbeit einen Schritt hin zur vollständigen Simulation von Haarwachs dar. In folgenden Arbeiten muss das Materialmodell für weitere Experimente verifiziert werden.

Die Möglichkeit, das Materialverhalten zu simulieren und damit vorherzusagen, bietet große Vorteile für die Herstellung und Handhabung von viskoelastischen Materialien wie z.B. Haarwachs. Bisher werden verstärkt Viskosimeter zur Überwachung von z.B. Abfüllprozessen eingesetzt. Durch Simulation des Materialverhaltens kann auf Viskosimeter, die bisher zur Prozessüberwachung benötigt werden, verzichtet werden. Dies spart Geld und durch z.B. weniger Wartungsaufwand auch Zeit.

7 Literaturverzeichnis

- [1] Abali, B. E., *Projekt Simulationstools und ihre Anwendung*, Vorlesungsmitschriften, Technische Universität Berlin, WS12/13
- [2] Ahmed, J., Ramaswamy, H., *Viscoelastic properties of sweet potato puree infant food*, Department of Food Science and Agricultural Chemistry, Macdonald Campus of McGill University, Ste. Anne de Bellevue, Canada, 2005
- [3] Ancy, C., *Introduction to Fluid Rheology*, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne, Schweiz, 2005
- [4] Gunasekaran, S., Ak, M., *Dynamic oscillatory shear testing of foods - selected applications*, University of Wisconsin-Madison, USA, Istanbul Technical University, Turkey, 2000
- [5] Hying, K., *Analyse der viskoelastischen Eigenschaften von Poly(tetrafluorethylen) im Bereich des β -Übergangs*, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2003
- [6] Juszcak, L., Witczak, M., Fortuna, T., Banys, A., *Rheological properties of commercial mustards*, Department of Analysis and Evaluation of Food Quality, University of Agriculture, Krakow, Poland, 2003
- [7] Wu, C., *Inverse Analyse für die Parameterbestimmung in nicht-linearen rheologischen Modellen mittels Rheometermessungen*, Institut für Mechanik, Technische Universität Berlin, 2012
- [8] Yilmaz, M., Karaman, S., Cankurz, H., Kayacier, A., Sagdic, O., *Steady and dynamic oscillatory shear rheological properties of ketchup-processed cheese mixtures: Effect of temperature and concentration*, Food Technology Department, Erciyes University, Kayseri, Turkey, 2010
- [9] *Computational Reality C – Beyond FEniCS*: http://www.lkm.tu-berlin.de/menue/forschung/computational_reality, Zugriff am 01.02.2013
- [10] *Introductory Guide To Using An AR Series Rheometer*: <http://www.bu.edu/becf/downloads/BioInterface%20Technologies/Guide%20to%20Set%20up%20Rheometer.pdf>, Zugriff am 22.02.2013
- [11] *Rheologie von kolloidalen Suspensionen*: http://www.chemie.uni-bayreuth.de/pci/de/lehre/23489/kc_rheologie.pdf, Zugriff am 05.12.2012

8 Anhang

8.1 Quellcode: Lineares Materialgesetz

```
from dolfin import*
import numpy

import scipy
import scipy.interpolate
import scipy.optimize
import scipy.integrate

#read data from file
omega, Temperature, t, stress, strain,
delta,G_storage,G_loss=numpy.loadtxt('wax_T30_new.csv', delimiter=',',
unpack=True)

G_storage_data=scipy.interpolate.interp1d(omega,G_storage,bounds_error=False,fill_value=0.0)
G_loss_data=scipy.interpolate.interp1d(omega,G_loss,bounds_error=False,fill_value=0.0)

def storage_fit(omega,a,b,c):
    return (b+a*c*omega**2)/(1+a**2*omega**2)

def loss_fit(omega,a,b,c):
    return ((c-a*b)*omega)/(1+a**2*omega)

def residual(param,G_storage_data,G_loss_data, x,storage_fit,loss_fit):
    return numpy.sqrt(((G_storage_data(x)-
storage_fit(x,*param))/G_storage_data(x))**2+((G_loss_data(x)-
loss_fit(x,*param))/G_loss_data(x))**2)

def cost(param,G_storage_data,G_loss_data, x ,storage_fit,loss_fit):
    return numpy.sum(residual(param,G_storage_data,G_loss_data,
x,storage_fit,loss_fit)**2,axis=0)

# dimension of x-space, number of experiments
m=omega.size
# number of them to be taken for fit in cross validation
m=round(m*0.7)
# initial guess, as a range for Monte-Carlo
prange=[numpy.arange(0,100,1),numpy.arange(0,10000,1),numpy.arange(0,100,1)
]
numpy.seterr(all='ignore')

# fitting on a random set and testing with another set
montecarlo=6
number_of_trials=0
error_min=10e10
penalty=10e6
from copy import deepcopy
x_=deepcopy(omega)

fpr= open('alM_potocol.txt','w')
while number_of_trials<10000:
    if montecarlo>5:
        p1 =prange[0][numpy.random.random_integers(0,len(prange[0])-1)]
        p2 =prange[1][numpy.random.random_integers(0,len(prange[1])-1)]
        p3 =prange[2][numpy.random.random_integers(0,len(prange[2])-1)]
        param0 =[p1,p2,p3]
```

```

        montecarlo=0
        numpy.random.shuffle(x_)
        param_lsq=scipy.optimize.leastsq(residual,
param0,args=(G_storage_data,G_loss_data, x_[:m],storage_fit,loss_fit))
        param=param_lsq[0]
        montecarlo+=1
        error=cost(param,G_storage_data,G_loss_data,
x_[:m],storage_fit,loss_fit)
        if error<error_min:
            chosen_param=param
            error_min= error
            print'parameters: ',param,' error on test set: ', error, \
' @ ',number_of_trials
            fpr.write('parameters: '+repr(param)+' error on test set:
'+repr(error)+' @ '+repr(number_of_trials)+'\n')
            #print number_of_trials
            number_of_trials+=1

fpr.close()

import matplotlib.pyplot as plt
plt.plot(omega,G_storage,'+r',markersize=15, label="$G'$")
plt.plot(omega,
storage_fit(omega,chosen_param[0],chosen_param[1],chosen_param[2]),'-
or',markersize=5, label="Fit $G'$")
plt.plot(omega,G_loss,'+g',markersize=15, label="$G''$")
plt.plot(omega,loss_fit(omega,chosen_param[0],chosen_param[1],chosen_param[
2]),'-og',markersize=5, label="Fit $G''$")

plt.ylabel("$G',G''$ [Pa]")
plt.ylim([0,4000])
plt.xlabel('$\omega$ [rad/s]')
plt.title(r'$\sigma + a\dot{\sigma}=b\varepsilon + c\dot{\varepsilon}$')
plt.legend(loc='best')
plt.grid(True)

plt.savefig('alM.png')

```

8.2 Quellcode: Herschel-Bulkley Modell

```
from dolphin import*
import numpy as np

import scipy
import scipy.interpolate
import scipy.optimize
import scipy.integrate
from scipy.integrate import simps as integrate

#read data from file
omega, Temperature, t, stress, strain, delta, G_1, G_11
=np.loadtxt('wax_T30_new.csv', delimiter=',', unpack=True)

energy4=0.5*strain**2*G_1 +0.25*np.pi*strain**2*G_11
energy1=np.pi*strain**2*G_11

en_4 =scipy.interpolate.interpld(omega,
energy4,bounds_error=False,fill_value=0.0)
en_1 =scipy.interpolate.interpld(omega,
energy1,bounds_error=False,fill_value=0.0)

def residual(param, en_1, en_4, omega, eps_0):
    a,b=param[0],param[1]
    res=np.zeros(len(omega))
    for idx,x in enumerate(omega):
        time_f=np.linspace(0.,2.*np.pi/x,100)
        integrand_f=abs(np.cos(x*time_f))**(b+1)

        f_1=a*eps_0[idx]**(b+1)*x**(b+1)*integrate(integrand_f,time_f)
        time_q=np.linspace(0.,0.5*np.pi/x,100)
        integrand_q=abs(np.cos(x*time_q))**(b+1)

        f_4=a*x**(b+1)*eps_0[idx]**(b+1)*integrate(integrand_q,time_q)
        res[idx]=(en_1(x)- f_1)**2+(en_4(x)- f_4)**2
    return np.sqrt(res)

def cost(param, data1,data11, x ,eps_0):
    return np.sum(residual(param, data1, data11, x, eps_0)**2,axis=0)

# dimension of x-space, number of experiments
m=omega.size
# number of them to be taken for fit in cross validation
m=round(m*0.7)
# initial guess, as a range for Monte-Carlo
prange=[np.arange(0,10.,1),np.arange(0,1.,0.01)]
np.seterr(all='ignore')

# fitting on a random set and testing with another set
montecarlo=6
number_of_trials=0
error_min= np.inf
penalty=10e6

fpr= open('HB_energyfit_new_log.txt','w')
while number_of_trials<10000:
    if montecarlo>5:
        p1 =prange[0][np.random.random_integers(0,len(prange[0])-1)]
        p2 =prange[1][np.random.random_integers(0,len(prange[1])-1)]
```

```

        param0 =[p1,p2]
        montecarlo=0
        cv=np.arange(0,len(omega)-1,1)
        np.random.shuffle(cv)
        param_lsq=scipy.optimize.leastsq(residual, param0,args=(en_1, en_4,
omega[cv[:m]], strain[cv[:m]]))
        param=param_lsq[0]
        montecarlo+=1
        error=cost(param, en_1, en_4, omega[cv[m:]], strain[cv[m:]])#cross
validation
        if error<error_min:
            chosen_param=param
            error_min= error
            print 'parameters: ',param,' error on test set: ', error, \
' @ ',number_of_trials
            fpr.write('parameters: '+repr(param)+' error on test set:
'+repr(error)+' @ '+repr(number_of_trials)+'\n')
            #print number_of_trials
            number_of_trials+=1

fpr.close()

```

8.3 Quellcode: Simulation

```
from dolphin import*
import pylab
from numpy import array
import numpy as np

shear_stress_data,shear_rate_data,viscosity,time,temperature,normal_stress=
\
np.loadtxt('waxT30_shear.csv', delimiter=',',unpack=True)

parameters["form_compiler"]["cpp_optimize"]=True
parameters["form_compiler"]["log_level"]=CRITICAL
#-----solver for incremental nonlinear scheme
pwd='/home/jan-willem/Documents/New_Data/FEM/Paraview/'

class iterate(NonlinearProblem):
    def __init__(self, a, L,bc,exter_B):
        NonlinearProblem.__init__(self)
        self.L=L
        self.a=a
        self.bc=bc
        self.exter=exter_B
    def F(self, b, x):
        assemble(self.L, tensor=b,exterior_facet_domains=self.exter)
        for condition inself.bc:condition.apply(b,x)
    def J(self, A, x):
        assemble(self.a, tensor=A,exterior_facet_domains=self.exter)
        for condition inself.bc:condition.apply(A)
#-----intial values
class init_values(Expression):
    def eval(self,vec,x):
        vec[0]=0.0
        vec[0]=0.0
    def value_shape(self):
        return(2,)

#-----space
xlength=188.4955#D=60mm
ylength=1.0476#30mm*tan(2)

mesh=Rectangle(0.,0.,xlength,ylength,320,4)
D=mesh.topology().dim()

V=VectorFunctionSpace(mesh,'CG',1)
T=TensorFunctionSpace(mesh,'CG',1)

left=compile_subdomains('x[0] == 0.0')
right=compile_subdomains('x[0] == xlength')
right.xlength=xlength
bottom=compile_subdomains('x[1] == 0.0')
top=compile_subdomains('x[1] == ylength')
top.ylength=ylength

neumann_domains=MeshFunction("uint", mesh, D-1)
neumann_domains.set_all(0)
top.mark(neumann_domains,1)
traction=Expression(('tim','0.0'),tim=0.)

class PeriodicBoundary(SubDomain):
```



```

def inside(self, x,on_boundary):
    #left side is x[0]=-xlength/2
    return x[0]<+1.e-5and x[0]>-1.e-5andon_boundary
def map(self, y, x):
    #this maps right side x[0]=xlength to the left
    x[0]=y[0]-xlength
    x[1]=y[1]

bc=[DirichletBC(V,(0.,0.), bottom),DirichletBC(V.sub(1),0.,top),\
    PeriodicBC(V,PeriodicBoundary())]

du=TrialFunction(V)
delu=TestFunction(V)
u00=Function(V)
u0=Function(V)
u=Function(V)
S=Function(T)
S0=Function(T)
Deps0=Function(T)

print 'initializing time in secons'
t=0.0
dt=0.5
tend=60

init=init_values()
u.interpolate(init)
u0.assign(u)
u00.assign(u0)

rho0=1.e-3#g/mm3
a,b=47.45533195,0.48958172

i,j,k,r= indices(4)
delta= Identity(2)

F=as_tensor(delta[i,j]+ u[i].dx(j),[i,j])

eps=as_tensor(1.0/2.0*(u[i].dx(k)+ u[k].dx(i)),[i,k])
eps0=as_tensor(1.0/2.0*(u0[i].dx(k)+u0[k].dx(i)),[i,k])
Deps=as_tensor((eps[i,j]-eps0[i,j])/dt,[i,j])
IId=as_tensor(1./2.*(Deps[i,j]*Deps[i,j]+0.000001),())
S=as_tensor(a*IId**((b-1.)/2.)*Deps[i,j],[i,j])
N=FacetNormal(mesh)

Form=(rho0/dt/dt*(u-2.*u0+u00)[i]*delu[i]+F[i,k]*S[r,k]*delu[i].dx(r))*dx \
    -traction[i]*delu[i]*ds(1)

Gain=derivative(Form, u, du)

file_u=File(pwd+'displacement.pvd')

# fuersPlotten
time_values=[0.0]

solver=NewtonSolver('lu')
solver.parameters['convergence_criterion']='incremental'
solver.parameters['relative_tolerance']=1.0e-2
solver.parameters['absolute_tolerance']=1.0e-5
solver.parameters['maximum_iterations']=20

pylab.rc('font', size=34)

```

```

pylab.rc('lines',markersize=14,linewidth=8)
pylab.figure(1,figsize=(20,16), dpi=70)
pylab.xlabel(r'$\dot{\varepsilon}$ [1/s]')
pylab.ylabel(r'$S_{12}$ [Pa]')
pylab.grid()

shear_rate, stress = [], []

while t<tend:
    t+=dt
    print 'time: ', t
    traction.tim=(200./tend)*t
    problem=iterate(Gain,Form,bc,neumann_domains)
    solver.solve(problem,u.vector())
    file_u<<(u,t)
    time_values.append(t)
    S0.assign(project(S,T))
    Deps0.assign(project(Deps,T))
    u00.assign(u0)
    u0.assign(u)
    P=(xlength,ylength)
    sig12=S0(P)[1]
    sr=Deps0(P)[1]
    shear_rate.append(sr)
    stress.append(sig12)
    pylab.plot(array(shear_rate_data),array(shear_stress_data),'k+',
label='Messdaten')
    pylab.plot(array(shear_rate), array(stress),'ro--',
label='Simulation')
    pylab.savefig('HB_new.png')
    pylab.legend(['Messdaten','Simulation'])

```