

eingereicht/handed in: 30.07.2018  
angenommen/accepted: 12.09.2018

**Michael Burgfeld M.Sc., Ingrid Sturm M.Sc., Jan Kummerow, M.Sc.**  
**Prof. Dr.-Ing. Johannes Wortberg, Prof. Dr.-Ing. Reinhard Schiffers**  
**Institut für Produkt Engineering (IPE), Universität Duisburg-Essen**

## **Methodik zur Simulation von wandnahen Strömungen am Beispiel eines Farbwechselprozesses**

*Im Rahmen dieser Arbeit erfolgt die Ausarbeitung einer Simulationsmethodik zur Untersuchung des Einflusses der Oberflächentopologie auf Strömungen in der Fließkanalrandschicht. Mit dieser Methode ist es möglich, ausgehend vom Makrobereich ein Modell sukzessive in den Mikrobereich zu überführen. Entsprechend der Verkleinerung der Modellgeometrie können Strömungsvorgänge in der Fließkanalrandschicht durch numerische Simulationen abgebildet werden. Das Vorgehen wird exemplarisch anhand eines Farbwechselversuches unter Berücksichtigung einer korundgestrahlten Oberflächentopologie demonstriert.*

## **Methodology for the simulation of flows in proximity to walls using the example of color change processes**

*In this work, a simulation methodology was developed to investigate the impact of the surface topology on boundary flows with numerical simulations. The method allows the stepwise conversion of a macro model into micro scale. This downsizing enables the simulation of flow conditions in proximity to the flow channel boundary through higher resolution. This procedure is shown exemplary for a material change processes under consideration of a corundum blasted surface topology.*

# Methodik zur Simulation von wandnahen Strömungen am Beispiel eines Farbwechselprozesses

M. Burgfeld, I. Sturm, J. Kummerow, J. Wortberg, R. Schiffers

## 1 EINLEITUNG

Die Herstellung von Folien, Halbzeugen oder Profilen wird verfahrenstechnisch durch den stationären Extrusionsprozess realisiert. Der Wunsch nach individuellen Produkteigenschaften oder Farbgebung und sinkende Losgrößen führen jedoch dazu, dass kunststoffverarbeitende Firmen immer häufiger Produkt- und Materialwechsel vollziehen müssen. Hierbei wird eine Umstellung des Materials, der Farbe oder eine Kombination aus beiden vorgenommen. Bei einer direkten Umstellung wird ohne Unterbrechung oder Stillstand das in der Extrusionsanlage befindliche Ausgangsmaterial durch das Zielmaterial verdrängt. Hierbei entsteht in dem als stationär geltenden Verarbeitungsprozess ein instationärer Zustand. Aufgrund von geringen Strömungsgeschwindigkeiten an der Fließkanalwand, dem Viskositätsverhältnis zwischen Ausgangs- und Zielmaterial als auch durch auftretende Wechselwirkungen mit der Fließkanaloberfläche dominiert die Randschicht die benötigte Wechselzeit. Für eine gesteigerte Wirtschaftlichkeit des Wechselprozesses wurde von Szöke [1] und Overbeck [2] sowohl die Prozessführung als auch das Verhalten in der Randschicht selbst untersucht. Die empirischen Untersuchungen umfassen Materialwechselprozesse unter Verwendung verschiedener Polyolefine. Gegenstand dieser Untersuchungen ist es, den Einfluss von Viskositätsunterschieden auf den Wechselprozess auszuarbeiten. Die gewonnenen Erkenntnisse bilden die Grundlage zur Modellbildung von instationären Wechselvorgängen. Ferner konnten bereits in [3, 4] durch numerische Berechnungen die Strömungsverhältnisse für komplexe Geometrien während des Verdrängungsprozesses im Makrobereich abgebildet werden.

Abgrenzend zu den angeführten Simulationen wird im Rahmen dieser Arbeit eine Methode vorgestellt, die es ermöglicht, schleichende Strömungen in der Fließkanalrandschicht unter Berücksichtigung der Oberflächentopologie zu visualisieren. Hierdurch ist es möglich, strömungsmechanische Vorgänge in der Randschicht zu analysieren und beschreibbar zu machen. Exemplarisch wird hierzu ein Farbwechselprozess untersucht, mit dem Fokus auf dem Verhalten der Fluidströmung in der Fließkanalrandschicht unter Berücksichtigung der Oberflächentopologie.

## 2 SIMULATIONEN

Grundlage der Simulationen bildet ein praktischer Farbwechselfersuch, im Rahmen dessen eine Untersuchung des Einflusses der Oberflächentopologie auf das Wechselverhalten in der Fließkanalrandschicht erfolgte. Da im Randbereich die exakte Strömungssituation unter Einfluss der Oberflächenstruktur unbekannt ist, wird mittels Mehrphasensimulationen in ANSYS Fluent die strömungs-mechanische Situation nachgestellt. Hierdurch wird die Visualisierung von stationären als auch instationären (transienten) dreidimensionalen Strömungen ermöglicht. Dazu gehören die Änderungen physikalischer Eigenschaften oder geometrischer Merkmale, wie beispielsweise der Oberflächentopologie oder der Partikelgröße. Folglich können durch numerische Berechnungen Phänomene in der Randschicht untersucht werden, welche empirisch nicht oder nur unzu-reichend nachgestellt werden können.

### 2.1 Mehrphasenströmungen

Um Farbwechselprozesse numerisch zu berechnen, werden Mehrphasenströmungen angenommen, welche sich aus der Kunststoffschmelze als Flüssigphase mit ggf. darin befindlichen Partikeln ableiten. Zur Berechnung solcher Problemstellungen stehen die Ansätze

- CFD
- DEM
- DPM

zur Verfügung, die sich hinsichtlich des zugrundeliegenden Berechnungsverfahrens und der Anwendbarkeit unterscheiden.

Unter Verwendung des **Computational-Fluid-Dynamics-Ansatzes** (CFD) ist es möglich, sowohl flüssige als auch feste Phasen abzubilden. Bewegungen von Fluiden und Partikeln werden dabei in einem Kontinuum beschrieben. Im Vergleich zum CFD-Ansatz bildet die **Discrete-Element-Method** (DEM) die direkte gegenseitige Interaktion von Partikeln ab. Für Mehrphasensimulationen wird der sogenannte Euler-Lagrange-Ansatz genutzt, welcher eine Kombination aus beiden Berechnungsansätzen ist [5]. Ferner wird bei der DEM jede Partikeltrajektorie explizit berechnet. Folglich werden Bewegungen von einzelnen Partikeln erfasst, als auch Interaktionen zwischen diesen wie beispielsweise Zusammenstöße berücksichtigt [6, 7]. Steigende Partikelanzahlen determinieren jedoch die benötigte Rechenleistung, wodurch Berechnungen mit Hilfe der DEM sehr zeitaufwendig sind. Daher wird diese Methode durch das **Discrete Phase Model** (DPM), welches die Simulation beschleunigt, ergänzt. Wie die DEM basiert auch das DPM auf einem translatorischen Kräftegleichgewicht, welches für jeden einzelnen Partikel formuliert wird. Es wird jedoch hierbei nicht die Bewegung einzelner Partikel, sondern die Bewegung einer Gruppe von Partikeln, sogenannter „Parcels“ (Pakete) erfasst, wodurch sich die benötigte Rechenleistung reduziert. Die Anzahl der Partikel in einem Paket kann zwischen einem und mehreren hundert liegen [6]. Anders als bei der DEM werden beim DPM

interpartikuläre Kollisionen als auch die Fluidverdrängung durch die Partikel vernachlässigt, letzteres hat zur Folge, dass der Volumenanteil der Flüssigphase konstant bleibt. Entsprechend dieser Annahmen und weiterer Vereinfachungen ist das DPM für verdünnte Mehrphasenströmungen mit einem volumetrischen Anteil der dispersen Partikel  $\leq 10\%$  gültig [7, 8, 9].

## 2.2 Randbedingungen der Simulationen

Die für die Simulationen getroffenen Randbedingungen orientieren sich an einem praktischen Wechserversuch und werden aus diesem abgeleitet. Im Rahmen dessen wurde ein Rundstrangwerkzeug mit korundgestrahlter Oberflächen-topologie (siehe Bild 1) eingesetzt. Das Werkzeug weist hierbei einen Durchmesser von 20 mm sowie eine Länge von 200 mm auf. Als Versuchs-material dient ein Polyethylen niedriger Dichte (PE-LD), welches während des Wechselprozesses eine Schmelzetemperatur von 190 °C aufwies. Ferner wurden die Versuche bei einem Massestrom von 5 kg/h durchgeführt.

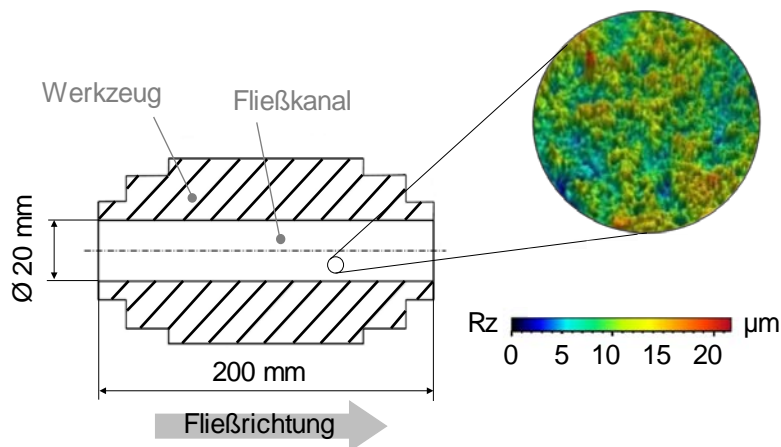


Bild 1: Schnittdarstellung des Extrusionswerkzeuges

Neben dem Werkzeug, welches die numerisch zu berechnende Fließkanalgeometrie bildet, werden Prozessparameter wie die Verarbeitungstemperatur, der Massedurchsatz, das Material und das verwendete Farbbatch (Farbpartikelgröße) herangezogen. Das rheologische Materialverhalten wird in den Simulationen über den Carreau-Ansatz mit den nachfolgenden Parametern berücksichtigt. Zudem wird eine Dichte von  $788\text{ kg/m}^3$  angenommen.

### Carreau-Ansatz:

**A:** 95 740 [Pa s]

**B:** 42,07 [s]

**C:** 0,5134 [-]

$$\eta(\dot{\gamma}) = \frac{A}{(1 + B \cdot \dot{\gamma})^C}$$

Um den Farbwechselversuch numerisch abzubilden, wird die Größe der im Farbbatch vorliegenden anorganischen Farbpigmente ermittelt. Die Erfassung erfolgte mittels einer Suspension aus 5 mg anorganischer Partikel und 10 ml Reinstwasser. Das Gemisch wird durch ein Ultraschallbad vermischt und anschließend mittels dynamische Lichtstreuung vermessen.

Aus der Verteilung der Partikeldurchmesser wird für die Simulation die am häufigsten vorkommenden Partikelgröße herangezogen, welche rund 0,5 µm beträgt. Ferner wird für die Simulationen die geometrische Gestalt des Farbpigmentes als idealisiert sphärisch angenommen.

Neben den Randbedingungen aus den Versuchen wird für die numerische Berechnung die Kunststoffschmelze als inkompressibles Fluid angenommen. Ferner werden laminare Strömungsbedingungen sowie isotherme Bedingungen unter Vernachlässigung der dissipativen Schererwärmungen zugrundegelegt.

### **3 ÜBERFÜHRUNG DER FLIEßKANALGEOMETRIE VOM MAKRO- IN DEN MIKROBEREICH**

Wie bereits angeführt, bildet der Fließkanal des Extrusionswerkzeuges, Bild 1, die Grundlage der Modellerstellung. Zur Analyse des Strömungsverhaltens in der Randschicht unter Berücksichtigung der Oberflächentopologie muss eine hohe Netzdichte verwendet werden, um eine hohe Genauigkeit in den numerischen Simulationen zu erzielen. Dies ist jedoch aufgrund des hohen Rechenaufwandes und zeitlichen Restriktionen nicht umsetzbar. Mittels einer Multiskalen-Modellierung, bei der eine Informationsübergabe zwischen verschiedenen Skalenebenen erfolgt, wird das Geometriemodell über mehrere Simulationsstufen vom Makro- in den Mikrobereich überführt. Entsprechen der vorgenommenen Verkleinerungen ergeben sich die nachfolgenden Simulationsstufen, Tabelle 1.

Ferner werden bei den Stufen I bis V stationäre Berechnungen vorgenommen. Ziel der jeweiligen Stufe ist es, das resultierende Strömungsprofil exakter im Randbereich zu berechnen. Über die Verkleinerung der Geometrie werden feinere Rechnetze im Vergleich zur vorherigen Stufe möglich, die eine exaktere Berechnung des Strömungsprofils im Randbereich ermöglichen. Stufe VI bildet die geometrischen Verhältnisse im Randbereich ab. Hierzu wird sowohl die Oberflächentopologie berücksichtigt als auch eine transiente Berechnung zur Abbildung des Wechselprozesses vorgenommen.



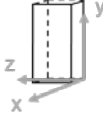
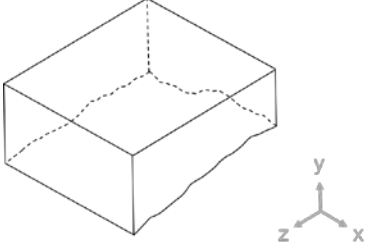
Stationär	<b>Stufe I (mm):</b> Ausgangsgeometrie (Makrobereich)	
	<b>Stufe II (mm):</b> Vereinfachung der Ausgangsgeometrie	
	<b>Stufe III – V (mm → μm):</b> Überführung vom Makro- in den Mikrobereich	
Transient	<b>Stufe VI (μm):</b> Mikrobereich	

Tabelle 1: Darstellung der Geometriestufen vom Makro- zum Mikrobereich

### 3.1 Stufe I

Als Stufe I wird das Fluidvolumen des Extrusionswerkzeuges definiert und repräsentiert die Fließkanalgeometrie im Makrobereich. Zur Verkürzung der benötigten Rechenzeit wird der Fließkanal mit einer Länge von 0,05 m (anstelle von 0,2 m) und einem Radius von 0,01 m modelliert. Mit einer analytisch berechneten hydrodynamischen Einlaufänge von 0,012 m ist die Reduzierung der Gesamtlänge zulässig aufgrund eines vollständig ausgebildeten Strömungsprofils an der Auslassfläche. Ferner wird der rotationssymmetrische Aufbau zur Verkürzung der Rechenzeit ausgenutzt und nur ein Viertel der Gesamtgeometrie simuliert, siehe nachfolgendes Bild 2.

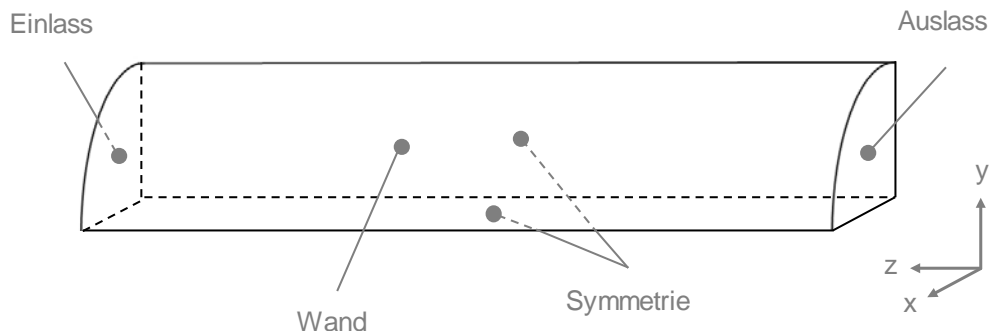


Bild 2: Randbedingungen von Stufe I

An der Einlassfläche wird mit einer Eintrittsgeschwindigkeit von  $0,00561 \text{ m/s}$  gerechnet, welche sich aus dem Massestrom bzw. dem Volumenstrom bezogen auf die Einlassfläche ergibt. An der Auslassfläche wird Umgebungsdruck angenommen, während die Mantelfläche als Wand mit stoke'scher Haftung definiert wird. Die Symmetriegrenzflächen werden mit der Randbedingung „Symmetrie“ versehen. Diese bildet Grenzflächen, bei denen keine Wandhaftung vorliegt und folglich kein Einfluss auf das Strömungsprofil genommen wird. Ferner wird die Qualität der numerischen Berechnungen über das Rechennetz selbst beeinflusst. Es gilt einen Kompromiss zwischen der sich ergebenden Rechendauer und Genauigkeit zu wählen. Für die Diskretisierung der Geometrie über den Radius wird die maximale Elementgröße auf  $500 \mu\text{m}$  festgelegt, während in z-Richtung die Elementgröße  $1 \text{ mm}$  entspricht. Hinsichtlich des ansteigenden Geschwindigkeitsgradienten zur Wand hin wird eine Prismenschicht von 30 Schichten mit einer Wachstumsrate von  $1,25$  verwendet. Hierdurch wird bei jeder Stufe der erste Layer im Randbereich durch Prismenschicht verfeinert. Diese Einstellung wird gleichbleibend für alle weiteren Simulationen verwendet. Zudem sei angemerkt, dass diese Simulationsstufe die Referenz für das sich ausbildende Strömungsprofil dient. Dies führt unter Verwendung eines hybriden Rechennetzes zu einer Knotenanzahl von  $1.253.309$  bei  $1.220.300$  Elementen für Stufe I.

### 3.2 Stufe II

Mittels Stufe II wird die Geometrie von Stufe I in ein quaderförmiges Modell überführt, wodurch sich der Vorteil einer Reduzierung von Rechenelementen ergibt, Bild 3. Zudem kann eine strukturierte Vernetzung vorgenommen werden, wodurch sich gegenüber hybriden bzw. unstrukturierten Netzen kürzere Rechenzeiten ergeben [10].

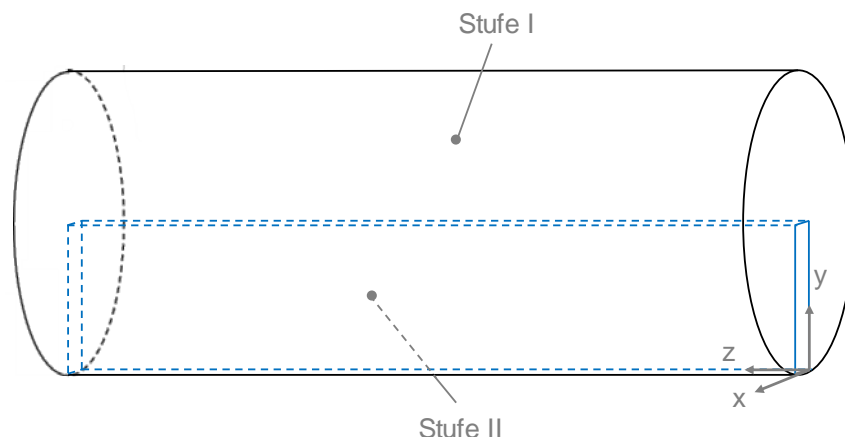


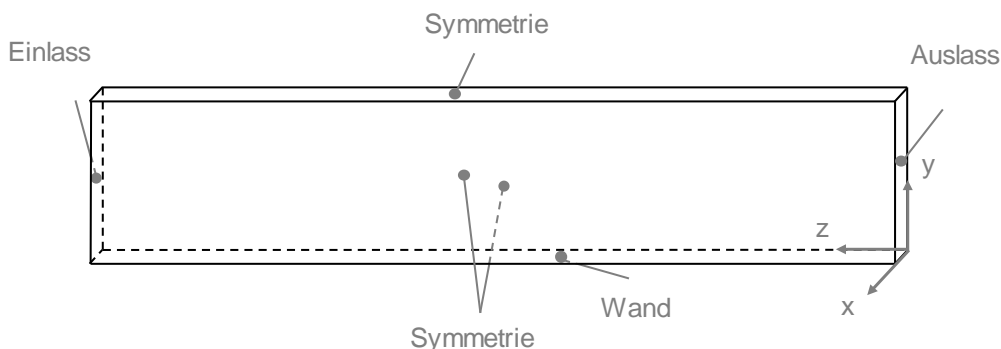
Bild 3: Schematischer Vergleich Stufe I und II

Darüber hinaus wird ab Stufe I bis Stufe V das Geschwindigkeitsprofil am Austritt an die Eintrittsfläche der nachfolgenden Stufe übergeben. Bei der Übergabe des Strömungsprofils wird zwischen den Netzknoten die Strömungsgeschwindigkeit durch Interpolation berechnet. Mittels des strukturierten Rechennetzes und der Verkleinerung des Fluidvolumens kann eine feinere Vernetzung vorgenommen werden. Dies hat zur Folge, dass durch die gestiegene Anzahl an Interpolationspunkten die Fehler bei der Interpolation minimiert werden. Die beiden Geometrievarianten werden in der nachfolgenden Abbildung gegenübergestellt. Quader und Zylinder weisen dabei mit jeweils 50 mm die gleiche Länge (z-Richtung) auf. Die Höhe des Quaders (y-Richtung) entspricht mit 10 mm dem Zylinderradius, seine Breite (x-Richtung) wird auf einen Wert von 0,1 mm definiert. Die maximale Rechennetzgröße bei der Diskretisierung entspricht  $100\ \mu\text{m}$ . Das sich ergebene Rechennetz weist eine Knotenanzahl von 1.140.997 bei 1.026.000 Elementen auf.

### 3.2.1 Randbedingungen Stufe II

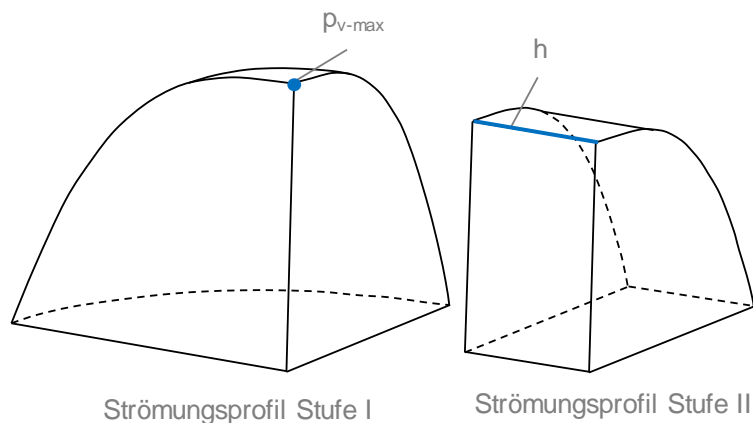
Die Randbedingungen für Stufe II, Bild 4, sind analog zu denen der Stufe I. Die beiden Flächen in der x-y-Ebene werden als Eintritts- bzw. Austrittsfläche deklariert, während die im Ursprung der x-z-Ebene liegende Fläche als „Wand“ definiert ist, da diese der äußeren Fläche des Zylinders entspricht. Die drei restlichen Flächen liegen innerhalb des Volumens des Zylinders und werden aufgrund dessen als „Symmetrie“ festgelegt.





**Bild 4:** Randbedingungen Stufe II

Während an der Eintrittsfläche von Stufe I die Geschwindigkeit vorgegeben wird, erfolgt bei Stufe II eine Übergabe des Strömungsprofils der Austrittsgeschwindigkeit von Stufe I über eine „User-Defined-Function“ (UDF). Dem liegt zugrunde, dass zunächst in einer zweidimensionalen Darstellung der beiden Stufen diese denselben geometrischen Wert (Radius Stufe I entspricht Höhe der Stufe II) aufweisen. Folglich würde sich ein identisches Strömungsprofil ausbilden. Wird jedoch eine dreidimensionale Gegenüberstellung der resultierenden Geschwindigkeitsprofile vorgenommen, wird der sich ergebende Unterschied anhand einer qualitativen Betrachtung ersichtlich, Bild 5.



**Bild 5:** Vergleich der Strömungsprofile zwischen Stufe I und II (schematisch)

Aufgrund des gleichen Massestroms in beiden Fällen muss der sich ergebende Volumenstrom der beiden Strömungsprofile am Austritt gleich groß sein. Während bei Stufe II der Volumenstrom über die Tiefe  $h$  (siehe Bild 5, rechts) des Fließkanals beeinflusst wird, geschieht dies bei Stufe I über die maximale Geschwindigkeit ( $p_{v-max}$ , siehe Bild 5, links). Aufgrund der höheren maximalen Geschwindigkeit wird das Volumen des Strömungsprofils, welches als Rotations-

paraboloid vorliegt, vergrößert. Das Strömungsprofil beider Stufen würde gemäß den Randbedingungen nicht übereinkommen.

### 3.2.2 Abbruchkriterium

Zur Validierung der Ergebnisse wird eine Konvergenzstudie durchgeführt, um die Kriterien für den Abbruch der Simulationen festlegen zu können. Zweck dieser Studie ist die Prüfung, welchen Wert die jeweiligen Kontrollgrößen aufweisen müssen, damit die Berechnungsungenauigkeit minimiert wird. In den Standardeinstellungen stehen als Konvergenzkriterien die Residuengrenzen ( $10^{-4}$ ) der Kontinuitäts- sowie der Geschwindigkeitsgleichungen (für die drei Raumrichtungen) zur Verfügung (**Kriterium 1**). Um beurteilen zu können, ob die Simulation konvergiert ist, wird als Kontrollgröße die maximale Geschwindigkeit an der Austrittsfläche herangezogen. Sofern diese keine signifikante Änderung aufweist, kann eine Änderung des Strömungsprofils ausgeschlossen werden. Entsprechend wird als Abbruchkriterium der Simulation die Änderung dieser Kontrollgröße zwischen zwei Simulationsschritten gewählt (**Kriterium 2**). Die Residuengrenzen gemäß Kriterium 1 werden deaktiviert und weitere Simulationen unter Verwendung von Kriterium 2 durchgeführt. In Bild 6 ist die maximale Strömungsgeschwindigkeit am Austritt über den Iterationsschritten aufgetragen. Ferner werden die hierzu notwendigen Residuen des ersten und zweiten Kriteriums mit angegeben.

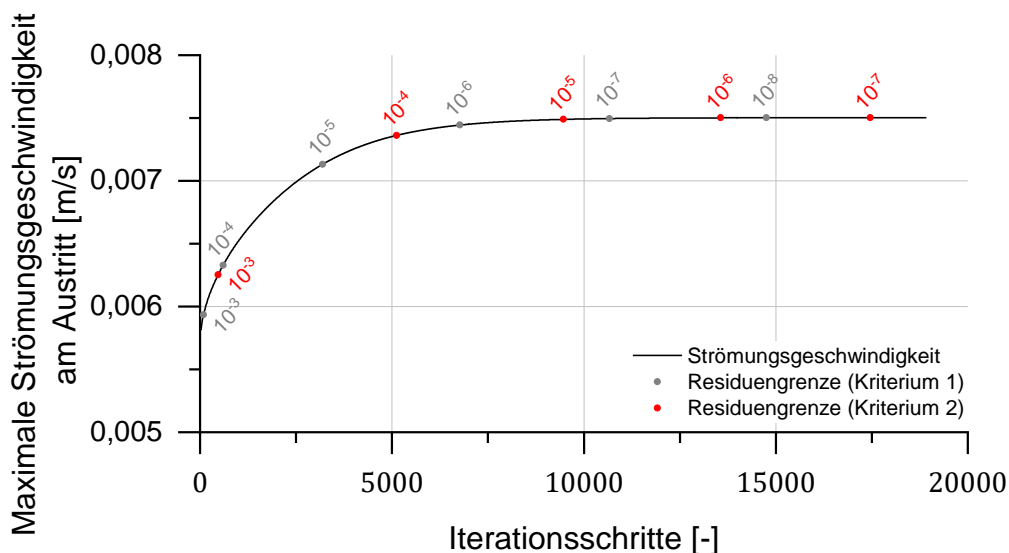


Bild 6: Vergleich des Einflusses beider Konvergenzkriterien

Ergebnis dieser Studie ist es, dass bei Verwendung des Kriteriums 1 die Residuengrenze der Standardvorgabe nicht zulässig ist. In diesem Fall müsste die Residuengrenze für Kriterium 1 mindestens auf  $10^{-7}$  gesetzt werden, damit die Simulation ausreichend genaue Ergebnisse liefert. Diese Konvergenzstudie wird nur einmal exemplarisch an Stufe II durchgeführt. Die Erkenntnisse bezüg-

lich der Residuengrenzen werden im Folgenden auf alle weiteren Simulationen übertragen und angepasst. Eine zunehmende Feinheit des Rechnetzes führt dazu, dass kleinere Residuen für die Kontinuitätsgleichung als auch für die Geschwindigkeit in x-, y- und z-Richtung gewählt werden müssten.

### 3.2.3 Vergleich - Stufe I mit Stufe II

Zur Verifizierung der Geometrieüberführung von einer zylinderförmigen in eine quaderförmige Geometrie erfolgt abschließend ein Vergleich der Strömungsgeschwindigkeiten am Austritt von Stufe I mit denen von Stufe II. Dabei wurde das aus Stufe I resultierende Strömungsprofil durch eine benutzerdefinierte Funktion zweiter Ordnung approximiert und anschließend per UDF an die Eintrittsfläche von Stufe II übergeben. Es zeigt sich, dass das Strömungsprofil von Stufe II dem von Stufe I folgt. Daraus lässt sich ableiten, dass die Geometrie in Form eines Zylinders aus Stufe I durch die quaderförmige Geometrie von Stufe II angenähert werden kann.

## 3.3 Stufe III bis V

In den nachfolgenden Simulationsstufen wird das Geometriemodell von einer zur nachfolgenden Stufe sukzessive zur Fließkanalwand hin (x-y-Ebene) verkleinert. In diesem Zusammenhang werden sowohl die Randbedingungen, Vernetzungsmethoden sowie die Übergabe des Strömungsprofils von einer auf die nachfolgende Geometriestufe als auch die Konvergenzkriterien der zugehörigen Modelle auf Makroebene erläutert.

Bei der schrittweisen Verkleinerung der Geometrie bleibt die Abmessung der Modelle in x-Richtung unverändert. Ein schematischer Vergleich der Modellüberführung ist anhand von Stufe II und Stufe III in Bild 7 dargestellt.

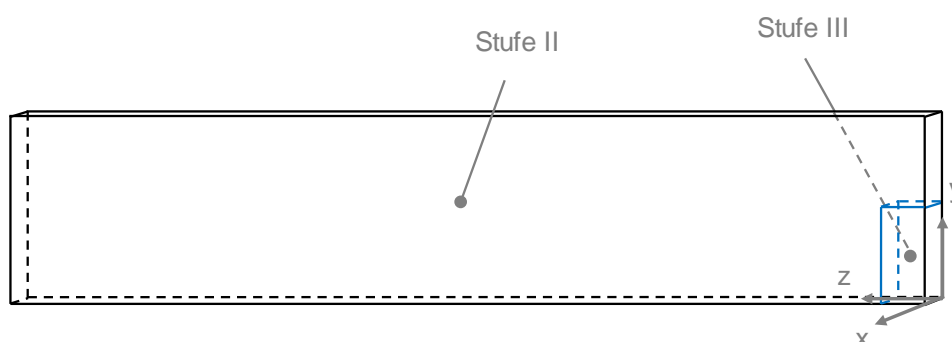


Bild 7: Schematischer Vergleich Stufe II und III

Die verwendeten Größenabstufungen der Geometriemodelle von Stufe II bis V sind Tabelle 2 zu entnehmen. Der Vollständigkeit halber sind noch einmal die Abmessungen von Stufe II, der ersten quaderförmigen Geometrie, aufgeführt.

Stufe [-]	x-Richtung [mm]	y-Richtung [mm]	z-Richtung [mm]	Residuen [-]	Strukturiertes Rechennetz [Knoten / Elemente]
II	0,1	10	50	$10^{-08}$	1.140.997 / 1.026.000
III	0,1	5	1	$10^{-10}$	1.523.181 / 1.005.200
IV	0,1	1	0,1	$10^{-08}$	1.144.330 / 2.029.000
V	0,1	0,5	0,1	$10^{-08}$	2.270.697 / 2.052.000

Tabelle 2: Größen der Stufen II - V

Wie im Vergleich aus Bild 8 mit Bild 4 ersichtlich wird, weisen die gewählten Randbedingungen von Stufe III bis V Unterschiede im Vergleich zu den ersten beiden Stufen auf. Der Einlassfläche wird jeweils, wie bei den Stufen zuvor, eine Strömungsgeschwindigkeit aufgeprägt. Während in Stufe II die Geschwindigkeit am Einlass über eine UDF aus Stufe I übergeben wird, werden ab Stufe III jeweils die Strömungsprofile vom Austritt der vorherigen Stufe ohne UDF übergeben.

Entsprechend den vorherigen Stufen I und II wird die Auslassfläche als Auslass festgelegt und die an der Wand liegende Fläche als stationäre Wand, an der kein Gleiten auftritt, definiert. Weiterhin sind die beiden in der y-z-Ebene liegenden Flächen jeweils als „Symmetrie“ definiert. Die getroffenen Randbedingungen werden in Bild 8 dargestellt.

Anders als bei den zuvor durchgeführten Simulationen stellt die im Inneren des Volumenkörpers liegende Fläche parallel zum Ursprung der x-z-Ebene keine „Symmetrie“ dar, sondern eine bewegte Wand, an der kein Gleiten möglich ist. An dieser wird im Rahmen der Übergabe des Strömungsprofils die Geschwindigkeit vorgegeben, welche auf gleicher Höhe des Geometriemodells der vorherigen Stufe liegt.

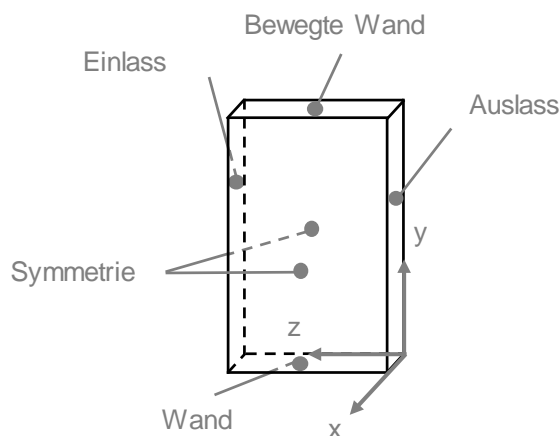
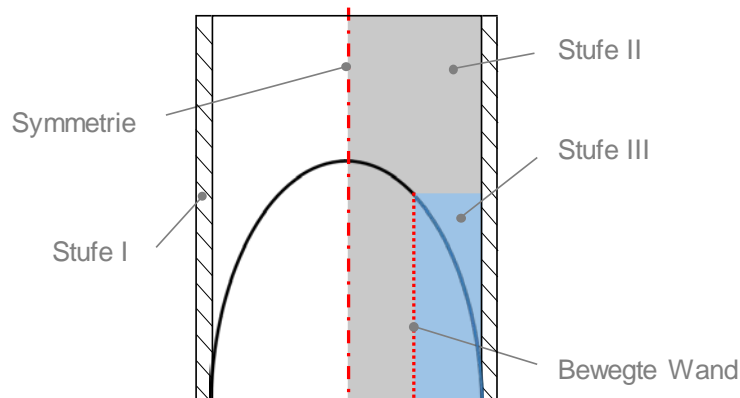


Bild 8: Randbedingungen von Stufe III - V

Unterschiede hinsichtlich der in Stufe I und II gewählten Option „Symmetrie“ und der in Stufe III bis V verwendeten Randbedingung einer bewegten Wand werden in Bild 9 veranschaulicht. Es wird ersichtlich, dass die Strömungsprofile in Abhängigkeit dieser Option variieren. Stufe I und II weisen eine Symmetrie des Strömungsprofils auf, aufgrund der Variation der Fließkanalhöhe ab Stufe III ist eine Annahme von Symmetrie jedoch nicht mehr zulässig. Aufgrund dessen kann nur ein Anteil des Strömungsprofils der vorhergehenden Stufe berücksichtigt werden, welcher nicht mehr gespiegelt werden kann. Damit der Geschwindigkeitsverlauf exakt dem der vorherigen Stufe folgt, wird anstelle der Symmetrie die bewegte Wand gewählt. Eine Symmetrie würde eine Abnahme des Geschwindigkeitsgradienten bewirken, was zu einer Verfälschung der Simulationsergebnisse führt. Außerdem würde diese Randbedingung zu einer Änderung des Zylinderdurchmessers führen und der daraus resultierende Fehler mit jeder simulierten Stufe größer werden.



*Bild 9: Vergleich Randbedingungen Stufe II und III*

Die Art der Übergabe der Strömungsprofile zwischen den Simulationsstufen II bis V, jeweils vom Austritt einer Stufe zum Eintritt der nachfolgenden Stufe kann nur dann als valide und fehlerfrei angesehen werden, wenn die Strömungsprofile am Austritt aller Stufen dem Verlauf des jeweiligen Vorgängers folgen. Dies liegt zwischen den einzelnen Stufen vor, demnach sind die gewählten Optionen zur Weitergabe der Profile als gültig anzusehen.

### 3.4 Stufe VI

Das finale Modell im Mikrobereich bildet Stufe VI. Mit dieser wird der Einfluss der Oberflächentopologie auf das Strömungsverhalten in der Randschicht untersucht, wozu die begrenzende Fließkanalwand im Simulationsmodell nicht länger durch eine ebene Fläche repräsentiert wird, sondern eine Oberflächenstruktur berücksichtigt. Grundlage für die Modellerstellung bildet

nicht die Oberfläche des verwendeten Extrusionswerkzeugs, sondern analog hierzu eine aus demselben Werkzeugstahl gefertigte und bearbeitete Probe. Dementsprechend ist die Oberflächentopologie der Probe repräsentativ für die des Werkzeugs.

Die Digitalisierung der Oberflächenstruktur, bei der ein Ausschnitt von  $800\ \mu\text{m} \times 800\ \mu\text{m}$  durch Punktereihen beschrieben wird, erfolgt mittels Laser-Konfokalmikroskopie. Der Abstand der Punkte in x- und y-Richtung beträgt jeweils  $6,7 \cdot 10^{-7}\ \text{m}$ . Eine Darstellung der erfassten Oberflächentopologie erfolgt in Bild 10. Es lässt sich erkennen, dass die Rauheitstäler dabei unterschiedliche Tiefen, bis maximal ca.  $20\ \mu\text{m}$ , aufweisen.

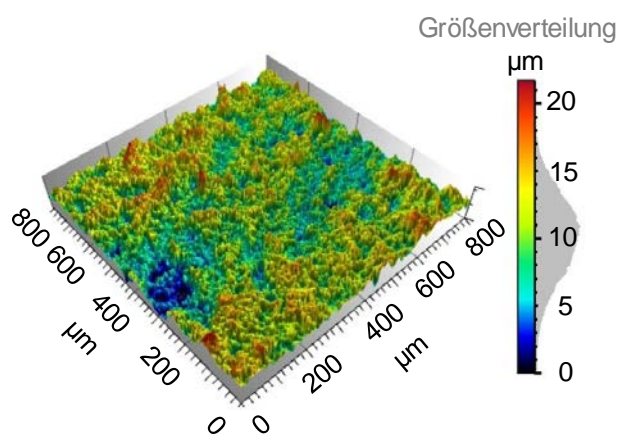


Bild 10: Digitalisierte Oberflächentopologie

Für die Simulation, Bild 11, wird ausgehend vom Nullpunkt ein Ausschnitt von rund  $15 \times 15\ \mu\text{m}$  (Bereich II) der digitalisierten Oberflächentopologie herangezogen. Ferner wird im CAD-Modell an der Einlassfläche ein  $2\ \mu\text{m}$  langer Einlaufbereich (Bereich I) vorgesehen, welcher notwendig ist, um eine fehlerfreie Übergabe des Strömungsprofils am Einlass per UDF zu garantieren. Die gesetzten Randbedingungen (siehe Bild 11) entsprechen jenen von Stufe III bis Stufe V. Lediglich die Strömungsprofilübergabe an der Einlassfläche erfolgt, wie bereits bei Stufe II, über eine UDF.

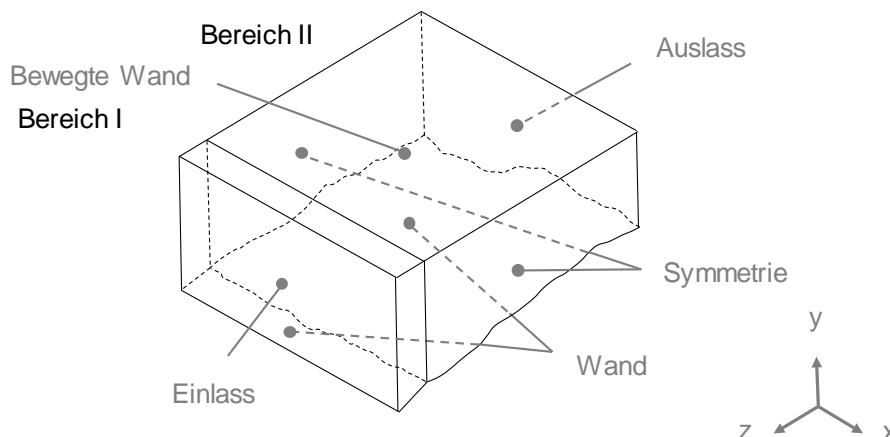


Bild 11: Randbedingungen von Stufe VI

Das Gesamtmodell wird mit einer Netzelementgröße von  $0,1 \mu\text{m}$  in allen Raumrichtungen vernetzt. Zur Vernetzung des Fluidvolumens wird ein strukturiertes Rechenetz verwendet. Dieses weist eine Knotanzahl von 1.105.770 bei 1.065.680 Elementen auf. Ferner wird eine Residuengrenzenvon  $10^{-7}$  als Abbruchkriterium für die Simulation verwendet, welche eine ausreichende Genauigkeit im Kontext der aufzubringenden Rechenzeit aufweist.

## 4 NUMERISCHE BERECHNUNGEN

Um den Farbwechselprozess abzubilden, wird eine transiente Mehrphasensimulation durchgeführt. In der Ausgangslage wird das Fluidvolumen sowohl mit Kunststoffschmelze als auch mit Farbpartikeln gefüllt, welche nachfolgend durch eine partikelfreie Schmelzeströmung ausgetragen werden. Die benötigte Zeit zur Verdrängung der Farbpartikel aus dem Fluidvolumen ist analog zu der benötigten Wechselzeit aus dem praktischen Versuch anzusehen. Diese beträgt bei einer Werkzeuglänge von 200 mm rund 30 Minuten.

Um die benötigte Wechselzeit in der numerischen Berechnung abzuschätzen, wird das Strömungsprofil an einer ideal glatten Fließkanaloberfläche angenommen. Es wird davon ausgegangen, dass die Strömungsgeschwindigkeit des Farbpigmentes identisch ist mit der Schmelze. Die Fließgeschwindigkeit im Abstand des Partikelradius zur Fließkanalwand ( $6,7041 \times 10^{-7} \text{ m/s}$ ) entspricht damit der minimalen Pigmentgeschwindigkeit. Folglich ergibt sich eine theoretische Wechselzeit von rund 22 Sekunden bei einer Fließkanallänge von  $15 \mu\text{m}$ . Es ist an dieser Stelle nicht bekannt, wie die Einflussnahme der Oberflächentopologie auf den Wechselprozess ist, weshalb der Zeitraum auf 5 Minuten erhöht wird um einen größtmöglichen Austrag der Pigmente aus dem Fluidvolumen zu erzielen.

Zur Abbildung des instationären Wechselprozesses mittels Simulationsstufe VI erschließt sich der numerisch berechnete Zeitraum aus der Multiplikation der

Zeitschrittlänge („Time Step Size“ - TSS) und der Anzahl an definierten Zeitschritten („Number of Timesteps“ - NoTS). Über die Courant-Zahl wird die Zeitschrittlänge abgeschätzt und nachfolgend auf 0,1 s festgelegt. Durch die abzubildende Wechselzeit von 5 Minuten ergibt sich die nötige Anzahl von 3.000 Zeitschritten. Ferner wird, wie bereits angeführt, die Verdrängung der Farbpartikel mittels der DPM über die Bewegung von „Parcels“ dargestellt.

Bei den zuvor durchgeführten Experimenten ist die Verteilung und Anzahl der Partikel im Fließkanal und insbesondere in der Randschicht nicht bekannt, weshalb als Randbedingung für die Simulation in jeder Zelle ein Parcel (1 Parcel=1 Partikel) festgelegt wird. Damit wird vorausgesetzt, dass die Randschichtzellen vollständig mit Parcels befüllt sind und das dominierende Verhalten auf den Wechselprozess abgebildet wird. Ferner ist davon auszugehen, dass sich die in der Randschicht befindlichen Partikel zwischen Simulation und Experiment hinsichtlich des Fließverhaltens annähernd gleich verhalten

Das Austragen der Parcels aus dem Fluidvolumen erfolgt über eine strömende, partikelfreie Kunststoffschmelze. Hierzu wird der Einfluss des Geschwindigkeitsprofils auf die Verdrängung der Farbpartikel in der Randschicht exemplarisch in Bild 12 nach 1 s dargestellt. Das über die UDF am Einlass definierte Geschwindigkeitsprofil zeichnet sich in der Verdrängung der Parcels ab. Um das Strömungsprofil besser darstellen zu können, handelt es sich um eine seitliche Ansicht (y-z-Ebene) des Fluidvolumens. Dabei befindet sich links der Einlass und rechts die Austrittsfläche. Ferner wird die korundgestrahlte Oberfläche an der Unterseite abgebildet, während die Oberseite gemäß den vorherigen Stufen eine bewegte Wand darstellt.

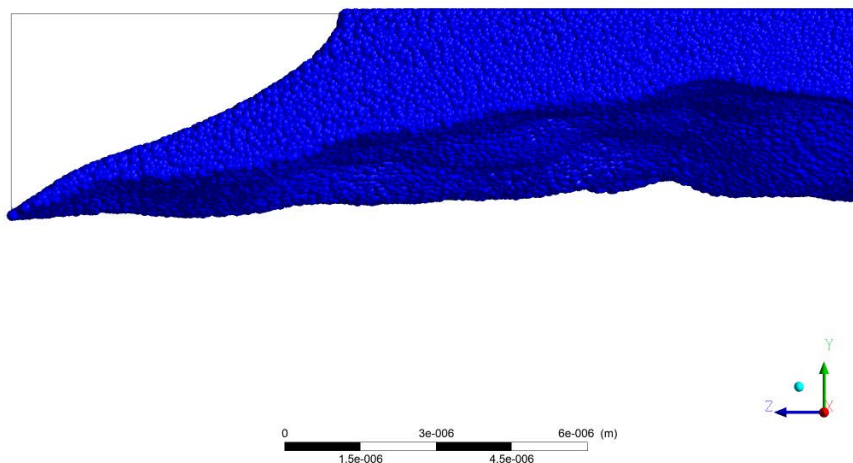


Bild 12: Verbliebene Parcels (blau) im Fluidvolumen nach 1 s

Die Versuche zeigten, dass die Stagnation der Farbpigmente in der Randschicht den Wechselprozess maßgeblich dominiert [11]. Dies wird durch die numerische Berechnung bestätigt und im nachfolgende Bild 13 dargestellt. Nach 300 s zeigt sich, dass lediglich im Randbereich Parcels vorhanden sind und ein vollständiger Austrag der Partikel aus dem Volumen nicht vorliegt. Dies



kann, gegenüber der theoretischen Wechselzeit der ideal glatten Oberfläche, auf den Einfluss der Oberflächentopologie zurückgeführt werden. Demnach befinden sich nach 300 s 2577 Parcels im Kontrollvolumen. Dies entspricht einem Anteil von 0,24 % bezogen auf die Ausgangszahl an Parcels von 1065679. Ein abgeschlossener Wechsel in der numerischen Berechnung wird mit einem vollständigen Austragen der Partikel aus dem Fluidvolumen angesehen.

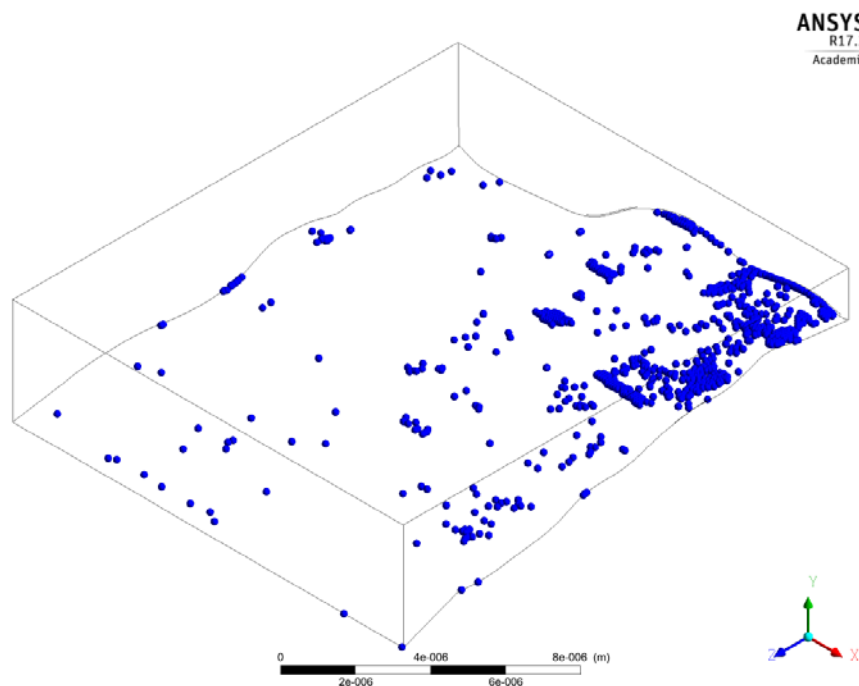


Bild 13: Verbliebene Parcel nach 300 s

Ferner spiegelt die Stagnation der Parcels im Fluidvolumen den Einfluss der strömungsmechanischen Gegebenheiten wieder. Während bei dem zugrundegelegten Fluidvolumen im Makrobereich die laminare Strömung gerichtet verläuft, nimmt die Oberflächentopologie im Mikrobereich einen Einfluss auf die Fließrichtungen. Wie Bild 14 belegt, ändert sich diese abhängig von der Oberflächenstruktur und führt neben der Agglomeration von Parcels in den Rauheitstälern zu einem langsameren Austrag im oberen rechten Bereich des Fluidvolumens.

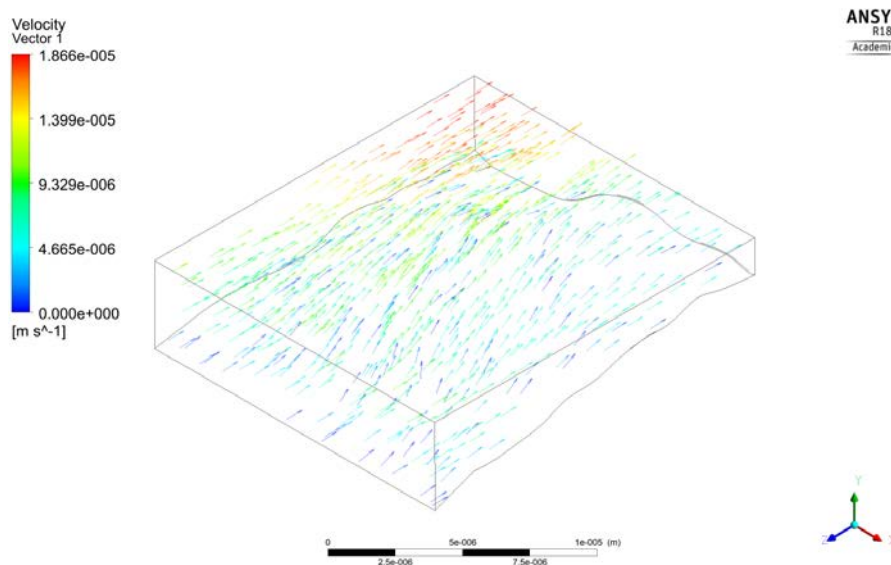


Bild 14: Vektordarstellung der Fließgeschwindigkeit und -richtung

Zwischen den experimentellen Untersuchungen und den numerischen Berechnungen liegen unterschiedliche Wechselzeiten vor, welche auf getroffene Annahmen und Randbedingungen zurückzuführen sind. Es muss ferner beachtet werden, dass bei den numerischen Berechnungen physikalische Wechselwirkungen zwischen Farbpartikel und Oberflächenstruktur nicht berücksichtigt werden.

Bei dem experimentell durchgeführten Farbwechselprozess wurde zur Erfassung des Wechselverhaltens der Farbverlauf des extrudierten Profils über den  $L^*a^*b^*$ -Farbraum beschrieben. Über diesen ist es möglich, Farbunterschiede zwischen zwei Messpunkten durch die Berechnung des Farbabstandes  $\Delta E$  auszudrücken und die benötigte Wechselzeit zu berechnen [12]. Demnach werden für ein vollständiges Verdrängen der eingefärbten Kunststoffschmelze aus dem Werkzeug 30 Minuten benötigt, wohingegen der Wechselprozess des simulierten Farbwechselversuchs nach 5 Minuten für  $15\ \mu\text{m}$  noch nicht abgeschlossen ist und sich Partikel in der Oberflächenstruktur befinden. Das Austragen der Parcels erfolgt über die Fließgeschwindigkeit der Schmelze, wie es in Bild 12 dargestellt ist. Würde die simulierte Wechselzeit auf die Gesamtlänge des Werkzeuges mittels einer Reihenschaltung hochgerechnet werden, übertrifft diese die real beobachtete Wechselzeit um ein Vielfaches. Diese Zeitdifferenz ist darauf zurückzuführen, dass keine bekannte Korrelation zwischen dem  $\Delta E$ -Wert und der Parcelanzahl vorliegt. Ferner ist nicht bekannt, wie viele Farbpartikel sich in der Randschicht während des Versuches noch befinden, obwohl kein Blauanteil im Extrudat mehr erkennbar ist.

Dieses Verhalten bestätigt jedoch Erkenntnisse aus praktischen Versuchen, bei denen zum Ende des Wechselprozesses kein Blauanteil im Extrudat mehr ersichtlich war. Nach dem Abkühlen der Schmelze im Werkzeug und dem anschließenden Öffnen desgleichen ist jedoch in der Randschicht eine blaue Ver-

färbung ersichtlich und lässt darauf schließen, dass sich in der Oberflächentopologie des Werkzeuges noch Farbpigmente befanden, jedoch während des Extrusionsprozesses nicht aus dieser verdrängt wurden. Entsprechend korrelieren die beiden Ergebnisse und entsprechen der Annahme in [11], dass die Farbpigmente in den Rauheitstälern der Oberflächentopologie verweilen. Diese Stagnation in der Fließkanaloberfläche wird durch die numerischen Berechnungen belegt.

## 5 FAZIT

Durch die ausgearbeitete und angewandte Methodik konnten strömungsmechanische Vorgänge in der Randschicht beschreibbar gemacht und das komplexe Strömungsverhalten in der Fluidrandschicht visualisiert werden. Exemplarisch wurde hierzu ein Farbwechselprozess abgebildet, dessen Fokus auf das Verhalten der Fluidströmung in der Fließkanalrandschicht unter Berücksichtigung der Oberflächentopologie liegt. Unter Verwendung der DPM wird die Bewegung von Farbpartikeln in der Kunststoffschmelzeströmung numerisch berechnet.

Im Fokus steht das strömungsmechanische Verhalten in der Randschicht unter Berücksichtigung der Oberflächentopologie. Um dies abbilden zu können, erfolgt eine schrittweise Verkleinerung des betrachteten Ausschnittes des Fließkanals, ausgehend vom Makrobereich der Ausgangsgeometrie in den Mikrobereich unter Heranziehen der Fließkanaloberfläche. Einhergehend mit jeder Verkleinerung des Fließkanalausschnittes erfolgt eine neue Diskretisierung des Fluidvolumens und Berechnung der Strömungssimulationen, mit der sukzessiv eine bessere Abbildung der wandnahen Grenzschicht erzielt wird. Folglich können über das ausgearbeitete Verfahren ein besseres Verständnis von druckgetriebenen Strömungsvorgängen in der Randschicht erlangt und weitere aus der Strömung resultierende Aspekte im Randbereich abgeleitet werden. Ferner bestätigen die Simulationsergebnisse aus der Praxis bekannten Ergebnisse über das Randschichtverhalten und der Stagnation von Farbpartikeln in der Oberflächentopologie.

## Literatur

- [1] Szöke, L. Modellbildung von Produktwechselprozessen in Extrusionswerkzeugen  
Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2014
- [2] Overbeck, J.R. Einfluss der Viskosität auf Materialwechsel im Extrusionsprozess  
Dissertation, RWTH Aachen, 2014
- [3] Szöke, L.; Ketteler, C.; Wortberg, J. Analyzing the Product Changing Behavior of Complex Extrusion Die Geometries Based on CFD Simulation  
PPS 30, Cleveland, USA, 2014
- [4] Ketteler, C.; te Heesen, O.; Szöke, L.; Wortberg, J. Simulation of color and material change processes in spiral mandrel dies by a transient multiphase approach  
SPE Antec, Cincinnati, USA, 2013
- [5] Mostoufi, N.; Norouzi, H.; Sotudeh-Gharebagh, R.; et al. Coupled CFD-DEM Modeling - Formulation, Implementation and Application to Multiphase Flows  
John Wiley & Sons, United Kingdom, 2016
- [6] Jain, V.; Kalo, L.; Kumar, D.; et al. Experimental and numerical investigation of liquid-solid binary fluidized beds: Radioactive particle tracking technique and dense discrete phase model simulations  
Particuology 33 (2017) S.112 – 122  
DOI 10.1016/j.partic.2016.07.011
- [7] Kloss, C.; Goniva, C.; Aichinger, G.; et al. Comprehensive DEM-DPM-CFD Simulations - Model Synthesis, Experimental Validation and Scalability  
Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, Melbourne, 9-11 Dezember, 2009

- [8] Kaushal, D.; Mohsin, M. Three-dimensional computational fluid dynamics (volume of fluid) modelling coupled with a stochastic discrete phase model for the performance analysis of an invert trap experimentally validated using field sewer solids  
Particuology 33 (2017) S.98 – 111  
DOI 10.1016/j.partic.2016.09.010
- [9] Schütz, S.; Schilling, M.; Piesche, M. Bestimmung der Widerstandskraft und des Transportverhaltens kugelförmiger Partikel in Strömungen mit Hilfe moderner CFD-Werkzeuge  
Chemie Ingenieur Technik 2007.79.No.12, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007
- [10] Gilde, B. Grundklassen von Rechengittern  
<http://www.cfd.tu-berlin.de/>  
Änderungsdatum: 19.11.2017
- [11] Groß, C. Einfluss von Farbpigmentbatches auf den Produktwechsel bei der Blasfolienextrusion  
Dissertation, Universität Duisburg-Essen, 2006
- [12] Burgfeld, M.; Wortberg, J. Inline Calculation Tool for the Determination of the Changeover Time for Color and Material Changes in Polymer Processing  
PPS-31, Jeju Island, 2015

### Bibliography

DOI 10.3139/O999.01052018  
Zeitschrift Kunststofftechnik / Journal of Plastics  
Technology 14 (2018) 5; page 279–300  
© Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG  
ISSN 1864 – 2217

**Stichworte:**

**Extrusion**, Randschichtverhalten, instationäre Strömungssimulation, Mehrphasenströmung, Farb- und Materialwechsel, Multiskalensimulation

**Keywords:**

**Extrusion**, boundary layer behavior, transient flow simulation, multiphase flow, color and material changes, multiscale modeling

**Autor / author:**

Michael Burgfeld, M.Sc.  
Ingrid Sturm, M.Sc.  
Jan Kummerow, M.Sc.  
Prof. Dr.-Ing. Johannes Wortberg  
Prof. Dr.-Ing. Reinhard Schiffers

E-Mail: office.kkm@uni-due.de  
Webseite: www.uni-due.de/kkm  
Tel.: +49 (0)203 / 379 - 3252  
Fax: +49 (0)203 / 379 - 4379

Institut für Produkt Engineering - KKM  
Universität Duisburg Essen  
Lotharstraße 1  
45057 Duisburg

**Herausgeber / Editors:**Editor-in-Chief

Prof. em. Dr.-Ing. Dr. h.c. Gottfried W. Ehrenstein  
Lehrstuhl für Kunststofftechnik  
Universität Erlangen-Nürnberg  
Am Weichselgarten 9  
91058 Erlangen  
Deutschland  
Tel.: +49 (0)9131/85 - 29703  
Fax: +49 (0)9131/85 - 29709  
E-Mail: ehrenstein@ikt.uni-erlangen.de

Europa / Europe

Prof. Dr.-Ing. Dietmar Drummer, verantwortlich  
Lehrstuhl für Kunststofftechnik  
Universität Erlangen-Nürnberg  
Am Weichselgarten 9  
91058 Erlangen  
Deutschland  
Tel.: +49 (0)9131/85 - 29700  
Fax: +49 (0)9131/85 - 29709  
E-Mail: drummer@ikt.uni-erlangen.de

Amerika / The Americas

Prof. Prof. hon. Dr. Tim A. Osswald, verantwortlich  
Polymer Engineering Center, Director  
University of Wisconsin-Madison  
1513 University Avenue  
Madison, WI 53706  
USA  
Tel.: +1 608/263 9538  
Fax: +1 608/265 2316  
E-Mail: osswald@engr.wisc.edu

**Verlag / Publisher:**

Carl-Hanser-Verlag GmbH & Co. KG  
Wolfgang Beisler  
Geschäftsführer  
Kolbergerstraße 22  
D-81679 München  
Tel.: +49 (0)89/99830-0  
Fax: +49 (0)89/98480-9  
E-Mail: info@hanser.

**Redaktion / Editorial Office:**

Dr.-Ing. Eva Bittmann  
Jannik Werner, M.Sc.  
E-Mail: redaktion@kunststofftech.com

**Beirat / Advisory Board:**

Experten aus Forschung und Industrie, gelistet unter  
www.kunststofftech.com