



FORSCHUNGSBERICHT

Erweiterung des Anwendungsbereichs für Schmelzesimulationen von Ko-Knetern

Schmelzesimulation Ko-Kneter 2

Alina Heihoff, Tanja Matzerath, Rebecca Wolff, Hatice Malatyali, Johannes Rudloff, Benjamin Baudrit, Thomas Hochrein, Martin Bastian, Christian Bonten

Bildung & Forschung

SKZ – Das Kunststoff-Zentrum

Danksagung

Das Vorhaben 01IF22721N der Forschungsvereinigung Fördergemeinschaft für das Süddeutsche Kunststoff-Zentrum e.V. (FSKZ) wurde über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen "Otto von Guericke" (AiF) und den DLR-Projektträger im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

Wir danken allen am Projekt beteiligten Firmen und Mitarbeitenden der Forschungseinrichtungen.

Kurzfassung

Das Ziel des Projekts bestand darin, das Prozessverständnis von Ko-Knetern durch eine Kombination aus numerischen, analytischen und experimentellen Untersuchungen zu erweitern und zu vertiefen. Das Erzielen einer optimalen Mischwirkung bei möglichst geringer Materialbelastung ist ein zentrales Ziel der Polymeraufbereitung. Wo konventionelle Aufbereitungskonzepte an ihre Grenzen stoßen, bieten spezielle Mischaggregate wie der Ko-Kneter Lösungsansätze. Für die experimentellen Untersuchungen wurde ein Labor-Ko-Kneter mit Messtechnik zur Druck- und Temperaturbestimmung ausgestattet und in einem breiten Versuchsplan Zylindertemperaturen, Drehzahlen und Durchsätze variiert. Zur Optimierung der analytischen Modellierung wurden Korrekturfaktoren eingeführt. Zudem wurde das Druckaufbauverhalten betrachtet und festgestellt, dass durch eine geeignete Wahl der Kennzahlen der Förder- und Rückstromverhältnisse die Darstellung des Strömungsverhaltens verbessert werden konnte. Die Übereinstimmung zwischen der analytischen Modellierung und den experimentell bestimmten Daten konnte somit erhöht werden. Eine breite Datenbasis für weitere Forschungstätigkeiten ist vorhanden. Darüber hinaus wurde erfolgreich ein dreidimensionales Simulationsmodell für den Ko-Kneter-Prozess aufgebaut, das die komplexe Bewegung der Schnecke, bestehend aus Rotation und Translation, realistisch abbildet. Dabei wurde die Strukturviskosität der Kunststoffschmelze berücksichtigt. Das entwickelte Modell ist auf verschiedene Schneckenelemente übertragbar und ermöglicht eine detaillierte Analyse der Strömungsbedingungen. Abschließend wurde durch eine Übertragung auf den weitverbreiteten Doppelschneckenextruder gezeigt, dass eine generelle Anwendbarkeit der Berechnungsansätze auf andere Extrudertypen möglich ist.

Abstract

The aim of the project was to expand and deepen the process understanding of co-kneaders through a combination of numerical, analytical and experimental investigations. Achieving an optimum mixing effect while minimizing material stress is a key objective of polymer processing. Where conventional processing concepts reach their limits, specialized extruders such as the co-kneader offer solutions. For the experimental investigations, a laboratory co-kneader was equipped with measuring equipment to determine pressure and temperature. Barrel temperature, screw speed and feed rate were varied in a comprehensive experimental plan. Correction factors were introduced to optimize the analytical modeling. Additionally, the pressure build-up within the extruder was examined. It was found that the representation of the flow behavior could be improved by selecting suitable parameters for feed and backflow ratios. The agreement between the analytical modelling and the experimentally determined data could thus be increased. A broad database for further research activities is available. In addition, a three-dimensional simulation model for the co-kneading process was successfully developed, which realistically depicts the complex movement of the screw, consisting of rotation and translation. The structural viscosity of the plastic melt was also taken into account. The developed model can be transferred to different screw elements and enables a detailed analysis of the flow conditions. Finally, by transferring the model to the widely used twin-screw extruder, it was shown that the calculation approaches can be generally applied to other extruder types.

1Einleitung11.1Anlass für Forschungsvorhaben11.2Problemstellung21.3Zielsetzung22Stand der Technik42.1Ko-Kneter42.2Simulation in der Compoundierung52.3Eigene Vorarbeiten63Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels114Materialcharakterisierung124.1Eingesetze Materialien124.2Rheologische und thermodynamische Untersuchungen124.2.1Viskosität124.2.2Dichte154.2.3Enthalpie und Wärmekapazität164.2.4Zusamenfassung165Experimentelle Untersuchungen185.1.1Aufbau der Versuchsanlage185.1.2Temperaturmessungen205.1.3Druckmessungen215.1.4Verweilzeitmessungen225.1.5Ermittlung des Füllgrads235.1.6Datenaufnahme245.2DSE255.2.1Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden255.2.2Versuchsplanung266Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1.1Temperaturverlauf276.1.2Druckverlauf.316.1.3Einflussfaktoren auf den Füllgrad35	Pro	jekts	teckbri	ef	III			
1.1Anlass für Forschungsvorhaben11.2Problemstellung21.3Zielsetzung22Stand der Technik42.1Ko-Kneter42.2Simulation in der Compoundierung52.3Eigene Vorarbeiten63Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels114Materialcharakterisierung124.1Eingesetzte Materialien124.2Rheologische und thermodynamische Untersuchungen124.2.1Viskosität124.2.2Dichte154.2.3Enthalpie und Wärmekapazität164.2.4Zusammenfassung165Experimentelle Untersuchungen185.1.1Aufbau der Versuchsanlage185.1.2Temperaturmessungen205.1.3Druckmessungen215.1.4Verweilzeitmessungen225.1.5Ermittlung des Füllgrads235.1.6Datenaufnahme245.2DSE255.2.1Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden255.2.2Versuchsplanung266Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1.1Temperaturverlauf316.1.3Einflussfaktoren auf den Füllgrad316.1.3Einflussfaktoren auf den Füllgrad356.1.4Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1.2Druckverlauf31 <tr< th=""><th>1</th><th colspan="7">Einleitung</th></tr<>	1	Einleitung						
2Stand der Technik.42.1Ko-Kneter42.2Simulation in der Compoundierung52.3Eigene Vorarbeiten63Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels114Materialcharakterisierung124.1Eingesetzte Materialien124.2Rheologische und thermodynamische Untersuchungen124.2.1Viskosität124.2.2Dichte154.2.3Enthalpie und Wärmekapazität164.2.4Zusammenfassung165Experimentelle Untersuchungen185.1.1Aufbau der Versuchsanlage185.1.2Temperaturmessungen205.1.3Druckmessungen215.1.4Verweilzeitmessungen225.1.5Ermittlung des Füllgrads235.1.6Datenaufnahme245.2Versuchsplanung245.2Versuchsplanung266Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1.1Temperaturrealuf276.1.2Druckverlauf316.1.3Einflussfaktoren auf den Füllgrad35		 Anlass für Forschungsvorhaben Problemstellung Zielsetzung 						
2.1 Ko-Kneter 4 2.2 Simulation in der Compoundierung 5 2.3 Eigene Vorarbeiten 6 3 Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels 11 4 Materialcharakterisierung 12 4.1 Eingesetzte Materialien 12 4.2 Rheologische und thermodynamische Untersuchungen 12 4.2.1 Viskosität 12 4.2.2 Dichte 15 4.2.3 Enthalpie und Wärmekapazität 16 4.2.4 Zusammenfassung 16 5 Experimentelle Untersuchungen 18 5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27	2	Stan	nd der T	ſechnik	4			
3 Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels 11 4 Materialcharakterisierung 12 4.1 Eingesetzte Materialien 12 4.2 Rheologische und thermodynamische Untersuchungen 12 4.2.1 Viskosität 12 4.2.2 Dichte 15 4.2.3 Enthalpie und Wärmekapazität 16 4.2.4 Zusammenfassung 16 5 Experimentelle Untersuchungen 18 5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Dr		 2.1 Ko-Kneter 2.2 Simulation in der Compoundierung 2.3 Eigene Vorarbeiten 						
4Materialcharakterisierung124.1Eingesetzte Materialien124.2Rheologische und thermodynamische Untersuchungen124.2.1Viskosität124.2.2Dichte154.2.3Enthalpie und Wärmekapazität164.2.4Zusammenfassung165Experimentelle Untersuchungen185.1Ko-Kneter185.1.2Temperaturmessungen205.1.3Druckmessungen215.1.4Verweilzeitmessungen225.1.5Ermittlung des Füllgrads235.1.6Datenaufnahme245.2DSE255.2.1Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden255.2.2Versuchsplanung266Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter276.1.1Temperaturverlauf316.1.3Einflussfaktoren auf den Füllgrad35	3	Lösi	ungswe	g zur Erreichung des Forschungsziels	11			
4.1 Eingesetzte Materialien. 12 4.2 Rheologische und thermodynamische Untersuchungen 12 4.2.1 Viskosität 12 4.2.2 Dichte 15 4.2.3 Enthalpie und Wärmekapazität. 16 4.2.4 Zusammenfassung 16 5 Experimentelle Untersuchungen 18 5.1 Ko-Kneter 18 5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 31 <	4	Mat	erialch	arakterisierung				
5 Experimentelle Untersuchungen 18 5.1 Ko-Kneter 18 5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35		4.1 4.2	Einges Rheold 4.2.1 4.2.2 4.2.3 4.2.4	setzte Materialien ogische und thermodynamische Untersuchungen Viskosität Dichte Enthalpie und Wärmekapazität Zusammenfassung				
5.1 Ko-Kneter 18 5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35	5	Exp	erimen	telle Untersuchungen				
5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage 18 5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35		5.1	Ko-Kr	neter				
5.1.2 Temperaturmessungen 20 5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.1	Aufbau der Versuchsanlage				
5.1.3 Druckmessungen 21 5.1.4 Verweilzeitmessungen 22 5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.2	Temperaturmessungen	20			
5.1.4 Verweilzeitmessungen			5.1.3	Druckmessungen	21			
5.1.5 Ermittlung des Füllgrads 23 5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.4	Verweilzeitmessungen				
5.1.6 Datenaufnahme 24 5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.5	Ermittlung des Füllgrads				
5.1.7 Versuchsplanung 24 5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.6	Datenaufnahme	24			
5.2 DSE 25 5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			5.1.7	Versuchsplanung				
5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden 25 5.2.2 Versuchsplanung 26 6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen 27 6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter 27 6.1.1 Temperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35		5.2	DSE					
6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen			5.2.1	Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden				
6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen	(Б	5.2.2					
6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter	0	Erg	ebnisse	der experimentellen Untersuchungen	Z /			
6.1.1 1 emperaturverlauf 27 6.1.2 Druckverlauf 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35		6.1	Ergebr	nsse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter				
6.1.2 Druckvernau 31 6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad 35			0.1.1	I emperaturveriaui				
			0.1.2	Druckverlaul				
6 1 4 Hintlusstaktoren auf die kumulierte Leistung 38			611	Einflussfaktoren auf die kumulierte Leistung				
6.2 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am DSE 40		6.2 Fraehnisse der experimentellen Untersuchungen am DSF						

7	Ana	lytische	e Modellierung	42		
	7.1	Vergleich der experimentell bestimmten und der berechneten Daten				
		7.1.1	Temperaturverlauf	42		
		7.1.2	Druckverlauf	43		
		7.1.3	Füllgrad	44		
		7.1.4	Kumulierte Leistung	45		
	7.2	Einfüh	rung von Korrekturfaktoren	46		
	7.3	Kennz	ahlenvariation	49		
8	Nun	nerisch	e Simulation	52		
	8.1	Modifi	izierung der Simulationssoftware foamExtend	52		
		8.1.1	Implementierung der Ko-Kneter-Bewegung	52		
		8.1.2	Implementierung zweier strukturviskoser Viskositätsmodelle	53		
		8.1.3	Implementierung der Energiegleichung und des Arrhenius-Faktors	s55		
	8.2	Simula	ationsaufbau des Ko-Kneters	55		
	8.3	ationsergebnisse	58			
		8.3.1	Förderelement C2	58		
		8.3.2	Knetelemente KN und KL	61		
		8.3.3	Elementübergänge zwischen Förderelement und Knetelement	66		
		8.3.4	Nicht-Isotherme Simulation	74		
		8.3.5	Doppelschnecke	76		
		8.3.6	Vergleich DSE mit dem Ko-Kneter	80		
9	Zus	ammen	fassung	82		
10	Abb	ildungs	sverzeichnis	85		
11	Lite	ratur		91		
12	Anh	ang		97		
		9				

Projektsteckbrief

Das Erzielen einer optimalen Mischwirkung bei möglichst geringer Materialbelastung ist ein zentrales Ziel der Polymeraufbereitung. Wo konventionelle Aufbereitungskonzepte an ihre Grenzen stoßen, bieten spezielle Mischaggregate wie der Ko-Kneter Lösungsansätze. Limitiertes Prozesswissen und ein Mangel an Vorhersagemöglichkeiten anhand unterstützender Prozessmodelle machen die Auswahl des richtigen Mischaggregats sowie die Anlagen- und Prozessauslegung kosten- und zeitintensiv. Um dem entgegenzuwirken, bedarf es verbesserter Simulationsansätze. Die Vorhersage von Modellen für den Ko-Kneter ist aktuell zu stark vereinfachend. Zudem ist die Allgemeingültigkeit der Methoden nicht ausreichend nachgewiesen.

Ziel dieses Projekts ist daher, das Prozessverständnis von Ko-Knetern durch eine Kombination aus numerischen, analytischen und experimentellen Untersuchungen weiter zu erhöhen. Im Rahmen des Projekts werden zunächst für sechs Materialien die erforderlichen Materialdaten ermittelt und beschrieben. Mit diesen Materialien wurden Extrusionsversuche sowie analytische und numerische Simulationen unter Variation der Prozessparameter wie Durchsatz, Drehzahl und Schneckengeometrie durchgeführt. Die Ergebnisse machen auftretende Effekte im laufenden Prozess verständlich. Darauf aufbauend erfolgt die Optimierung der Modelle. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist bedingt zufriedenstellend. Abschließend wird durch eine Übertragung auf den weitverbreiteten Doppelschneckenextruder gezeigt, dass eine generelle Anwendbarkeit der Berechnungsansätze möglich ist.

Die Projektergebnisse ermöglichen Anwendern eine effektivere Gestaltung und Optimierung von Aufbereitungsprozessen. Eine breite Datenbasis für weitere Forschungstätigkeiten, beispielsweise zur weiteren Optimierung der Modelle, ist vorhanden. Ein gesteigertes Prozessverständnis führt zudem zu einer schnelleren Produktentwicklung, einer höheren Produktqualität und somit zur Steigerung der Wettbewerbsfähigkeit, wodurch besonders kleine und mittlere Unternehmen (kmU) ihre Position am Markt festigen können.

IGF-Projekt Nr. 22721 N:

"Erweiterung des Anwendungsbereichs für Schmelzesimulationen von Ko Knetern"

Dauer: 01.12.2022 bis 30.11.2024

Unterstützt durch den projektbegleitenden Ausschuss:

- acano Gmbh
- BASF SE
- Buss AG
- C4PP Consulting for Polymer Processing
- Condor Compounds GmbH
- Coperion GmbH
- Covestro Deutschland AG
- Dennert Poraver GmbH
- emendo-tec GmbH

- Extricom Extrusion GmbH
- FOS Messstechnik GmbH
- IANUS Simulation GmbH
- RITTEC Umwelttechnik GmbH
- Sciences Computers Consultants
- TER HELL PLASTIC GmbH
- Think Tank Technologies (TTT)
- Wacker Chemie AG
- Wikki GmbH
- X-Compound GmbH

1 Einleitung

1.1 Anlass für Forschungsvorhaben

Polymere Werkstoffe sind aus dem heutigen Alltag nicht mehr wegzudenken. Dies spiegelt sich auch in der Produktion von Kunststoffen, Kautschuken und Klebstoffen wider: 2019 produzierten in Deutschland 200 Unternehmen 18,2 Millionen Tonnen Kunststoff. Die Kunststoffindustrie, bestehend aus Kunststofferzeugung, Verarbeitung und Maschinenbau, umfasste 2019 insgesamt rund 3.510 Unternehmen. Die Kunststoffverarbeitung bildet dabei mit ca. 3.060 Unternehmen den Großteil und ist sehr stark von kmU geprägt. Somit erzielten rund 421.000 Beschäftigte in diesem Bereich einen Umsatz von 97 Milliarden Euro [1]. Aufgrund der hohen Nachfrage nehmen die Polyolefine sowie das Polyvinylchlorid (PVC) in der Verarbeitung einen großen Anteil ein: Polyethylen (PE) mit 29,8%, Polypropylen (PP) mit 19,4% und PVC mit 10% [2]. Dennoch ist die Materialvielfalt der unterschiedlichen Kunststofftypen darüber hinaus sehr groß. Zudem gibt es innerhalb einer Materialklasse wiederum eine Vielzahl von Typen und Compounds, die sich in den Eigenschaften, wie Viskosität oder Füllstofftyp und -anteil, unterscheiden. Auch in der deutschen Kautschukindustrie werden Polymere hergestellt und verarbeitet. 2019 wurden mit 73.300 Beschäftigten rund 1,5 Millionen Tonnen Kautschuk hergestellt und ein Umsatz von ca. 11 Milliarden Euro erzielt [3]. Die Materialvielfalt ist dabei sogar noch größer als in der Kunststoffindustrie, da jeder Verarbeiter im Allgemeinen seine eigenen Mischungen einsetzt und diese auch selbst herstellt. Fast jedes dieser Materialien durchläuft mindestens einmal eine Schneckenmaschine. Insbesondere bei der Aufbereitung der Materialien spielen Extruder eine bedeutende Rolle. Dabei werden die Ausgangspolymere unter anderem durch das Mischen mit Additiven, weiteren Polymeren und/oder Verstärkungsstoffen zu einem Compound verarbeitet. Eine wesentliche Anforderung an einen Extruder ist dabei eine möglichst hohe Mischwirkung bei minimalem Energieeintrag. Die für diese Aufgabe verbreitetste Maschine ist der gleichläufige Doppelschneckenextruder (DSE) [4]. Für Mischaufgaben, bei denen der DSE an seine verfahrenstechnischen Grenzen stößt, sind weitere Mischaggregate, wie Ko-Kneter, Planetwalzenextruder (PWE), Ringextruder oder auch andere dynamische Inline-Mischer verfügbar. Wissenschaftliche Untersuchungen und Anwendungen in der Praxis zeigen, dass mit Spezialextrudern Polymere aufbereitet werden können, die mit DSE nicht mehr zu verarbeiten sind [5, 6]. Diese Erkenntnisse basieren allerdings weitestgehend auf empirischen Untersuchungen und Erfahrung der auslegenden Ingenieure. Auch für dynamische Inlinemischer wie sie bspw. vom kmU INDAG angeboten werden [7], stellt sich die Lage ähnlich dar [8]. Der Grund dafür ist, dass im Gegensatz zum DSE kaum Prozessmodelle und damit keine analytisch oder numerisch basierten Simulationsprogramme zur Auslegung dieser Extruder vorliegen. Selbst für die gut erforschten DSE führt die Materialbandbreite zu Herausforderungen bei der Anwendbarkeit von Modellen. Diese Herausforderungen fallen mit fortschreitender Digitalisierung von Prozessen zunehmend ins Gewicht. Für den Ko-Kneter (und auch den PWE) wurden deshalb von den Forschungseinrichtungen SKZ und IKT in den letzten Jahren erste Modelle entwickelt [9-17], die sowohl eine 1D-Berechnung des Gesamtextruders als auch eine 3D-Berechnung einzelner Schneckenelemente ermöglichen.

Bezüglich des Ko-Kneters stehen erstmals Tools zur Berechnung wichtiger Prozessgrößen des Ko-Kneters zur Verfügung. Das 1D-Tool "SimKo" zur Berechnung von Füllgrad, Temperaturentwicklung und Energieeintrag entlang des Ko-Kneters basiert auf analytischen Betrachtungen. SimKo wird durch die Simulationsmethodik für numerische 3D-Berechnungen mittels der neuartigen Immersed Boundary Methode (IBM) von vollgefüllten Schneckensegmenten ergänzt. Die dabei erzielten Fortschritte der IBM ermöglichen darüber hinaus den effizienten Einsatz der Methode auch für andere Mischaggregate und sind daher von Prozessbzw. branchenübergreifender Bedeutung.

1.2 Problemstellung

Für eine großflächige industrielle Anwendung der Berechnung der Prozesse des Ko-Kneters sind weitere Forschungs- und Entwicklungsarbeiten notwendig. Insbesondere sind folgende Herausforderungen dabei relevant:

- Die Modelle wurden bis jetzt nur mit wenigen Materialsystemen experimentell validiert. Obwohl der Modellierungsansatz das Abbilden einer Vielzahl von Materialsystemen zulässt, fehlen noch experimentelle Untersuchungen. Dies ist nötig, um die Genauigkeiten der Modelle für die große Bandbreite der auf dem Ko-Kneter verarbeiteten Materialien abschätzen zu können.
- Obwohl erste numerische Berechnungen des Ko-Kneters möglich sind, konnte der reale Prozess bisher nur bedingt dargestellt werden. Aufgrund der komplexen Geometrie- und Bewegungsbedingungen des Ko-Kneters in Kombination mit der Anwendung einer neuen Simulationsmethode traten vor allem bei der Variation von Prozessparametern wie Drehzahl und Durchsatz noch Abweichungen und Instabilitäten in den Simulationen auf.
- Bei der Compoundierung gewinnen insbesondere (hoch-)gefüllte Materialien zunehmend an Bedeutung. Diese können zum jetzigen Zeitpunkt sowohl für Spezialextruder als auch für DSE in Simulationen meist nicht korrekt erfasst werden.

Die zuvor genannten Herausforderungen können von kmU allein nur schwer überwunden werden. Deshalb sollten diese im Projekt, basierend auf den Ergebnissen des Vorgängerprojekts (18650 N), angegangen werden. Dadurch kann die Anwendbarkeit von Simulationen des Ko-Kneters für Unternehmen deutlich verbessert werden. Durch die Erkenntnisse des Projekts werden dabei insbesondere die Potentiale der IBM-Methode aufgezeigt. Zudem wird ihr Einsatz, gemeinsam mit experimentellen und analytischen Ergebnissen, für eine Verbesserung von komplexen Mischaggregaten- und Prozessen belegt. Die erfolgreiche Anwendung innerhalb dieses Projektvorhabens stellt somit einen exzellenten Demonstrator für eine Vielzahl weiterer Prozesse neben dem Ko-Kneter dar.

1.3 Zielsetzung

Das Prozessverständnis von Misch- und Aufbereitungsaggregaten für polymere Werkstoffe ist noch steigerungsfähig. Dies macht die Auslegung und Anwendung der Anlagen kosten- und zeitintensiv. Darüber hinaus verhindert ein mangelndes Prozesswissen die Potenziale einzelner Aggregate, wie etwa dem Ko-Kneter, voll auszuschöpfen. Dies steht sowohl einer weiteren Verbreitung der jeweiligen Anlagentypen als auch der Entwicklung neuer Materialien im Weg, für die z. B. ein besonders schonendes Mischen benötigt wird.

Ziel dieses Projekts ist deshalb, aufbauend auf den Ergebnissen des Vorgängervorhabens, für den Ko-Kneter, für den ein besonders hoher Handlungsbedarf besteht, eine Kombination aus numerischen, analytischen und experimentellen Untersuchungen zur Lösung dieser Problematik einzusetzen. Durch eine große Materialbandbreite wird eine Allgemeingültigkeit der Modelle erreicht. Über numerische Simulationen ist es außerdem erstmals möglich, ein besseres Verständnis der Verarbeitungsparameter wie bspw. die Scherrate zu erhalten. Die Weiterentwicklung der IBS ermöglicht, die komplexen Geometrien und Bewegungsabläufe eines Ko-Kneters abzubilden. Über Erweiterungen des Rechengebiets und der Implementierung strukturviskoser (temperaturabhängiger) Materialmodelle profitieren zudem analytische Modellierungsansätze. Darüber hinaus wird die Berechnung der Leistung im vollgefüllten Bereich optimiert. Über einen weiteren Abgleich mit erweiterten Experimenten wird somit die Qualität beider Simulationsmethoden verbessert. Vor allem durch die numerische Simulation ist es dann erstmals möglich, einen detaillierten Einblick in die Einflüsse der Verarbeitungsparameter auf bspw. die Scherrate zu bekommen. Die entwickelten Simulationsmodelle und Methodiken können somit für eine Vielzahl verschiedener Mischaggregate, wie sie auch in der Industrie Verwendung finden, übertragen, individuell angepasst und eingesetzt werden. Diese Übertragbarkeit wird durch die demonstratorhafte Anwendung auf ein weiteres Mischaggregat (DSE) nachgewiesen.

2 Stand der Technik

2.1 Ko-Kneter

Der Ko-Kneter ist eine spezieller Einschneckenextruder zur Aufbereitung und Modifizierung von Polymeren und anderen Stoffen [5, 6]. Im Gegensatz zu konventionellen Extrudern besteht das Maschinenkonzept des Ko-Kneters aus zwei separaten Einheiten: dem Ko-Kneter als eigentliches Verfahrensteil und einem Austragssystem (siehe Abbildung 2-1, links).



Abbildung 2-1: Ko-Kneter Gesamtaufbau (links, [18]) und Aufnahme eines Förderelements Typ C1 und eines Mischelements (Typ KN) eines MX30 BUSS Ko-Kneters (rechts).

Die Schnecke des kontinuierlich arbeitenden Ko-Kneters führt sowohl eine rotatorische als auch eine translatorische Bewegung durch. Um einen kontinuierlichen Materialaustrag zu gewährleisten, erfolgt daher die Kopplung mit einem (Einschnecken-) Austragsextruder. Durch die Kombination der oszillierenden Bewegung der Schnecke in axialer Richtung mit den stationären Knetzähnen, die von der Zylinderwand aus in den Zwischenraum der Schneckenstege ragen, werden der Materialtransport und der Mischeffekt gewährleistet [19]. Gleichzeitig führt dieser Aufbau zu einer guten Selbstreinigung. Dieses Forschungsprojekt konzentriert sich auf das Verfahrensteil des Kneters.

Das Verfahrensteil (vgl. Abbildung 2-1, links) aller Maschinentypen besteht aus dem axial teilbaren Schneckengehäuse und der modular aufgebauten Schnecke. Da die in den Schneckenkanal ragenden Knetzähne kein klassisches Schneckenziehen und -rüsten ermöglichen, muss das Gehäuse auf die Schnecke gesetzt werden. Dosiermöglichkeiten für Polymere, Additive und Füllstoffe bestehen einerseits über den sogenannten Haupteinzug, andererseits nach dem Aufschmelzen des Polymers über weitere modulare Zugabestellen, die mit Rückwärtsentgasungen versehen sind. Das System kann zudem atmosphärisch und mit Vakuum entgast werden. Durch den modularen Aufbau kann der Prozess an die jeweilige Anforderung genau angepasst werden. Die Schneckenstege der Schneckenelemente sind nicht durchgängig, sondern in Schneckenflügel unterteilt, um den stationären Knetzähnen bei der Hubbewegung der Schnecke Platz einzuräumen. Ein gutes distributives Mischen resultiert dabei aus der Überlagerung von Radial- und Längsmischeffekten [18]. Zum Aufbau der Schnecke stehen verschiedene Elemente zur Verfügung [18, 20]. Förderelemente sind an einer Stelle unterbrochen und übernehmen vorwiegend eine Förderung von Feststoff und Granulat. Knetelemente sind in verschiedenen Ausführungen vorhanden und bringen je nach Typ unterschiedliche Scherung in den Kunststoff ein. Beide Elementtypen sind exemplarisch in Bild 1 (rechts) dargestellt. Dabei handelt es sich um ein Förderelement (Typ C1) und ein vierflügeliges Knetelement mit breiten Flügeln (Typ KN) eines Ko-Kneter Typ MX30 der Fa. Buss, Pratteln, Schweiz. Bei geeigneter Prozessführung können der Schereintrag und damit die Massetemperatur potentiell konstant gehalten werden, wodurch auch die Verarbeitung von scher- und temperatursensitiven Materialien möglich wird. Aufgrund der guten Regelbarkeit des Prozesses werden Ko-Kneter vielfältig eingesetzt, wobei die genauen Vorgänge dabei noch unzureichend erforscht sind [21, 22].

2.2 Simulation in der Compoundierung

Die simulative Auslegung von Compoundierextrudern, insbesondere DSE, erlangte über die Jahre hinweg eine breite Akzeptanz bei Anlagenherstellern und Verarbeitern [4]. Dieser Entwicklungsstand beruht auf einer kontinuierlichen Forschung. Dabei reicht die Entwicklung für DSE von ersten ganzheitlichen 1D-Simulationsansätze in den 90er Jahren [23, 24] über eine Weiterentwicklung der Modelle zur Berechnung des Energieeintrags und Förderung [25, 26] bis hin zu spezifischen Modellen wie z.B. für das Einarbeiten von mineralischen Füllstoffen oder Fasern [27, 28]. Große Bedeutung für eine realitätsnahe Prozesssimulation kommt auch immer den Materialdaten zu, die aktuell als scherverdünnende Schmelze häufig über den Carreau-Ansatz beschrieben werden [29]. Obwohl DSE-Simulationen in der Industrie bereits etabliert sind, führt die große Materialbandbreite bei der Polymeraufbereitung immer wieder zu Problemen. Modelle zur Beschreibung von Dehneffekten oder hochgefüllter Systeme sind in Simulationsumgebungen häufig noch nicht oder nur unzureichend vorhanden. Auch die Grenzen scherverdünnender Materialmodelle sind in der industriellen Anwendung häufig unbekannt, wodurch es zu fehlerhaften Berechnungen und Auslegung kommen kann.

Für DSE werden zur Simulation neben den analytischen Berechnungen verstärkt auch numerische Untersuchungen herangezogen. Potente et al. untersuchten beispielsweise mit einer Finite-Elemente-Methode (FEM) in Kombination mit analytischen Betrachtungen die Temperaturentwicklung entlang des Schneckenkanals sowie die Energieaufnahme in verschiedenen Bereichen des Extruders. Er erweiterte seine Untersuchungen auf eine abgewickelte Extrudergeometrie, um das Förderverhalten, die Verweilzeitverteilung und die Mischgüte spezieller Mischelemente zu ermitteln [30-32]. Bravo et al. simulierte die Strömung durch zwei Knetscheiben und verglich die Ergebnisse mit Experimenten [33]. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes, jedoch mit der Einschränkung, dass nur für einen speziellen Durchsatz von 60 U/min gute Ergebnisse erzielt werden konnten. Herken simulierte einen gleichlaufenden DSE auf Basis einer "Fictitious Boundary Method" (FBM), Hétu und Ilnica verwendeten eine FEM IBM und Helmig verwendet eine sog. "boundary-conforming" FEM für die Simulation von DSE [34], [35], [36]. Andere Versuche, um DSE zu simulieren, verwenden zudem die sogenannte "Smoothed Particle Hydrodynamics" (SPH), eine Lagrange-Methode zur Simulation von Strömungen, ohne das zeitaufwändige Erzeugen von Volumennetzen. Weitere Details zur SPH sind beschrieben in [37], [38], [39]]. Im Hinblick auf die Kunststofftechnik verwendete Habla eine IBM in Kombination mit einer Volume of Fluid Methode, um eine viskoelastische Zweiphasenströmung in einem DSE zu simulieren [40]. Der in OpenFOAM implementierte Solver wurde jedoch nicht validiert. Zusammenfassend wurden in den letzten zehn Jahren erhebliche Fortschritte in der numerischen Simulation von DSE erreicht. Es gibt aber noch wesentliche Limitierungen bei steigender Komplexität, z. B. hinsichtlich Geometrie oder Materialsystem. Zudem muss für alle Extrusions- und Mischaggregate durch anwendungsorientierte Forschung die Anwendbarkeit in der Industrie insbesondere für kmU gesteigert werden. Damit beschäftigen sich z. B. auch aktuelle Forschungsarbeiten für dynamische Inline-Mischer [8].

Die Untersuchung und Beschreibung des Prozessverhaltens von Ko-Knetern ist, wie für die meisten Spezial-Aufbereitungsaggregate, durch die geometrischen und kinematischen Verhältnisse und deren Funktionsweisen, verglichen mit dem DSE, deutlich anspruchsvoller. Modelle für Ein- und Mehrschneckensysteme können daher nicht ohne Weiteres auf das Prozessverhalten von Ko-Knetern übertragen werden. Zur Untersuchung und Beschreibung des Prozessverhaltens von Ko-Knetern ist zudem kaum wissenschaftlich fundierte Literatur vorhanden. Die wenigen Arbeiten beschäftigen sich vorwiegend mit der eindimensionalen, analytischen Beschreibung des Schmelzetransports [20-22, 41-47]. Die Ergebnisse dieser Arbeiten können allerdings nur begrenzt in der Industrie angewandt werden, da wichtige Prozessbedingungen, wie der Einfluss der Pins, die Temperaturabhängigkeit oder das strukturviskose Fließverhalten, vernachlässigt werden. Alle Arbeiten beschränken sich zudem auf Elemente von dreiflügeligen Ko-Knetern, wobei heute auch Kneter mit vierflügeligen Elementen im Markt etabliert sind. Abgesehen davon ist jedoch das größte Hindernis für eine industrielle Anwendung der Modelle, dass diese in keinem Simulationstool implementiert sind, welches die notwendigen Auslegungsschritte für modular aufgebaute Extruder schon frühzeitig bestimmt. Dies steht in Kontrast zu den aktuellen Simulationsmöglichkeiten gleichläufiger DSE, für die mit SIGMA des KTP, MO-REX der Fa. Aixtrusion und LUDOVIC der Fa. SCC drei etablierte 1D-Simulationsprogramme kommerziell verfügbar sind. Zudem ist es möglich, die Schmelzeförderung in DSE für einzelne, vollgefüllte Schneckenabschnitte numerisch zu simulieren.

Um die Lücke zum DSE ein Stück weit zu schließen, wurde sowohl am SKZ als auch am IKT damit begonnen, Simulationsmethoden für Auslegungen am Ko-Kneter voranzutreiben. Die durchgeführten Arbeiten werden im Abschnitt zu den eigenen Vorarbeiten näher erläutert. Die Forschungsarbeiten zum DSE zeigen in diesem Zusammenhang, dass für die Etablierung und industrielle Anwendbarkeit eines solchen Berechnungstools die kontinuierliche Weiterentwicklung und Erweiterung essenziell sind. Die industrielle Gemeinschaftsforschung bietet hierfür durch die Zusammenarbeit der relevanten Experten aus Forschung und Industrie den optimalen Rahmen.

2.3 Eigene Vorarbeiten

Die zwei Forschungseinrichtungen SKZ und IKT konnten bereits im gemeinsamen Vorgängervorhaben zum Thema Vorhersage und Optimierung des Ko-Kneter-Prozesses ihre jeweiligen Stärken bündeln, um den Ko-Kneter-Prozess für Polyethylen (PE) und Polystyrol (PS) mit numerischen sowie analytischen Methoden zu untersuchen. Die für das vorliegende Forschungsprojekt relevanten Ergebnisse werden im Folgenden zusammengefasst.

Am SKZ wurde für den Ko-Kneter ein Vorgehen genutzt, das bereits erfolgreich für den PWE eingesetzt wurde [9–11, 15, 16]. In den analytischen Modellen wurde die Geometrie des Ko-Kneters über Geometrieparameter beschrieben. Diese orientieren sich an den Parametern konventioneller Einschneckenextruder und wurden um spezifische Größen, wie

Anzahl und Breite von Pins und Nuten erweitert. Darauf aufbauend wurde über eine Überlagerung der Strömungen in den Nuten und in den Kanälen eine dimensionslose Beschreibung der Strömungsverhältnisse im Ko-Kneter durchgeführt. Die Massetemperaturentwicklung wurde über eine energetische Bilanzierung beschrieben. Die im Excel-Tool SimKo gekoppelten Modelle zeigen im Abgleich mit experimentellen Daten insbesondere für PE eine gute Übereinstimmung. Simulationen von Füllgrad, Verweilzeiten, Leistungen und Temperaturen sind trotz der vielen Annahmen und Vereinfachungen bei der Modellierung mit der erreichten Ergebnisgüte von DSE-Simulationen vergleichbar. Hervorzuheben ist dabei, dass die Modelle bisher ohne experimentell ermittelte, materialspezifische Korrekturfaktoren auskommen. Für PS werden die Tendenzen ebenfalls gut wiedergegeben, allerdings weichen insbesondere die berechneten Leistungen und Verweilzeiten stark von den experimentellen Ergebnissen ab (Bild 2, links und mittig unten). Dies ist vermutlich auf einen zu gering berechneten Füllgrad in den teilgefüllten Elementen zurückzuführen. Dieser unterscheidet sich stark zwischen PE und PS und liegt für PE im betrachteten Versuchsfeld unter 20 % und für PS bei über 50 % (Bild 2, rechts). Im Modell wird der Füllgrad über das Verhältnis von dosiertem Volumenstrom zu einem maximal drucklos förderbaren Volumenstrom berechnet. Der dosierte Volumenstrom ist ein Eingabeparameter und der drucklos förderbare Volumenstrom ist nur geringfügig von den Materialdaten, Viskosität und Dichte, abhängig.



Abbildung 2-2: Vergleich von simulierten und gemessenen Verweilzeiten (links) und Leistungen (Mitte) sowie experimentellen ermittelten Füllgraden (rechts) an einem spezifischen Prozesspunkt für PE (oben) und PS (unten).

Am **IKT** wird bereits seit mehreren Jahren an dreidimensionalen numerischen Simulationen der Transportvorgänge innerhalb verschiedener Kunststoff-Verarbeitungsverfahren geforscht [14, 48–57]. Hierzu wird unter anderem die quelloffene C++ Simulationssoftware OpenFOAM (Open <u>Field Operation And Manipulation</u>) [58, 59] eingesetzt, welche durch ihren modularen Aufbau und frei zugänglichen Quellcode den Nutzern einen uneingeschränkten Zugriff und somit die Neu- und Weiterentwicklung von Simulationsmodellen ermöglicht. Ein Themenschwerpunkt bildete in der Vergangenheit auch die Vorhersage verschiedener Kunststoff-Verarbeitungsprozesse anhand der IBM in *foam-extend* – einer community-getriebenen Version von OpenFOAM. Bei der IBM werden zur Beschreibung des dreidimensionalen Strömungsraums ein Hintergrundnetz (Rechennetz) und zusätzlich ein Oberflächengitter zur Abgrenzung des Festkörpers eingesetzt. Anders als bei körperangepassten Netzen (Abbildung 2-3, A) wird bei der IBM das Oberflächennetz in das Hintergrundnetz eingetaucht und die Randbedingungen an den "geschnittenen" Zellen der Geometrie ins Hintergrundnetz eingebracht (Abbildung 2-3, B).



Abbildung 2-3: Gegenüberstellung körperangepasster Netze (A) und Netze für die Verwendung der IBM (B) [60].

Auf die Weise können mithilfe der IBM komplexe Geometrien einfach vernetzt und auch ohne aufwendige Gitterverschiebungsalgorithmen bewegt gerechnet werden. Im Vergleich zu anderen (körperangepassten) Simulationsmethoden muss lediglich das Oberflächennetz bewegt werden, während das Volumennetz (Hintergrundnetz) statisch bestehen bleibt. Dies bringt generell einige Vorteile mit sich, die unter anderem auch bei der Kinematik von Ko-Knetern und dabei in den Interaktionen zwischen Knetflügel und Pins zum Tragen kommen. Verfahren mit komplexen Bewegungen und ineinandergreifenden Elementen, wie bspw. DSE, PWE und auch Ko-Kneter, können mit körperangepassten Methoden nur unter großem Aufwand realitätsnah berechnet werden. Hier stellt die IBM eine sehr vielversprechende Methode dar. In der Literatur sind viele verschiedene IBM-Ansätze zu finden, die jeweils eigene Charakteristika aufweisen und verschiedenste Fragestellungen adressieren. Auf Einzelheiten der verschiedenen IBM-Ansätze soll hier jedoch nicht im Detail eingegangen werden und für eine Übersicht wird auf weiterführende Literatur verwiesen [61–66]. Im Rahmen des Projekts wurde die sog. Immersed Boundary Surface Methode (IBS) verwendet. Die IBS wurde von Prof. H. Jasak [67] an der Universität Zagreb entwickelt und ist in foam-extend (Version 4.1) implementiert. Die IBS basiert auf einem modifizierten Cut-Cell Ansatz, bei der sich jedoch die geschnittenen Zellen physisch nicht ändern, sondern lediglich die Zelleinträge in der Diskretisierungsmatrix entsprechend angepasst werden. Für eine ausführlichere Beschreibung der Funktionsweise, Umsetzung und Anwendung der IBS wird auf [67] sowie auf vergangene Arbeiten am IKT verwiesen [17, 68–71]. Zudem wurde die IBS am IKT bereits umfassend verifiziert und erstmals experimentell validiert [70]. Dieses umfassende Forschungsfeld und eine Anwendung der IBS auf verschiedenste Kunststoff-Verarbeitungsverfahren hat sich unter anderem auch aus dem Vorgängerprojekt ergeben, bei dem bereits zum Ende hin erste dreidimensionale Simulationen von Ko-Knetern mit der IBS erfolgreich durchgeführt werden konnten [72].

Im Vorgängerprojekt wurde bereits die überlagerte Schneckenbewegung eines Ko-Kneters erfolgreich in *foam-extend* implementiert und mit der IBS verknüpft [72]. Die überlagerte Bewegung ist über die Eingabe der Drehzahl in U/min und der Hublänge in m voll definiert und entspricht den realen Prozessparametern eines Ko-Kneters. Zudem konnte die stationären sowie transienten IBS-Strömungslöser um eine temperaturabhängige Berechnung in Kombination mit einem Carreau-Viskositätsmodell [73, 74] und einem Arrhenius-Temperaturverschiebungsfaktor [75] erweitert werden. Da die IBS damals jedoch noch sehr neu war, konnten vollumfängliche 3D-Simulationen lediglich am Ende der Projektlaufzeit realisiert werden. Eine vollumfängliche Studie mit real bewegten 3D-Simulationen war demnach nicht möglich und war deshalb Schwerpunkt in diesem Forschungsprojekt. Anhand vereinfachter Geometrien und stationären Berechnungen konnten im Vorgängervorhaben bereits erste Erkenntnisse zur eingebrachten Scherung erarbeitet werden [14, 72] (siehe Abbildung 2-4).



Abbildung 2-4: Geschwindigkeitsverteilung einer Ko-Kneter-Geometrie an verschiedenen Flügelpositionen.

Die stark vereinfachten (körperangepassten) Geometrien erwiesen sich im Vorgängerprojekt als praktikabel für eine erste Abschätzung der Scherrate, insbesondere da anhand der IBS zu diesem Zeitpunkt noch keine stabilen Simulationen möglich waren. Aussagen über die Förderwirkung und den Druckverlust der einzelnen Elemente waren jedoch damit nicht möglich. Erste 3D-Berechnungen eines Ko-Kneters anhand der IBS erwiesen sich dahingehend als sehr vielversprechend für zukünftige Untersuchungen [72]. Die Ergebnisse dieser Berechnungen sind in Abbildung 2-5 visualisiert.



Abbildung 2-5: 3D-Berechnung eines Ko-Kneters anhand der IBS: Druck (links), Geschwindigkeitsprofil (mittig) und Schergeschwindigkeit (rechts).

Dass die IBS mittlerweile vollumfänglich einsetzbar ist, zeigen die Ergebnisse aus vergangenen Arbeiten. Hier wurde die Methode erfolgreich zur Simulation der Mischzone in der Einschneckenextrusion angewendet und ein Saxton-Mischer dreidimensional berechnet (Abbildung 2-6, links) [71]. Der Saxton-Mischer besitzt zwar eine relative komplexe Geometrie, kann aber aufgrund seiner einfachen Bewegung im Gegensatz zum Ko-Kneter auch konventionell (körperangepasst) gerechnet werden. Aus diesem Grund wurden hier die Ergebnisse beider Methoden (körperangepasste Berechnungen und IBS) miteinander verglichen, um die IBS zu verifizieren. Die Ergebnisse der Vergleiche aus konventionellen Simulationen (boundary-fitted, BF) und IBS zeigen sowohl im Geschwindigkeitsprofil (Abbildung 2-6, mittig) als auch im analysierten Druckverlust (Abbildung 2-6, rechts) eine gute Übereinstimmung. Die IBS-Simulationen konvergierten zudem schneller und stabiler, was an der deutlich einfacheren Netztopologie des Hintergrundnetzes im Vergleich zum relativ komplexen körperangepassten Rechennetz liegt.



Abbildung 2-6: Vergleich zwischen konventioneller Simulation (BF) und IBS anhand des Saxton-Mischers [71].

Des Weiteren konnte die IBS in der Vergangenheit bereits erfolgreich auf komplexere Verarbeitungsverfahren mit mehreren ineinandergreifenden Elementen angewendet werden. Hier konnte in einem IGF-Projekt mit der Vorhabennummer 19920 N erfolgreich ein PWE sowohl zwei- wie auch dreidimensional berechnet werden [17]. Auf Basis der simulativ ermittelten Schergeschwindigkeiten in Abhängigkeit von verschiedenen Betriebs- und Geometriegrößen konnten letztlich analytische Berechnungsansätze optimiert und weiterentwickelt werden. Zudem konnten erfolgreich dreidimensionale Simulationen von DSE durchgeführt werden, um die Druck- und Geschwindigkeitsverhältnisse bei Variation verschiedener Elemente näher zu charakterisieren (siehe Abbildung 2-7). Im Rahmen dieser Untersuchungen konnte zudem gezeigt werden, dass die IBS parallele Berechnungen vollumfänglich unterstützt und somit auch sehr umfangreiche Modelle gerechnet werden können. Dies ist auch für künftige dreidimensionale Berechnungen von Ko-Knetern von großer Bedeutung, um auch hier größere Ausschnitte der schmelzedominierten Verfahrenszonen eines Ko-Kneters zu rechnen.



Abbildung 2-7: Geschwindigkeitsprofil des Förderelements (links), eines Mischelements (mittig) und eines Knetelements (rechts) nach einer kompletten Umdrehung (Zeit = 0,5 s).

3 Lösungsweg zur Erreichung des Forschungsziels

In dem Projekt wurde zur Lösung der in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Problematik durch eine Kombination aus numerischen Simulationen und experimentellen Untersuchungen das Prozessverständnis zum Ko-Kneter erhöht. Hierfür wurden zunächst Materialien (u.a. LDPE, HDPE, PS, PA6) ausgewählt und die relevanten Materialdaten (Viskosität, Dichte, Wärmekapazität etc.) bestimmt und in die üblichen Materialmodelle überführt. Im Anschluss erfolgten experimentelle Untersuchungen am Ko-Kneter mit Fokus auf die Materialvariation. Zusätzlich wurden verschiedene Verfahrensparameter betrachtet, Druck- und Temperaturdaten aufgezeichnet und die Füllgrade über sog. Dead-Stop-Versuche bestimmt. Mittels numerischer Strömungssimulationen, im Speziellen mit der IBS-Methode, wurde der Prozess dreidimensional simuliert. Die Simulationssoftware foamExtend wurde dafür erweitert, um zum einen das strukturviskose Fließverhalten der Kunststoffschmelze sowie hochgefüllte Schmelzen zu berücksichtigen (Carreau- und Carpow-Ansatz). Zum anderen musste die komplexe Bewegungsform (Kombination zwischen Rotation und Translation) in foamExtend implementiert werden. Anschließend wurden Förder- und Knetelemente sowie Elementübergänge zwischen Förder- und Knetelement simulativ für verschiedene Materialien betrachtet. Darüber hinaus wurden materialspezifische experimentelle Korrekturfaktoren für die analytischen Ko-Kneter-Modelle hergeleitet. Diese sollten die Berechnung des Füllgrad in teilgefüllten Bereichen und damit auch die Leistung korrigieren. Folgend wurden die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen, numerischen Simulationen und analytischen Berechnungen miteinander abgeglichen und analysiert. Zudem wurden die vorangegangenen Ergebnisse und Programmentwicklungen auf den DSE übertragen. Experimentelle Untersuchungen wurden mit einem Materialsystem (LDPE) im kurzen Aufbau durchgeführt und als Referenz für die Abbildung der Prozesse verwendet. Aus den Ergebnissen der Versuche am Ko-Kneter, DSE und der Simulationsrechnungen konnten abschließend Handlungsempfehlungen abgeleitet und Empfehlungen für die Maschinenkonfiguration und Einstellparameter für die jeweiligen Materialsysteme formuliert werden.

4 Materialcharakterisierung

In diesem Kapitel werden die eingesetzten Materialien vorgestellt und die Analyse der rheologischen und thermodynamischen Eigenschaften der Materialien gezeigt.

4.1 Eingesetzte Materialien

Zu Beginn des Projekts erfolgte die Materialauswahl in Abstimmung mit dem projektbegleitenden Ausschuss (pbA). Hauptfokus bei der Werkstoffauswahl war, vor allem ein möglichst breites Eigenschaftsspektrum verschiedener Kunststoffe abzubilden. Die Viskosität, die hier als Kennwert genutzt wurde, wurde bei einer Scherrate und Temperatur bei mittleren Prozessbedingungen gewählt.

Folgende Materialien wurden ausgewählt und beschafft:

- HDPE M1053 der Fa. Sabic, Riad, mit einer Viskosität von ca. 560 Pa s bei einer Scherrate von 30 s⁻¹ und 200 °C
- LDPE Lupolen 2420 F, der Fa. LyondellBasell, Rotterdam, mit einer Viskosität von ca. 1390 Pa s bei einer Scherrate von 30 s⁻¹ und 200 °C
- PS 158 N, der Fa. Ineos Styrolution, Frankfurt, mit einer Viskosität von 1600 Pa s bei 30 s⁻¹ und 200 °C
- Ultramid B27, ein Polyamid 6 der Fa. BASF, Ludwigshafen, mit einer Viskosität von ca. 92 Pa s bei einer Scherrate von 30 s⁻¹ und 260 °C
- Glashohlkugeln der Fa. PoraComp, Schlüsselfeld, Korngröße 80-180 μm zum Eincompoundieren in HDPE M1053

Die Glashohlkugeln wurden mit Massenanteilen von 10 bzw. 20 % in HDPE M1053 (folgend als "HDPE-10 GC" bzw. "HDPE-20 GC" bezeichnet) eincompoundiert. Somit standen zwei weitere Werkstoffe für die Untersuchungen zur Verfügung.

4.2 Rheologische und thermodynamische Untersuchungen

Für eine exakte Beschreibung der Vorgänge im Kneter durch mathematisch-physikalische Modelle müssen die Materialsysteme analysiert und ihr Verhalten bei unterschiedlichen Einflüssen exakt beschrieben werden. Dafür ist insbesondere die Kenntnis über die rheologischen und thermodynamischen Eigenschaften essenziell.

4.2.1 Viskosität

Die rheologische Untersuchung der eingesetzten Kunststoffgranulate erfolgte mittels Kapillarrheometer Rheograph 20 der Firma Göttfert Werkstoff-Prüfmaschinen GmbH, Buchen. Hierbei wurden für die vier PE-Typen (HDPE M1053, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC, LDPE Lupolen 2420 F) jeweils drei Einzelmessungen bei 180, 200 und 220 °C durchgeführt. Für das PA6 (Ultramid B27) wurden drei Einzelmessungen bei 240, 260 und 280 °C und für das PS 158 N bei 170, 190 und 210 °C durchgeführt. Dazu wurden scheinbare Schergeschwindigkeiten in logarithmischen Schritten von 10 bis 2500 s⁻¹ vorgegeben, so dass sieben Viskositätspunkte pro Materialprobe aufgezeichnet werden konnten (vgl. Abbildung 4-1 bis Abbildung 4-6). Mittels des Carreau-Arrhenius- (für M1053, Lupolen 2420 F, Ultramid B27, PS 158 N) bzw. des Carpow-Arrhenius-Ansatzes (für HDPE-10 GC, HDPE-20 GC) wurde die Viskosität für jeweils eine Bezugstemperatur modelliert und die Viskositätsverläufe auf niedrige Schergeschwindigkeiten extrapoliert (vgl. Tabelle 4-1). Für PA6 konnte die Messung nicht optimal durchgeführt werden, da sehr geringe Messdrücke auftraten.



Abbildung 4-1: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des LDPE Lupolen 2420 F.



Abbildung 4-2: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 170 °C des PS 158 N.



Abbildung 4-3: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 240 °C des PA6 Ultramid B27.



Abbildung 4-4: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des HDPE M1053.



Abbildung 4-5: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des HDPE-10 GC.



Abbildung 4-6: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des HDPE-20 GC.

Alle Materialien zeigen den für Thermoplaste typischen strukturviskosen Verlauf. Zudem ist erkennbar, dass PS und LDPE ähnliche Viskositätsverkäufe zeigen. HDPE hingegen zeigt eine weniger ausgeprägte Scherviskosität und eine deutlich niedrigere Viskosität bei 200 °C. Durch das Eincompoundieren der Glashohlkugeln verschob sich der Viskositätsverlauf des HDPE zu höheren Viskositäten.

4.2.2 Dichte

Neben der Kenntnis des Fließverhaltens ist auch die Dichte-Volumen-Funktion in Abhängigkeit von der Temperatur (pvT) speziell für die numerische Simulation zu ermitteln. Mittels Hochdruckkapillarrheometer (Rheograph 20, Fa. Göttfert Werkstoff-Prüfmaschinen GmbH, Buchen) wurde für die entsprechenden Temperaturbereiche die Kurven für unterschiedliche Drücke aufgezeichnet (vgl. Anhang, Abbildung 12-1 bis Abbildung 12-6).

Alle gewonnenen Daten werden später in der numerischen Simulation über die eingerichteten Funktionen genutzt, um das Materialverhalten in unterschiedlichen Strömungssegmenten darstellen zu können.

4.2.3 Enthalpie und Wärmekapazität

Die spezifischen Wärmekapazitäten und die spezifischen Enthalpien für die eingesetzten Materialien wurden über den relevanten Temperaturbereich ermittelt. Die Messung erfolgte mittels DSC (Phoenix 204 F1, Fa. Netzsch-Gerätebau GmbH). Durch die Integration der spezifischen Wärmekapazität über die Temperatur lässt sich die spezifische Enthalpie berechnen (vgl. Tabelle 4-1).

4.2.4 Zusammenfassung

Die in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Materialdaten bzw. Modelldaten der verschiedenen untersuchten Materialien sind in Tabelle 4-1 zusammengefasst. Diese dienen als Input-Parameter für die in den Kapiteln 7 und 8 beschriebene analytische bzw. numerische Simulation.

Tabelle 4-1: Relevante Materialdaten bzw. entsprechende Modelldaten der verschiedenen Materialien.

Parameter	HDPE	LDPE	PS	PA6	HDPE-10 GC	HDPE-20 GC
Carreau-Parameter A in Pa \cdot s	915,0	18.482,8	40.880,95	1327,6	1248,0	1501,6
Carreau-Parameter <i>B</i> in s^{-1}	0,02	1,4	1,26	605,8	0,03	0,03
Carreau-Parameter C in –	0,52	0,63	0,72	0,18	0,49	0,51
Aktivierungsenergie E_0 in J · mol ⁻¹	28231,10	51628,30	107100,73	120069,78	33896,51	36553,99
Bezugstemperatur $T_{\rm b}$ in °C	180	180	170	240	180	180
Startwert Dichte Feststoff ρ_{S0} in kg \cdot m ⁻³	953	923	1050	1130	998	1060
Steigung $\rho_{\rm S,m}$ in kg \cdot m ⁻³ \cdot K ⁻¹	0	0	0	0	0	0
Startwert Dichte Schmelze $ ho_{M0}$ in kg \cdot m ⁻³	860	860	936	959	794	892
Steigung $\rho_{M,m}$ in kg \cdot m ⁻³ \cdot K ⁻¹	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
Wärmekapazität Feststoff $c_{p,S0}$ in kJ \cdot kg ⁻¹ \cdot K ⁻¹	1,56	2,05	1,00	0,84	1,78	1,74
Steigung $c_{p,S,m}$ in kJ · kg ⁻¹ · K ⁻²	0,00778	0,01407	0,00480	0,00837	0,00769	0,00719
Wärmekapazität Schmelze $c_{\mathrm{p,M0}}$ in kJ \cdot kg ⁻¹ \cdot K ⁻¹	2,52	2,56	1,57	2,30	2,44	2,37
Steigung $c_{p,M,m}$ in kJ · kg ⁻¹ · K ⁻²	0,00373	0,00545	0,00360	0,00131	0,00281	0,00276
Wärmeleitfähigkeit Feststoff λ_{S0} in $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	0,425	0,350	0,164	0,38	0,425	0,425
Steigung $\lambda_{S,m}$ in $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-2}$	0	0	0	0	0	0
Wärmeleitfähigkeit Schmelze λ_{M0} in $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	0,26	0,24	0,17	0,23	0,26	0,26
Steigung $\lambda_{M,m}$ in $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-2}$	0	0	0	0	0	0
Feststoffenthalpie $\Delta h_{\rm F}$ in J \cdot g ⁻¹	223	220	83	376	342	323
Aufschmelzenthalpie Δh_A in J \cdot g ⁻¹	227	127	0	182	645	592
Starttemperatur Schmelze $T_{\rm fl}$ in °C	145	122	110	225	139	139
Schüttdichte Granulat $\rho_{\rm G}$ in kg \cdot m ⁻³	629	587	657	640	300	300
Mittlerer Granulatkornradius \bar{r}_{G} in mm	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45	1,45

5 Experimentelle Untersuchungen

Zur Untersuchung der im Ko-Kneter auftretenden Wechselwirkungen zwischen Maschinenkonfiguration, Prozessparameter und Material wurden Messmethoden und Versuchspläne festgelegt, die verfahrenstechnisch möglich sowie anwendungsrelevant sind. Ziel dieser Untersuchungen ist die Ermittlung von Druck- und Temperaturgradienten sowie der Füllgrade mittels Dead-Stop-Versuchen zum Vergleich mit bzw. zur Validierung der in den folgenden Kapiteln beschriebenen analytischen bzw. numerischen Simulation. Neben der detaillierten Untersuchung der Prozesse im Ko-Kneter wurden auch Untersuchungen mit dem DSE durchgeführt, um die Übertragbarkeit der Erkenntnisse von Ko-Kneter auf DSE zu prüfen.

5.1 Ko-Kneter

Der Aufbau der Versuchsanlage mit den eingesetzten Messmethoden und die Prozessparameter der durchgeführten Versuche werden in diesem Kapitel vorgestellt.

5.1.1 Aufbau der Versuchsanlage

Für die Untersuchungen wurde der Labor-Ko-Kneter MX 30-22 F40-6, Baujahr 2014, Fa. Buss AG (Prattel, Schweiz) verwendet. Er besteht aus einem Verfahrensteil und einer Austragseinheit. Die Temperierung erfolgt elektrisch über Heizpatronen bzw. über Kühlrippen und Lüfter. Der MX 30 besitzt einen Schneckendurchmesser von 30 mm und beschreibt einen Hub von 5,5 mm. Verwendet wird die verlängerte 22 L/D Ausführung für höher gefüllte Compounds. In der verlängerten Ausführung kann mehr Sensorik untergebracht werden. Dadurch können innerhalb eines Versuchspunktes mehr Datenpunkte ermittelt werden. Der Ko-Kneter wurde in einer Standard-Schneckenkonfiguration (vgl. Abbildung 5-1) und in einer zweiten Konfiguration, benannt mit "Standard KN", verwendet.



Abbildung 5-1: Aufbau der Standardschnecke des Ko-Kneters MX-30 mit einem Stauringdurchmesser (RR) von 22 mm.

Bei der Standard KN-Konfiguration wurden die Knetelemente des Typs KL durch Knetelemente des Typs KN ausgetauscht. Die KN-Elemente besitzen im Vergleich zu KL-Elementen längere Flügel, wodurch der offene Gang zwischen den Flügeln geschlossen ist (Abbildung 5-2, rechts). Hierbei kommt eine stärkere Scherwirkung zustande, weil das Material über einen längeren Zeitraum zwischen Flanke und Knetbolzen geschert wird. Bei Teilfüllungen kann die Formmasse außerdem nicht durch offene Gänge ausweichen. Aufgrund dessen weisen KN-Elemente eine höhere Förderwirkung auf, was sich auf eine Verkürzung der Verweilzeit des Kunststoffes auswirkt [76]. Beim KL-Element hingegen sind die asymmetrisch geformten Knetflügel kürzer, weshalb die Gänge offen sind (Abbildung 5-2, links). Dadurch wird eine intensivere, axiale Durchmischung und Umorientierung der Masse gewährleistet. Die geringere Förderleistung der KL-Elemente spiegelt sich in höheren Füllgraden und Verweilzeiten wider [76].



Abbildung 5-2: Das KL-11-Element mit kurzen Flügeln und viel freiem Volumen (links) sowie das KN-11-Element mit langen Flügeln und wenig freiem Volumen (rechts) [76].

Die Versuche zur Analyse des Prozessverhaltens werden ohne druckaufbauende Austragsschnecke durchgeführt, da die Vorgänge im Verfahrensteil des Ko-Kneters MX-30 im Fokus dieser Arbeit stehen. Deshalb wird das Verfahrensteil des Kneters neben einer Verfahrensverlängerung, in die Bohrungen für Knetpins und Messsensoren integriert sind, um ein zusätzliches Drosselwerkzeug erweitert (vgl. Abbildung 5-3). Das Drosselwerkzeug wurde in der geöffneten Stellung verwendet, da es lediglich dem Materialaustrag diente.



Abbildung 5-3: Verfahrensverlängerung des Ko-Kneters inklusive Drosselsystem.

Die Verlängerung ist zweiteilig ausgeführt, was ein zeitgleiches Aufklappen mit dem Zylinder des Kneters ermöglicht, ohne vorher abmontiert werden zu müssen. Zur Messung des Druck- und Temperaturverlaufs ist ein adaptiertes Messsystem notwendig, weshalb in die Bohrungen der Verfahrensverlängerung Druck- und Temperatursensoren integriert werden. So können axiale Druckgradienten aufgenommen werden, über die sich Rückstaulängen bestimmen lassen.

Neben der Verfahrensverlängerung werden passgenaue Verschlussstopfen in zwei der vier Zylinderöffnungen eingebaut (vgl. Abbildung 5-4).



Abbildung 5-4: Verschlussstopfen mit Sensorbohrung.

Diese Bauteile ermöglichen zum einen die Entnahme der Schmelze im laufenden Betrieb, ohne den Prozessraum des Ko-Kneters öffnen zu müssen. Zum anderen erlauben die genormten Bohrungen die Integration weiterer Druck- und Temperatursensoren. Damit können entlang der Schneckenachse systemrelevante Temperatur- und Druckgradienten gemessen werden.

Daraus ergibt sich die Möglichkeit, entlang der Schneckenachse entweder Druck- oder Temperaturgradienten zu messen (vgl. Abbildung 5-1). Aufgrund des universellen Gewindes können aber auch Farbsonden für die Verweilzeitmessung oder andere Sensoren integriert werden. Mit der zusätzlichen Möglichkeit der Verwendung der Pin-Konfiguration als Messstelle bieten sich umfangreiche Optionen, Prozessdaten sowohl längs als auch radial der Schneckenachse aufzunehmen. Die Möglichkeit der Pin-Bestückung wird folgenden Kapitel erläutert.

Für die experimentelle Versuchsdurchführung stehen mehrere Messmethoden zur Verfügung, die in den folgenden Unterkapiteln vorgestellt werden. Neben inline-Messungen mit elektronischen Messmitteln wie Druck- und Temperatursensoren wurden auch visuelle Prüfungen durchgeführt.

5.1.2 Temperaturmessungen

Für die Temperaturmessungen stehen unterschiedliche Sensortypen zur Verfügung. Entlang des Verfahrensteils des Ko-Kneters befanden sich standardmäßig vier PT-100-Messfühler (vgl. Abbildung 5-5, T1 – T4) in hohlgebohrten Pins mit einer Länge von 3 mm. Die Fühler ermitteln die Temperatur der in die Schmelze ragenden Pins. Über T1 und T2 sollen die Temperaturen des Matrixmaterials vor und während des Aufschmelzvorgangs ermittelt werden. T3 und T4 geben die Temperaturen der Schmelze nach dem Aufschmelzen bzw. Dispergieren wieder.



Abbildung 5-5: Positionen der integrierten Temperatursensoren T1 – T4 sowie Positionen der eingebauten Sensoren für Temperaturmessungen (IR-1 – IR-4) und Druck (P1 – P3).

Zusätzlich zu den PT-100-Messfühlern wurden in die Pins IR-Sensoren des Typs IR Therm (Fa. FOS Messtechnik GmbH, Schacht-Audorf) eingebaut. Die IR-Temperatursensoren sollen den Unterschied der Massetemperatur in unterschiedlichen Bereichen des Schneckenkanals wiedergeben. IR-1 und IR-3 messen wandbündig, währen IR-2 und IR-4 über die Pins 2,5 mm tief in den Kanal ragen. Im Bereich der Position von IR-3 wird eine Radialmessung mit den IR-Sensoren durchgeführt. Alle Konfigurationen besitzen am Pin-Ende ein Saphirfenster zur IR-Strahlungsdetektion. Die erwarteten Vorteile beruhen auf dem physikalischen Messprinzip der Sensoren.

Alle Körper emittieren elektromagnetische IR-Strahlungen, die von IR-Temperatursensoren als elektrische Signale detektiert werden können. Eine präzise Wiedergabe des Temperaturverlaufs von 50 bis 400 °C wird durch die schnelle Ansprechzeit der IR-Temperatursensoren von ca. 10 ms erreicht. Eine Erhöhung der Schmelzetemperatur führt zu einem Anstieg der Strahlungsintensität und damit des messbaren Signals. Die Strahlungsemission erfolgt innerhalb eines zylindrischen Schmelzevolumens vor dem Saphirfenster, das durch den Durchmesser der Sensorspitze von 1,5 mm und materialabhängigen Messtiefen von 0,1 mm bis 1,0 mm begrenzt ist [77].

Zusätzlich wurde als Referenz die Massetemperatur beim Austritt aus der Drossel von Hand mit einem Einstechthermometer (ebro TFN 520 mit Messspitze TPN230/231, Fa. Xylem Analytics Germany Sales GmbH & Co. KG, Weilheim) gemessen.

5.1.3 Druckmessungen

Für die Druckmessung kamen drei Sensoren des Typs Impact Serie INO (Fa. Gefran SpA, Brescia, Italien) mit starrem Schaft zum Einsatz (vgl. Abbildung 5-5). Diese sind in der gepanzerten Version ausgeführt und können in einem Messbereich bis 350 bar eingesetzt werden sowie mit einer Abtastrate von 1000 Messungen pro Sekunde messen. Um die Messfrequenz zu verifizieren, werden im Abstand von zehn Sekunden Drucksignale durch Klopfen auf den Sensor ausgelöst. Die Kalibrierung des Druckwertes erfolgt durch einen Prüfstand, bei dem über Öldruck ein Druckverlauf bei variabler Temperatur abgefahren wird.

Läuft der Extruder thermisch stabil, wird die Druckmessung gestartet. Das Drucksignal der Sensoren wird in einer Messbox (Typ 2400-1-0-4R-3-1, ebenfalls Fa. Gefran SpA) gebündelt und über einen Analog-Digitalwandler (NI cDAQ-9188, Fa. National Instruments Corp., Austin, Texas, Vereinigte Staaten) an eine Recheneinheit zum Aufzeichnen

und Speichern weitergegeben (vgl. Abbildung 5-6). Die Ausgabe erfolgt als TDMS-Datei (National Instruments). Die Messwerte werden tabellarisch und als Spannung über die Zeitachse angegeben. Dabei entspricht 1 mV einem Druckwert von 35 bar. Das Zeitsignal wird auf Sekunden normiert und die Spannung in den entsprechenden Druck umgerechnet. Es werden 10 000 Messwerte zur näheren Betrachtung ausgewählt (66,6 Umdrehungen bei 400 Umdrehungen pro Minute).



Abbildung 5-6: Schematischer Messaufbau der Druckmessung.

5.1.4 Verweilzeitmessungen

Die Verweilzeit beschreibt bei der Kunststoffaufbereitung und -verarbeitung diejenige Zeit, die ein Material in den verschiedenen Zonen eines Extrusionssystems verbringt. Die chemischen und physikalischen Eigenschaften von Materialien werden durch Wärmeund Scherbeanspruchungen beeinflusst. Eine lange Verweilzeit kann beispielsweise zum Abbau der Molekülketten führen. Verweilzeitmessungen in Abhängigkeit von der Verfahrensparameter sind deshalb essentiell für das Auslegen und Optimieren von Compoundier- bzw. Extrusionsprozessen. Das Verweilzeitverhalten in Extrudern hat einen entscheidenden Einfluss auf die Produktqualität bei Dispergier-, Aufschmelz- und Mischvorgängen, Reaktionsabläufen oder auf thermische Abbaumechanismen. Da Extrusionsund Compoundiervorgänge zu den kontinuierlichen Prozessen mit Längsmischwirkung zählen, werden Verteilungen mit minimaler und mittlerer Verweilzeit gemessen (vgl. Abbildung 5-7) [4, 20].



Abbildung 5-7: Beispielhafte Darstellung einer Verteilungsfunktion mit minimaler Verweilzeit t_{\min} und mittlerer Verweilzeit.

Zur eigentlichen Messung der Verweilzeitverteilung wird eine geringe Menge an Tracer "impulsartig" in den laufenden Extrusionsprozess gegeben und mittels Farbsensor die Konzentration an einer oder mehreren Positionen gemessen. Dabei durchläuft nach einer bestimmten Totzeit t_{min} ein großer Teil des Tracers die Messstelle. Diese minimale Verweilzeit hängt hauptsächlich von der mittleren Verweilzeit, der Extrudergeometrie und dem strukturviskosen Materialverhalten ab. Nachdem eine maximale Intensität erreicht wurde, nimmt die Partikelanzahl langsam ab und eine "Verweilzeitschleppe" entsteht. Die mittlere Verweilzeit \overline{t} gibt an, wann 50 % der eingesetzten Partikelmenge die Messstelle durchlaufen haben (vgl. Abbildung 5-7) [78, 79].

Die mittlere Verweilzeit \bar{t} in einem Schneckenabschnitt lässt sich als Produkt aus dem freien Volumen V mit einem Füllgrad f im Verhältnis zum Durchsatz \dot{V} definieren:

$$\bar{t} = \frac{V \cdot f(N_0)}{\dot{V}}$$
 5-1

Dieses Verhältnis kann in Compoundierextrudern durch den Durchsatz bzw. Volumenstrom \dot{V} maßgeblich beeinflusst werden. Zusätzlich verändert die Drehzahl N_0 den Füllgrad f in den teilgefüllten Schneckenelementen signifikant, da der Füllgrad indirekt proportional zur Drehzahl ist.

Für die Verweilzeitmessungen wurde eine Reflexionssonde für opake Polymerschmelzen des Typs RPMP (Fa. ColVisTec AG, Berlin) verwendet. Die Aufnahme der Daten erfolgt über das Programm CVTtrend, v 1.7.62 zum Inline Process Monitoring (ebenfalls von der Fa. ColVisTech AG). Pro Versuchspunkt wurden fünf Messungen durchgeführt. Die Auswertung der gemessenen Signale erfolgt mit Hilfe einer Fitfunktion, die die Ver-

weilzeitverteilungsdichte beschreibt [31]:

$$f(t) = 4 \cdot A \cdot \exp\left(-\frac{t - t_{\min}}{B}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{t - t_{\min}}{B}\right)\right]$$
 5-2

Der Parameter A repräsentiert die Amplitude der Kurve, der Parameter B die Breite der Kurve an der Stelle halber Amplitude und t_{min} der minimalen Verweilzeit. Dabei ist wichtig, dass sich die Fläche unter der Verweilzeitkurve linear zur Tracermenge verhält.

Die Fläche unter der Funktion aus 5-2 entspricht folgendem Zusammenhang:

$$\int_{t_{\min}}^{\infty} f(t) dt = 2 \cdot A \cdot B$$
 5-3

Damit die Fläche unter der Funktion dem Wert "1" entspricht, erfolgt die Normierung der Gleichung 5-3:

$$f'(t) = \frac{f(t)}{2 \cdot A \cdot B} = \frac{2}{B} \cdot \exp\left(-\frac{t - t_{\min}}{B}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{t - t_{\min}}{B}\right)\right]$$
 5-4

Die anschließende Auswertung erfolgte durch das Fitten der aufgezeichneten Intensitäten der Signale mittels Gleichungen 5-2 und 5-4. Dadurch konnten die mittlere und minimale Verweilzeit bestimmt werden.

5.1.5 Ermittlung des Füllgrads

Ein Ziehen der Schnecke ist beim Ko-Kneter MX-30 nicht möglich, weil die in den Schneckenraum ragenden Pins die Schnecke blockieren. Daher werden über Dead-Stop-Untersuchungen mit dem aufklappbaren Zylinder die Rückstaulängen sowie die Voll- und Teilfüllungen innerhalb des Verfahrensteils des Ko-Kneters untersucht. Auf diese Weise können Voll- und Teilfüllungen zur Analyse der Schmelzeförderung bestimmt werden. Zur Untersuchung des Verlaufs des Füllgrads über die Zylinderlänge wurden drei Zonen festgelegt (vgl. Abbildung 5-8).



Abbildung 5-8: Zonen für die Bestimmung des Füllgradverlaufs über die Zylinderlänge.

Pro Versuchspunkt wurden zwei Dead-Stop-Versuche durchgeführt. Nachdem Bilder vom geöffneten Extruder aufgenommen wurden, erfolgte die Berechnung des Füllgrads f über die Bestimmung der entnommenen Schmelzemassen $m_{gemessen}$ aus den teilgefüllten Förderzonen:

$$f = \frac{m_{\text{gemessen}}}{m_{\text{max}}} = \frac{m_{\text{gemessen}}}{\rho \cdot \sum V_{\text{frei}}}$$
5-5

Die maximale Masse m_{max} , die sich in den Teilfüllungen anhäufen kann, ergibt sich aus dem Produkt der Dichte ρ des verwendeten Kunststoffgranulats und der Summe der freien Volumina V_{frei} der einzelnen Förderelemente. Die Berechnung des freien Volumens ergibt sich aus den geometrischen Größen der technischen Zeichnungen.

5.1.6 Datenaufnahme

Ergänzt werden die in den vorigen Unterkapiteln dargestellten Messmethoden durch die Ermittlung der Leistungsaufnahme über die Maschinensteuerung sowie die Aufnahme des dosierten Massestroms über gravimetrische Dosieraggregate.

In Kombination der gesamten Messmethoden, kontinuierlicher Protokollierung über Zeitintervalle, optischer Beurteilung und Überprüfung der Messergebnisse in mehreren unabhängigen Versuchsdurchführungen kann ein reproduzierbares Bild des Ko-Kneters und dessen Vorgängen gezeichnet werden.

5.1.7 Versuchsplanung

Fokus der Versuchsplanung lag auf einem Abfahren eines breiten Parameterfeldes mit insgesamt sechs Materialien. Der Durchsatz, die Drehzahl und die Zylindertemperatur wurden variiert (vgl. Tabelle 5-1).

Ver-	Material	Schnecken-	Temperatur /	Durchsatz /	Drehzahl /
suchsnr.		konfiguration	°C	kg h-1	U/min
V1	HDPE M1053	Standard	200	10	400
V2	HDPE M1053	Standard	200	10	600
V3	LDPE Lupolen 2420F	Standard	200	10	400
V4	LDPE Lupolen 2420F	Standard	200	10	600
V5	PS 158N	Standard	200	10	400
V6	PS 158N	Standard	200	10	600
V7	PA6 Ultramid B27	Standard	260	10	400
V8	PA6 Ultramid B27	Standard	260	10	600
V9	HDPE-10 GC	Standard	200	10	400
V10	HDPE-10 GC	Standard	200	10	600
V11	HDPE-20 GC	Standard	200	10	400
V12	HDPE-20 GC	Standard	200	10	600
V13	HDPE M1053	Standard	200	5	400
V14	HDPE M1053	Standard	200	8	400
V15	HDPE M1053	Standard	200	10	500
V16	HDPE M1053	Standard	180	10	400
V17	HDPE M1053	Standard	220	10	400
V18	PS 158N	Standard	200	5	400
V19	PS 158N	Standard	200	8	400
V20	PS 158N	Standard	200	10	500
V21	PS 158N	Standard	180	10	400
V22	PS 158N	Standard	220	10	400
V23	PS 158N	Standard KN	200	8	400
V24	PS 158N	Standard KN	200	10	400
V25	PS 158N	Standard KN	200	10	600
V26	PS 158N	Standard KN	180	10	400
V27	HDPE M1053	Standard KN	200	8	400
V28	HDPE M1053	Standard KN	200	10	400
V29	HDPE M1053	Standard KN	200	10	600
V30	HDPE M1053	Standard KN	180	10	400

Tabelle 5-1: Versuchsplan für die Versuche am Ko-Kneter.

5.2 **DSE**

Der Aufbau der Versuchsanlage mit den eingesetzten Messmethoden und die Prozessparameter der durchgeführten Versuche werden in diesem Kapitel vorgestellt.

5.2.1 Aufbau der Versuchsanlage und Messmethoden

Für die Versuche wurde der DSE ZSK 26 Mc18 (Fa. Coperion GmbH, Stuttgart) verwendet. Hierfür wurde ein kurzer Aufbau mit insgesamt acht Zylindern genutzt, bei dem in den Gehäusen 5 und 7 sowie am Messring an der Schneckenspitze Messpositionen für Druck- und Temperatursensoren vorgesehen wurden. Zwischen dem ersten und dem fünften Gehäuse befand sich eine Aufschmelz- und Mischzone. Als Drucksensoren wurden Sensoren des Typs DA-250-12A-B35Z-S0-F0-R-N-6P (Fa. Gneuß Kunststofftechnik GmbH, Bad Oeynhausen) genutzt. Zur Temperaturmessung wurden zwei IR-Sensoren des Typs IR Therm (Fa. FOS Messtechnik GmbH, Schacht-Audorf) an den Gehäusen 5 und 7 sowie ein Einstechthermometer (ebro TFN 520 mit Messspitze TPN230/231, Fa. Xylem Analytics Germany Sales GmbH & Co. KG, Weilheim) an der Schneckenspitze eingesetzt.

5.2.2 Versuchsplanung

Ziel der Versuche war eine Validierung der numerischen Simulation mit experimentellen Versuchen am DSE. Hierfür wurde das LDPE Lupolen 2420F verwendet und zwei Drosselstellungen (geschlossen und geöffnet) und zwei Drehzahlen (200 und 400 U/min) variiert (vgl. Tabelle 5-2).

Ver- suchsnr.	Material	Drosselstel- lung	Temperatur / °C	Durchsatz / kg h ⁻¹	Drehzahl / U/min
V1	LDPE Lupolen 2420F	Geschlossen	200	10	200
V2	LDPE Lupolen 2420F	Geschlossen	200	10	400
V3	LDPE Lupolen 2420F	Offen	200	10	200

Tabelle 5-2: Versuchsplan für die Versuche am DSE.

6 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse (Temperaturverläufe, Druckverläufe etc.) der experimentellen Untersuchungen in Abhängigkeit von den Prozessparametern am Ko-Kneter und am DSE vorgestellt.

6.1 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am Ko-Kneter

Die entwickelte Messtechnik sowie der aufgestellte Versuchsplan wurden systematisch abgefahren. Die Auswertung erfolgte anhand der relevanten und signifikanten Parameter hinsichtlich des Schmelzeförderverhaltens des Ko-Kneters.

6.1.1 Temperaturverlauf

Die Schmelzetemperatur wurde über die im Ko-Kneter integrierten PT100-Sensoren (T1 - T4) und IR-Sensoren (IR-1 - IR-4) sowie über das Einstechthermometer am Austritt bestimmt. Für die Sensoren wurden Positionen im Ko-Kneter ausgewählt, die den Temperaturverlauf des laufenden Prozesses bei Variation der Prozessparameter möglichst komplett und repräsentativ darstellen sollen. In den folgenden Darstellungen des Temperaturverlaufs wird zwischen den Sensoren nicht unterschieden. Die Sensortype lässt sich über die Position des Sensors nachvollziehen (vgl. Abbildung 6-1).



Abbildung 6-1: Position der PT100-Sensoren (T1 – T4), IR-Sensoren (IR-1 – IR-4) und des Einstechthermometers.

6.1.1.1 Drehzahleinfluss

Bei der Verwendung von HDPE zeigt sich bei einer Erhöhung der Drehzahl von 200 U/min auf 600 U/min (vgl. Abbildung 6-2) ein Anstieg der Temperatur um ca. 30 K am Schmelzeaustritt aufgrund des höheren Energieeintrags durch Scherung. Für die Versuche wurden sehr scherintensive Schnecken genutzt, um speziell besonders hohe Temperaturen zu erreichen, um die Einflussfaktoren gut sichtbar zu machen. Bei beiden Drehzahlen steigt die Massetemperatur bis ca. 586 mm und ca. 269 °C (für 200 U/min) bzw. ca. 287 °C (für 600 U/min) mit der Zylinderlänge an. Anschließend flacht die Temperaturkurve ab. Die PT100-Sensoren T2, T3 und T4 liegen jeweils ca. 10 K unterhalb der entsprechenden IR-Sensoren. Der Temperaturunterschied liegt vermutlich daran, dass die Zylinderwand mit 200 °C geheizt wurde. Da die PT100-Sensoren anfällig gegenüber Wärmestrahlung und Wärmeleitung sind, kann es aufgrund der Abkühlung der Anlage zu Messschwankungen des PT100-Leiterdrahts kommen. Damit messen die PT100-
Temperatursensoren eine Temperaturdifferenz im PT100-Leiter und nicht die eigentliche Massetemperatur. Diese Temperaturdifferenz entsteht dadurch, dass der Knetpin des PT100-Sensors in Berührung mit der Zylinderwand steht, hingegen die Spitze des Knetpins in Kontakt mit der Massetemperatur ist. Das bedeutet, dass die Knetpins von der Zylinderwand je nach Situation gekühlt oder geheizt werden.



●400 U/min ●600 U/min

Abbildung 6-2: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge in Abhängigkeit von der Drehzahl für HDPE (Versuchsnr. V1, V2).

6.1.1.2 Materialeinfluss

Die Materialien HDPE, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC und LDPE zeigen einen ähnlichen Temperaturverlauf (vgl. Abbildung 6-3). LDPE erreicht eine um ca. 35 K höhere Schmelzetemperatur am Austritt als HDPE, was in der niedrigeren Aufschmelzenthalpie von LDPE begründet ist (LDPE: 127 J g⁻¹, HDPE: 227 J g⁻¹). LDPE und HDPE weisen am Schmelzeaustritt das Temperaturmaximum auf. HDPE-10 GC und HDPE-20 GC erreichen im Vergleich zu HDPE ebenfalls höhere Temperaturen in der letzten Knetzone. PS und PA6 heizten im Vergleich zu HDPE schneller auf: Der Temperatursensor T1 (Position: ca. 124 mm) zeigte für PS eine ca. 55 K und für PA6 eine ca. 90 K höhere Temperatur als HDPE. Die Zylindertemperatur lag für PS, analog zu HDPE, bei 200 °C. Das Aufheizen erfolgt für PS schneller, da im amorphen PS keine kristallinen Bereiche vorhanden sind. Bei PA6 hingegen wurde die Zylindertemperatur bei 260 °C gewählt, um die höhere Schmelzetemperatur bzw. die höhere typische Verarbeitungstemperatur zu berücksichtigen.

Das Temperaturmaximum liegt für alle Materialien in oder kurz vor der letzten Knetzone. Aufgrund der gezielt besonders scherintensiven Schneckenkonfiguration liegen die Werte im Vergleich zu typischerweise mit dem Ko-Kneter eingesetzten Schnecken tendenziell höher. Der in Kapitel 6.1.1.1 beschriebene Drehzahleinfluss zeigt sich hier analog für alle untersuchten Materialien.



Abbildung 6-3: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12).

6.1.1.3 Einfluss des Durchsatzes

Bei der Erhöhung des Durchsatzes bei der Verarbeitung von HDPE sinkt tendenziell das Temperaturniveau bei einem analogen Temperaturverlauf über die Zylinderlänge (vgl. Abbildung 6-4). Bei PS tritt dieser Effekt aufgrund der fehlenden kristallinen Bereiche nicht bzw. nur in geringem Maße auf.



Abbildung 6-4: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19).

6.1.1.4 Einfluss der Zylindertemperatur

Bei der Erhöhung der Zylindertemperatur auf 180 °C auf 200 °C bzw. von 200 °C auf 220 °C bei der Verarbeitung von HDPE und PS steigen jeweils die Temperaturniveaus im Temperaturverlauf über die Zylinderlänge (vgl. Abbildung 6-5). Die Differenz vergrößert sich mit dem Zylinderverlauf, sodass in der letzten Knetzone die größten Temperaturunterschiede bei verschiedenen Zylindertemperaturen vorliegen. Die Veränderung der Zylindertemperatur beeinflusst HDPE und PS in ähnlichem Maße. Aufgrund der gezielt besonders scherintensiven Schneckenkonfiguration liegen die Werte im Vergleich zu typischerweise mit dem Ko-Kneter eingesetzten Schnecken tendenziell höher.



Abbildung 6-5: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22).

6.1.1.5 Einfluss der Schneckenkonfiguration

Bei der Standard KN-Konfiguration wurden die Knetelemente des Typs KL durch Knetelemente des Typs KN ausgetauscht. Hierbei kommt eine stärkere Scherwirkung zustande, weil das Material über einen längeren Zeitraum zwischen Flanke und Knetbolzen geschert wird. Dies führt zu einer Temperaturerhöhung im Bereich der letzten Knetzone bei der Verarbeitung von HDPE und PS in der Standard KN-Konfiguration (vgl. Abbildung 6-6). Beide Schneckenkonfigurationen wurden allerdings im Vergleich zu typischerweise im Ko-Kneter eingesetzten Schnecken besonders scherintensiv gewählt, um hohe Mischleistungen und Temperaturen für die Modellierung zu erreichen.



```
Abbildung 6-6: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS in den Schne-
ckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von
400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28,
V29).
```

6.1.2 Druckverlauf

Im Folgenden werden die Druckverläufe über der Position der Drucksensoren P1 – P3 in der Zylinderlänge aufgetragen. Zu Untersuchungen zur Genauigkeit und Reproduzierbarkeit der Drucksensoren am Ko-Kneter wird auf [80] verwiesen.

6.1.2.1 Material- und Drehzahleinfluss

Bei der Verarbeitung von HDPE bei den Drehzahlen 400 U/min und 600 U/min ist eine geringe Abhängigkeit des Druckaufbauvermögens von der Drehzahl und der Zylinderlänge erkennbar (vgl. Abbildung 6-7). Die Materialien HDPE-10 GC und HDPE-20 GC zeigen analog kaum Abhängigkeit von der Drehzahl an den Sensoren P1 und P2, aber eine Abweichung in der letzten Knetzone am Sensor P3. Hier ist der Druck im Vergleich zu den ersten beiden Sensoren angestiegen. Im Bereich zwischen den Sensoren P1 und P2 kann eine teilgefüllte Zone vorliegen, da hier ein Wechsel von Knet- auf Förderelementen geschieht. Dies erklärt den leichten Abfall des Drucks von P1 auf P2. Zudem liegt der Druck bei einer Drehzahl von 600 U/min höher als bei 400 U/min. Der Drucksensor P3 ist am Schneckenende angebracht, in dem eine laminare Rohrströmung ohne Scherspitzen vorherrscht. Aufgrund der geringen Scherkräfte stellt sich in diesem Bereich bei den gefüllten Materialien ein hoher Druck ein. Dies gilt analog auch für LDPE, PS und PA6. LDPE und PS zeigen im Vergleich zu HDPE eine höhere Viskosität bei geringen Scherraten und eine stärkere Scherratenabhängigkeit (vgl. Kapitel 4.2.1). Dies trägt auch zum Druckabfall im Bereich von P2 bei, bei dem hohe Scherraten und hohe Massetemperaturen vorliegen. Insgesamt ist jedoch zu beachten, dass die Drucksensoreinsätze im Ko-Kneter durch den Hub in Schwingung geraten können. Dies erschwert eine Aus-

sage über die Verlässlichkeit der gezeigten Daten. Zudem liegen die Prozesspunkte tendenziell an der Förderkapazität der Schneckenelemente.



Abbildung 6-7: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12).

6.1.2.2 Einfluss des Durchsatzes

Bei der Erhöhung des Durchsatzes bei der Verarbeitung von HDPE und verändert sich der Druckverlauf über die Zylinderlänge (vgl. Abbildung 6-8). Der Druck steigt bei einem Durchsatz von 5 bzw. 8 kg/h über die Zylinderlänge an. Bei einem Durchsatz von 10 kg/h ist eine geringe Abhängigkeit des Druckaufbauvermögens von der Zylinderlänge

erkennbar. Dies deutet darauf hin, dass ein Durchsatz von 10 kg/h tendenziell an der begrenzenden Förderkapazität der Schneckenelemente liegt.



Abbildung 6-8: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19).

6.1.2.3 Einfluss der Zylindertemperatur

Bei der Erhöhung der Zylindertemperatur auf 180 °C auf 200 °C bzw. von 200 °C auf 220 °C bei der Verarbeitung von HDPE und PS verändert sich das Druckaufbauvermögen (vgl. Abbildung 6-9). Bei einer Zylindertemperatur von 200 °C ist eine geringe Abhängigkeit des Druckaufbauvermögens von der Zylinderlänge erkennbar. Bei Zylindertemperaturen von 180 °C und 220 °C steigt der Druck mit der Zylinderlänge. Während der Druck vor der letzten Knetzone unter dem Niveau (für HDPE) bzw. in einem ähnlichen Bereich (für PS) bei einer Zylindertemperatur von 200 °C liegt, steigt der Druck in der letzten Knetzone auf höhere Werte.



Abbildung 6-9: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22).

6.1.2.4 Einfluss der Schneckenkonfiguration

Die Standard KN-Konfiguration führt zu einem von der Zylinderlänge abhängigen Druckaufbauverhalten, während bei der Verarbeitung von HDPE und PS in der Standard-Konfiguration der Druck von der Zylinderlänge weitgehend unabhängig ist (vgl. Abbildung 6-10). Die KN-Elemente besitzen im Vergleich zu KL-Elementen längere Flügel, wodurch der offene Gang zwischen den Flügeln geschlossen ist. Somit kann die Formmasse bei Teilfüllungen nicht durch offene Gänge ausweichen. Insbesondere in der letzten Knetzone ist hier für HDPE ein Druckanstieg bei der Standard KN-Konfiguration festgestellt worden.



Abbildung 6-10: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS in den Schneckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28, V29).

Insgesamt lässt sich festhalten, dass eine Interpretation der Druckverläufe in Abhängigkeit von den Prozessparametern aufgrund der genannten Gründe (mögliches Schwingen der Drucksensoreinsätze, eventuelle Teilfüllung zwischen den Sensoren P1 und P2, tendenziell Prozesspunkte nahe der Förderkapazität) komplex ist. Typische Drücke liegen bei ca. 15 - 20 bar.

6.1.3 Einflussfaktoren auf den Füllgrad

Der Füllgrad wurde über Dead-Stop-Versuche bestimmt. Dabei wurde neben der optischen Prüfung des aufgeklappten Zylinders Material im Stillstand entnommen und über die Masse sowie die Schmelzedichte der Füllgrad in drei Zonen bestimmt (vgl. Kapitel 5.1.5). Für HDPE wurde ein maximaler Füllgrad vor der letzten Knetzone beobachtet (vgl. Abbildung 6-11). Die Füllgrade vor der ersten und der letzten Knetzone sind für eine Drehzahl von 400 U/min und 600 U/min jeweils in einem ähnlichen Bereich. Für diese Zonen ist keine Abhängigkeit von der Drehzahl erkennbar. Bei einer Drehzahl von 600 U/min zeigt sich eine Zunahme des Füllgrads vor der zweiten Knetzone durch Rückstau.



Abbildung 6-11: Aufgeklappter Zylinder des Ko-Kneters zur Bestimmung der Füllgrade in den definierten Zonen bei der Verarbeitung von HDPE bei einer Drehzahl von 400 U/min (oben) bzw. 600 U/min (unten).

LDPE zeigt im Vergleich zu HDPE den gleichen Verlauf des Füllgrads über die Zylinderlänge und einen ähnlichen Drehzahleinfluss (vgl. Abbildung 6-12). Dagegen zeigen PS und PA6 einen grundlegend anderen Verlauf des Füllgrads über der Zylinderlänge. Sowohl PS als auch PA6 zeigen im untersuchten Bereich eine geringe Abhängigkeit des Füllgrads von der Drehzahl. Insgesamt weisen die Materialien höhere Füllgrade als LDPE und HDPE auf. Dies ist im verringerten Druckaufbauvermögen bzw. im erleichterten Materialrückstrom bei niedrigerer Viskosität bei hohen Scherraten bzw. Massetemperaturen begründet.



Abbildung 6-12: Füllgrad f über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min.

6.1.4 Einflussfaktoren auf die kumulierte Leistung

6.1.4.1 Material- und Drehzahleinflusss

Die Leistung wurde über die Maschinensteuerung des Ko-Kneters aufgezeichnet und zum Vergleich der verarbeiteten Materialien kumuliert. Für alle Materialien steigt die Leistung mit erhöhter Drehzahl (vgl. Abbildung 6-13). Die höhere Viskosität in der Aufschmelzzone als größter Leistungsverbraucher führt zu einer höheren Leistung bei der Verarbeitung von LDPE. Für das amorphe PS erfolgt ein niedrigerer Leistungseintrag. Das Einmischen der Glashohlkugeln in HDPE verändert den Leistungseintrag im Vergleich zum HDPE nicht signifikant. Insgesamt stellen das Aufschmelzverhalten und die Viskosität in der Aufschmelzzone die Haupteinflussfaktoren auf die aufzubringende Leistung dar.



Abbildung 6-13: Kumulierte Leistung *P* bei der Verarbeitung von HDPE, LDPE, PS, PA7, HDPE-10 GC und HDPE-20 GC bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12).

6.1.4.2 Einfluss des Durchsatzes

Die kumulierte Leistung steigt bei der Verarbeitung von HDPE und PS mit dem Durchsatz an (vgl. Abbildung 6-14). Die Aufschmelzzone als größter Leistungsverbraucher führt bei einem erhöhten Durchsatz zu einer Erhöhung der kumulierten Leistung. Die Extruderleistung skaliert mit dem Durchsatz. Bei PS ist aufgrund der fehlenden kristallinen Zonen der Leistungsanstieg mit dem Durchsatz geringer als bei HDPE.



Abbildung 6-14: Kumulierte Leistung *P* bei der Verarbeitung von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19).

6.1.4.3 Einfluss der Zylindertemperatur

Die kumulierte Leistung sinkt bei Erhöhung der Zylindertemperatur bei der Verarbeitung von LDPE und HDPE (vgl. Abbildung 6-15). Aufgrund des größeren Temperatureintrags durch den Zylinder erfolgt ein geringerer Leistungseintrag.



Abbildung 6-15: Kumulierte Leistung *P* bei der Verarbeitung von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22).

6.1.4.4 Einfluss der Schneckenkonfiguration

Die kumulierte Leistung verändert sich bei Verwendung der Standard KN-Konfiguration im Vergleich zur Standard-Konfiguration nahezu nicht (vgl. Abbildung 6-16). Der Drehzahleinfluss ist ebenfalls analog für die beiden Schneckenkonfigurationen (vgl. Kapitel 6.1.4.1).



Abbildung 6-16: Kumulierte Leistung *P* bei der Verarbeitung von HDPE und PS in den Schneckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28, V29).

6.2 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen am DSE

Der aufgestellte Versuchsplan wurde systematisch abgefahren. Dabei wurden die Temperatur- und Druckverläufe an den Messpositionen aufgezeichnet. Die Massetemperatur zeigt an den Messposition keine Abhängigkeit von der Drosselstellung (vgl. Abbildung 6-17). Bei Erhöhung der Drehzahl von 200 auf 400 U/min erhöht sich auch die Temperatur. Der Druckaufbau erfolgt an der letzten Messposition. Der Druck erhöht sich bei geschlossener im Vergleich zu geöffneter Drossel um ca. 170 %. Die Drehzahl beeinflusst den Druckaufbau bei der geschlossenen Drossel nicht relevant. Im Gegensatz zum Ko-Kneter, der im Rahmen der gezeigten Versuche mit einer besonders scherintensiven Schneckenkonfiguration betrieben wurde, wurde für den DSE hier eine typische Schneckenkonfiguration verwendet.



Abbildung 6-17: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge bei der Verarbeitung von LDPE in zwei Drosselstellungen (geschlossen bzw. offen) und zwei Drehzahlen (200 bzw. 400 U/min).



●geschlossen, 200 U/min ●geschlossen, 400 U/min ●offen, 200 U/min

Abbildung 6-18: Druckverläufe über die Zylinderlänge bei der Verarbeitung von LDPE in zwei Drosselstellungen (geschlossen bzw. offen) und zwei Drehzahlen (200 bzw. 400 U/min).

7 Analytische Modellierung

Für den Ko-Kneter wurde mit der im Vorgängerprojekt entwickelten Software "SimKo" [80] eine analytische Modellierung durchgeführt. Hierbei werden Materialdaten, Geometriedaten, Verfahrensparameter und die Extruderkonfiguration als Eingabedaten genutzt und die Verläufe von Druck, Füllgrad und Aufschmelzgrad über die Schneckenlänge simuliert. Zudem kann die dissipierte Leistung berechnet werden. Folgend werden die berechneten Daten gezeigt und mit den experimentellen Daten verglichen.

7.1 Vergleich der experimentell bestimmten und der berechneten Daten

7.1.1 Temperaturverlauf

In den Simulationen steigt die Temperatur während des Aufschmelzens an. Die simulierten und die experimentellen Temperaturen im Bereich der ersten beiden Messpositionen stimmen bei einer Drehzahl von 400 U/min relativ gut überein (vgl. Abbildung 7-1). Bei LDPE und PS kommt es bei einer Drehzahl von 600 U/min zu einem starken Temperaturanstieg bei der Simulation im Bereich der ersten Messposition. Hier übersteigen die simulierten Daten die experimentell bestimmten Werte. Im weiteren Verlauf entlang des Zylinders liegen die simulierten Temperaturdaten unter den experimentell bestimmten Werten, da sie in geringerem Maße ansteigen. Hier wird der Temperaturanstieg in der Knetzone in der Simulation unterschätzt.



Abbildung 7-1: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Massetemperaturen entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6).

7.1.2 Druckverlauf

Die simulierten Daten des Druckverlaufs zeigen im Wechsel einen Druckanstieg und einen Druckabfall mit den Knetzonen (vgl. Abbildung 7-2). Im Vergleich zu den experimentell bestimmten Werten unterschätzt die Simulation die Druckanstiege in der zweiten Zylinderhälfte.



Abbildung 7-2: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Druckverläufen entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6).

7.1.3 Füllgrad

Der Füllgrad in der Simulation wechselt zwischen Voll- und Teilfüllung über der Zylinderlänge (vgl. Abbildung 7-3). In den Förderzonen unterschätzt die Simulation den Füllgrad im Vergleich zu den experimentell bestimmten Füllgraden. Ebenso wird der Anstieg der Füllgradniveaus in den Förderzonen über die Zylinderlänge durch die berechneten Daten nicht wiedergegeben.



Abbildung 7-3: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Füllgraden entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6).

7.1.4 Kumulierte Leistung

In der Gegenüberstellung von experimentell bestimmter kumulierter Leistung und simulativ berechneter kumulierter Leistung ist erkennbar, dass in der Simulation die Leistung unterschätzt wird (vgl. Abbildung 7-4). Die Abweichung liegt für alle untersuchten Versuchspunkte über 20 %.



Abbildung 7-4: Gegenüberstellung von simulierter und gemessener kumulierter Leistung für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6).

7.2 Einführung von Korrekturfaktoren

Bei der Berechnung der dissipierten Leistung P_{diss} nach Gleichung 7-21 mit der Viskosität η , der Schergeschwindigkeit γ^2 und dem Volumen V ist der Füllgrad f direkt proportional zur Leistung.

$$P_{\rm diss} = \eta \cdot \gamma^2 \cdot V \cdot f \tag{7-1}$$

Das Volumen V lässt sich aus der Schneckengeometrie nach Gleichung 7-21 mit dem Kanalvolumen $V_{\rm K}$, dem Nutvolumen $V_{\rm N}$, dem Pinvolumen $V_{\rm P}$ und dem Volumen des Leckspalts $V_{\rm L}$ berechnen.

$$V = V_{\rm K} + V_{\rm N} - V_{\rm P} + V_{\rm L}$$
 7-2

Die kumulierte Leistung ist direkt messbar. Somit wurde die Annahme getroffen, dass Abweichungen in der berechneten Gesamtleistung auf eine ungenaue Abschätzung des Füllgrads zurückzuführen sind. Die Einführung eines Korrekturfaktors K für die Berechnung der teilgefüllten Bereiche soll diese Abweichungen verringern. Hierfür wurde ein Betriebspunkt für alle Materialsysteme ausgewählt, die Gesamtleistung $P_{\text{gemessen,ges}}$ im Versuch gemessen und nach Gleichung als Summe der berechneten Leistung in vollgefüllten Bereichen $P_{\text{simuliert,voll}}$ und der berechneten Leistung in teilgefüllten Bereichen $P_{\text{simuliert,teil}}$ dargestellt.

$$P_{\text{gemessen,ges}} = P_{\text{simuliert,voll}} + P_{\text{simuliert,teil}}$$
 7-3

Der Korrekturfaktor K ergibt sich dann aus folgender Gleichung:

$$K = \frac{\left(P_{\text{gemessen,ges}} - P_{\text{simuliert,voll}}\right)}{P_{\text{simuliert,teil}}}$$
7-4

Mithilfe von *K* kann dann ein korrigierter Füllgrad f^* nach Gleichung 7-5 definiert werden, der zur korrigierten berechneten Leistung in teilgefüllten Bereichen $P^*_{\text{simuliert,teil}}$ nach Gleichung 7-21 führt.

$$f^* = f \cdot K \tag{7-5}$$

$$P_{\text{simuliert,teil}}^* = \eta \cdot \gamma^2 \cdot V \cdot f^*$$
 7-6

Somit stimmen die korrigierten berechneten kumulierten Leistungsdaten besser mit den experimentell bestimmten Daten überein (vgl. Abbildung 7-5).



Abbildung 7-5: Gegenüberstellung von korrigierter simulierter und gemessener kumulierter Leistung für HDPE und LDPE bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V4).

Die Berechnung der Temperatur-, Druck- und Füllgradverläufe erfolgt unter Nutzung des berechneten Korrekturfaktors. Die Trends im Verlauf des Füllgrads und im Druckaufbau werden durch die berechneten Daten nicht reproduziert (vgl. Abbildung 7-6). Der mittlere Füllgrad liegt durch die Korrektur näher an den experimentellen Daten. Es ergibt sich somit aber nur eine geringe Verbesserung der Modellgenauigkeit im Vergleich zu den experimentell bestimmten Daten. Eine mögliche Erklärung für die Abweichungen ist eine unzureichende Modellierung des Druckaufbauverhaltens. Dies wird im folgenden Kapitel diskutiert.



Abbildung 7-6: Experimentell bestimmte und mit Korrekturfaktor berechnete Temperatur-, Druck- und Füllgradverläufe über der Zylinderlänge bei der Verarbeitung von HDPE bzw. LDPE bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min.

7.3 Kennzahlenvariation

Folgend wird die Beschreibung des Druckaufbauverhaltens in der analytischen Modellierung erläutert. Für eine ausführliche Erklärung wird auf [80] verwiesen.

Der geförderte Volumenstrom \dot{V} entspricht der Summe aus Kanalförderung $i_K \dot{V}_K$ und Zwangsförderung der Pins $i_P \dot{V}_P$ abgezogen der Rückströmung durch die Nuten $i_N \dot{V}_N$:

$$\dot{V} = i_K \dot{V}_K + i_P \dot{V}_P - i_N \dot{V}_N \tag{7-7}$$

mit: Gangzahl i_K

Volumenstrom im Kanal \dot{V}_K

Pinanzahl innerhalb eines vorgegebenen Schneckenabschnitts i_P

Volumenstrom durch die Zwangsförderung des Pins \dot{V}_P

Nutanzahl i_N

Volumenstrom in der Nut \dot{V}_N

Das Druck-Durchsatzverhalten mit dem dimensionslosen Volumenstrom $\pi_{\dot{V}}$ und dem dimensionslosen Druckgradienten π_p kann über die Gleichungen 7-8 und 7-9 beschrieben werden:

$$\pi_{\dot{V}} = \frac{\dot{V}}{i_{\rm K} \cdot 0.5 \cdot h \cdot b \cdot v_z}$$
7-8

$$\pi_p = \frac{\Delta p}{\Delta z} \cdot \frac{h^{n+1}}{6 \cdot K \cdot v_z^n}$$
7-9

mit: Kanalhöhe h

Kanalbreite b

z-Komponente der Geschwindigkeit v_z

Konsistenz des Potenzgesetzes K

Gleichungen 7-8 und 7-9 können über die Approximationskennzahlen A und B, die zusätzliche Effekte (strukturviskoses Verhalten, weitere Geometrieeinflüsse) berücksichtigen, verknüpft werden:

$$\pi_{\dot{V}} = A - B \cdot \pi_p \tag{7-10}$$

Das Druck-Durchsatzverhalten bei Kanalförderung, Zwangsförderung der Pins und Rückströmung durch die Nuten wird mithilfe der Approximationszahlen zusammengefasst (vgl. Abbildung 7-7). Hierbei gehen folgende Geometriegrößen ein:

- Gangsteigungswinkel φ
- Zylinderdurchmesser D_Z
- Nuthöhe h_N
- Nutbreite b_N
- Pinhöhe h_P
- Pindurchmesser D_P
- x-Komponente der Geschwindigkeit v_x





Durch die Verknüpfung der Gleichungen 7-12, 7-14 und 7-16 ergibt sich die Beschreibung des Förderverhaltens:

$$\pi_{\dot{V}} = A_K - A_N \cdot \frac{v_x}{v_z} \cdot \frac{h_N \cdot b_N \cdot i_n}{h \cdot b \cdot i_k} - \left(B_K + B_N \cdot \left(\frac{v_x}{v_z}\right)^{1-n} \cdot \frac{h_N^{n+2} \cdot b_N \cdot i_n}{\tan \varphi \cdot h^{n+2} \cdot b \cdot i_k}\right) \cdot \pi_{p,K}$$
 7-19

Aus Modellierungen der Einschnecke wurden die Approximationszahlen als konstante Größen angenommen:

$$A_{\rm K} = 1$$
 7-20

$$A_{\rm N} = 1$$
 7-21

$$B_{\rm K} = \frac{1}{n^{0.94}}$$
 7-22

$$B_{\rm N} = \frac{1}{n^{0.94}}$$
 7-23

Mit diesen Größen wurden die in Kapitel 7.1 gezeigten Daten berechnet. Womöglich beschreiben die genannten Approximationszahlen das Druckaufbauverhalten aber nur unzureichend. Deshalb wurde Modellierung Werten die mit den $A_{\rm K} = 0,75$ für die Förderelemente und $A_{\rm K} = 0,75$, $A_{\rm N} = 1,25$ für die Mischelemente wiederholt. Somit wird ein verringertes Druckaufbauvermögen in den Förder- und Mischelementen und eine Erhöhung der Rückströmung in den Nuten der Mischelemente berücksichtigt. Für HDPE ergibt dies tendenziell eine Verbesserung der Modellgenauigkeit (vgl. Abbildung 7-8). Dies deutet darauf hin, dass durch die geeignete Wahl der Kennzahlen die Beschreibung des Strömungsverhaltens verbessert werden kann. Die korrekte Wahl der Kennzahlen und Prüfung dieser bzw. Modellierung mit den Kennzahlen ist hier von entscheidender Bedeutung. Innerhalb der Projektlaufzeit konnte diese komplexe Modellierung aufgrund des unerwarteten Mehraufwands allerdings nicht mehr vorgenommen werden.



Abbildung 7-8: Vergleich der experimentellen (blaue Punkte), simulierten (blaue Linie) und der kennzahlangepassten (grüne, gestrichelte Linie) Temperatur-, Druck- und Füllgradverläufe entlang der Zylinderlänge und der Leistungsdaten bei der Verarbeitung von HDPE bei einer Drehzahl von 400 U/min.

8 Numerische Simulation

Für die Untersuchung der Strömungsvorgänge im Ko-Kneter wurden numerische Strömungssimulationen (CFD) durchgeführt. Ziel ist es, die Geschwindigkeitsverteilung, Druckverhältnisse und Schubspannungen verschiedener Schneckenelemente zu analysieren. Dabei wurden folgende Annahmen für die Simulationen getroffen:

- Isotherme Bedingungen: Die Temperatur wird als konstant angenommen.
- Inkompressible Strömung: Die Dichte wird als konstant angenommen.
- Einphasigkeit: Es wird vorausgesetzt, dass der gesamte Strömungsraum vollständig mit Schmelze gefüllt ist.

Unter diesen Bedingungen ergibt sich das folgende Gleichungssystem:

$$\nabla U(t) = 0 \tag{8-1}$$

$$\nabla p(t) = \nabla \underline{\tau} \tag{8-2}$$

bestehend aus der Kontinuität (8-1)- und Impulsgleichung (8-2). Dabei ist U das Geschwindigkeitsfeld, p der Druck und $\underline{\tau}$ der Schubspannungstensor. Dieser ist definiert als:

$$\underline{\tau} = \eta(\dot{\gamma}) \frac{\partial U}{\partial x}.$$
 8-3

Für die instationäre Simulation wurde ein Zeitschritt von 0,0001 s gewählt, um die Abhängigkeit der rotierenden Schnecke von den Strömungsvorgängen im Ko-Kneter präzise abzubilden. Der instationäre Solver für dynamische Bewegung *pimpleDyMIbFoamsolver* wurde für die Simulationen in diesem Projekt verwendet. Darüber hinaus wurde der bwHPC Cluster das Landes Baden-Württemberg genutzt und jede Simulation mit 40 Prozessoren parallelisiert gerechnet.

8.1 Modifizierung der Simulationssoftware foamExtend

Die numerischen Strömungssimulationen wurden mit der frei zugänglichen Simulationssoftware *foamExtend* (wie im Vorgängerprojekt) durchgeführt. Allerdings musste im Rahmen des Projektes von der Softwareversion *foamExtend 4.1* (im Vorgängerprojekt verwendet) auf *foamExtend 5.0* gewechselt werden. Der von *foamExtend 4.1* benötigte *Compiler* wird nicht mehr in den neueren Betriebssystemen (ab *Ubuntu 18.04 LTS*) unterstützt und ist somit nicht mehr kompatibel. Um jedoch die komplexe Bewegung (Kombination aus Translation und Rotation) des Ko-Kneters simulativ abbilden zu können, musste die Software im Rahmen des Projektes entsprechend erweitert werden. Auch um die Strukturviskosität zu berücksichtigen, mussten zusätzliche Viskositätsmodelle implementiert werden. Diese Änderungen werden im Folgenden genauer erläutert.

8.1.1 Implementierung der Ko-Kneter-Bewegung

Die Ko-Kneter-Bewegung setzt sich aus einer Kombination translatorischer und rotatorischer Bewegungen zusammen. Hierfür wurde ein neuer dynamischer Netzlöser (Dynamic Mesh Solver) entwickelt. Die Winkelgeschwindigkeit wird durch

$$\omega = 2 \cdot \pi \cdot \frac{N}{60}$$
 8-4

in rad/s definiert, wobei N die Drehzahl in U/min ist. Die Rotationsbewegung berechnet sich aus

$$rot = \omega \cdot t$$
 8-5

mit der Zeit t in Sekunden. Die translatorische Bewegung (Hubbewegung) wird durch

$$trans = Hub \cdot \sin(\omega \cdot t)$$
 8-6

beschrieben, wobei *Hub* die Amplitude der Bewegung ist. Diese gibt an, wie weit sich die Schnecke vorwärts bzw. rückwärts bewegt.

Der erweiterte Strömungslöser wurde in *foamExtend 5.0* als neue dynamische Bewegungsfunktion mit der Bezeichnung *koKneterMotion* integriert. Um diese Funktion zu nutzen, müssen vom Anwender die Drehzahl sowie die Hublänge vorgegeben werden. Dies erfolgt über eine Konfigurationsdatei (*dynamicMeshDict*), in der die Bewegungsfunktion spezifiziert ist. Neben der Hublänge (in m) und der Drehzahl (in U/min) muss zudem die Rotationsachse der Schnecke angegeben werden.

8.1.2 Implementierung zweier strukturviskoser Viskositätsmodelle

Zusätzlich wurden zwei Viskositätsmodelle in *foamExtend* implementiert. Zunächst wurde der Carreau-Ansatz als zusätzliche Viskositätsfunktion implementiert, um die Strukturviskosität der Kunststoffschmelze zu berücksichtigen. Dieses Modell beschreibt die Viskosität η in Abhängigkeit von dem Betrag des Deformationsgeschwindigkeitsgradienten $|\dot{\gamma}|$ durch die Gleichung:

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{A}{(1+B\cdot|\dot{\gamma}|)^c}$$
8-7

mit

$$|\dot{\gamma}| = \sqrt{\sum_{i}^{3} \sum_{j}^{3} \left(\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}}\right)^{2}}.$$
 8-8

Die Modellparameter *A*, *B* und *C* wurden durch eine Anpassung experimenteller Messungen an die Viskositätsfunktion bestimmt und müssen als Eingabeparameter für die Simulation übergeben werden (siehe Tabelle 4-1). Dies erfolgt über eine weitere Konfigurationsdatei (*transportProperties*), in der das Transportmodell mit der Bezeichnung *Carreau* sowie die entsprechenden Koeffizienten (*CarreauCoeffs*) angegeben werden. Dabei ist es erforderlich, die Einheiten der Parameter gemäß dem in *foamExtend* verwendeten SI-Einheitensystem anzugeben. Darüber hinaus wurde der Carpow-Ansatz in *foamExtend* implementiert. Dieser Ansatz ist eine Kombination zwischen dem Potenz- und dem Carreau-Ansatz und beschreibt das Verhalten hochgefüllter Materialien. Diese Materialien besitzen die Eigenschaft, dass die Viskosität bei geringen Schwergeschwindigkeiten zunimmt [81]. Er setzt sich wie folgt aus den Ansätzen

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \phi^{-\frac{1}{m}} \cdot |\dot{\gamma}|^{\frac{1}{m}-1}$$
8-9

und

Potenz

Carreau

Carpow

zu

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{A}{(1+B\cdot|\dot{\gamma}|)^c}$$
8-10

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{d_k}{(b_1 \cdot |\dot{\gamma}|)^m} + \frac{A}{(1 + B \cdot |\dot{\gamma}|)^C}$$
8-11

zusammen. Dabei ist ϕ die Fluidität und m der Fließexponent. Der Carpow-Ansatz wird u. a. über den Konsistenzparameter $d_k = (d \cdot |\dot{\gamma}|_{We}^{-1})$ und $b_1 = |\dot{\gamma}|_{We}^{-1}$ beschrieben. Dabei ist $|\dot{\gamma}|_{We}$ die Scherrate am Wendepunkt der Fließkurve, das heißt der Übergang des plastischen Fließens der gefüllten Schmelze zum strukturviskosen Fließen. Dieser Punkt wird über die Kreisfrequenz ω_{We} bestimmt. Der Parameter b_1 hat die Dimension s. Die Einführung d_k ist ein Normierungsschritt und notwendig, damit dieser Ansatz physikalisch Korrekt implementiert werden kann [81].

Um den Carpow-Ansatz in der CFD-Simulation zu verwenden, müssen die Modellparameter (d_k , b_1 , A, B, C) als Eingangsgrößen definiert werden. Diese Parameter, die das charakteristische Fließverhalten hochgefüllter Kunststoffe beschreiben, werden aus rheologischen Messdaten abgeleitet. Im Verlauf des Projekts wurden zwar hochgefüllte Compunds hergestellt und rheologisch charakterisiert, jedoch zeigten die Messdaten nicht das für hochgefüllte Systeme typische Verhalten. Insbesondere blieb der erwartete Anstieg der Viskosität bei niedrigen Scherraten aus, der jedoch entscheidend ist, um den Carpow-Ansatz an experimentelle Daten anzupassen. Da eine direkte Parameterermittlung somit nicht möglich war und um den weiteren Projektfortschritt nicht zu verzögern, wurden stattdessen Materialdaten aus der Literatur herangezogen. Dabei handelt es sich um hochgefüllte Polypropylen-Compounds mit Kurzglasfaseranteilen von 10, 20 und 30 M. %, Die entsprechenden Parameter sind in Tabelle 8-1 aufgelistet und dienen als Eingangsgrößen für die Simulationen mit dem Carpow-Ansatz.

Tabelle 8-1: Parameter des Carpow – Ansatzes einer PP-Kunststoffschmelze mit unterschiedlichen Kurzglasfasergehalten bei T = 180 °C – Scherviskosität η und Kreisfrequenz ω im Wendepunkt ist η_{WE} . [81]

Kurzglasfa- sergehalt in PP	Parameter des Carpow-Ansatzes					We der $\eta(\omega)$ -Funk-tion		Konsis- tenzpara- meter
in M.%	d in	n	а	b	с	η_{WE} .	ω_{We}	d_k
	Pa s ⁽ⁿ⁺¹⁾	in -	in Pa s	in s	in -	in Pa s	in rad s ⁻¹	in Pa s
0	-	-	1156	0,18	0,45	-	-	-
10	53	0,31	2196	0,15	0,46	2304	0,074	120
20	229	0,46	2514	0,12	0,47	2785	0,445	332
30	338	0,58	3001	0,25	0,44	3298	0,675	424

8.1.3 Implementierung der Energiegleichung und des Arrhenius-Faktors

Für die nicht-isothermen Simulationen wurde im weiteren Verlauf des Projektes die Energiegleichung

$$c_{p}\left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \left(\mathbf{U}T\right)\right) = -\nabla \cdot \left(\lambda \nabla T\right) + \tau : \nabla U \qquad 8-12$$

als weitere Transportgleichung in *foamExtend* implementiert. Dadurch ist es möglich, die Temperaturabhängigkeit der Kunststoffschmelze zu berücksichtigen. Dabei werden die Stoffparameter, wie die Wärmeleitfähigkeit λ und die spezifische Wärmekapazität c_p , als konstant angenommen (siehe Tabelle 4-1). Um die Temperaturabhängigkeit der Viskosität zu berücksichtigen, wurde zusätzlich der Arrhenius-Temperaturverschiebungsfaktor

$$\alpha_T = \exp\left(\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right)$$
8-13

implementiert, mit R als die universelle Gaskonstante. Damit ändert sich der Carreau-Ansatz zu

$$\eta = \frac{\alpha_T \cdot \mathbf{A}}{(1 + \alpha_T \cdot \mathbf{B} \cdot \dot{\gamma})^C}$$
 8-14

wobei E die Aktivierungsenergie ist.

Der Carpow-Ansatz setzt sich dann zusammen aus:

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{\alpha_T \cdot d_k(T_0)}{(\alpha_T \cdot b_1(T_0) \cdot |\dot{\gamma}|)^n} + \frac{\alpha_T \cdot A}{(1 + \alpha_T \cdot B(T_0) \cdot |\dot{\gamma}|)^c}$$
8-15

Die Parameter λ und c_p müssen dabei ebenfalls in der Textdatei *transportProperties* als Inputparameter übergeben werden.

Die nicht-isothermen Simulationen werden im Kapitel 8.3.4 vorgesellt. Während der Simulation kam es jedoch zu Konvergenzproblemen und die Simulationsergebnisse erscheinen unglaubwürdig. Das Problem, das die Instabilität in den Simulationen hervorruft, konnte nicht gefunden werden. Darum wurde im weiteren Verlauf des Projektes die isothermen Simulationen fokussiert.

8.2 Simulationsaufbau des Ko-Kneters

Um den Ko-Kneter Prozess mittels der IBS simulativ abbilden zu können, muss ein sogenannter Simulationscase aufgebaut werden. Dazu müssen in einem ersten Schritt die Geometrien der zu untersuchenden Schneckenelemente aufbereitet und der zugehörige Zylinder mit Pins konstruiert werden. In Abbildung 8-1 sind CAD-Ausschnitte (von der Firma BUSS AG, Pratteln, Schweiz) der Förderelemente C1, C2 sowie der Knetelemente KL und KN dargestellt. Dabei ist links das C1-Förderelement abgebildet, welches einen längeren Flügel im Vergleich zum rechts davon dargestellten C2-Element hat. Danach folgt das Knetelement KN (orange), mit längeren Flügeln als das Knetelement KL (ganz rechts, gelb).

Im nächsten Schritt müssen die Geometrien der zu untersuchenden Schneckenelemente aufbereitet und der zugehörige Zylinder mit Pins konstruiert werden. In Abbildung 8-2



Abbildung 8-1: Schneckenelemente von links nach rechts: Förderelemente C1(hell grau) und C2 (dunkel grau). Knetelemente KN (orange) und KL (gelb).

ist dies beispielhaft für das KL-Element abgebildet. Dabei wird der Spalt zwischen Flügel und Zylinder vernachlässigt. Aus diesem Grund stehen die Flügel des Elements aus dem Zylinder hervor. Der Spalt zwischen Flügel und Zylinder ist in der Realität kleiner als 1 mm, wodurch eine sehr feine Vernetzung durchgeführt werden müsste. Dies würde zu einem erheblichen Anstieg der Rechenzellen und damit auch der Rechenleistung führen. Da in den Untersuchungen jedoch vor allem die Interaktion zwischen Schneckenelement und Pin im Fokus steht, wird der Spalt vernachlässigt und somit die Rechenzeit verringert. Darüber hinaus wurde die Schneckenwelle entsprechend verlängert und steht auf beiden Seiten des Zylinders hervor. Aufgrund der axialen Hubbewegung ist dies notwendig.



Abbildung 8-2: Aufbereitetes Knetelement KL mit Zylinder und Pins im Sinne der IBS.

Für die Geometrie müssen schließlich sog. *patches* definiert werden, die in Abbildung 8-3 beispielhaft für das KL-Element farblich untereilt sind. Die *patches* werden benötigt, um die Randbedingungen (RB) für die Geschwindigkeit *U* und den Druck *p* zu definieren. Nur mit den festgelegten RB können die Transportgleichungen als ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Dabei wird der Eintritt der Schmelze als *Einlass*, der Austritt als *Auslass* bezeichnet. Die Zylinderwand und Pins müssen ebenfalls definiert werden. Die Schnecke ist im Sinne der IBS ebenfalls als *patch* definiert.

In Tabelle 8-2 sind die RB der jeweiligen *patches* aufgelistet, wobei Funktionswerte bei einer Dirichlet-RB und der Ableitungswert bei einer Neumann-RB zu 0 gesetzt wird. In den drei Spalten rechts, sind die Initialgeschwindigkeiten U_0 der jeweiligen Materialien für die Dirichlet-RB am *Einlass* aufgelistet. Diese werden über den Massenstrom (10 kg/h), der Dichte und der Eintrittsfläche ermittelt. Da Haftung an den Wänden (no-slip



Abbildung 8-3: Farbliche Darstellung der definierten *patches* am KL-Element. Die Schnecke fließt im *Einlass* ein und tritt am *Auslass* aus. Für *Pins* und *Zylinder* gilt die no-slip Bedingung. Die Schnecke wird im Sinne der IBS behandelt.

Bedingung) vorausgesetzt wird, sind alle weiteren Geschwindigkeiten zu 0 gesetzt. Für den Druck wurde jeweils am Auslass 0 bar vorgegeben. Aufgrund der Annahme der Inkompressibilität in den Simulationen ist in der Auswertung nur die Druckdifferenz entscheidend, nicht der Absolutwert. Sind die Geometrien aufbereitet und die *patches* definiert, liegt ein sogenannter Simulationscase vor.

patch	RB für Ge- schwindigkeit <i>U</i>	RB für Druck <i>p</i>	U ₀ von PS in m/s	U ₀ von HDPE in m/s	U ₀ von LDPE und PP in m/s	
Einlass	Dirichlet	Neumann	0,00646	0,00816	0,00850	
Auslass	Neumann	Dirichlet $p_0 = 0$ bar	-	-	-	
Zylinder	Dirichlet	Neumann	0	0	0	
Pins	Dirichlet	Neumann	0	0	0	
Schnecke	movingImmersed		Umdrehungsgeschwindigkeit in U/min			
	BoundaryVelocity	mixedlb	400/600	400/600	400/600	

Tabelle 8-2: Randbedingungen der jeweiligen *patches* für U und p mit den Initialgeschwindigkeiten U_0 der Materialien PS, HDPE, LDPE und PP.

In Tabelle 8-3 ist eine Übersicht der Simulationen aufgelistet, die im Rahmen des Projektes durchgeführt wurden. Dabei wurde zunächst das C2-Element bei unterschiedlichen Umdrehungsgeschwindigkeiten der drei Materialien HDPE, LDPE und PS simuliert. Darauffolgend wurden die unterschiedlichen Knetelemente KL und KN miteinander verglichen sowie Elementübergänge zwischen Förder- und Knetelemente betrachtet. An diesem Punkte wurde der Carpow-Ansatz implementiert und die kombinierten Elemente auch mit aus der Literatur erhaltenen Materialdaten von PP mit 0, 10, 20 und 30% Massegewicht enthaltenen Kurzglasfasern simuliert. Im Folgenden werden die einzelnen Simulationscases und deren Auswertungen genauer betrachtet und erläutert.

	Betriebspunkt in	Viskositätsansätze und Materialien			
Element	U/min	Carreau	Carpow		
C2	400, 600	HDPE, LDPE, PS	-		
KN	400, 600	HDPE, LDPE, PS	-		
KL	400, 600	HDPE, LDPE, PS	-		
C1-KL	400	HDPE, LDPE, PS, PP0	PP10, PP20, PP30		
C2-KL	400	HDPE, LDPE, PS, PP0	PP10, PP20, PP30		
C1-KN	400	HDPE, LDPE, PS, PP0	PP10, PP20, PP30		
C2-KN	400	HDPE, LDPE, PS, PP0	PP10, PP20, PP30		

Tabelle 8-3: Übersicht der durchgeführten Simulationen, mit PP und 0, 10, 20 und 30% Massegewicht Kurzglasfaser.

8.3 Simulationsergebnisse

Für die in Tabelle 8-3 aufgelisteten Schneckenelemente, Betriebspunkte und Materialien wurden schließlich verschiedene Simulationen durchgeführt. Dabei wurde je nach aktuellen Projektstand und Elementuntersuchung die Simulationsdaten unterschiedlich ausgewertet.

8.3.1 Förderelement C2

Zu Beginn wurde das Element C2, mit den kürzeren Flügeln, untersucht. Das heißt, es musste zunächst ein Simulationcase erstellt werden, um Simulationen mit der in Kapitel 8.1 durchgeführten Modifizierungen in *foamExtend*, durchführen zu können. Auch die aufbereiteten Schneckengeometrien und der konstruierte Zylinder spielen eine entscheidende Rolle, um Stabilität und Konvergenz der CFD-Simulationen zu gewährleisten. Für die erste erfolgreiche CFD-Simulation wurde ein Workflow, bestehend aus Pre-Processing, Simulationsdurchführung und Post-Processing erstellt. Dafür mussten mehrfach die CAD-Dateien (Elemente und Zylinder) und die Vernetzung (Pre-Processing) angepasst werden. Die optimalen Solvereinstellungen und Konvergenzkriterien mussten ermittelt (Simulationsdurchführung) und Auswertroutinen geschrieben werden (Post-Processing). Dieses Vorgehen geschah iterativ, bis ein optimaler Workflow entstand, der auf die anderen Elemente übertragen werden konnte. Problematiken, die dabei aufkamen, werden im Folgenden genauer erläutert.

Das Exportieren der CAD-Dateien in *stl*-Dateien ist notwendig, um den in dieser Arbeit verwendeten Vernetzter (*cfMesh*) und die IBS verwenden zu können. Durch den Export werden die Geometrien als Oberflächengeometrien definiert. Mittels der Oberflächengeometrie erstellt der Vernetzer ein Volumengitter und diskretiert die Transportgleichungen (8-1, 8-2). Dadurch wird die Rechendomäne erstellt, die über die Diskretisierungsmatrix beschrieben wird. In diesem Beispiel ist die Rechendomäne das Zylindervolumen. Die Schneckengeometrie wird dann im Sinne der IBS als Oberflächengeometrie in die Rechendomäne eingetaucht. Allerdings kam es zu Stabilitätsproblemen mit dem Volumengitter sowohl während der Vernetzung als auch bei der Anwendung der IBS. Die Zellen, die durch die Schneckengeometrie geschnitten werden (IB-Zellen), konnten nicht ausreichend gut identifiziert werden. Diese Problematik kann eintreffen, wenn erstens das Volumengitter nicht hinreichend gut aufgelöst ist (uneinheitliche Hexaeder mit spitzen Winkeln) oder zweitens, die Oberflächengeometrie der Schnecke, also die exportierte *stl*-Datei, keine gute Qualität besitzt.

Letzteres ist in Abbildung 8-4, links dargestellt: die *stl*-Datei des Schneckenelements C2 direkt exportiert aus der CAD-Software. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Dreiecke, die die Schneckengeometrie definieren, inhomogene Seitenverhältnisse besitzen, sehr lang sind und einen spitzen Winkel besitzen.



Abbildung 8-4: Förderelement C2 als Oberflächengeometrie. Links: Direkt exportiert aus der CAD-Software mit uneinheitlichen Dreiecken. Rechts: Aufbereitet und mit gleichmäßgen Dreiecken.

Aufgrund dieser uneinheitlichen Dreiecke kam es zu Problemen bei der Anwendung der IBS, da diese Dreiecke nicht geeignet sind, die IB-Zellen im Volumengitter korrekt zu schneiden. Um dies zu verhindern, muss ein zusätzlicher Schritt im Pre-Processing durchgeführt werden. Dies geschieht mit einer weiteren Software (*Salome*), in der die exportieren Dateien aus der CAD-Software mit einheitlichen und gleichseitigen Dreiecken vernetzt werden (siehe Abbildung 8-4, rechts). Die dadurch erhaltenen Oberflächengeometrien führten schließlich zu einem fehlerfreien Anwenden der IBS in der Rechendomäne.



Abbildung 8-5: Das Volumennetz mit ca. 870.000 Zellen und Verfeinerung um den Pin mit dem aufbereitetem Förderelement C2 (einheitliche Dreiecke).

Dieser zusätzliche Schritt wurde schließlich auch für die Erstellung der Rechendomäne durchgeführt, da der Vernetzer als Inputdateien ebenfalls Oberflächengeometrien benötigt. Dadurch wurden schließlich einheitliche Hexaeder generiert, wodurch die Stabilitätsprobleme während der Vernetzung gelöst worden sind. Dadurch ist nun ein Volumennetz generiert worden, welches die Rechendomäne ausreichend gut repräsentiert und zusammen mit dem Förderelement C2 in Abbildung 8-5 dargestellt ist. Aufgrund des auftretenden schmalen Spaltes zwischen Element und Pin während der Hubbewegung, wurde eine Verfeinerung um den Pin durchgeführt. Es ergibt sich somit ein Volumennetz mit etwa 870.000 Zellen.

Nach erfolgreicher Vernetzung und Durchführung der CFD-Simulation wurden schließlich mehrere Simulationen bei Variation der Drehzahl für die Materialien PS, LDPE und HDPE durchgeführt. Ausgewertet wurden im Anschluss die Geschwindigkeit, der Druckverlust und der Volumenstrom.

In Abbildung 8-6, links, sind die Geschwindigkeitskomponenten in y-Richtung U_y über die Schneckenlänge für unterschiedliche Positionen des Schneckenelements für LDPE abgebildet. Rechts im Bild ist die Auswertlinie (weiß) dargestellt bei einer Schneckenposition von 360°. Diese Lage der Auswertlinie wird zur Auswertung der folgenden Abbildungen der Geschwindigkeit verwendet, die das C2-Element betrifft. Es ändert sich lediglich die Position des Schneckenelements. Da die Fließrichtung in x-Richtung gewählt wurde und sich die Schnecke um die x-Achse dreht, besitzt die Geschwindigkeitskomponente U_z nur einen geringen Einfluss und wird nicht weiter betrachtet. Zu erkennen sind außerdem in den Geschwindigkeitsverläufen in Abbildung 8-6, rechts, die Position des Flügelelements und des Pins. Dort ist die Geschwindigkeit jeweils 0 m/s.



Abbildung 8-6: Links: Die Geschwindigkeit in y-Richtung über der Schneckenlänge von LDPE bei 400 U/min und unterschiedlichen Positionen des Förderelements C2 (324°-366°). Rechts: Förderelement (grün) mit Zylinder (rot) und Auswertelinie (weiß) für die Geschwindigkeit bei einer Schneckenposition von 360°.

Des Weiteren ist zu erkennen, dass sich bei einer Schneckenposition ab 348° ein Rückfluss im Spalt zwischen Förderelement und Pin ausbildet. Der Spalt wird enger bei weiterdrehender Schnecke und der Rückfluss prägt sich stärker aus. Bei einer Schneckenposition von 366° ist das Förderelement am Pin vorbeigedreht und es existiert kein Spalt mehr zwischen Flügel und Pin. Auch hinter dem Pin bildet sich ein Rückfluss aus, d. h. die Schmelze umfließt den Pin. Dieser Rückfluss korreliert jedoch nicht mit dem Rückfluss im Spalt zwischen dem Flügel des Förderelements und Pin. Hinter dem Pin ergibt sich der stärkste Rückfluss bei einer Schneckenposition von 366°, während sich im Spalt zwischen Flügel und Pin der stärkste Rückfluss bei einer Position von 354° ergibt. Aufgrund des Rückflusses sowohl zwischen Pin und Flügel als auch hinter dem Pin kann erwartet werden, dass eine gute Mischwirkung erzielt wird.

In Abbildung 8-7, links, ist die Geschwindigkeit in y-Richtung bei 400 und 600 U/min von PS abgebildet. Die Schneckenposition beträgt 360°. Gut zu erkennen ist, dass sich

der Rückfluss bei höherer Drehzahl stärker zwischen Element und Pin ausbildet. Dieses Verhalten korreliert mit dem Rückfluss hinter dem Pin. In Abbildung 8-7, rechts, wird die Geschwindigkeit über die Schneckenlänge der drei Materialien LDPE, HDPE und PS miteinander verglichen. Die Drehzahl beträgt 400 U/min und die Schneckenposition liegt bei 360°.



Abbildung 8-7: Geschwindigkeit in y-Richtung über der Schneckenlänge C2. Links: PS bei 400 und 600 U/min. Rechts: LDPE (Lupolen), HDPE (M1053) und PS bei 400 U/min. Die Schneckenposition ist für beide 360°.

Wie in Tabelle 4-1 zu sehen ist, besitzen die Materialien unterschiedliche Materialeigenschaften bei unterschiedlichen Strömungsbedingungen (unterschiedliche Schergeschwin-



Abbildung 8-8: Der Druckverlust und Volumenstrom über die Schneckenposition von PS bei 400 U/min des Förderelements C2.

digkeiten). Zu erkennen ist, dass sich bei HDPE mit der geringsten Nullviskosität η_0 kaum ein Rückfluss im Spalt ausbildet und der höchste Rückfluss bei PS mit größter η_0 vorliegt. Das Verhalten tritt entgegengesetzt hinter dem Pin auf.

In Abbildung 8-8 ist der Druckverlust Δp und der Volumenstrom \dot{V} über die Rotation der Schnecke aufgetragen. Zu erkennen ist ein oszillierendes Verhalten der Strömungsgrößen. Aufgrund des ne-

gativen Volumenstroms im Rückwärtshub ergibt sich ein negativer Rückfluss in x-Richtung. Dieses Verhalten führt ebenfalls zu einem Vorzeichenwechsel der Druckgleichung und damit im Druckverlust, was das oszillierende Verhalten erklärt.

8.3.2 Knetelemente KN und KL

In einem nächsten Schritt wurden die Strömungsvorgänge innerhalb der Knetelemente KN sowie KL simuliert und miteinander verglichen. Dabei wurden zunächst der Zylinder sowie die Anzahl der Pins am Zylinder erweitert und neu diskretisiert. Das Volumennetz (blau) ist in Abbildung 8-9 dargestellt, zusammen mit dem KL-Element (schwarz).



Abbildung 8-9: Links: Volumennetz (blau) mit 1.500,000 Zellen am Beispiel des KL-Elements (schwarz). Rechts: Vergrößerung des Ausschnitts im roten Kasten: Pin zwischen zwei Flügelelementen.

Die Zunahme der Länge des Zylinders und der Pins (Verfeinerung um die Pins) führt zu einer Erhöhung der Rechenzellen um ca. 1.500,000 Zellen. Im Post-Processing wurde dann die Magnitude der Geschwindigkeit U, der Druckverlust Δp , der Volumenstrom \dot{V} sowie die Schergeschwindigkeit $|\dot{\gamma}|$ ausgewertet.

Als weitere Auswertgröße wurde noch die Scherung als eine weitere Maßzahl definiert. Die Scherung, definiert als das zeitliche Integral der Schergeschwindigkeit

$$\gamma = \int |\dot{\gamma}| \, dt, \qquad 8-16$$

ist aufgrund der rein viskosen Annahme äquivalent zum Intergral über den Ort

$$\gamma = \sum_{n=1}^{N} |\dot{\gamma}_{ij}| \frac{\Delta z}{|U|} \operatorname{mit} i \neq j$$
8-17

mit einem Abstand Δz , an dem *N* mal der Betrag der Schergeschwindigkeit bestimmt wird. Damit kann die Scherbeanspruchung innerhalb eines Elements quantifiziert werden. Diese Maßzahl wurde am Ende des Projektes definiert, um einen quantitativen Vergleich der Scherbeanspruchung mit der Doppelschnecke durchführen zu können. Darüber hinaus kann sie jedoch auch verwendet werden, um die Scherbeanspruchung der verschiedenen Knetelemente zu quantifizierten.

In Abbildung 8-10 ist links die Magnitude der Geschwindigkeit an vier Schnittstellen (Plane 1-4) abgebildet für eine Position des KL-Elements. Die entsprechende Position der Schnecke ist rechts im Bild dargestellt. Die Schnittstellen der Plane 1 bis 4 sind so gewählt, dass sie eine Vierer-Pinreihe exakt mittig schneiden. Die Fließrichtung ist die *z*-Richtung und die Pfeile stellen die Orientierung der Magnitude der Geschwindigkeit dar. Das heißt, dass die Schnecke sich in dieser Position im Vorwärtshub befindet.



Abbildung 8-10: Die Magnitude der Geschwindigkeit bei einer Position des KL-Elements an vier Schnittstellen (Plane 1-4). Die Fließrichtung ist in z-Richtung. Die Pfeile zeigen die Orientierung der Magnitude der Geschwindigkeit.

Es ist zu erkennen, dass das Geschwindigkeitsprofil sowohl von der Schneckenposition als auch von der axialen Schnittstellenposition abhängig ist. Plane 1 erfährt ein homogenes Geschwindigkeitsprofil über die gesamte Hub- und Rotationsbewegung der Schnecke. Plane 2 und 3 erfahren die höchsten Geschwindigkeiten mit einem inhomogenen Geschwindigkeitsfeld über die Querschnittsfläche. Bei Betrachtung der Umgebung der einzelnen Planes in Abbildung 8-10, rechts, hat Plane 1 keinen Pin in näherer Umgebung. Anders ist dies bei Plane 2 und 3. Der sich ausbildende schmale Spalt zwischen Schneckenflügel und Pin führt zu höheren Geschwindigkeiten in diesem Bereich.

In Abbildung 8-11, links, ist der Volumenstrom \dot{V} und die Druckdifferenz Δp über die Schneckenrotation des KL-Elements für das Material HDPE abgebildet bei einer Umdrehungsgeschwindigkeit von 400 U/min. Die Druckdifferenz wurde zwischen Plane 1 und Plane 4 ermittelt. Auch hier ist aufgrund des Vorwärts- und Rückwärtshub der Schnecke das oszillierende Verhalten der Strömungsgrößen zu erkennen. Dabei liegen die negativen Druckdifferenzen im Vorwärtshub. Abbildung 8-11, rechts, zeigt einen Vergleich der Druckdifferenzen der drei Materialen HDPE, LDPE und PS beider Knetelemente KN (dunkel) und KL (hell).



Abbildung 8-11:Links: Druckdifferenz ∆p und Volumenstrom V[•] von HDPE des KL-Elements. Rechts: Druckdifferenz des KN- (dunkel) und KL- (hell) Elements über der Schneckenrotation. Beide Abbildungen bei 400 U/min.
Die Materialabhängigkeit ist deutlich zu erkennen: PS, das die höchste Viskosität der drei Materialien besitzt, baut die betragsmäßig höheren Druckdifferenzen auf (10 bar) als HDPE, mit der geringsten Viskosität (4 bar). Darüber hinaus liegt der größte Unterschied zwischen den Knetelementen KL und KN im Vorwärtshub. Während der Rückwärtshub Druckdifferenzen von bis zu 5 bar aufbaut (für beide Elemente), erfährt der Vorwärtshub bis zu 10 bar im KN-Element und etwa 6 bar im KL-Element für PS.

In Abbildung 8-12 ist der Betrag des Deformationsgradienten $|\dot{\gamma}|$ aufgetragen von Plane 2. Links ist dargestellt das KN-Element der Materialien HDPE, LDPE und PS bei einer Umdrehung von 400 U/min der Schnecke. Auch hier ist die Hierarchie der Materialien zu erkennen. HDPE erfährt im Mittel die höchsten Deformationsgeschwindigkeiten.



Abbildung 8-12: Links: Betrag des Deformationsgradienten des KN-Elements bei 400 U/min. Rechts: Betrag des Deformationsgradienten des KN- (hell) und KL- (dunkel) Elements für das Material LDPE bei 400 (orange) U/min und 600 (grün) U/min. Von Plane 2.

Rechts im Bild sind die Deformationsgeschwindigkeiten von LDPE bei Umdrehungen von 400 U/min (orange) und 600 U/min (grün) der Knetelemente KN (hell) und KL (dunkel) abgebildet. Es ist zu erkennen, dass die größten Unterschiede zwischen den Knetelementen im Rückwärtshub liegen. Dabei erfährt das Material LDPE im KN-Element im Mittel die höheren Deformationen als im KL-Element. Eine Erhöhung der Umdrehungsgeschwindigkeit führt auch zu einer Erhöhung der Deformationsgeschwindigkeiten, sowohl im Rückwärts- als auch im Vorwärtshub. Dabei steigt auch der Unterschied der Deformationsraten zwischen KN- und KL-Element. Dieser liegt bei 600 U/min im Rückwärtshub bei fast 200 1/s. Bei 400 U/min ist der Unterschied zwischen KL- und KN-Element etwa bei 100 1/s.

Zuletzt wurde schließlich noch die Scherbeanspruchung der einzelnen Knetelemente berechnet (nach Gleichung 8-17). In Abbildung 8-13 ist diese aufgetragen über die Schneckenrotation für die drei Materialien PS, HDPE und LDPE für das KN-Element bei zwei Betriebspunkten (400 U/min und, gestrichelt, 600 U/min).



Abbildung 8-13: Scherbeanspruchung der Materialien PS, LDPE und HDPE bei unterschiedlichen Umdrehungsgeschwindigkeiten im KN-Element.

Es ist zu erkennen, dass das Material mit der höchsten Viskosität (PS) auch die höchste Scherbeanspruchung erfährt. Auch führt die Erhöhung der Umdrehungsgeschwindigkeit zu einem Anstieg der Scherbeanspruchung. Dies ist vor allem im Rückwärtshub zu erkennen. Die zwei Peaks im PS-Verlauf (rot) im Rückwärtshub zeigen die Position der Schneckenflügel mit dem geringsten Abstand zum Pin. Dabei sind die Peaks vor allem im Rückwärtshub stark ausgeprägt und fallen im Vorwärtshub deutlich kleiner aus. Interessant ist, dass das gegenseitige Verhalten für HDPE zu erkennen ist. Hier liegen kaum noch Peaks im Rückwärtshub vor, dafür sehr große im Vorwärtshub. Das kann auf die Strukturviskosität zurückgeführt werden. PS hat mit dem Carreau-Parameter c = 0,72eine ausgeprägtere Strukturviskosität als HDPE mit c = 0,52. LDPE liegt dazwischen. In allen Fällen jedoch werden die Materialien im Vorwärtshub geringer scherbeansprucht als im Rückwärtshub.

Abbildung 8-14 zeigt einen Vergleich der Scherbeanspruchung zwischen dem KL- und KN-Element der Materialien PS und HDPE bei 400 U/min. Dabei ist das KL-Element als gestrichelte Kurve aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass der größte Unterschied der zwei Knetelemente für das Material PS im Vorwärtshub liegt. Im KL-Element erfährt PS eine deutlich geringere Scherbeanspruchung als im KN-Element. Anders sieht es aus für das Material HDPE. Dieses erfährt eine höhere Beanspruchung im Vorwärtshub im KL-Element, während das Material im Rückwärtshub im Mittel weniger scherbeansprucht wird.



Abbildung 8-14:Vergleich der Scherbeanspruchung zwischen Knetelementen KL und KN der Materialien PS und HDPE bei 400 U/min.

8.3.3 Elementübergänge zwischen Förderelement und Knetelement

In einem weiteren Schritt wurden die Elementübergänge zwischen den Förderelementen C1 und C2 und den Knetelementen KL und KN untersucht. Dabei wurde immer das Förderelement vor das Knetelement gesetzt. Diese Elementübergänge resultieren in vier unterschiedliche Kombinationen: C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN. Aufgrund der steigenden Länge der Schnecke wurde an diesem Punkt das Volumennetz erneut optimiert, um Rechenzeit einzusparen. Dafür wurde der Zylinder zu einem Hohlzylinder geändert und neu vernetzt (siehe Abbildung 8-15).



Abbildung 8-15: Längsschnitt des Volumennetzes (blau) am Beispiel des C1-KL-Elements (rot). Fließrichtung ist von rechts nach links. Volumennetz ist ein Hohlzylinder, mit einem kleineren Innendurchmesser als der Schneckenkerndurchmesser.

Der innere Durchmesser des Hohlzylinders ist dabei ausreichend kleiner als der Durchmesser des inneren Kerns der Schnecke, sodass die Schnecke definitiv die Zellen des Volumennetzes schneidet. Dies führt zu einer Anzahl von ca. 1.400.000 Zellen.

Darüber hinaus wurde an diesem Punkt der Carpow-Ansatz in *foamExtend* implementiert (siehe Kapitel 8.1.2). Im Folgenden werden zunächst die Ergebnisse der Materialien LDPE und HDPE sowie PP0 unter Berücksichtigung des Carreau-Ansatzes genauer

betrachtet. Anschließend folgen die Ergebnisse der Materialien PP10, PP20 und PP30, berechnet mit dem Carpow-Ansatz. Wie in Kapitel 8.1.2 erwähnt, handelt es sich dabei um PP gefüllt mit Kurzglasfaser (0, 10, 20 und 30 M. %). Die Materialdaten wurden aus der Literatur [81] entnommen und sind in Tabelle 8-1 aufgelistet.

Im Post-Processing wurde schließlich die Druckdifferenz zwischen Einlass und Auslass, der Volumenstrom und der Betrag der Deformationsrate am Auslass ausgewertet. Dabei gilt $D = |\dot{\gamma}|$.

8.3.3.1 Carreau-Ansatz

In Abbildung 8-16 sind die Druckdifferenzen und der Volumenstrom über die Schneckenrotation für die zwei Schneckenkombinationen C2-KL und C2-KN der Materialien LDPE und HDPE aufgetragen bei 400 U/min. Dabei zeigt die gestrichelte Linie den Volumenstrom, die durchgezogene Linie die Druckdifferenz, während die blauen Linien LDPE und die grünen HDPE darstellen.



Abbildung 8-16: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der zwei Schneckenkombinationen (C2-KL, C2-KN) von LDPE und HDPE bei 400 U/min.

Aus der Abbildung geht hervor, dass maßgeblich die Materialeigenschaften die Druckdifferenzen beeinflussen. Es ergibt sich, dass LDPE, mit der höheren Viskosität verglichen zu HDPE, betragsmäßig die höchsten Druckdifferenzen aufbaut. Darüber hinaus muss auch hier wieder zwischen Vorwärts- und Rückwärtshub unterschieden werden. Die betragsmäßig höchsten Druckdifferenzen befinden sich im Vorwärtshub (positiver Volumenstrom). Dabei ist ein deutlicher Einfluss des KN-Elements hinter dem Förderelement C2 zu erkennen. Dieses erzeugt die höheren Druckdifferenzen verglichen zum Elementübergang C2-KL.

In Abbildung 8-17 sind die Druckdifferenzen und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL, C2-KN) von LDPE aufgetragen 400 U/min. Die Ergebnisse machen sichtbar, dass das Förderelement C1 einen größeren Einfluss auf die Strömungsbedingungen innerhalb des Schneckenelements hat. Während in Abbildung 8-16 das Knetelement KN einen maßgeblichen Einfluss auf die Druckdifferenz hat, kann in Abbildung 8-17 festgestellt werden, dass bei den Schneckenkombinationen mit C1, der Knetelementtype im Vorwärtshub keinen erkennbaren Einfluss auf die Druckdifferenz hat. Das bedeutet, dass das Element C1, unabhängig von dem gewählten Knetelement, die betragsmäßig höchsten Druckdifferenzen erzeugt. Die Schneckenkombination C1-KN erzeugt den höchsten Volumenstrom, C2-KL den geringsten im Vorwärtshub. Dies ist logisch, da C1 und KN die Elemente mit den längeren Flügeln sind, verglichen zu C2 und KL, und damit zwangsläufig mehr "fördern".



Abbildung 8-17: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL, C2-KN) von LDPE bei 400 U/min.

Abbildung 8-18 zeigt den Betrag der Deformationsrate am Auslass der zwei Elementübergänge C2-KL und C2-KN der Materialien LDPE (blau) und HDPE (grün) bei 400 U/min. Daraus geht hervor, dass das Material HDPE mit der niedrigeren Viskosität, höhere Deformationsraten erfährt, verglichen zu LDPE. Darüber hinaus ist zu erkennen, dass die beiden Materialien im Vorwärtshub die höheren Deformationsraten erfahren, wobei die Schneckenkombination C2-KN zu den höchsten Deformationsraten führt.



Abbildung 8-18: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min für ein Förderelement C2 und zwei Knetelemente KL und KN.

In Abbildung 8-19 ist der Betrag der Deformationsrate über die Schneckenrotation am Auslass der vier Elementübergänge (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) für das Material LDPE aufgetragen bei 400 U/min. Dabei sind die Kombinationen mit C1 grün und mit C2 blau dargestellt.



Abbildung 8-19: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) für LDPE.

Die Ergebnisse machen sichtbar, dass das Förderelement C1 den größten Einfluss auf die Strömungsbedingungen innerhalb der verschiedenen Schneckenkombinationen besitzt. Im Rückwärtshub weisen die C1-Kombinationen höhere Deformationsraten auf. Im Vorwärtshub liegt C1-KL mit C2-KN im Mittel näherungsweise bei den gleichen Deformationsraten. Dabei sind stärkere Fluktuationen in der Deformationsrate bei den Kombinationen mit dem C1-Element zu erkennen. Die Ursache kann in der durch den längeren Flügel erzeugten inhomogenen Geschwindigkeitsverteilung liegen. Dadurch entstehen komplexere Strömungsvorgänge mit lokalen Beschleunigungen. In Abbildung 8-20 ist die Druckdifferenz und der Volumenstrom des Materials PP0 (mit 0 M. % Kurzglasfasergehalt) aufgetragen bei 400 U/min und allen vier Elementübergängen.



Abbildung 8-20: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) für PP0 ohne Kurzglasfasergehalt bei 400 U/min.

Die Grafik verdeutlicht, dass die Elemente C1 und KN den Volumenstrom maßgeblich beeinflussen. So fördert C1-KN den höchsten Volumenstrom der vier Kombinationen. Die Druckdifferenz ist moderat und liegt unter 2,5 bar in allen vier Elementübergängen. Wobei im Vorwärtshub das C2-KL und im Rückwärtshub das C1-KL Element die geringsten Druckdifferenzen aufweist. Das KL-Element hat hier also einen maßgeblichen Einfluss.

In Abbildung 8-21 ist der Deformationsgeschwindigkeitsgradient über die Schneckenrotation von PP0 aufgetragen für alle vier Schneckenkombinationen bei 400 U/min. Auch hier ist zu erkennen, dass das Element C1-KN die höchsten Deformationsgeschwindigkeiten generiert, sowohl im Vorwärts- als auch im Rückwärtshub. Danach folgt C1-KL, wobei die Deformationen im Vorwärtshub näherungsweise gleich sind wie die des Elements C2-KN. Das heißt, die Elemente C1 und KN haben den größten Einfluss auf die Strömungsbedingungen innerhalb des Ko-Kneters. Auf Grund der steigenden Komplexität der Strömungsvorgänge, die mit dem C1-Element hervorgerufen werden, liegt ein inhomogenes Geschwindigkeitsfeld vor, was das Rauschen der Daten erklärt.



Abbildung 8-21: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) von PP0 ohne Kurzglasfasergehalt.

8.3.3.2 Carpow-Ansatz

Im folgenden Abschnitt wird nun erstmals der Carpow-Ansatz (vgl. Kapitel 8.1.2) angewendet mit aus der Literatur erhaltenen Materialdaten (siehe Tabelle 8-1). Untersucht wurde PP mit unterschiedlichem Anteil an Kurzglasfasern und die vier verschiedenen Elementübergänge bei 400 U/min. Ausgewertet wurden die Druckdifferenzen, der Volumenstrom sowie der Deformationsgeschwindigkeitsgradient am Auslass.

Im Verlaufe des Projektes kam es zu Instabilitäten und Abbrüchen der Simulationen bei der Verwendung des Carpow-Ansatzes. Um die Simulationen stabil zu bekommen, wurde zunächst ein vereinfachter zwei dimensionaler Testcase mit einfachen Strömungsvorgängen aufgebaut. Mit diesem Testcase kam es jedoch zu keiner Instabilität und die Simulation hat konvergiert. Die Komplexität der Strömungsbedingung wurde schließlich sukzessiv gesteigert. Zuerst wurde eine rotierende Schnecke mit glattem Zylinder simuliert. In einem weiteren Schritt wurde die Hubbewegung hinzugefügt. Auch diese Simulation sind konvergiert. Sobald die Pins hinzugefügt wurden, kam es wieder zu Instabilitäten. Bei genauerer Betrachtung der Deformationsgeschwindigkeitsgradienten wurde deutlich, dass nicht die hohen, sondern die zu geringen Deformationen die Instabilität hervorrufen. Die Viskosität wird bei geringen Deformationen zu groß. Daraufhin wurde die Implementierung wie folgt geändert:

$$\eta(|\dot{\gamma}|) = \frac{d_k}{\rho\left(\frac{\max(|\dot{\gamma}|, \dot{\gamma}_{min})}{\dot{\gamma}_{We}}\right)^n} + \frac{a}{\rho\left(1 + b \cdot |\dot{\gamma}|\right)^c}$$
8-18

Es muss nun ein $\dot{\gamma}_{min}$ im *transportProperties*-Dictionary als zusätzlicher Inputparameter übergeben werden. Sobald $\dot{\gamma}_{min} > |\dot{\gamma}|$ vorliegt, wird zur Berechnung der Viskosität $\dot{\gamma}_{min}$ verwendet. Im weiteren Verlauf wurde $\dot{\gamma}_{min} = 10^{-06}$ gewählt. Dadurch wird gewährleistet, dass die Viskosität nicht zu groß wird.

In Abbildung 8-22 ist die Druckdifferenz sowie der Volumenstrom aufgetragen über die Schneckenrotation des Materials PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt bei 400 U/min für die Schneckenkombination C2-KL.



Abbildung 8-22: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der Schneckenkombination C2-KL von PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt bei 400 U/min.

Es lässt sich feststellen, dass mit steigendem Glasfasergehalt die Druckdifferenz steigt. Auch steigt die Druckdifferenz auf bis zu ca. |8| bar im Vorwärts- und 6 bar im Rückwärtshub, während die Materialien LDPE und HDPE im Bereich |6| bar und 4 bar liegen (vgl. Abbildung 8-16). Aus den Verläufen des Volumenstroms geht hervor, dass diese näherungsweise identisch sind zwischen dem unterschiedlichen Glasfasergehalt. Auffällig ist jedoch, dass in den Verläufen der Druckdifferenz der Unterschied zwischen 20 M.% und 30 M.% sehr gering ausfällt, verglichen mit den Unterschieden zwischen 0 M.%, 10 M.% und 20 M.%. Dieses abweichende Verhalten zeigt sich auch im Deformationsgeschwindigkeitsgradienten am Auslass in Abbildung 8-23.



Abbildung 8-23: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min der Schneckenkombination C2-KL von PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt.

Aus der Abbildung geht hervor, dass der steigende Glasfasergehalt auch zu einem Anstieg der Deformation führt. Allerdings weicht PP30 (orange) davon ab. Daraufhin wurden die Viskositäten der Materialien mittels der Carpow-Funktion über der Scherrate aufgetragen (siehe Abbildung 8-24).



Abbildung 8-24: Viskosität über die Scherrate von PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt, die Carpow Parameter D, n, A, B, C und die jeweiligen Wendepunkte (Point($\dot{\gamma}_{We}(\omega_{We}), \eta_{We}$)), vgl. Tabelle 8-1.

Die Carpow-Parameter D, n, A, B, C zum Auftragen der Viskositätsfunktion wurden aus [81] entnommen (vgl. Tabelle 8-1). Die Darstellung verdeutlicht, dass die Viskositätskurve von PP30 (rot) verglichen zu den anderen Kurven abweicht und die Kurve PP20 (grün) sogar schneidet. Daraus lässt sich schließen, dass die Parameterangabe für PP30 in [81] fehlerhaft ist. Aus diesem Grund wird im weiteren Verlauf das Material PP30 nicht weiter untersucht.

In Abbildung 8-25 ist die Deformationsrate am Auslass über die Schneckenumdrehung des Materials PP mit 0, 10 und 20 M.% Kurzglasfasergehalt aller vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) bei 400 U/min aufgetragen. Aus der Grafik geht hervor, dass das Material PP20 die höchsten Deformationsgeschwindigkeitsgradienten hervorruft für die verschiedenen Schneckenkombinationen. Darüber hinaus hat das Förderelement C1 und das Knetelement KN den größten Einfluss auf die Strömungsvorgänge innerhalb der kombinierten Schneckenelemente, da sich die höchsten Deformationen im Vorwärtshub einstellen. Auch stellen sich größere Unterschiede zwischen den Peaks von Vor- und Rückwärtshub ein. Diese Unterschiede werden kleiner bei der Verwendung von KL und C2.



Abbildung 8-25: Die Deformationsrate über die Schneckenumdrehung des Materials PP mit 0, 10 und 20 M.% Kurzglasfasergehalt aller vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) am Auslass bei 400 U/min.

8.3.4 Nicht-Isotherme Simulation

Für die nicht-isothermen Simulationen wurde die Energiegleichung und der Carreau-Arrhenius-Ansatz implementiert (siehe Kapitel 8.1.3, Gleichung 8-12, 8-13). Dadurch soll die Temperaturabhängigkeit der Kunststoffschmelze berücksichtigt werden. Es wurde das KL- und das KN-Element bei 400 U/min untersucht. Die RB-Werte für die Temperatur sind in Tabelle 8-4 aufgelistet.

Tabelle 8-4: RB für die Temperatur.

patch	Einlass	Auslass	Zylinder	Pins	Schnecke
RB	Dirichlet	Neumann	Dirichlet	Dirichlet	Dirichlet
T in K	453,15	-	453,15	453,15	453,15

Alle *patches* werden auf einen fixen Wert von 453,15 K gesetzt außer das *patch Auslass*. Hier wird eine Neumann-RB gewählt und den Gradienten zu Null gesetzt.

In Abbildung 8-26 ist das Temperaturprofil des KL-Elements abgebildet bei einer Umdrehungsgeschwindigkeit von 400 U/min, bei einer 360° Umdrehung. Zu erkennen ist, dass ein stark inhomogenes Temperaturfeld mit Differenzen von bis zu 1000 K ausbildet, was nicht mit einem physikalisch realistischen Temperaturverlauf übereinstimmt.



Abbildung 8-26: Temperaturverlauf des KL-Elements bei 400 U/min von LDPE nach einer 360° Umdrehung.

In Abbildung 8-27, links, ist der Temperaturverlauf über die Schneckenlänge des Materials LDPE aufgetragen nach einer vollständigen Umdrehung des Elements KL um 360° bei 400 U/min. Diese Werte entsprechen den Temperaturdaten entlang der in Abbildung 8-27 (rechts) gezeigten schwarzen Linien, wobei 0 mm den Einlass und 0,077 mm den Auslass entspricht. In Abbildung 8-27, rechts, ist das Temperaturprofil im Längsschnitt abgebildet. Die Fließrichtung geht von oben nach unten. Es zeigt sich eine physikalische Temperaturverteilung mit einer deutlichen Abkühlung der Schmelze am Auslass bei weiteren Umdrehungen der Schnecke. Dies weist auf eine nicht stationäre Lösung hin. Dieses Verhalten verstärkt sich in Abbildung 8-28, in dem, bei gleichem Betriebspunkt, Element und Material, die Temperaturverläufe entlang der Schnecke nach der zweiten (links) und dritten (rechts) Umdrehung dargestellt sind.



 Abbildung 8-27: Links: Temperaturverlauf in K über die Schneckenlänge von 0 bis 0,077 m des Materials LDPE nach der ersten Umdrehung des Schneckenelements KL um 360° bei 400 U/min. Rechts: Temperaturprofil im Längsschnitt. Die schwarze Linie ist der T-Verlauf links. Fließrichtung ist von unten nach oben.

Mit zunehmender Berechnungszeit nimmt die Temperatur am Auslass weiter ab, was auf eine fehlerhafte numerische Lösung hindeutet. Problematisch ist dabei, dass die Simulationen konvergieren und kein numerischer Fehler angezeigt wird.



Abbildung 8-28: Temperaturverlauf in K über die Schneckenlänge von 0 bis 0,077 m des Materials LDPE des Schneckenelements KL bei 400 U/min. Links: nach der zweiten Umdrehung. Rechts: nach der dritten Umdrehung.

Zur Ursachenanalyse wurde ein vereinfachter Simulationsfall mit reduzierter Geometrie und vereinfachten Strömungsbedingungen erstellt. In diesem Szenario tritt das Problem nicht auf und der Temperaturverlauf bleibt konsistent mit den Randbedingungen. Dies deutet darauf hin, dass die komplexe Kombination aus Translation und Rotation der Schnecke sowie die resultierenden Vorzeichenwechsel der Strömungsparameter zu sprunghaften Temperaturänderungen führen. Obwohl die Rechnung nicht abbricht und der Solver konvergiert, liefern die Ergebnisse nicht physikalische Werte.

Es scheint, dass die Schneckenflügel während der Rotation ein stark heterogenes Temperaturprofil in den Rechenzellen herbeiführen, welches sich nicht unmittelbar an die realistischen Strömungsbedingungen anpasst (siehe Abbildung 8-26), sobald die Geometrie die Rechenzellen passiert hat. Sobald ein neuer Schneckenflügel eine bereits durch hohe Temperatur beeinflusste Zelle passiert, werden die bereits fehlerhaften Temperaturwerte weiterverwendet, wodurch sich das Problem über mehrere Zeitschritte hinweg verstärkt. Dies wird insbesondere für das KN-Element deutlich, da die längeren Flügel dazu führen, dass die Rechenzellen nahezu durchgängig einer Schneckengeometrie mit hohen Temperaturen ausgesetzt sind.

Die genaue Ursache dieses Problems konnte bislang nicht abschließend identifiziert werden. Weitere Untersuchungen sind erforderlich, um die Vorhersagegenauigkeit der nichtisothermen Berechnungen zu verbessern. Um den weiteren Verlauf des Projekts nicht zu verzögern, wurden die Simulationen zunächst unter der Annahme isothermer Bedingungen durchgeführt.

8.3.5 Doppelschnecke

Abschließend wurde die Simulation eines DSE aufgebaut und durchgeführt. Dabei wurden ein Knetblock (KB45_5_36) sowie ein Elementübergang bestehend aus einem Förderelement (FE_36_18) und dem Knetblock KB45_5_36 untersucht. Im weiteren Verlauf werden diese als FE (Förderelement) und KB (Knetblock) bezeichnet. Für die Simulation wurde der Carreau-Ansatz verwendet, wobei das Materialverhalten von LDPE analysiert wurde.

8.3.5.1 Simulationsaufbau

Der Simulationsaufbau für den DSE erfolgt analog zum Ko-Kneter. Auch hier werden *patches* zur Definition der Randbedingungen (RB) festgelegt, die in Abbildung 8-29 am Beispiel des Elementübergangs FE-KB farblich dargestellt sind. Die Kunststoffschmelze tritt über den Einlass ein und verlässt das Element am Auslass. Die gewählten Randbedingungen sind in Tabelle 8-5 zusammengefasst. Die Initialgeschwindigkeit U_0 wird basierend auf die Eintrittsfläche, der Schmelzedichte sowie einem festgelegten Durchsatz von 10 kg/h berechnet.

patch	RB für Geschwindigkeit U	RB für Druck <i>p</i>	U ₀ von LDPE und in m/s
Einlass	Dirichlet	Neumann	0,00850
Auslass	Neumann	Dirichlet $p_0 = 0$ bar	-
Zylinder	Dirichlet	Neumann	0
			Umdrehungsgeschwindigkeit
REschnecke	movingImmersedBoundry- Velocity	mixedIb	400 U/min
	movingImmersedBoundry-		
LIschnecke	Velocity	mixedIb	400 U/min

Tabelle 8-5: RB für die Doppelschnecke mit einer rechten (RE) und linken (LI) Schnecke.

Das Pre-Processing entspricht dem des Ko-Kneters. Auch hier müssen die CAD-Geometrien der Schneckenelemente, zur Verfügung gestellt von Coperion GmbH, Stuttgart, Deutschland, für die Simulation angepasst werden. Der wesentliche Unterschied besteht in der synchronen Rotation zweier Schnecken. Dies erfordert die Einbindung zweier separater Schneckenelemente als Oberflächengeometrien in Form von *stl*-Dateien im Simulationscase. Zusätzlich wurde ein neuer Zylinder konstruiert, der beide Schnecken umfasst. Zur Reduzierung des numerischen Aufwands wird, wie bereits beim Ko-Kneter, das Schneckenspiel zwischen Schnecke und Zylinder vernachlässigt. Aufgrund der geringen Spaltbreiter wäre eine hochauflösende Vernetzung erforderlich, um das Strömungsprofil innerhalb dieses Bereichs abzubilden, was zu einem erheblichen Anstieg der Rechenzeit führen würde.



Abbildung 8-29: Schematische Darstellung der definierten *patches* (farblich unterteilt) am Elementübergang FE-KB. Die Schmelze fließt im Einlass ein und tritt am Auslass aus. Für den Zylinder gilt die no-slip-Bedingung. Die Schnecken werden im Sinne der IBS behandelt.

Der neu konstruierte Zylinder wurde entsprechend vernetzt und ist in Abbildung 8-30 dargestellt. Zur Erhöhung der Genauigkeit wurde das Rechengitter in der Mitte des Zylinders verfeinert, da hier die Schnecken ineinandergreifen und besonders schmale Spaltbereiche entstehen. Das resultierende Volumennetz umfasst etwa 7 Millionen Zellen.



Abbildung 8-30: Die Vernetzung der Rechendomäne des DSE mit einer Verfeinerung des Netzes im Zentrum des Zylinders.

Der Simulationscase für das einzelne KB-Element ist bis auf die Länge der Schnecke identisch zur Schneckenkombination FE-KB. Darum wird aus diesem Grunde auf die schematische Abbildung des Cases verzichtet.

8.3.5.2 Simulationsauswertung

Ausgewertet wurde schließlich der Druck, der Volumenstrom und die Schergeschwindigkeit eines einzelnen Element KB sowie für ein Elementübergang FE-KB.

Abbildung 8-31 zeigt den Verlauf der Druckdifferenz und des Volumenstroms eines KB-Elements sowie die Kombination aus FE-KB Elementen über die Schneckenrotation bei 400 U/min.



Abbildung 8-31: Druckdifferenz und Volumenstrom über die Schneckenrotation für ein einzelnes KB-Element und ein Elementübergang FE-KB bei 400 U/min.

Der Verlauf der Druckdifferenz zeigt, dass durch das vorangeschaltete FE-Element die Druckdifferenz auf das Doppelte erhöht wird, verglichen mit dem einzelnen KB-Element. Auch steigt der Volumenstrom um fast 10 cm³/s.

In Abbildung 8-32 ist der Betrag des Deformationsgeschwindigkeitsgradients aufgetragen über die Schneckenrotation bei 400 U/min für das Material LDPE am Auslass des KB- und FE-KB-Elements. Daraus geht hervor, dass das einzelne KB-Element eine geringe Deformationsrate am Auslass erfährt. Das bedeutet, dass das Förderelement einen wesentlichen Einfluss auf die Schergeschwindigkeiten ausübt. Das ist entgegen der Erwartung, da in der Realität ein Knetblock vermutlich höhere Deformationsraten generiert als ein Förderelement. Dies kann in der Vernachlässigung des Schneckenspiels zwischen Zylinder und Schnecke begründet sein. Denn die höchsten Deformationsraten werden in diesem Spalt generiert, über die Simulation aber nicht abgebildet. Das bedeutet, diese Annahme, wie sie auch in der Literatur oft zu finden ist, muss in Bezug auf den DSE in weiterfolgenden Arbeiten kritisch hinterfragt und überprüft werden.



Abbildung 8-32: Betrag des Deformationsgeschwindigkeitstensor am Auslass über die Schneckenrotation für ein einzelnes KB-Element und ein Elementübergang FE-KB bei 400 U/min.

8.3.6 Vergleich DSE mit dem Ko-Kneter

Als letzter Punkt wurde im Rahmen des Projektes ein Vergleich zwischen DSE und Ko-Kneter durchgeführt. Um einen Vergleich mit den verschiedenen Elementen der verschiedenen Prozesse durchführen zu können, wird, die in Kapitel 8.3.2 eingeführte Scherung (8-17), über die Länge des Ko-Kneter Elements gewichtet mit $\frac{L_k - L_i}{L_k}$, wobei L_K die Länge des Ko-Kneters ist und i = DSE,K.

In Abbildung 8-33 ist die Scherung aufgetragen über die Schneckenrotation der Ko-Kneter-Elemente KN und KL sowie das DSE-Element KB für das Material LDPE bei 400 U/min. Aus der Abbildung wird ersichtlich, dass im Mittel das KB-Element des DSE (orange) das Material LDPE höher auf Scherung beansprucht, verglichen mit den Ko-Kneter-Elementen.

In Abbildung 8-34 ist die Scherung aufgetragen über die Schneckenrotation des Elementübergangs C1-KL des Ko-Kneters sowie die Schneckenkombination FE-KB des DSE für das Material LDPE bei 400 U/min. Daraus wird ersichtlich, dass das Förderelement FE in DSE einen erheblichen Einfluss auf die Scherung im System hat. Die Schneckenkombination C2-KL des Ko-Kneters führt zu einer deutlich geringeren Scherbeanspruchung im System. Aber auch hier müssen die Ergebnisse in Bezug auf den DSE mit Vorsicht betrachtet werden, da auch hier der Spalt zwischen Schnecke und Zylinder, aufgrund des extrem erhöhten Rechenaufwandes, vernachlässigt wurde.



Abbildung 8-33 Scherbeanspruchung innerhalb der Elemente KN, KL und KB über die Schneckenrotation des Materials LDPE bei 400 U/min.



Abbildung 8-34: Scherbeanspruchung innerhalb der Elementübergänge über die Schneckenrotation des Materials LDPE bei 400 U/min.

9 Zusammenfassung

Das Prozessverhalten des Ko-Kneters wurde in dem Projekt umfassend für verschiedene Materialsysteme untersucht. Dabei wurden neben experimentellen Untersuchungen auch analytische und numerische Simulationen durchgeführt.

Für die experimentellen Untersuchungen wurde ein MX30-Labor-Ko-Kneter verwendet. Dieser wurde mit Messtechnik zur Druck- und Temperaturbestimmung ausgestattet und in einem breiten Versuchsplan neben verschiedenen Materialien Zylindertemperaturen, Drehzahlen und Durchsätze variiert. Dabei wurden auch die Füllgrade bestimmt. Der Ko-Kneter wurde mit einer besonders scherintensiven Schneckenkonfiguration nahe der Prozessgrenzen betrieben, um Effekte der Prozessparameter gut sichtbar zu machen.

Der Verlauf der Massetemperatur wird im Wesentlichen durch die eingestellte Drehzahl und die Materialeigenschaften (Viskosität, Aufschmelzenthalpie) bestimmt. Bei einer höheren Drehzahl steigt auch die Massetemperatur. Die Temperaturdifferenz vergrößert sich im hinteren Schneckenbereich. Die hohen Temperaturen (teilweise über 300 °C) stellen kein Merkmal des Ko-Kneters, sondern gezielt durch die scherintensive Schnecke herbei geführte Extremwerte dar. Dies zeigt das Potential des Ko-Kneters, sehr hohe Mischleistungen und damit auch Temperaturen zu erzeugen. Das kann beispielsweise genutzt werden, um Materialien für das chemische Recycling durch Pyrolyse effizient auf hohe Temperaturen zu bringen. Diese Extremsituationen sind aber auch aus modelltechnischer Sicht von großer Wichtigkeit, da durch den Fit dieser Werte voraussichtlich auch geringere Temperaturen gut detektiert werden können. Wie im Vorgängerprojekt (18650 N) gezeigt, treten bei der Verwendung von geeigneten Schnecken wesentlich geringere Temperaturen auf.

Hinsichtlich des Druckaufbauverhalten zeigt sich bei der Verwendung von Knetelementen des Typs KN statt KL, wobei der Typ KN längere Flügel und eine stärkere Scherwirkung aufweist, eine Abhängigkeit von der Schneckenlänge. Der Druck ist vor bzw. in der letzten Knetzone am höchsten. Der Füllgrad des Extruders wurde über Dead-Stopp-Untersuchungen ermittelt. Hier zeigt sich eine Abhängigkeit des Füllgrads von der Drehzahl und der Materialviskosität. Insgesamt weisen PS und PA6, insbesondere im düsennahen Schneckenbereich, wesentlich höhere Füllgrade als LDPE und HDPE auf. Der Leistungseintrag ist von der Drehzahl und den Materialeigenschaften, insbesondere der Viskosität in der Aufschmelzzone, abhängig. HDPE zeigt keine wesentlichen Unterschiede im Leistungseintrag zu HDPE mit Glashohlkugeln. Bei Erhöhung des Durchsatzes steigt auch die kumulierte Leistung. Wird die Zylindertemperatur erhöht, sinkt der Leistungseintrag aufgrund der tendenziell höheren Schmelzetemperaturen und damit einhergehenden niedrigeren Viskositäten. Im Vergleich der beiden Schneckenkonfigurationen Standard und Standard-KN ist kein Unterschied in der kumulierten Leistung zu beobachten.

Zudem wurden experimentelle Versuche am DSE ZSK 26 durchgeführt und die Temperatur- und Druckverläufe ausgewertet. Für einen Teil der Versuche wurde eine Drossel eingesetzt. Bei Erhöhung der Drehzahl erhöhte sich die Temperatur. Bei der Drossel in geschlossener Stellung erhöhte sich der an der Schneckenspitze gemessene Druck. Für den Ko-Kneter wurde mit der Software "SimKo" eine analytische Modellierung durchgeführt. Materialdaten, Geometriedaten, Verfahrensparameter und die Extruderkonfiguration wurden als Eingabedaten genutzt und die Verläufe von Druck, Füllgrad und Aufschmelzgrad über die Schneckenlänge simuliert. Zudem wurde die dissipierte Leistung berechnet. Im Vergleich der berechneten zu den experimentell erhaltenen Daten ist erkennbar, dass Temperaturen, Drücke, der Füllgrad und die Leistung in der Simulation unterschätzt werden. Der Verlauf der Temperatur über die Zylinderlänge konnten in der Modellierung gut wiedergegeben werden. Zur Verbesserung der Modellierung wurden in der Annahme, dass Abweichungen in der berechneten Gesamtleistung auf eine ungenaue Abschätzung des Füllgrads zurückzuführen sind, Korrekturfaktoren eingeführt. Dieser wurde aus Leistungsdaten der Voll- und Teilfüllung bestimmt. Somit wurde eine bessere Übereinstimmung der Leistungsdaten der experimentell bestimmten und der berechneten Daten erreicht. Der mittlere Füllgrad liegt durch die Korrektur näher an den experimentellen Daten. Es ergibt sich insgesamt durch die Einführung der Korrekturfaktoren aber nur eine geringe Verbesserung der Modellgenauigkeit im Vergleich zu den experimentell bestimmten Daten. Deshalb wurde im nächsten Schritt die Modellierung des Druckaufbauverhaltens betrachtet. Aus Modellierungen der Einschnecke wurden die Kennzahlen der Förder- und Rückstromverhältnisse als konstante Größen angenommen (A_{K/N}=1, $B_{K/N} = 1/n^{0.94}$). Diese Annahme ist für den Ko-Kneter vermutlich unzutreffend. Über erste empirische Versuche, die Kennzahlen zu variieren, konnte festgestellt werden, dass durch geeignete Wahl der Kennzahlen die Darstellung des Strömungsverhalten verbessert werden konnte. Innerhalb der Projektzeit kann so eine komplexe Modellierung aufgrund des unerwarteten Mehraufwands zwar nicht mehr vorgenommen werden, die Erkenntnisse ermöglichen aber bereits eine Modellkalibrierung im Praxiseinsatz. Anhand der Daten der Geschwindigkeitsanteile (vz, vy, vx) aus der Numerik wird durch das Projekt zudem zukünftig eine korrekte analytische Modellierung ermöglicht. Zudem sind nun mehr experimentelle Daten vorhanden, sodass ausreichend Daten für erweiterte Analysen vorliegen und daher für eine zukünftige Verbesserung der Modellierung weitere experimentellen Versuche reduziert sind bzw. präziser geplant werden können. Somit ist mit den Arbeiten in diesem Projekt eine sehr gute Ausgangslage für weitere Forschungsarbeiten geschaffen worden, was die Attraktivität für kmU deutlich erhöht.

Es wurde erfolgreich ein dreidimensionales Simulationsmodell für den Ko-Kneter-Prozess aufgebaut, das die komplexe Bewegung der Schnecke, bestehend aus Rotation und Translation, realistisch abbildet. Dabei wurde die Strukturviskosität der Kunststoffschmelze berücksichtigt. Das entwickelte Modell ist auf verschiedene Schneckenelemente übertragbar und ermöglicht eine detaillierte Analyse der Strömungsbedingungen.

Die Simulationen zeigen, dass sowohl die Geometrie der Schneckenelemente als auch die Materialeigenschaften einen wesentlichen Einfluss auf die Strömungsparameter haben. Die Druckdifferenz, die Deformationsraten und der Volumenstrom variieren signifikant in Abhängigkeit von den Schneckenelementen und den verwendeten Materialien. Dabei muss zwischen Vorwärts- und Rückwärtshub unterschieden werden, da sich in beiden Phasen unterschiedliche Strömungsverhältnisse ausbilden. Höhere Drehzahlen führen zu steigenden Deformationsraten, wobei im Vorwärtshub die höchsten Werte auftreten. Besonders das Förderelement C1 und das Knetelement KN beeinflussen die Strömungsverhältnisse stark.

Die Analyse der Knetelemente zeigt, dass KN aufgrund der längeren Flügel höhere Deformationsraten erzeugt als KL. Dadurch entstehen größere Scherkräfte, die die Durchmischung begünstigen, jedoch auch zu höheren Druckverlusten und Scherbeanspruchungen führen. Diese Effekte sind besonders im Vorwärtshub ausgeprägt, während im Rückwärtshub geringere Deformationsraten und Druckverluste auftreten.

Durch die Implementierung des Carpow-Ansatzes konnten erstmals hochgefüllte Kunststoffe in der Simulation berücksichtigt werden. Die verwendeten Materialparameter wurden aus der Literatur entnommen, da experimentelle Messungen keine typischen rheologischen Eigenschaften hochgefüllter Compounds zeigten. Die Simulationsergebnisse bestätigen, dass mit steigendem Füllstoffgehalt die Druckdifferenz zunimmt.

Die nicht-isothermen Simulationen, die mit dem Carreau-Arrhenius-Ansatz durchgeführt wurden, zeigten unphysikalische Temperaturverläufe, insbesondere in der Nähe der Schneckenflügel. Trotz konvergierender Simulationen traten unrealistische Temperaturverläufe auf. Die genaue Ursache konnte nicht abschließend geklärt werden, weshalb zur Sicherstellung verlässlicher Ergebnisse die Berechnungen unter isothermen Bedingungen weitergeführt wurden.

Das entwickelte Vorgehen wurde erfolgreich auf den DSE übertragen. Der Vergleich zwischen DSE und Ko-Kneter zeigt, dass der DSE im Mittel höhere Scherbeanspruchungen erzeugt, insbesondere in Kombination mit Förderelementen. Dies bestätigt erstmals die tendenziellen Aussagen von Anwendern und ermöglicht zukünftig bisher rein empirisch gesammelte Erfahrung besser anzuwenden. Bei der Simulation des DSE wurde, analog zum Ko-Kneter, das Schneckenspiel zwischen Schnecke und Zylinder vernachlässigt. Diese Annahme könnte jedoch im Hinblick auf die realen Strömungsverhältnisse im DSE kritisch sein.

Mit dem Simulationsmodell steht nun ein leistungsfähiges Werkzeug zur Verfügung, das eine detaillierte Prozessvorhersage für den Ko-Kneter und den DSE ermöglicht. Die implementierten Modelle berücksichtigen die komplexe Bewegung der Schnecke sowie das strukturviskose Verhalten der Kunststoffschmelze und bieten eine fundierte Grundlage zur Analyse der Strömungsbedingungen. Durch die frei zugängliche Software *foamExtend* kann die Methode ohne zusätzliche Lizenzkosten in der Industrie und Forschung eingesetzt werden. Damit trägt die Simulation nicht nur zur besseren Prozessverständnis bei, sondern kann auch zur gezielten Optimierung von Misch- und Förderprozessen genutzt werden in Abhängigkeit von den Materialien.

10 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2-1: Ko-Kneter Gesamtaufbau (links, [18]) und Aufnahme eines
Förderelements Typ C1 und eines Mischelements (Typ KN) eines MX30 BUSS Ko-
Kneters (rechts)4
Abbildung 2-2: Vergleich von simulierten und gemessenen Verweilzeiten (links) und
spezifischen Prozesspunkt für PE (oben) und PS (unten)
Abbildung 2-3: Gegenüberstellung körperangenasster Netze (A) und Netze für die
Verwendung der IBM (B) [60]
Abbildung 2-4: Geschwindigkeitsverteilung einer Ko-Kneter-Geometrie an verschiedenen Flügelpositionen
Abbildung 2-5:3D-Berechnung eines Ko-Kneters anhand der IBS: Druck (links),Geschwindigkeitsprofil (mittig) und Schergeschwindigkeit (rechts).9
Abbildung 2-6: Vergleich zwischen konventioneller Simulation (BF) und IBS anhand des Saxton-Mischers [71]10
Abbildung 2-7: Geschwindigkeitsprofil des Förderelements (links), eines Mischelements
(mittig) und eines Knetelements (rechts) nach einer kompletten Umdrehung (Zeit = 0,5 s).
Abbildung 4-1: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C
des LDPE Lupolen 2420 F 13
Abbildung 4-2: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 170 °C des PS 158 N
Abbildung 4-3: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 240 °C des PA6 Ultramid B27
Abbildung 4-4: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C
des HDPE M1053
Abbildung 4-5: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des HDPE-10 GC
Abbildung 4-6: Gemessene Viskositäten und extrapolierter Viskositätsverlauf bei 180 °C des HDPE-20 GC
Abbildung 5-1: Aufbau der Standardschnecke des Ko-Kneters MX-30 mit einem Stauringdurchmesser (RR) von 22 mm
Abbildung 5-2: Das KL-11-Element mit kurzen Flügeln und viel freiem Volumen (links) sowie das KN-11-Element mit langen Flügeln und wenig freiem Volumen (rechts) [76].
Abbildung 5-3: Verfahrensverlängerung des Ko-Kneters inklusive Drosselsystem 19
Abbildung 5-4: Verschlussstopfen mit Sensorbohrung
Abbildung 5-5: Positionen der integrierten Temperatursensoren T1 – T4 sowie Positionen der eingebauten Sensoren für Temperaturmessungen (IR-1 – IR-4) und Druck (P1 – P3).

Abbildung 5-6: Schematischer Messaufbau der Druckmessung22
Abbildung 5-7: Beispielhafte Darstellung einer Verteilungsfunktion mit minimaler
Verweilzeit <i>t</i> _{min} und mittlerer Verweilzeit
Abbildung 5-8: Zonen für die Bestimmung des Füllgradverlaufs über die Zylinderlänge.
Abbildung 6-1: Position der PT100-Sensoren (T1 – T4), IR-Sensoren (IR-1 – IR-4) und des Einstechthermometers
Abbildung 6-2: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge in Abhängigkeit von der Drehzahl für HDPE (Versuchsnr. V1, V2)
Abbildung 6-3: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12)
Abbildung 6-4: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19)30
Abbildung 6-5: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22)
Abbildung 6-6: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS in den Schneckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28, V29)31
Abbildung 6-7: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, HDPE-10 GC, HDPE-20 GC, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12)
Abbildung 6-8: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19)34
Abbildung 6-9: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22)
Abbildung 6-10: Druckverläufe über die Zylinderlänge von HDPE und PS in den Schneckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28, V29)35
Abbildung 6-11: Aufgeklappter Zylinder des Ko-Kneters zur Bestimmung der Füllgrade in den definierten Zonen bei der Verarbeitung von HDPE bei einer Drehzahl von 400 U/min (oben) bzw. 600 U/min (unten)
Abbildung 6-12: Füllgrad <i>f</i> über die Zylinderlänge von HDPE, LDPE, PS und PA6 bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min37
Abbildung 6-13: Kumulierte Leistung <i>P</i> bei der Verarbeitung von HDPE, LDPE, PS, PA7, HDPE-10 GC und HDPE-20 GC bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1 – V12)
Abbildung 6-14: Kumulierte Leistung <i>P</i> bei der Verarbeitung von HDPE und PS bei einem Durchsatz von 5, 8 bzw. 10 kg/h (Versuchsnr. V1, V5, V13, V14, V18, V19)39

Abbildung 6-15: Kumulierte Leistung <i>P</i> bei der Verarbeitung von HDPE und PS bei einer Zylindertemperatur von 180 °C, 200 °C bzw. 220 °C (Versuchsnr. V1, V5, V16, V17, V21, V22).
Abbildung 6-16: Kumulierte Leistung <i>P</i> bei der Verarbeitung von HDPE und PS in den Schneckenkonfigurationen "Standard" und "Standard KN" bei einer Drehzahl von 400 U/min bzw. 600 U/min (Versuchsnr. V1, V2, V4, V5, V24, V25, V28, V29) 40 Abbildung 6-17: Temperaturverläufe über die Zylinderlänge bei der Verarbeitung von LDPE in zwei Drosselstellungen (geschlossen bzw. offen) und zwei Drehzahlen (200
bzw. 400 U/min)
Abbildung 7-1: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Massetemperaturen entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6)
Abbildung 7-2: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Druckverläufen entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6)
Abbildung 7-3: Gegenüberstellung von simulierten und gemessenen Füllgraden entlang des Ko-Kneters für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6)
Abbildung 7-4: Gegenüberstellung von simulierter und gemessener kumulierter Leistung für HDPE, LDPE und PS bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V6)
Abbildung 7-5: Gegenüberstellung von korrigierter simulierter und gemessener kumulierter Leistung für HDPE und LDPE bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min (Versuchnr. V1 – V4)
Abbildung 7-6: Experimentell bestimmte und mit Korrekturfaktor berechnete Temperatur-, Druck- und Füllgradverläufe über der Zylinderlänge bei der Verarbeitung von HDPE bzw. LDPE bei einer Drehzahl von 400 bzw. 600 U/min
Abbildung 7-7: Druck-Durchsatzverhalten bei Kanalförderung, Zwangsförderung der Pins und Rückströmung durch die Nuten
Abbildung 7-8: Vergleich der experimentellen (blaue Punkte), simulierten (blaue Linie) und der kennzahlangepassten (grüne, gestrichelte Linie) Temperatur-, Druck- und Füllgradverläufe entlang der Zylinderlänge und der Leistungsdaten bei der Verarbeitung von HDPE bei einer Drehzahl von 400 U/min51
Abbildung 8-1: Schneckenelemente von links nach rechts: Förderelemente C1(hell grau) und C2 (dunkel grau). Knetelemente KN (orange) und KL (gelb)
Abbildung 8-2: Aufbereitetes Knetelement KL mit Zylinder und Pins im Sinne der IBS.

Abbildung 8-3: Farbliche Darstellung der definierten <i>patches</i> am KL-Element. Die Schnecke fließt im <i>Einlass</i> ein und tritt am <i>Auslass</i> aus. Für <i>Pins</i> und <i>Zylinder</i> gilt die no- slip Bedingung. Die Schnecke wird im Sinne der IBS behandelt
Abbildung 8-4: Förderelement C2 als Oberflächengeometrie. Links: Direkt exportiert aus der CAD-Software mit uneinheitlichen Dreiecken. Rechts: Aufbereitet und mit gleichmäßgen Dreiecken
Abbildung 8-5: Das Volumennetz mit ca. 870.000 Zellen und Verfeinerung um den Pin mit dem aufbereitetem Förderelement C2 (einheitliche Dreiecke)
Abbildung 8-6: Links: Die Geschwindigkeit in y-Richtung über der Schneckenlänge von LDPE bei 400 U/min und unterschiedlichen Positionen des Förderelements C2 (324°- 366°). Rechts: Förderelement (grün) mit Zylinder (rot) und Auswertelinie (weiß) für die Geschwindigkeit bei einer Schneckenposition von 360°
Abbildung 8-7: Geschwindigkeit in y-Richtung über der Schneckenlänge C2. Links: PS bei 400 und 600 U/min. Rechts: LDPE (Lupolen), HDPE (M1053) und PS bei 400 U/min. Die Schneckenposition ist für beide 360°
Abbildung 8-8: Der Druckverlust und Volumenstrom über die Schneckenposition von PS bei 400 U/min des Förderelements C261
Abbildung 8-9: Links: Volumennetz (blau) mit 1.500,000 Zellen am Beispiel des KL- Elements (schwarz). Rechts: Vergrößerung des Ausschnitts im roten Kasten: Pin zwischen zwei Flügelelementen
Abbildung 8-10: Die Magnitude der Geschwindigkeit bei einer Position des KL-Elements an vier Schnittstellen (Plane 1-4). Die Fließrichtung ist in z-Richtung. Die Pfeile zeigen die Orientierung der Magnitude der Geschwindigkeit
Abbildung 8-11:Links: Druckdifferenz ∆p und Volumenstrom V ⁺ von HDPE des KL- Elements. Rechts: Druckdifferenz des KN- (dunkel) und KL- (hell) Elements über der Schneckenrotation. Beide Abbildungen bei 400 U/min63
Abbildung 8-12: Links: Betrag des Deformationsgradienten des KN-Elements bei 400 U/min. Rechts: Betrag des Deformationsgradienten des KN- (hell) und KL- (dunkel) Elements für das Material LDPE bei 400 (orange) U/min und 600 (grün) U/min. Von Plane 2
Abbildung 8-13: Scherbeanspruchung der Materialien PS, LDPE und HDPE bei unterschiedlichen Umdrehungsgeschwindigkeiten im KN-Element
Abbildung 8-14:Vergleich der Scherbeanspruchung zwischen Knetelementen KL und KN der Materialien PS und HDPE bei 400 U/min66
Abbildung 8-15: Längsschnitt des Volumennetzes (blau) am Beispiel des C1-KL- Elements (rot). Fließrichtung ist von rechts nach links. Volumennetz ist ein Hohlzylinder, mit einem kleineren Innendurchmesser als der Schneckenkerndurchmesser
Abbildung 8-16: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der zwei Schneckenkombinationen (C2-KL, C2-KN) von LDPE und HDPE bei 400 U/min

Abbildung 8-17: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL, C2-KN) von LDPE bei 400 U/min
Abbildung 8-18: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min für ein Förderelement C2 und zwei Knetelemente KL und KN
Abbildung 8-19: Der Betrag der Deformationsrate am Auslass über die Schneckenrotation bei 400 U/min der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) für LDPE
Abbildung 8-20: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) für PP0 ohne Kurzglasfasergehalt bei 400 U/min
Abbildung8-21:DerBetragderDeformationsrateamAuslassüberdieSchneckenrotationbei400U/mindervierSchneckenkombinationen(C1-KL, C1-KN,C2-KLundC2-KN)vonPP0ohneKurzglasfasergehalt
Abbildung 8-22: Die Druckdifferenz und der Volumenstrom über die Schneckenrotation der Schneckenkombination C2-KL von PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt bei 400 U/min
Abbildung8-23:DerBetragderDeformationsrateamAuslassüberdieSchneckenrotationbei 400 U/minderSchneckenkombinationC2-KL von PP mit 0, 10,20 und 30 M.%Kurzglasfasergehalt
Abbildung 8-24: Viskosität über die Scherrate von PP mit 0, 10, 20 und 30 M.% Kurzglasfasergehalt, die Carpow Parameter D, n, A, B, C und die jeweiligen Wendepunkte (Point(γ We(ω We), η We)), vgl. Tabelle 8-1
Abbildung 8-25: Die Deformationsrate über die Schneckenumdrehung des Materials PP mit 0, 10 und 20 M.% Kurzglasfasergehalt aller vier Schneckenkombinationen (C1-KL, C1-KN, C2-KL und C2-KN) am Auslass bei 400 U/min
Abbildung 8-26: Temperaturverlauf des KL-Elements bei 400 U/min von LDPE nach einer 360° Umdrehung
Abbildung 8-27: Links: Temperaturverlauf in K über die Schneckenlänge von 0 bis 0,077 m des Materials LDPE nach der ersten Umdrehung des Schneckenelements KL um 360° bei 400 U/min. Rechts: Temperaturprofil im Längsschnitt. Die schwarze Linie ist der T- Verlauf links. Fließrichtung ist von unten nach oben
Abbildung 8-28: Temperaturverlauf in K über die Schneckenlänge von 0 bis 0,077 m des Materials LDPE des Schneckenelements KL bei 400 U/min. Links: nach der zweiten Umdrehung. Rechts: nach der dritten Umdrehung
Abbildung 8-29: Schematische Darstellung der definierten <i>patches</i> (farblich unterteilt) am Elementübergang FE-KB. Die Schmelze fließt im Einlass ein und tritt am Auslass aus. Für den Zylinder gilt die no-slip-Bedingung. Die Schnecken werden im Sinne der IBS behandelt
Abbildung 8-30: Die Vernetzung der Rechendomäne des DSE mit einer Verfeinerung des Netzes im Zentrum des Zylinders

Abbildung 8-31: Druckdifferenz und Volumenstrom über die Schneckenrotation für einzelnes KB-Element und ein Elementübergang FE-KB bei 400 U/min	ein .79
Abbildung 8-32: Betrag des Deformationsgeschwindigkeitstensor am Auslass über Schneckenrotation für ein einzelnes KB-Element und ein Elementübergang FE-KB 400 U/min	die bei .80
Abbildung 8-33 Scherbeanspruchung innerhalb der Elemente KN, KL und KB über Schneckenrotation des Materials LDPE bei 400 U/min	die .81
Abbildung 8-34: Scherbeanspruchung innerhalb der Elementübergänge über Schneckenrotation des Materials LDPE bei 400 U/min	die .81
Abbildung 14-1: pvT-Diagramm von LDPE Lupolen 2420F Abbildung 14-2: pvT-Diagramm von PS 158N	.97 .97
Abbildung 14-3: pvT-Diagramm von PA6 Ultramid T040.	.97
Abbildung 14-4: pvT-Diagramm von HDPE-10 GC.	.98 .98
Abbildung 14-6: pvT-Diagramm von HDPE-20 GC.	.98

11 Literatur

- [1] Plasticseurope Deutschland e.V., Hg., "Geschäftsbericht 2019," Brüssel, 2020.
- [2] Plasticseurope, "Plastics-the Facts 2020," Brüssel, 2020.
- [3] Wirtschaftsverband der deutschen Kautschukindustrie e. V., "Die Kautschukindustrie 2019/20," Apr. 2020.
- [4] K. Kohlgrüber, Hg. Der gleichläufige Doppelschneckenextruder: Grundlagen, Technologie, Anwendungen, 2. Aufl. München: Hanser, 2016.
- [5] M. Bastian und T. Hochrein, *Einfärben von Kunststoffen: Produktanforderungen Verfahrenstechnik Prüfmethodik*, 2. Aufl. München: Hanser, 2018.
- [6] K. Kohlgrüber, M. Bierdel und H. Rust, Hg. Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung: Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. München: Hanser, 2019.
- [7] "INDAG Maschinenbau GmbH | Produkte." Zugriff am: 8. Juni 2022. [Online.] Verfügbar: https://indag.com/produkte
- [8] U. Janoske und W. Pauer, IGF-Vorhaben Nr. 21058 N: Experimentelle und numerische Untersuchung eines kontinuierlich durchströmten Rotor-Stator-Mischsystems für Newtonsche und nicht-Newtonsche, mischbare hochviskose Stoffsysteme, 2020 - 2022.
- [9] J. Rudloff, M. Lang, K. Kretschmer, P. Heidemeyer, M. Bastian und M. Koch, "Analysis of the process behavior for planetary roller extruders," in *Shaping the future by engineering : 58th IWK, Ilmenau Scientific Colloquium, Technische Universität Ilmenau, 8 - 12 September 2014*, Ilmenau: Univ.-Verl. Ilmenau, 2014, S. 105.
- [10] J. Rudloff, K. Kretschmer, P. Heidemayer, M. Bastian und M. Koch, Simulation des Prozessverhaltens von Planetwalzenextrudern. Dortmund: Jahrestreffen der Fachgemeinschaft Prozess-, Apparate- und Anlagentechnik, 2012.
- [11] J. Rudloff, M. Lang, K. Kretschmer, P. Heidemeyer, M. Bastian und M. Koch, "A mathematical model describing the solid conveying and melting behavior of planetary roller extruders," in 29th International Conference of the Polymer-Processing-Society (PPS), Bd. 1593, S. 592–595, doi: 10.1063/1.4873850.
- [12] J. Rudloff, M. Wilhelm, M. Lang, P. Heidemeyer und M. Bastian, *Analysis and simulation of the melting behavior of polymer materials in co-kneaders* (Engineering for a changing world : Proceedings [2.3.P1]). Ilmenau: Universitätsbibliothek Ilmenau, 2017.
- [13] J. Rudloff, M. Wilhelm, M. Lang, P. Heidemeyer und M. Bastian, "Analysis of the process behavior of co-kneaders," in *AIP Conference Proceedings*, 2019, doi: 10.1063/1.5084808.
- [14] J. Kattinger, J. Kettemann und C. Bonten, "Numerical 3D simulation of a cokneader in OpenFOAM," in *AIP Proceedings*, Bd. 2289, S. 20031, doi: 10.1063/5.0028367.

- [15] K. Kretschmer, J. Rudloff, P. Heidemeyer und M. Bastian, "A physical mathematical model describing the process behaviour of planetary roller extruders," in 27th PPS Annual meeting, Marokko, 2011.
- [16] J. Rudloff, P. Heidemeyer, K. Kretschmer und M. Bastian, "Modellierung von Planetwalzenextrudern," *Kunststoffe*, Nr. 6, S. 55–58, 2011.
- [17] J. Kettemann und C. Bonten, "Simulation eines Planetwalzenextruders anhand einer Immersed Boundary Methode in OpenFOAM," in 27. Stuttgarter Kunststoffkolloquium, 1. Aufl. Stuttgart, 2021, S. 283–288.
- [18] Grütter H., Trachsel R. und Siegenthaler H. U., "Ko-Kneter für Kabelcompounds," *Kunststoffe*, Nr. 9, S. 207–2011, 2007.
- [19] H. Stamm, Maschinenbau in der Buss AG: Historische Übersicht von 1945 bis 1983. Buss international publication, kindly provided by S. Jakopin, CTI, Barrington, IL, 1983.
- [20] I. Manas-Zloczower, *Mixing and compounding of polymers: theory and practice*. München: Hanser, 2012.
- [21] P. H. M. Elemans, "Modelling of the processing of incompatible polymer blends," Department of Chemical Engineering and Chemistry, Eindhoven, 1989, doi: 10.6100/IR316189.
- [22] P. H. M. Elemans und H. E. H. Meijer, "On the modeling of continuous mixers. Part II: The cokneader," *Polymer Engineering & Science*, Jg. 30, Nr. 15, S. 893– 904, 1990, doi: 10.1002/pen.760301504.
- [23] J. Ansahl, "Grundlagen zur Auslegung dichtkämmender Gleichdrall-Doppelschneckenextruder," Diss., Universität Paderborn, Paderborn, 1992.
- [24] B. Vergnes, G. Della Valle und L. Delamare, "A global computer software for polymer flows in corotating twin screw extruders," *Polym. Eng. Sci.*, Jg. 38, Nr. 11, S. 1781–1792, 1998, doi: 10.1002/pen.10348.
- [25] A. Thümen, "Untersuchung und Beschreibung des dispersen Aufschmelzens in Gleichdrall-Doppelschneckenextrudern," Diss., Universität Paderborn, Paderborn, 2008.
- [26] K. J. Westhues, "Entwicklung eines Modells zur Berechnung der initialen Aufschmelzvorgänge in gleichläufigen Doppelschneckenextrudern," Diss., Institut für Leichtbau mit Hybridsystemen (ILH), Universität Paderborn, Paderborn, 2019.
- [27] P. Kloke, "Modellierung des Glasfaserlängenabbaus," Diss., Institut f
 ür Leichtbau mit Hybridsystemen (ILH), Universität Paderborn, Paderborn, 2016.
- [28] J. Flecke, "Grundlagen zur Simulation des Prozeßverhaltens eines Gleichdrall-Doppelschneckenextruders bei der Aufbereitung mineralisch gefüllter Polymere," Diss., Universität Paderborn, Paderborn, 2016.
- [29] Universität Paderborn, SIGMA-Handbuch: SIGMA-Version 9.0.3.
- [30] H. Potente, K. Kretschmer und T. Pohl, "Physico-Mathematical Model for the Description of the Temperature Development and the Power Consumption in Co-

Rotating Twin Screw Extruders," *IPP*, Jg. 19, Nr. 1, S. 3–12, 2004, doi: 10.3139/217.1800.

- [31] K. Kretschmer, Untersuchung und Beschreibung des Prozess- und Mischverhaltens von Mischelementen f
 ür Gleichdrall-Doppelschneckenextruder (Paderborn, Univ., Diss., 2004). Aachen: Shaker, 2004.
- [32] H. Potente und K. Kretschmer, "Simulation and Evaluation of Compounding Processes," *Macro Materials & Eng*, Jg. 287, Nr. 11, S. 758–772, 2002, doi: 10.1002/mame.200290005.
- [33] V. L. Bravo, A. N. Hrymak und J. D. Wright, "Numerical simulation of pressure and velocity profiles in kneading elements of a co-rotating twin screw extruder," *Polym. Eng. Sci.*, Jg. 40, Nr. 2, S. 525–541, 2000, doi: 10.1002/pen.11184.
- [34] T. Herken, "Verarbeitung von PET auf gleichläufigen Doppelschneckenextrudern," Diss., Institut f
 ür Leichtbau mit Hybridsystemen, Universit
 ät Paderborn, Paderborn, 2016.
- [35] J.-F. Hétu und F. Ilinca, "Immersed boundary finite elements for 3D flow simulations in twin-screw extruders," *Computers & Fluids*, Jg. 87, S. 2–11, 2013, doi: 10.1016/j.compfluid.2012.06.025.
- [36] J. Helmig, M. Behr und S. Elgeti, "Boundary-conforming finite element methods for twin-screw extruders: Unsteady - temperature-dependent - non-Newtonian simulations," *Computers & Fluids*, Jg. 190, S. 322–336, 2019, doi: 10.1016/j.compfluid.2019.06.028.
- [37] A. Eitzlmayr und J. Khinast, "Co-rotating twin-screw extruders: Detailed analysis of conveying elements based on smoothed particle hydrodynamics. Part 1: Hydrodynamics," *Chemical Engineering Science*, Jg. 134, S. 861–879, 2015, doi: 10.1016/j.ces.2015.04.055.
- [38] A. Eitzlmayr und J. Khinast, "Co-rotating twin-screw extruders: Detailed analysis of conveying elements based on smoothed particle hydrodynamics. Part 2: Mixing," *Chemical Engineering Science*, Jg. 134, S. 880–886, 2015, doi: 10.1016/j.ces.2015.05.035.
- [39] A. Eitzlmayr, J. Matić und J. Khinast, "Analysis of flow and mixing in screw elements of corotating twin-screw extruders via SPH," *AIChE J.*, Jg. 63, Nr. 6, S. 2451–2463, 2017, doi: 10.1002/aic.15607.
- [40] F. Habla, "Modeling and CFD simulation of viscoelastic single and multiphase flows," Diss., Technische Universität München, 2015.
- [41] M.-Y. Lyu und J. L. White, "Models of Flow and Experimental Studies on a Modular List/Buss Kokneter," *International Polymer Processing*, Jg. 10, Nr. 4, S. 305– 313, 1995, doi: 10.3139/217.950305.
- [42] M.-Y. Lyu und J. L. White, "Modelling of a Viscous Non-Newtonian Polymer Melt in a List/Buss Kneader and Comparison to Experiment," *International Polymer Processing*, Jg. 11, Nr. 3, S. 208–221, 1996, doi: 10.3139/217.960208.

- [43] M.-Y. Lyu und J. L. White, "Simulation of Non-Isothermal Flow in a Modular Buss Kneader and Comparison with Experiment," *International Polymer Processing*, Jg. 12, Nr. 2, S. 104–109, 1997, doi: 10.3139/217.970104.
- [44] M.-Y. Lyu und J. L. White, "Simulation of linear viscoelastic flow behavior in the Buss Kneader," *Polymer Engineering & Science*, Jg. 37, Nr. 3, S. 623–635, 1997, doi: 10.1002/pen.11705.
- [45] M.-Y. Lyu und J. L. White, "Residence time distributions and basic studies of flow and melting in a modular buss kneader," *Polymer Engineering & Science*, Jg. 38, Nr. 9, S. 1366–1377, 1998, doi: 10.1002/pen.10307.
- [46] White, J. L., Lyu, M. Y., "Development of The Modern Buss Kneader and The Study of Its Flow and Mixing Mechanisms," *Polymer-Plastics Technology and En*gineering, Jg. 37, Nr. 3, S. 385–410, 1998, doi: 10.1080/03602559808006935.
- [47] J. L. White und E. K. Kim, *Twin screw extrusion: Technology and principles*, 2. Aufl. Cincinnati, Ohio, München: Hanser Publications; Hanser, 2010.
- [48] O. Celik und C. Bonten, "Three-dimensional simulation of a single-screw extruder's grooved feed section," *AIP Conference Proceedings*, Jg. 1779, 50004, 2016, doi: 10.1063/1.4965509.
- [49] T. Erb, O. Celik und C. Bonten, "Three-dimensional characterization of dispersive mixing in single screw extruders," *AIP Conference Proceedings*, Jg. 1779, S. 50001, 2016, doi: 10.1063/1.4965506.
- [50] Geiger, K., Martin, G., Sobotta A., Bonten, C., "Numerische Simulation von Strömungsvorgängen in Extrusionswerkzeugen für teilvernetzte oder hochgefüllte Kunststoffschmelzen," *Zeitschrift Kunststofftechnik*, Jg. 2, S. 144–174, 2017, doi: 10.3139/O999.03022017.
- [51] T. Erb und C. Bonten, "A Novel Method for Evaluation of Particle Tracking Simulations of Mixing Processes," in *ANTEC*, Cinncinati, Bd. 2, 2013.
- [52] T. Erb, "Simulationsgestützte Optimierung dynamischer Mischer für Hochleistungsextruder," Diss., Institut für Kunststofftechnik (IKT), Universität Stuttgart, Stuttgart, 2018.
- [53] O. Celik, "Neuartiges Simulationsmodell zur Vorhersage der prozessinduzierten Morphologieausbildung in heterogenen Kunststoffblends," Diss., Institut f
 ür Kunststofftechnik (IKT), Universit
 ät Stuttgart, Stuttgart, 2019.
- [54] F. Willems, P. Reitinger und C. Bonten, "Calibration of Fiber Orientation Simulations for LFT—A New Approach," J. Compos. Sci., Jg. 4, Nr. 4, S. 163, 2020, doi: 10.3390/jcs4040163.
- [55] A. Celik und C. Bonten, "A novel method for efficient engineering design of sheet dies by means of fluid dynamics," in *FRACTURE AND DAMAGE MECHANICS: Theory, Simulation and Experiment*, Mallorca, Spanien, 2020, S. 20060, doi: 10.1063/5.0028750.
- [56] F. Willems und C. Bonten, "Prediction of the mechanical properties of long fiber reinforced thermoplastics," in *FRACTURE AND DAMAGE MECHANICS: Theory*,

Simulation and Experiment, Mallorca, Spanien, 2020, S. 20066, doi: 10.1063/5.0028790.

- [57] A. Celik, C. Bonten, R. Togni, C. Kloss und C. Goniva, "A Novel Modeling Approach for Plastics Melting within a CFD-DEM Framework," *Polymers*, Early Access. doi: 10.3390/polym13020227.
- [58] H. Jasak, "H. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows," Diss., Department of Mechanical Engineering, University of London, London, 1996.
- [59] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak und C. Fureby, "A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques," *Comput. Phys.*, Jg. 12, Nr. 6, S. 620, 1998, doi: 10.1063/1.168744.
- [60] J. Kettemann und C. Bonten, "Numerische 3D Simulation eines Ko-Kneters in OpenFOAM," 26. Stuttgarter Kunststoffkolloquium Stuttgart 27. –28. März 2019.
- [61] D. M. Anderson, G. B. McFadden und A. A. Wheeler, "Diffuse-Interface Methods in Fluid Mechanics," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Jg. 30, Nr. 1, S. 139–165, 1998, doi: 10.1146/annurev.fluid.30.1.139.
- [62] R. Scardovelli und S. Zaleski, "Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow," Annu. Rev. Fluid Mech., Jg. 31, Nr. 1, S. 567–603, 1999, doi: 10.1146/annurev.fluid.31.1.567.
- [63] G. Iaccarino und R. Verzicco, "Immersed boundary technique for turbulent flow simulations," *Applied Mechanics Reviews*, Jg. 56, Nr. 3, S. 331–347, 2003, doi: 10.1115/1.1563627.
- [64] R. Mittal und G. Iaccarino, "Immersed Boundary Methods," Annu. Rev. Fluid Mech., Jg. 37, Nr. 1, S. 239–261, 2005, doi: 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743.
- [65] W.-X. Huang und F.-B. Tian, "Recent trends and progress in the immersed boundary method," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, Jg. 233, 23-24, S. 7617–7636, 2019, doi: 10.1177/0954406219842606.
- [66] S. Roy, A. De und E. Balaras, *Immersed Boundary Method: Development and Applications*, 1. Aufl. (Computational Methods in Engineering & the Sciences). Singapore: Springer Singapore; Imprint: Springer, 2020.
- [67] H. Jasak, "Immersed Boundary Surface Method in foam-extend," *The 13th Open-FOAM Workshop (OFW13)*, 2018.
- [68] J. Kettemann und C. Bonten, "Anwendung der Immersed Boundary Surface Methode in OpenFOAM," in 26. Stuttgarter Kunststoffkolloquium, Universität Stuttgart, Hg., 2019, S. 47–51.
- [69] J. Kettemann und C. Bonten, "Application of the immersed boundary surface method in OpenFOAM," in *Fracture and Damage Mechanics: Theory, Simulation and Experiment*, Mallorca, Spain, 2020, S. 20032, doi: 10.1063/5.0028625.

- [70] J. Kettemann, I. Gatin und C. Bonten, "Verification and validation of a finite volume immersed boundary method for the simulation of static and moving geometries," *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Jg. 290, S. 104510, 2021, doi: 10.1016/j.jnnfm.2021.104510.
- [71] J. Kettemann und C. Bonten, "Simulation of A Saxton-Mixer in High-Performance Extruders Using the Immersed Boundary Method," in ANTEC 2020: The Virtual Edition, 2020.
- [72] M. Lang und J. Kettemann, "Schlussbericht zu IGF-Vorhaben Nr. 18650 N: Simulation: Vorhersage und Optimierung des Ko-Knet-Prozesses," 2019.
- [73] P. J. Carreau, "Rheological Equations from Molecular Network Theories," *Transactions of the Society of Rheology*, Nr. 1, S. 99–127, 1972, doi: 10.1122/1.549276.
- [74] P. J. Carreau, D. C. de Kee und R. P. Chhabra, *Rheology of Polymeric Systems: Principles and Applications*. München: Hanser, 2021.
- [75] R. Dahlmann, E. Haberstroh und G. Menges, Menges Werkstoffkunde Kunststoffe: Rainer Dahlmann, Edmund Haberstroh, Georg Menges, 7. Aufl. (Hanser eLibrary). München: Hanser, 2019.
- [76] Buss AG, Hg., "Betriebsanleitung Ko-Kneter MX-30: Verfahrenstechnische Richtlinien für die Compound-Aufbereitung auf Buss Ko-Kneter des Typs MX," 2010.
- [77] K. Anger, H. Potente, V. Schöppner, E. Enns und E. Giese, "Dynamic Temperature and Pressure Measurement in Polymer Processing," *Zeitschrift Kunststofftechnik/Journal of Plastics Technology*, Jg. 5, Nr. 1, S. 32–47, 2009.
- [78] G. Emig und E. Klemm, *Technische Chemie: Einführung in die chemische Reaktionstechnik*. Springer-Verlag, 2006.
- [79] J. Gao, G. C. Walsh, D. Bigio, R. M. Briber und M. D. Wetzel, "Residence-time distribution model for twin-screw extruders," *AIChE Journal*, Jg. 45, Nr. 12, S. 2541–2549, 1999.
- [80] "Abschlussbericht zu IGF-Nr. 18650 N: Simulation: Vorhersage und Optimierung des Ko-Knet-Prozesses," SKZ-KFE gGmbH, Institut f
 ür Kunststofftechnik (Universit
 ät Stuttgart).
- [81] K. Geiger, "Ein neues heuristisches Fließgesetz," 21. Stuttgarter Kunststoff-Kolloquium, 2009.

12 Anhang



Abbildung 12-1: pvT-Diagramm von LDPE Lupolen 2420F.



Abbildung 12-2: pvT-Diagramm von PS 158N.



Abbildung 12-3: pvT-Diagramm von PA6 Ultramid T040.



Abbildung 12-4: pvT-Diagramm von HDPE M1053.



Abbildung 12-5: pvT-Diagramm von HDPE-10 GC.



Abbildung 12-6: pvT-Diagramm von HDPE-20 GC.