

eingereicht/handed in: 11.08.2021
angenommen/accepted: 18.11.2021

**Mirco Janßen, M.Sc., Lucas Schulz, M.Sc., Felix Vorjohann, M.Sc.,
Prof. Dr.-Ing. Reinhard Schiffers**
**Lehrstuhl für Konstruktion und Kunststoffmaschinen,
Institut für Produkt Engineering (IPE), Universität Duisburg-Essen**

Automatisierte Optimierung von dynamischen Mischelementen

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Algorithmus entwickelt und untersucht, der die automatisierte Optimierung von dynamischen Mischelementen ermöglichen soll. Hierzu werden an einem parametrisierten Wendelscherelement ausgewählte Geometrieparameter durch einen genetischen Algorithmus derart optimiert, dass sich misch-begünstigende Strömungsverhältnisse einstellen. Um eine manuelle Auswertung der Strömungsergebnisse zu vermeiden, werden Qualitätskriterien eingeführt, welche automatisch berechnet werden. Insgesamt werden neun verschiedene Qualitätskriterien verwendet, die nicht nur das Potenzial des Strömungsfeldes zur Realisierung von distributiven und dispersiven Mischmechanismen bewerten, sondern auch verfahrenstechnische Aspekte, wie bspw. die Spülbarkeit des Systems, einbeziehen. Die Ergebnisse der Untersuchung zeigen, dass mit den gewählten Qualitätskriterien eine automatisierte Optimierung vollzogen werden kann und sich weitere Verbesserungsmaßnahmen für den Algorithmus ableiten lassen.

Automated optimization of dynamic mixing elements

In this research project an algorithm is developed and tested, which enables the automated optimization of dynamic mixing elements. For this purpose, selected geometry parameters are optimized by a genetic algorithm on a parameterized spiral shear mixer in such a way that flow conditions that favor mixing are established. In order to avoid manual evaluation of the flow results, quality criteria are introduced which are automatically calculated. A total of nine different quality criteria are used, which not only assess the potential of the flow field to implement distributive and dispersive mixing mechanisms, but also include processing aspects such as the fluid change effectiveness of the system. The results of the test show that an automated optimization can be carried out with the selected quality criteria and further improvement measures for the algorithm can be derived.

Automatisierte Optimierung von dynamischen Mischelementen

M. Janßen, L. Schulz, F. Vorjohann, R. Schiffers

1 EINLEITUNG

In der Kunststoffverarbeitung sollen Mischelemente die stoffliche und thermische Homogenität der Schmelze gewährleisten. Insbesondere bei der direkten Verarbeitung von Additiven wie bspw. Masterbatches ist eine gleichmäßige Verteilung in die Polymermatrix des Basismaterials unerlässlich, um eine hohe Produktqualität zu erreichen. Für die strömungsoptimierte Auslegung von Mischelementen kann auf Expertenwissen sowie analytische Berechnungsvorschriften [1] und immer häufiger auf numerische Strömungssimulationen (engl.: Computational Fluid Dynamics, CFD) zurückgegriffen werden [2-7].

Insbesondere die CFD-Simulation hilft dabei, kosten- und zeitintensive experimentelle Erprobungen zu reduzieren. Darüber hinaus können detaillierte Einblicke in Strömungsvorgänge sowie die Analyse von Prozessgrößen, die im Experiment nicht ermittelt werden können, gewonnen werden. Im Rahmen der strömungsoptimierten Auslegung von Bauteilen handelt es sich derzeit jedoch um einen zeitintensiven Prozess. Bspw. wird eine analytisch bestimmte Ausgangsvariante generiert, CFD-gestützt analysiert und anschließend in mehreren Iterationsschritten eine optimierte Geometrievariante generiert. Der manuelle Aufwand der Ergebnisinterpretation ist hierbei aufwendig, da die Auswertung einen erfahrenen Ingenieur benötigt, der die Geometrievarianten aufsetzt, auswertet und eigenständig neue Designvorschläge ableitet. Im Rahmen dieser Arbeit soll der in [8] konzeptionell vorgestellte Algorithmus zur automatisierten Auslegung von dynamischen Mischelementen umgesetzt werden. Hierzu wird die CFD-Software ANSYS Fluent® genutzt, um das notwendige Framework zu erstellen. Im Anschluss soll der Algorithmus an einem primär dispersiv-wirkenden Wendelscherelement (WSE) untersucht werden. Zunächst werden neben einer Auswahl von Methoden zur virtuellen Bewertung von Mischvorgängen auch die grundlegenden numerischen Strömungszusammenhänge sowie mathematische Optimierungsverfahren vorgestellt.

1.1 Methoden zur virtuellen Mischgütebewertung

Zur Evaluierung der Mischgüte können unterschiedlichste Methoden und Ansätze verfolgt werden. Unterscheiden lassen sich experimentelle Methoden und virtuelle Ansätze der Bewertung. Dabei kann die reale Mischgüte nur über experimentelle Methoden ermittelt werden. Virtuelle Ansätze nutzen CFD-

Simulationen zur Bewertung des Strömungsfeldes und können demnach abschätzen, ob notwendige Strömungsverhältnisse vorliegen, um die distributiven und dispersiven Mischmechanismen umzusetzen [9]. Aus diesem Grund wird im Folgenden von virtuellen „Ansätzen“ zur Bewertung der Mischgüte gesprochen, um sie von den experimentellen „Methoden“ zu differenzieren. Experimentelle Methoden zur Bewertung der Homogenität können der Literatur entnommen werden [10-18].

Im Rahmen dieser Arbeit wird lediglich eine Auswahl von virtuellen Ansätzen vorgestellt, da es mittlerweile eine fast unüberschaubare Anzahl von Möglichkeiten zur Bewertung der „Mischgüte“ innerhalb der CFD-Simulation gibt. Allen Ansätzen ist jedoch gemein, dass diese mit Hilfe der Masse-, Impuls- und Energieerhaltung numerisch ein Strömungsfeld berechnen und dieses im Anschluss analysieren. Die getroffene Auswahl an virtuellen Ansätzen ist in Bild 1 dargestellt.

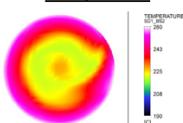
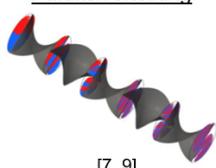
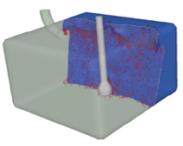
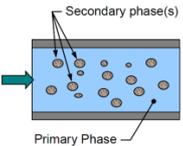
Virtuelle Ansätze				
Distributives Mischen			Dispersives Mischen	
Skalarfelder	Particle-Tracking	Mehrphasenmodelle	Particle-Tracking	Kennzahlen
<p><u>Temperatur</u></p>  <p>[16, 19]</p>	<p><u>Partikelverteilung</u></p>  <p>[7, 9]</p>	<p><u>Volume of Fluid (VOF)</u></p> 	<p><u>Deformation</u></p>  <p>[26, 16, 27]</p>	<p><u>Misch-Index</u></p> $\lambda = \frac{ D }{ D + W }$ <p>[30, 28]</p>
<p><u>Passiver Skalar</u></p>  <p>[20, 35]</p>	<p><u>Verweilzeitverteilung</u></p> $\sigma^2 = \int_{\theta_k}^{\infty} (\theta - 1)^2 f(\theta) d\theta$ <p>[23]</p>	<p><u>Discrete Phase Model (DPM)</u></p>  <p>[25]</p>		

Bild 1: Übersicht über eine Auswahl virtueller Ansätze zur Beurteilung der distributiven und dispersiven Mischgüte

Die Zuordnung der virtuellen Ansätze erfolgt in die Kategorien „distributives Mischen“ und „dispersives Mischen“, um zu verdeutlichen, welcher Mischmechanismus durch den jeweiligen Ansatz beschrieben werden kann.

Die Auswertung von skalaren Größen, welche sich aus den Erhaltungsgleichungen (siehe nächster Abschnitt) ergeben, ist ein häufig genutzter Ansatz, um Rückschlüsse auf die distributive Mischwirkung zu ziehen. So nutzen [16] und [19] bspw. statistische Größen wie Mittel-, Minimal-, Maximal- und Abweichungswerte für Temperaturen an den Ein- sowie Auslässen des Simulationsraums, um die thermische Homogenität zu beurteilen. Diese Art der Analyse

bietet jedoch keinen Aufschluss über das Potenzial zur stofflichen Homogenisierung der Schmelze. Hopmann und Schön et al. [20] verwenden hierzu einen passiven Skalar, der mittels Konvektion durch das Fluidvolumen strömt und am Einlass des Simulationsraumes aufgegeben wird. In einem kleinen Bereich des Einlasses wird dem Skalar der Wert 255 (RGB-Skala = schwarz) zugewiesen, während dem Rest des Einlasses der Wert 0 (weiß) zugeordnet wird. Die konvektiv-dominierte Strömung führt zu einer Mischung dieser beiden skalaren Werte, wodurch am Auslass des Systems eine Grauwertanalyse durchgeführt werden kann, um so einerseits die distributive Mischgüte innerhalb der Simulation zu beurteilen und andererseits auch einen Abgleich mit Dünnschnitten aus experimentellen Versuchen zu ermöglichen. Hopmann und Schön kommen zu dem Ergebnis, dass die simulierten Mischgüten eine gute Übereinstimmung mit experimentell durchgeführten Untersuchungen zeigen. Weiterhin lassen sich auch sogenannte Particle-Tracking-Ansätze zur Bewertung der distributiven Mischwirkung heranziehen. Hierbei beschreibt das Particle-Tracking die Abbildung und Untersuchung der Trajektorien, auf denen sich masselose Partikel durch das Strömungsfeld bewegen. Entscheidend für die Kalkulation der Partikeltrajektorien ist, ob ein stationäres oder instationäres Strömungsfeld vorliegt. Für stationäre Strömungen, in denen das Geschwindigkeitsfeld nicht zeitabhängig ist, stimmen Partikeltrajektorien mit Strömungslinien überein [21]. Eine weit verbreitete Möglichkeit der Auswertung von Partikelverteilungen stellen sogenannte Poincaré-Abbildungen dar. Diese bilden die Schnittpunkte von Trajektorien auf einer Ebene ab [22]. Unter anderem wurden sie bereits in [7] und [9] zur Auswertung der Mischgüte herangezogen. In [7] ist dazu eine Auswahl verschiedener Mischgütekennzahlen auf Basis von Poincaré-Abbildungen dargestellt. Roland und Marschik et al. [23] erweitern die Methode des Particle-Trackings mit der Einbeziehung der Verweilzeit. Aus der Berechnung der zeitlichen Verteilung der Strömung, kann das Potenzial zur Längsmischung (axiale Mischung) eines Mischelementes abgeschätzt werden.

Bislang haben sich alle vorgestellten Ansätze auf die Betrachtung einer klassischen einphasigen Strömung bezogen. In der Kunststoffverarbeitung liegen jedoch in der Regel mehrphasige Systeme (Dispersion) vor. Im Bereich der Mehrphasenmodelle sind vor allem der Volume-of-Fluid Ansatz (VOF) sowie das Discrete-Phase-Model (DPM) zu nennen. Der VOF-Ansatz simuliert das Verhalten nicht-mischbarer Fluide und errechnet für jede Zelle des verwendeten Rechenetztes den prozentualen Anteil der Fluide in dieser Zelle, welcher im Anschluss ausgewertet werden kann. Das DPM erlaubt neben der Lösung der kontinuierlichen Phase die Lösung einer weiteren nicht-kontinuierlichen diskreten Phase. Diese zweite Phase besteht aus sphärischen Partikeln, welche in der ersten Phase dispergiert sind. Über die Auswertung der Trajektorien der Partikel lassen sich Rückschlüsse auf die Mischgüte ziehen. [24, 25]

Particle-Tracking-Ansätze können auch zur Bewertung der dispersiven Mischgüte herangezogen werden. So wird bspw. in [26] entlang von Partikelbahnen die Deformation berechnet und eine Kennzahl gebildet, die die Gesamtdeforma-

tion in das Verhältnis zu einer initialen Startform setzt. Ähnliche Ansätze verwenden [16] und [27] zur Beurteilung der Deformationsneigung.

Eine weit verbreitete Kennzahl zur Bewertung der dispersiven Mischgüte ist der in [28] vorgestellte Mischindex, auch Manas-Zahl oder Fließzahl. Zur Berechnung wird der Geschwindigkeitsgradiententensor \bar{L} in einen symmetrischen Deformationstensor \bar{D} und einen schiefsymmetrischen Rotationstensor \bar{W} zerlegt. Die Anteile der Deformationsströmung (zweite Invariante der Matrix – häufig auch als Betrag bezeichnet) werden zu den Anteilen der Rotationsströmung (ebenfalls zweite Invariante der Matrix) gemäß Gl. 1 ins Verhältnis gesetzt [28].

$$\lambda = \frac{|\bar{D}|}{|\bar{D}| + |\bar{W}|} \quad \begin{array}{ll} \blacksquare \lambda = 0 & \rightarrow \text{reine Rotation,} \\ \blacksquare \lambda = 0,5 & \rightarrow \text{reine Scherströmung,} \\ \blacksquare \lambda = 1 & \rightarrow \text{reine Dehnströmung} \end{array} \quad \text{Gl. 1}$$

Ein höherer Wert entspricht einer potenziell besseren dispersiven Mischleistung aufgrund des Ausbleibens von Wirbeln, welche für das Aufbrechen von Fluidteilchen nicht förderlich sind. Im Idealfall ist das Fluidteilchen einer reinen Dehnströmung ausgesetzt. [28-30]

1.2 Numerische Strömungssimulation

Die numerische Strömungssimulation ermöglicht die iterative Berechnung der Strömungsfeld beschreibenden Größen Geschwindigkeitsvektor \bar{u} , Druck p und Temperatur T . Zur Bestimmung dieser Größen werden die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie für eine Fluidomäne – bestehend aus infinitesimal kleinen Kontrollvolumina – verwendet. Für die ausführliche Herleitung der Erhaltungssätze wird aufgrund ihres Umfangs an dieser Stelle auf Fachliteratur verwiesen [31-34]. „Die partiellen, nichtlinearen Differentialgleichungen [zur Beschreibung der Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie] besitzen einen formal ähnlichen Aufbau“ [34]. Vereinfachend können die drei Erhaltungsgleichungen in eine allgemeine Transportgleichungsform gemäß Gl. 2 gebracht werden.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \bar{u} \phi)}_{F_\phi} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma_\rho \nabla \phi)}_{D_\phi} + Q_\phi \quad \text{Gl. 2}$$

Die Größen ρ und \bar{u} repräsentieren hierbei die Dichte bzw. den Geschwindigkeitsvektor. ϕ stellt eine beliebige Strömungsgröße dar. Der Anteil F_ϕ beschreibt den konvektiven Fluss, also den Transport von ϕ durch die Strömung. Der diffuse Fluss, welcher in Folge einer ungleichmäßigen räumlichen Konzentration von ϕ im Fluid entsteht, wird durch D_ϕ beschrieben. Der Diffusionskoeffizient Γ_ρ ist hierbei eine auf die Dichte bezogene spezifische Größe. Zusätzliche Quellen und Senken von ϕ werden mit Q_ϕ berücksichtigt. Um aus der oben gezeigten generischen Transportgleichung die drei Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie zu erhalten, müssen für die Größen ϕ , D_ϕ und Q_ϕ die entsprechenden Gleichungen nach Tabelle 1 eingesetzt werden [34].

Gleichung	ϕ	D_ϕ	Q_ϕ
Kontinuität	1	0	0
Impuls	\bar{u}	$\nabla \cdot \bar{\tau}$	$-\nabla p + \rho \bar{g}$
Energie	h	$-\nabla \cdot \bar{q}''$	$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\tau} \cdot \bar{u})$

Tabelle 1: Komponenten zur Spezifizierung der jeweiligen Transportgleichung nach [34]

An dieser Stelle wird auf die Erläuterung der einzelnen Gleichungskomponenten verzichtet, da diese für den weiteren Verlauf von untergeordneter Bedeutung sind. Hierzu sei auf die Fachliteratur verwiesen [31-34]. Die allgemeine Transportgleichung wird an späterer Stelle wichtig, um die Berechnung von skalaren Strömungsgrößen wie der Verweilzeit und Scherbelastung innerhalb der Fluiddomäne zu ermöglichen. Zur Lösung der Erhaltungsgleichungen nutzt ANSYS die Finite-Volumen-Methode. Der Ablauf der Finite-Volumen-Methode ist in [33] umfassend erklärt.

1.3 Mathematische Optimierungsmethoden

Durch die wachsende Bedeutung der numerischen Strömungssimulation und die steigende Leistung moderner Computer gewinnt das Thema der automatisierten Optimierung immer mehr Bedeutung [6, 8, 35, 36, 37]. Gerade der iterative Prozess der Werkzeugauslegung profitiert davon, da diverse manuelle Auswertungsschritte und Anpassungen der Geometrie eliminiert werden. Im Rahmen einer Optimierung soll diejenige Kombination von Eingangsparametern gefunden werden, die ein oder mehrere definierte Ziele möglichst optimal erfüllt [38]. Mathematisch betrachtet sind solche Ziele in der Regel Minima oder Maxima einer Systemantwortfunktion, die sich aus dem definierten Optimierungsziel ergibt, innerhalb eines Parameterraumes. Auf Basis der ingenieurwissenschaftlichen Problemstellung muss die Auswahl einer geeigneten mathematischen Optimierungsmethode erfolgen. Die Einteilung von Optimierungsverfahren kann auf unterschiedlichste Arten und in unterschiedlichste Kategorien erfolgen. An dieser Stelle sei auf die einschlägige Literatur zu dieser Thematik verwiesen [38-40].

Im Rahmen dieser Arbeit wird auf das Spektrum der Optimierungsmethoden zurückgegriffen, die in der CFD-Software ANSYS Fluent® integriert sind. Um eine geeignete Methode auszuwählen, wurden vorab Anforderungen definiert, die diese Methode bestmöglich erfüllen soll.

- Auffinden globaler Mini- und Maxima der Zielfunktion
- Möglichkeit zur Lösung mono- und multikriterieller Optimierungsprobleme
- Integration von Parameterbeziehungen und -abhängigkeiten

Zwar ist es das ausgewiesene Ziel dieser Arbeit, mehrere Kriterien zu verwenden, diese aber durch die Methode der gewichteten Summe in eine Problemstellung zu überführen, die einen Funktionswert minimiert. Hierdurch wird die

gegenseitige Beeinflussung der verschiedenen Zielkriterien durch Gewichtung umgangen. Des Weiteren kann davon ausgegangen werden, dass sich die Zielfunktionen nicht-linear verhalten. In der Regel existieren für solche Optimierungsaufgaben keine analytischen Lösungsverfahren, so dass auf numerisch-iterative Methoden zurückgegriffen werden muss. Auch direkt mit dem praktischen Problem verknüpft ist die Tatsache, dass in der Regel definierte Nebenbedingungen einzuhalten sind. Diese Parameterbeziehungen sollten in Form von Gleichungen oder Ungleichungen vorliegen können. Als potenzielle Methoden, welche die Anforderungen erfüllen, wird im Folgenden auf das Screening und den sogenannten MOGA näher eingegangen. Diese beiden Optimierungsmethoden sind in ANSYS standardmäßig enthalten. [41]

Die Methode des Screenings stellt im eigentlichen Sinne gar keine Optimierungsmethode dar. Sie generiert zu Beginn eine bestimmte Anzahl zufälliger Geometrievarianten in Abhängigkeit von möglichen Parameterkombinationen und -grenzen (Freiheitsgrade der Geometrie). Anschließend erfolgt die Berechnung der so erstellten Design Points (kurz: DP → Geometrievarianten) und je nach Vorgabe wird eine Anzahl an optimalen Kandidaten ausgegeben, die das vom Benutzer vorgegebene Ziel der „Optimierung“ am besten erfüllen. Es findet kein weiterer Optimierungslauf statt, der bspw. weitere Geometrievarianten aus der Menge der besten Kandidaten bildet. Demnach ist das Ziel des Screenings (zu Deutsch: Früherkennung, Vorauswahl, Überprüfung) nicht das Finden der optimalen Parameterkombination, sondern das Ermitteln eines Datensets, welches für anschließende Optimierungen als Startwert genutzt werden kann und somit den Umfang und die Dauer der eigentlichen Optimierung reduziert [41].

Der sogenannte MOGA (**M**ulti-**O**bjective-**G**enetic-**A**lgorithm) hingegen ist ein genetischer Algorithmus, der auf dem biologischen Prinzip der Evolution basiert und darauf ausgelegt ist das globale Optimum zu finden. Beim biologischen Prinzip der Evolution geht es um den Überlebenskampf einer Population in einer bestimmten Umwelt. Durch Fortpflanzung entstehen neue Individuen, welche durch Rekombination und Mutation von Genen bessere oder schlechtere Eigenschaften als ihre Eltern aufweisen. Die fittesten Individuen haben dabei die größte Überlebenschance. Bei Übertragung dieses Prinzips auf eine Optimierung, stellt die Umwelt das zugrundeliegende Problem dar. Die einzelnen Individuen sind mögliche Lösungen für dieses Problem. Durch Aufstellen einer Zielfunktion wird die Fitness der einzelnen Individuen miteinander verglichen. Das fitteste Individuum stellt demnach die beste Lösung für das Optimierungsproblem dar [39]. In ANSYS läuft der MOGA nach dem folgenden Prinzip ab. In einem ersten Schritt wird eine initiale Population an DP erstellt und simuliert (bis zu diesem Arbeitsschritt vergleichbar mit Screening). Auf Basis dieser Ergebnisse wird anschließend eine neue Population erzeugt. Dazu verwendet der Algorithmus zwei verschiedene Verfahren, die Kreuzung und die Mutation. Mittels Kreuzung zweier DP (Eltern) der vorhergegangenen Population wird versucht die potenziell besten Eigenschaften der Eltern auf den neuen DP (Kind) zu übertragen. Durch Mutation werden ein oder mehrere Werte eines Individuums zufällig verändert, um eine bessere Lösung zu erreichen. Dadurch soll ver-

hindert werden, dass die Population an einem lokalen Minimum stagniert. Ist die neue Population erzeugt, wird die Berechnung für alle DP aktualisiert. Anschließend wird geprüft, ob die Lösung konvergiert ist. Ist dies nicht der Fall, wird auf Basis der neu erzeugten Population eine weitere Population erschaffen, bis die Lösung stabil ist [41].

Im Gegensatz zum Screening ermöglicht der MOGA demnach die Ermittlung eines optimalen Kandidaten, weshalb im Rahmen dieser Arbeit der MOGA als mathematisches Optimierungsverfahren verwendet wird. Es sei bereits an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass durch einen Wechsel zu einer alternativen (nicht in ANSYS-verfügbaren) Optimierungsmethode, welche ebenfalls die o.g. Anforderungen erfüllt, Vorteile im Hinblick auf die Optimierungsdauer erzielt werden können. Hierauf liegt jedoch nicht der Fokus dieser Arbeit.

2 AUTOMATISIERTER ALGORITHMUS ZUR AUSLEGUNG UND OPTIMIERUNG

Die Auslegung und Optimierung von Mischelementen stellt einen iterativen Prozess dar, bei dem verschiedene Parameter bisher manuell angepasst werden mussten. Das in [8] vorgestellte Konzept zur automatisierten Auslegung und Optimierung von dynamischen Mischelementen soll in diesem Kapitel umgesetzt werden. Dazu werden zunächst der Aufbau des Algorithmus und die Implementierung beschrieben. Darauf folgt die Definition verschiedener Zielgrößen – auch Qualitätskriterien (in Anlehnung an die Arbeiten von [6] und [36]) genannt – zur Beurteilung der Mischgüte. Abschließend wird auf die verwendete Methode der Gewichtung eingegangen.

2.1 Implementierung des Algorithmus in ANSYS Fluent

Der Algorithmus zur automatisierten Auslegung und Optimierung von dynamischen Mischelementen soll in die kommerziell verfügbare CFD-Software ANSYS Fluent® implementiert werden. Der grundsätzliche Ablauf des Algorithmus ist im folgenden Bild 2 dargestellt. Die blauen Kästen beschreiben primäre Schritte, die weißen Kästen hingegen beinhalten Daten, welche in den Algorithmus einfließen oder von diesem generiert werden. Die Grundlage des Algorithmus bildet ein parametrisiertes **CAD-Mastermodell** für das mischelementspezifisch geometrische Freiheitsgrade definiert werden müssen. Hierbei sind Fertigungsrestriktionen zu berücksichtigen. Aus den dadurch gesetzten Grenzen lässt sich ein Bereich festlegen, in dem die Parameter frei variiert werden können. Aus den entstehenden Geometrievarianten wird anschließend das Fluidvolumen abgeleitet und im nächsten Schritt **diskretisiert**. Hierzu werden globale Vernetzungseinstellungen gewählt, um sicherzustellen, dass für jede Geometrievariante die gleichen Einstellungen für Elementgrößen, Wachstumsraten und Anzahl von Randschichtverfeinerungen genutzt wird. Strukturierte Prismenschichten werden zur hohen Auflösung der wandnahen Strömungseffekte

verwendet, in den mittleren Bereichen hingegen unstrukturiert angeordnete Tetraederelemente.

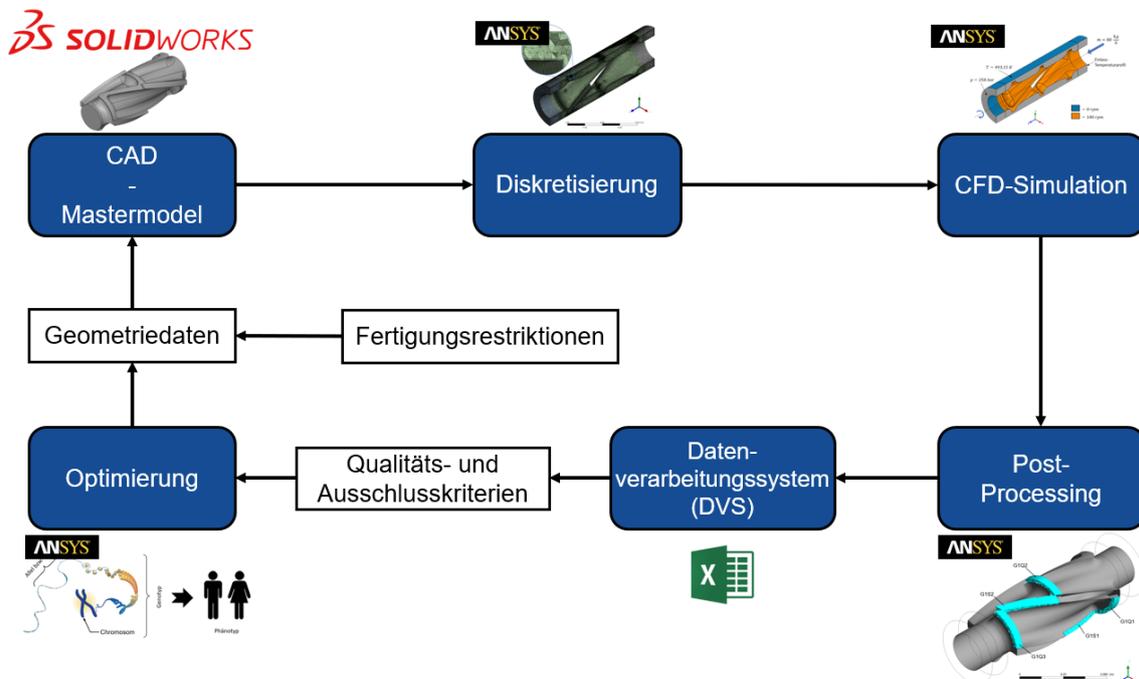


Bild 2: Algorithmus zur automatisierten Auslegung und Optimierung von dynamischen Mischelementen

Das vernetzte Geometriemodell wird in die **CFD-Simulation** überführt, in der die numerische Berechnung des Strömungsfeldes für jede Variante erfolgt. Jede Geometrievariante wird mit dem gleichen Betriebspunkt (Rotordrehzahl, Material, Massendurchsatz, ...) simuliert, um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse gewährleisten zu können. Da es sich bei den betrachteten Mischelementen um dynamische Mischelemente handelt, führt die Relativbewegung zwischen dem Rotor und dem Zylinder zu einem instationären Zustand der Strömung. Um den Aufwand bezüglich Zeit und Rechenleistung bei einer instationären Berechnung zu vermeiden, wird auf das Prinzip der kinematischen Umkehr zurückgegriffen. Dieses ermöglicht die Überführung des instationären Prozesses in einen stationären Prozess. In ANSYS wird dieses Prinzip durch die Verwendung eines bewegten Bezugssystems, sogenannten Moving Reference Frames, umgesetzt [24]. Für weiterführende Informationen zu dieser Thematik sei auf [24] und [42] verwiesen.

Nach Berechnung des Strömungsfeldes werden die Ergebnisse aus dem Solver an das **Post-Processing** übergeben. Im Post-Processing ist nicht jede beliebige statistische Größe komfortabel in der Auswertungsumgebung zu erstellen und zu analysieren. Deshalb werden alle relevanten Strömungsgrößen in das verwendete Datenverarbeitungssystem (DVS) exportiert und mit speziell programmierten **Makros** eine separate **Berechnung** der Qualitätskriterien durchgeführt, bevor diese an ANSYS zurückgegeben werden. Diese Größen dienen

dem Optimierer als Datenbasis zur Ermittlung eines „optimalen“ Kandidaten, der unter Einhaltung der vorgegebenen Ausschlusskriterien, die Qualitätskriterien bestmöglich erfüllt. Bevor die Definitionen der Qualitäts- und Ausschlusskriterien im nächsten Abschnitt vorgestellt werden, wird an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass lediglich solche Kriterien berücksichtigt werden, welche eine Beurteilung einer einphasigen Strömung auf makroskopischer Ebene zulassen. Rückschlüsse über das mikroskopische Verhalten, bspw. über Tropfenverteilung, -bruch oder -koaleszenzvorgängen wie es Celik in seiner Dissertation getan hat [4], sind demnach nicht möglich. Celiks Modell wird auf ein in der Größe und Komplexität begrenztes Fluidvolumen (6300 Zellen) angewendet, wohingegen der vorgestellte Algorithmus auf die Simulation eines gesamten Mischelementes (>1 Mio. Zellen) ausgelegt ist. Entsprechend höher ist der Rechenbedarf für die Optimierung. Im Rahmen dieser Arbeit werden insgesamt neun verschiedene Qualitätskriterien erprobt und auf deren Eignung zur automatisierten Bewertung der Mischgüte untersucht. Hierbei muss dem Anwender bewusst sein, dass jede Aggregation von Informationen zwangsläufig zu einem Informationsverlust führt. Eine kritische Beurteilung der Optimierungsergebnisse bleibt demnach nicht erspart.

2.2 Qualitäts- und Ausschlusskriterien

Wie im Stand der Technik gezeigt werden konnte, gibt es bereits eine Vielzahl virtueller Ansätze zur Bewertung der „Mischgüte“. In vergangenen wissenschaftlichen Publikationen lag der Fokus in der Regel auf der Betrachtung von ein oder zwei unterschiedlichen Ansätzen. Im Rahmen dieser Arbeit werden drei Ausschlusskriterien AK und neun verschiedene Qualitätskriterien QK herangezogen. Tabelle 2 und Tabelle 3 geben eine Übersicht dieser Kriterien mit der getroffenen Kategorisierung der QK .

Ausschlusskriterien
$AK_{DV} = \text{Druckverlust} < \text{systemspezifisch}$
$AK_{ES} = \text{Elementschiefe} < 0,94$
$AK_{TL} = \text{Temperaturlimit} < \text{materialspezifisch}$

Tabelle 2: Übersicht der verwendeten Ausschlusskriterien

Der Index jedes Ausschlusskriteriums AK bzw. Qualitätskriteriums QK ist ein Akronym des jeweiligen Kriteriums (bspw.: **T**emperatur**e**ntwicklung = TE).

Qualitätskriterien		
Performance	Mischmechanismen	
	distributiv	dispersiv
QK_{TE} = Temperaturentwicklung QK_{FCE} = Fluid Change Effectiveness	QK_{TV} = Temperaturverteilung QK_{TS} = Temperaturspanne QK_{PS} = Passiver Skalar QK_{LM} = Längsmischung	QK_{LSB} = Lokale Scherbelastung QK_{SV} = Scherungsverteilung QK_{GMI} = Globaler Mischindex

Tabelle 3: Übersicht über die verwendeten Qualitätskriterien

Die QK gliedern sich in die zwei Kategorien *Performance* und *Mischmechanismen*, wobei letztere nochmals in die Unterkategorien *distributiv* und *dispersiv* aufgeteilt ist. Diese Art der Zuordnung ermöglicht eine klare Abgrenzung verfahrenstechnischer Kriterien (Performance) zu solchen, die die Mischwirkung bewerten sollen. Die Zuordnung in distributive und dispersive Mischmechanismen soll verdeutlichen, dass nicht „die“ eine Mischgüte bestimmt wird. Vielmehr soll bewertet werden, inwiefern sich bestimmte Geometrievariationen eignen, solche Strömungsverhältnisse herbeizuführen, die distributive oder dispersive Mischwirkungen begünstigen. Bevor in den nächsten Abschnitten die einzelnen Kriterien näher erläutert werden, soll zunächst das Thema der mono- bzw. multikriteriellen Optimierung aufgegriffen werden.

Jedes Qualitätskriterium stellt im Rahmen der Optimierung eine Zielfunktion dar, welche es zu minimieren gilt. Es handelt sich demnach um ein multikriterielles Optimierungsproblem, welches zur Vereinfachung in ein monokriterielles Optimierungsproblem überführt wird. Die dazu notwendige Gewichtung der QK wird in Abschnitt 2.3 detailliert vorgestellt. Im Idealfall könnte für jedes QK eine Normierung auf den Wertebereich [0:1] mittels der Methode der linearen Skalierung durchgeführt werden. Grundsätzlich kann diese Vorgehensweise auch realisiert werden, jedoch wurde im Rahmen von internen Arbeiten festgestellt, dass die große Schwankungsbreite einzelner QK im Vergleich zu einer eher geringen Schwankungsbreite anderer QK einen sinnvollen Vergleich und somit eine objektive Bewertung verhindert. Aus diesem Grund wurde sich für eine „referenzbasierte“ Auswertung entschieden, in der die prozentuale Änderung eines QK im Vergleich zu einem Referenzmodell berechnet wird. Als Referenzmodell wird hierbei eine beliebige Startgeometrie verstanden, die dem Algorithmus zu Beginn zur Verfügung gestellt wird. Im Anschluss an die durchgeführte Optimierung muss geprüft werden, ob durch die Wahl einer alternativen Startgeometrie die Ermittlung des optimalen Kandidaten beeinflusst wird. Die notwendigen Umrechnungsschritte für eine alternative Startgeometrie sind im Anschluss an eine Optimierung problemlos möglich, ohne erneut eine Simulationslauf zu beginnen.

Da die Zielfunktion minimiert werden soll, können folgende Zusammenhänge festgehalten werden:

- $QK = 1$ → Variante gleichwertig mit Referenzmodell
- $QK < 1$ → Variante besser als Referenzmodell
- $QK > 1$ → Variante schlechter als Referenzmodell

2.2.1 Ausschlusskriterien

Der Algorithmus verwendet in seiner aktuellen Form drei Ausschlusskriterien AK . Hier sei zunächst das erste AK_{DV} , welches den Druckverlust des Systems bewertet, genannt und in Abhängigkeit des verwendeten Systems sowie des betrachteten Betriebspunktes festgesetzt werden muss. Grundsätzlich ist es denkbar, den Druckverlust auch als QK aufzunehmen, jedoch besteht das Risiko, dass gut-mischende Varianten aufgrund des tendenziell höheren Druckverlustes ausgeschlossen werden, obwohl das System den Druckverlust erlauben würde.

Das zweite $AK_{ES} < 0,94$ (Elementschiefe) bezieht sich auf den Diskretisierungsprozess und soll sicherstellen, dass nur solche Geometrievarianten in die Bewertung einbezogen werden, bei denen eine ausreichende Netzqualität gewährleistet ist. Unzureichende Werte für die Elementschiefe führen zu schlechter Abbildung der physikalischen Realität, zu Konvergenzproblemen und zu instabilen Lösungen, sodass Geometrievarianten mit einer Elementschiefe $> 0,94$ ausgeschlossen werden. Das Risiko besteht, dass aufgrund dieses AK die optimale Variante nicht berücksichtigt wird. Aus diesem Grund muss der Anwender im Nachgang kontrollieren, welche Varianten aufgrund zu schlechter Elementschiefe ausgeschlossen wurden und entscheiden, ob der Ausschluss hinsichtlich Mischwirkung sinnvoll war. Gegebenenfalls müsste eine manuelle Vernetzung sowie Auswertung dieser Variante erfolgen.

Das dritte AK_{TL} (Temperaturlimit) soll das Überschreiten von unzulässigen Materialverarbeitungstemperaturen verhindern, in dem ein Temperaturlimit in Abhängigkeit des verwendeten Materials definiert wird.

2.2.2 Performance-Kriterien

Die verfahrenstechnische Performance des Mischelementes wird durch zwei QK beschrieben. Das Kriterium QK_{TE} (Temperaturentwicklung) soll die primär durch Dissipation entstehende Massetemperaturentwicklung am Systemauslass betrachten, wohingegen das Kriterium QK_{FCE} die Spülbarkeit des Mischelementes bewerten soll. Der größte Teil aller QK wird an der Auslassfläche des Systems berechnet. Aus diesem Grund wird lediglich bei solchen Kriterien ein Vermerk in den Gleichungen aufgeführt, bei denen der Auswertungsbereich abweicht.

QK_{TE} wird auf der Auslassfläche des Systems berechnet, indem die massenstromgewichtete, mittlere Temperatur $\mu_{T(\dot{m})}$ einer jeden Geometrievariante gebildet wird. Die Schreibweise erfolgt für die mittlere Temperatur einer Geometrievariante j als $\mu_{T(\dot{m}),j}$ und für das zugehörige Qualitätskriterium als $QK_{TE,j}$. Diese Schreibweise wird für alle folgenden QK beibehalten. Gl. 3 setzt $\mu_{T(\dot{m}),j}$ ins Verhältnis zur Referenzgeometrie.

$$QK_{TE,j} = \frac{\mu_{T(\dot{m}),j}}{\mu_{T(\dot{m}),\text{Referenz}}} \quad \text{Gl. 3}$$

Das Kriterium QK_{FCE} konzentriert sich auf mögliche Totzonen im Fluidvolumen. In [43] leiten Kummerow und Wortberg die Fluid Change Effectiveness ε aus einem Ansatz von Spalding [44] ab. Dabei beschreibt ε wie häufig ein Schmelzestrom mit dem Rauminhalt des Fluidvolumens des Mischelementes durch das System strömen muss, um eine bestimmte Zelle zu spülen. Mathematisch lässt sich ε durch Gl. 4 beschreiben:

$$\varepsilon = \frac{\tau}{\theta} \quad \text{Gl. 4}$$

ε ergibt sich demnach aus dem Quotienten der mittleren Verweilzeit τ und dem mittleren lokalen Alter θ . Das mittlere lokale Alter θ der Schmelze stellt die Zeit dar, die ein masseloses Partikel durchschnittlich benötigt, um vom Eintritt des Fluidvolumens bis zu einem betrachteten Punkt zu gelangen. Das mittlere lokale Alter lässt sich somit in jeder Zelle des betrachteten Fluidvolumens auswerten. Daraus folgt, dass der Mittelwert aller mittleren lokalen Alter am Auslass des Fluidvolumens der mittleren Verweilzeit τ des Systems entspricht. Für Bereiche mit $\varepsilon > 1$ gilt, dass der betrachtete Bereich mindestens einmal gespült wird. Bereiche mit $\varepsilon < 1$ werden beim einmaligen Durchfluss des Volumens hingegen nicht vollständig gespült. Bezieht man nun das Volumen (also die Summe aller Zellvolumina) in dem $\varepsilon < 0,5$ liegt (V_{ε}) auf das gesamte Fluidvolumen (V_{total}), ergibt sich das von [43] vorgestellte Kriterium K_{ε} nach Gl. 5.

$$K_{\varepsilon,j} = \frac{V_{\varepsilon,j}}{V_{total,j}} \quad \text{Gl. 5}$$

Um das Kriterium in seinem Aufbau an die vorherigen anzugleichen, wird $K_{\varepsilon,j}$ ins Verhältnis zu $K_{\varepsilon,Referenz}$ gesetzt, sodass sich gemäß Gl. 6 das Qualitätskriterium $QK_{FCE,j}$ aufstellen lässt.

$$QK_{FCE,j} = \frac{K_{\varepsilon,j}}{K_{\varepsilon,Referenz}} \quad \text{Gl. 6}$$

2.2.3 Distributive Mischkriterien

Das Potenzial des Strömungsfeldes zur Umsetzung der distributiven Mischwirkung soll anhand von vier QK bewertet werden. Die Kriterien QK_{TV} (Temperaturverteilung) und QK_{TS} (Temperaturspanne) basieren hierbei auf der Auswertung von simulierten Temperaturfeldern. Um das Potenzial zur stofflichen Homogenisierung einbeziehen zu können, werden die Kriterien QK_{PS} (Passiver Skalar) und QK_{LM} (Längsmischung) verwendet.

QK_{TV} bewertet die thermische Homogenität am Auslass des Systems mit der mittleren absoluten Abweichung der massenstromgewichteten Temperatur $\delta_{T(m),j}$ (für jede Geometrievariante j) im Vergleich zum Referenzwert. Der Wert von δ beschreibt allgemein den durchschnittlichen Abstand der Merkmalswerte vom arithmetischen Mittel μ . Er wird anstelle der Standardabweichung verwendet, welche aufgrund mangelnder Nachvollziehbarkeit und nicht möglicher Interpretation in der empirischen (deskriptiven) Statistik nur bedingt zur Auswertung geeignet ist. Dies ist vor allem darauf zurückzuführen, dass zunehmende

Abweichungen vom Mittelwert durch die Quadrierung überproportionalen Einfluss auf das Streuungsmaß haben [45]. Anzustreben sind für die Temperaturverteilung möglichst kleine Werte der mittleren absoluten Abweichung, um die Streuung um den Temperaturmittelwert μ_T zu minimieren und eine homogene Temperaturverteilung zu erreichen. Die Berechnung des Kriteriums QK_{TV} erfolgt gemäß Gl. 7.

$$QK_{TV,j} = \frac{\delta_{T(\dot{m}),j}}{\delta_{T(\dot{m}),Referenz}} \quad \text{Gl. 7}$$

Mit dem ebenfalls temperaturbasierten Kriterium QK_{TS} wird die Temperaturspanne, also die Differenz zwischen minimalem und maximalem Temperaturwert am Auslass gemäß Gl. 8 ins Verhältnis zur Referenz gesetzt.

$$QK_{TS,j} = \frac{\max_{T(\dot{m}),j} - \min_{T(\dot{m}),j}}{\max_{T(\dot{m}),Referenz} - \min_{T(\dot{m}),Referenz}} \quad \text{Gl. 8}$$

Je näher der minimale und maximale Wert beieinander liegen, desto homogener ist die Massetemperatur am Auslass und desto kleiner der Wert für das Kriterium QK_{TS} . Die Betrachtung maximaler und minimaler Werte in der numerischen Strömungssimulation unterliegt durch mögliche Ausreißer einem gewissen Risiko. Diese Ausreißer können durch numerische Fehler (entartete Zellen) entstehen und verfälschen das Ergebnis der Auswertung. Zur Vermeidung dieser Problematik werden bei der Auswertung für die Temperaturspanne am Auslass die oberen 1 % und die unteren 1 % der Temperaturwerte nicht berücksichtigt. Ein Temperaturwert beschreibt in diesem Fall den Temperaturwert eines Netzelementes am Auslass der Geometrie.

Zur Beurteilung der stofflichen Verteilung des Strömungsfeldes wird das Kriterium QK_{PS} eingeführt. Hier wird ein ähnlicher Ansatz wie in [20] und [35] verfolgt. Mittels eines passiven Skalars, der durch die konvektive Strömung transportiert wird, kann die Verteilung des Skalars am Auslass bewertet werden. Die Berechnung des passiven Skalars erfolgt hierbei über die allgemeine Transportgleichung gemäß Gl. 2, wobei der generischen Strömungsgröße ϕ nun ein numerischer Wert zugewiesen wird. Hierzu wird der kreisringförmige Eintrittsquerschnitt des Simulationsraumes in zwei Hälften aufgeteilt. Für die obere Hälfte erhält der passive Skalar bzw. die Strömungsgröße den Wert Eins und für die untere Hälfte den Wert Null. Quellen und Senken sind nicht vorhanden. Der diffusive Anteil der Transportgleichung wird durch einen niedrig gewählten Diffusionskoeffizienten egalisiert, sodass lediglich konvektive Transportvorgänge die Strömung dominieren. In Abhängigkeit von der distributiven Mischwirkung des Strömungsfeldes wird der passive Skalar nun Werte zwischen Null und Eins entlang des Misch-elementes annehmen. Ein Wert von 0,5 am Auslass des Systems würde einer perfekten distributiven Durchmischung entsprechen. An dieser Stelle sei erwähnt, dass mit dieser Methodik nicht die Absicht verfolgt wird, die Mischung zweier unterschiedlicher Materialien miteinander zu bewerten, sondern lediglich eine einphasige Strömung betrachtet wird. Rückschlüsse über die Verteilung von Dispersionen sind mit dieser Methodik demnach nicht möglich. Zur Berechnung des Kriteriums QK_{PS} wird die mittlere absolute Abwei-

chung des massestromgewichteten Skalars am Auslass einer jeden Geometrievariante $\delta_{PS(\dot{m}),j}$ wiederum ins Verhältnis zum Wert der Referenz gesetzt (siehe Gl. 9).

$$QK_{PS,j} = \frac{\delta_{PS(\dot{m}),j}}{\delta_{PS(\dot{m}),Referenz}} \quad \text{Gl. 9}$$

Während die vorherigen Kriterien das Potenzial zur Quermischung bewerten, soll durch das Kriterium QK_{LM} das Potenzial zur Längsmischung beurteilt werden. Ähnlich wie Roland und Marschik et al. in [23] soll die Verteilung des mittleren lokalen Alters θ am Auslass des Systems zur Beurteilung der Längsmischung herangezogen werden. Hier wird jedoch anstatt der Particle-Tracking-Methode die Verweilzeitverteilung gemäß Kummerow und Wortberg [43] über eine Transportgleichung ermittelt. In [46] und [47] konnte gezeigt werden, dass die transportgleichungsbasierte Ermittlung der Verweilzeit ähnliche Genauigkeit aufweist, wie bei einer transienten Bestimmung der Verweilzeit. Wiederum wird für die Berechnung des Kriteriums QK_{LM} die mittlere absolute Abweichung des massestromgewichteten mittleren Alters am Auslass $\delta_{\theta(\dot{m}),j}$ des Simulationsraumes ermittelt, um den durchschnittlichen zeitlichen Versatz der Schmelze in Strömungsrichtung zu bewerten. Dieser Wert wird gemäß Gl. 10 ins Verhältnis zur Referenz gesetzt.

$$QK_{LM,j} = \frac{\delta_{\theta(\dot{m}),Referenz}}{\delta_{\theta(\dot{m}),j}} \quad \text{Gl. 10}$$

Anders als bei den vorherigen Kriterien steht der Referenzwert in dieser Gleichung im Zähler. Dies ist auf die übergeordnete Minimierungsfunktion zurückzuführen. Eine hohe absolute Abweichung der Verweilzeit ist förderlich für die Mischgüte, da sie gleichbedeutend mit einem axialen Versatz der Schmelze ist. Das Qualitätskriterium muss also mit steigender Abweichung kleiner werden, was durch den Tausch von Zähler und Nenner erfolgt.

2.2.4 Dispersive Mischkriterien

Das Potenzial des Strömungsfeldes zur Umsetzung der dispersiven Mischwirkung soll anhand von drei QK bewertet werden. Die zwei Kriterien QK_{LSB} und QK_{SV} beruhen hierbei auf der Auswertung von Scherungsvorgängen und das dritte Kriterium QK_{GMI} bewertet die Ausprägung der herrschenden Dehnströmungen (siehe Abschnitt 1.1).

Die Scherbelastung und die damit zusammenhängende Deformationsneigung von Fluidteilchen soll durch die Kriterien QK_{LSB} (lokale Scherbelastung) und QK_{SV} (Scherungsverteilung) erfolgen. „Lokal“ bedeutet in diesem Fall, dass nicht das gesamte Fluidvolumen zur Auswertung der Größen herangezogen wird, sondern vielmehr solche Bereiche im Fokus liegen, in denen erwartungsgemäß die dispersive Mischwirkung am stärksten ausgeprägt ist. Diese Bereiche sind mischelementspezifisch zu definieren. Im Fall des in dieser Arbeit untersuchten Wendelscherelementes wären das bspw. die Bereiche über den Scherstegen. Mit dem Kriterium QK_{GMI} (globaler Mischindex) wird die Strömung innerhalb des gesamten (globalen) Fluidvolumens hinsichtlich der auftretenden Strömungs-

formen bewertet (siehe hierzu Abschnitt 1.1). Um den Wert der Optimierungsfunktion minimieren zu können, wird bei allen folgenden dispersiven Mischkriterien der Referenzwert in den Zähler gesetzt.

Die Berechnung für das Kriterium QK_{LSB} erfolgt über die mittleren Scherraten des lokalen Volumens (V_{lokal}) $\mu_{\dot{\gamma}(V_{lokal}),j}$. Gemäß Gl. 11 wird dieser Wert ins Verhältnis zum Wert der Referenz gesetzt.

$$QK_{LSB,j} = \frac{\mu_{\dot{\gamma}(V_{lokal}),Referenz}}{\mu_{\dot{\gamma}(V_{lokal}),j}} \quad \text{Gl. 11}$$

Die Auswertung des Qualitätskriteriums QK_{GMI} erfolgt über das gesamte Fluidvolumen. Zur Formulierung des Qualitätskriteriums wird der volumenbezogene, mittlere Mischindex $\mu_{\lambda(V),j}$ (aus Gl. 1) ins Verhältnis zum gleichartigen Mischindex der Referenz $\mu_{\lambda(V),Referenz}$ gesetzt (Gl. 12).

$$QK_{GMI,j} = \frac{\mu_{\lambda(V),Referenz}}{\mu_{\lambda(V),j}} \quad \text{Gl. 12}$$

Mit dem Kriterium QK_{SV} (Scherungsverteilung) soll die Gleichmäßigkeit der Schmelzebelastung (durch Scherung) am Auslass des Systems bewertet werden. Ähnlich dem verfolgten Ansatz von Celik und Erb et al. in [26], bei dem die Schmelzebelastung entlang von Partikeltrajektorien kumuliert wird, soll in dieser Arbeit die Scherbelastung mittels einer eigens definierten Strömungsgröße $\phi_{\dot{\gamma}}$ kumuliert werden. Hierzu wird die allgemeine Transportgleichung (Gl. 2) um eine dichtespezifische Quelle der Form $Q_{\phi_{\dot{\gamma}}} = \dot{\gamma} \cdot \rho$ ergänzt, sodass in jeder Zelle die zellspezifische Scherung auf die Strömungsgröße $\phi_{\dot{\gamma}}$ addiert wird. Weiterhin wird der Diffusionskoeffizient auf 10^{-12} definiert, sodass lediglich konvektive Transportphänomene Berücksichtigung finden. Das Kriterium QK_{SV} berechnet sich wiederum aus dem Verhältnis der Referenz und der mittleren absoluten Abweichung der kumulierten, massestromgewichteten Scherung $\delta_{\phi_{\dot{\gamma}}(\dot{m}),j}$ am Auslass des Simulationsraumes (siehe Gl. 13).

$$QK_{SV,j} = \frac{\delta_{\phi_{\dot{\gamma}}(\dot{m}),Referenz}}{\delta_{\phi_{\dot{\gamma}}(\dot{m}),j}} \quad \text{Gl. 13}$$

2.3 Gewichtung der Qualitätskriterien

Um das multikriterielle Optimierungsproblem in ein Monokriterielles zu überführen, wird wie folgt vorgegangen. Die Qualitätskriterien (Index m) einer Kategorie (Index k) werden mittels der Faktoren $a_{k,m}$ gewichtet und für jede Kategorie zu aggregierten Kriterien zusammengefasst. Hierbei soll die Summe der Faktoren $a_{k,m}$ für jede Kategorie Eins ergeben. Im Anschluss werden die aggregierten Kriterien erneut mit einem Faktor a_k gewichtet. Auch hier gilt, dass die Summe der Faktoren a_k Eins sein soll. Durch diese Vorgehensweise ist einerseits die individuelle Gewichtung der einzelnen Qualitätskriterien und andererseits die Gewichtung der drei Kategorien Performance, Distributiv und Dispersiv möglich. Das aggregierte Kriterium aus der Gewichtung der Kategoriekriterien bildet zu-

letz das finale Qualitätskriterium QK_{FINAL} , welches als monokriterielle Zielgröße für die Optimierung dient. Eine Übersicht dieser Vorgehensweise ist in Bild 3 dargestellt.

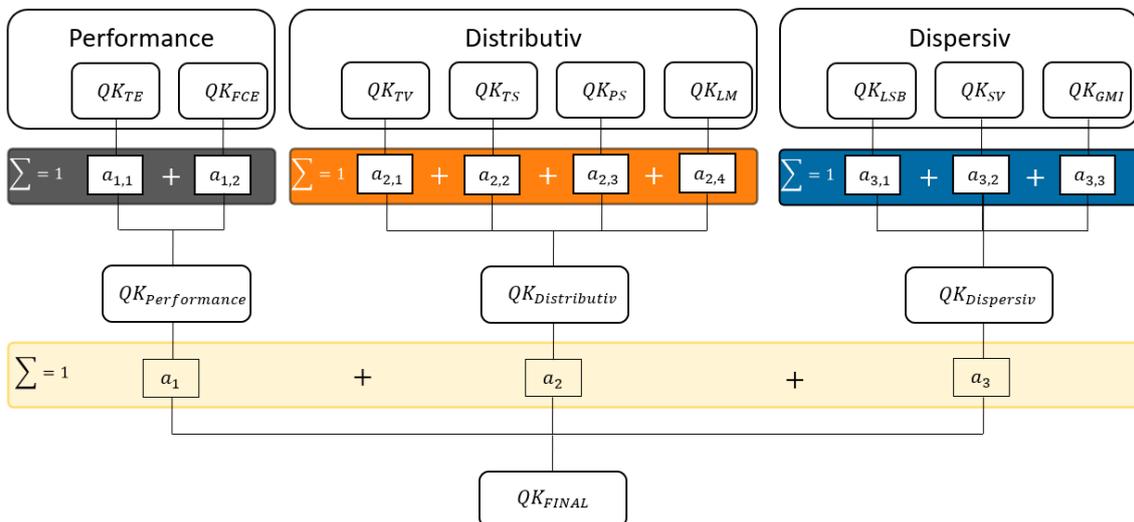


Bild 3: Übersicht der Gewichtungsfaktoren für die Qualitätskriterien

Die entsprechenden Gleichungen (Gl. 14 bis Gl. 16) für die Berechnung der aggregierten, kategoriegewichteten Kriterien sind im Folgenden zu sehen:

$$QK_{Performance} = \sum_{m=1}^2 a_{1,m} \cdot QK_{1,m}(x) \quad \text{Gl. 14}$$

$$QK_{Distributiv} = \sum_{m=1}^4 a_{2,m} \cdot QK_{2,m}(x) \quad \text{Gl. 15}$$

$$QK_{Dispersiv} = \sum_{m=1}^3 a_{3,m} \cdot QK_{3,m}(x) \quad \text{Gl. 16}$$

Aus diesen aggregierten Kriterien ergibt sich dann mit der Gewichtung a_k die finale zu minimierende Zielfunktion nach Gl. 17.

$$\text{Min } QK_{FINAL}(x) = a_1 \cdot QK_{Performance} + a_2 \cdot QK_{Distributiv} + a_3 \cdot QK_{Dispersiv} \quad \text{Gl. 17}$$

Der Wahl der Gewichtungsfaktoren fällt dabei eine große Bedeutung zu, da sie das Ergebnis der Optimierung in erheblichem Maße beeinflussen können. Anzustreben ist eine mischelementübergreifende, allgemeingültige Gewichtung der Qualitätskriterien (ähnlich wie es auch bei der Optimierung von Extrusionswerkzeugen angestrebt wird [37]). Aufgrund der Vielzahl unterschiedlich arbeitender Mischelemente und spezifischer Anforderungen ist dies jedoch nicht oder nur sehr begrenzt realisierbar. Für ein vorwiegend dispersiv wirkendes Mischelement ist es bspw. denkbar, dass das Kriterium $QK_{Dispersiv}$ stärker gewichtet wird. An dieser Stelle ist vom Anwender zu entscheiden, inwieweit die Performancekriterien und somit kritische Verfahrensparameter vernachlässigt werden dürfen.

Generell gilt, je mehr individuelle Benutzereingaben notwendig sind, desto stärker fließen subjektive Faktoren in den Algorithmus ein und das Ergebnis kann stärker vom Optimum abweichen.

3 UNTERSUCHUNG DES ALGORITHMUS

In diesem Kapitel wird der vorgestellte Algorithmus an einer Testgeometrie (Wendelscherelement, kurz: WSE) erprobt. Es erfolgt zunächst eine Beschreibung der notwendigen Schritte zum Aufsetzen des Algorithmus für das WSE. Diese gliedern sich in Geometrie, Diskretisierung, Solver, Ergebnisse (Post-Processing) und Optimierung. Anschließend werden die Ergebnisse der Optimierung analysiert. Dazu wird in einem ersten Schritt der optimale Kandidat mit der Referenzgeometrie verglichen. Weiterhin erfolgt eine Analyse ausgewählter Qualitätskriterien.

3.1 Referenzgeometrie und Simulationsrandbedingungen

Als Referenzgeometrie dient ein zweistufiges Wendelscherelement mit zwei wendelförmigen Gangpaarungen. In Bild 4 sind die relevanten Parameter zur Beschreibung dieses Mischelementes dargestellt.

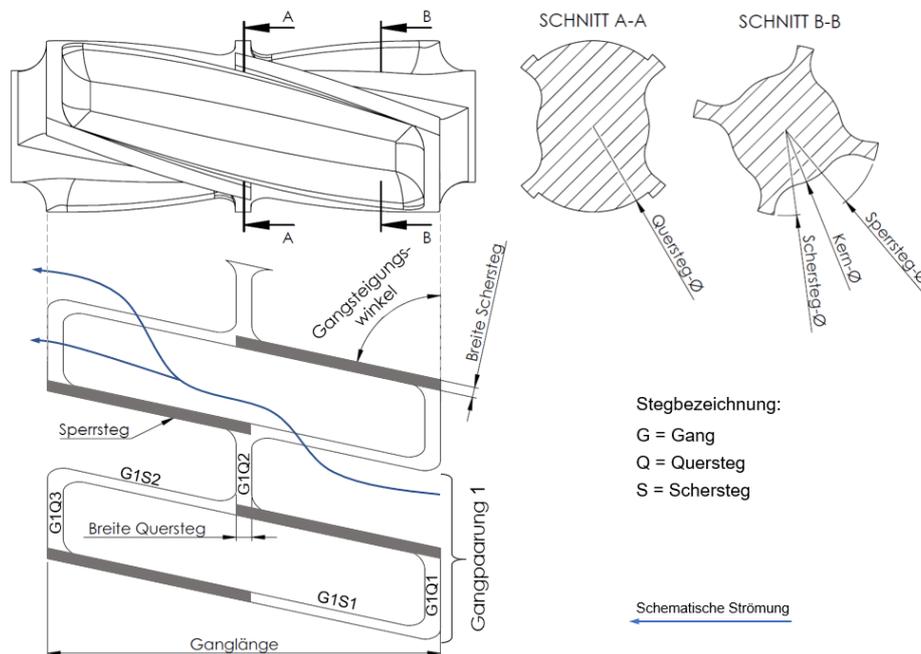


Bild 4: Geometrieparameter des Referenzmodells

Für die Optimierung muss zunächst die Auswahl der veränderlichen Geometrieparameter bestimmt und im Anschluss deren Wertebereich festgelegt werden. Für die in dieser Arbeit durchgeführte Optimierung werden die Quer- und

Scher-stegbreite, der Stegdurchmesser sowie die Gangsteigung berücksichtigt. Tabelle 4 zeigt eine Übersicht über die Parametergrenzen.

Bezeichnung	Minimum [mm]	Maximum [mm]	Schrittgröße [mm]	Referenzwert [mm]
<i>Breite Quersteg</i>	3	10	1	6
<i>Breite Schersteg</i>	3	8	1	5
<i>Stegdurchmesser</i>	39	46	1	42
<i>Gangsteigung</i>	250	500	50	350

Tabelle 4: Übersicht der Eingangsparameter und deren Freiheitsgrade sowie die Startparameter der Referenz

Die untere Grenze für die Breite von Quer- und Schersteg wird auf 3 mm gesetzt. Der Maximalwert der Breite des Querstegs liegt bei 10 mm, der des Scherstegs bei 8 mm. Die oberen Grenzen ergeben sich aus den geometrischen Randbedingungen des CAD-Modells. Der Stegdurchmesser kann Werte zwischen 39 mm und 46 mm annehmen. Durch die obere Grenze wird eine minimale Spalthöhe von 1 mm eingehalten. Die Gangsteigung selbst ist in Bild 4 nicht gekennzeichnet. Eine Gangsteigung von 400 mm würde bei dem hier vorliegenden WSE mit einer Ganglänge von 100 mm einem Gangsteigungswinkel von ca. 70° entsprechen. In der Spalte Schrittgröße werden die zugelassenen Schrittgrößen zur Anpassung der Parameter angegeben. Für die ersten drei Parameter ist eine Änderung in 1 mm Schritten möglich. Die Gangsteigung wird aufgrund des deutlich größeren Bereiches in 50 mm Schritten verändert. Der Gangdurchmesser und der Zylinderdurchmesser bleiben für alle Geometrievarianten konstant bei 28 mm bzw. 48 mm. Aus diesen Freiheitsgraden ergeben sich 2304 mögliche Geometrievarianten, aus denen nun der optimale Kandidat ermittelt werden soll. In der letzten Spalte sind die Parameter der Referenzgeometrie zu finden. Die Startwerte sind so definiert worden, dass diese ungefähr den Mittelwert des Intervalls darstellen. Mit dieser Ausgangsgeometrie wird der Algorithmus gestartet.

Diskretisierung:

Auf die Erstellung der Geometrie folgt die Diskretisierung des Modells. Als maximale Größe sind Elemente mit 2 mm zulässig. Wandbereiche des Fluidvolumens werden mit einer Randschicht aus drei Prismenschichten und einer Wachstumsrate von 1,2 verfeinert abgebildet. Zusätzlich zu den Prismenschichten müssen über den Spalt des Strömungskanals mindestens vier weitere Netzelemente liegen. Basierend auf diesen Vernetzungseinstellungen ergibt sich für die vorliegende Mischelementgeometrie eine Gesamtanzahl von ca. 2,2 Millionen Netzelementen (abhängig von der Geometrievariante). Im Rahmen einer Netzstudie konnten diese Vernetzungseinstellungen als Kompromiss zwischen Berechnungszeit und Abbildegenauigkeit ermittelt werden. Hierbei wurde eine maximale Abweichung der simulierten Temperaturen am Auslass und dem Einlassdruck am Eingang des Systems von 2 % in Abhängigkeit der Elementanzahl zugrunde gelegt. In Bild 5 ist das WSE im Halbschnitt mit vollständiger Diskretisierung zu sehen.

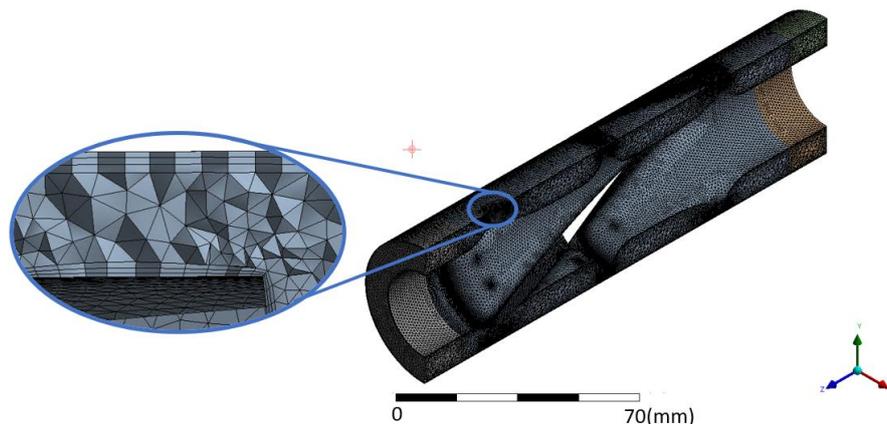


Bild 5: Halbschnitt des WSE mit abgeschlossener Diskretisierung

Die Vergrößerung zeigt einen Spalt über einem Quersteg inklusive der Prismenschichten. Um die Elementanzahl und die stark damit verbundene Rechen-
dauer zu reduzieren, wird der Leckspalt des WSE nicht berücksichtigt. Vorun-
tersuchungen haben gezeigt, dass der Einfluss vom Leckspalt im Rahmen der
Optimierung vernachlässigbar ist.

Solver:

Als Solver wird im Rahmen dieser Arbeit ANSYS Fluent verwendet. Als Lö-
sungsverfahren wird der SIMPLE-Algorithmus verwendet. Zur Lösung der zu-
sätzlichen skalaren Größen (Passiver Skalar für QK_{PS} sowie θ für QK_{FCE} und
 QK_{LM}) werden das Second-Order-Upwind-Verfahren genutzt. Als Material wurde
ein Polyethylen niedriger Dichte (PE-LD) der Firma *lyondellbasell* unter dem
Markennamen *Lupolen2420D* vermessen. Die rheologischen Materialeigen-
schaften wurden mittels eines Carreau-WLF-Ansatzes in die Simulation integri-
ert. Für die thermodynamischen Größen spezifische Wärmekapazität c_p und
die Wärmeleitfähigkeit λ wurden konstante Werte verwendet. Ebenso wie für
die Dichte ρ . Eine Übersicht der Werte für die Materialeigenschaften ist in Bild 6
zu finden.

Weitere Randbedingungen der Simulation sind ebenfalls in Bild 6 dargestellt.
Am Einlass der Geometrie wird ein konstanter Massenstrom von 60 kg/h vor-
gegeben. Um den Fließwiderstand von Maschinenkomponenten (bspw. Extru-
sionswerkzeug), die dem Mischelement nachgeschaltet sind, zu berücksichtigen,
wird der Druck am Auslass der Geometrie auf 150 bar festgelegt. Die äu-
ßeren Wände werden mit einer Temperatur von $T = 493,15 \text{ K}$ beaufschlagt. Alle
anderen Wände des Modells werden vereinfacht als adiabat angenommen.

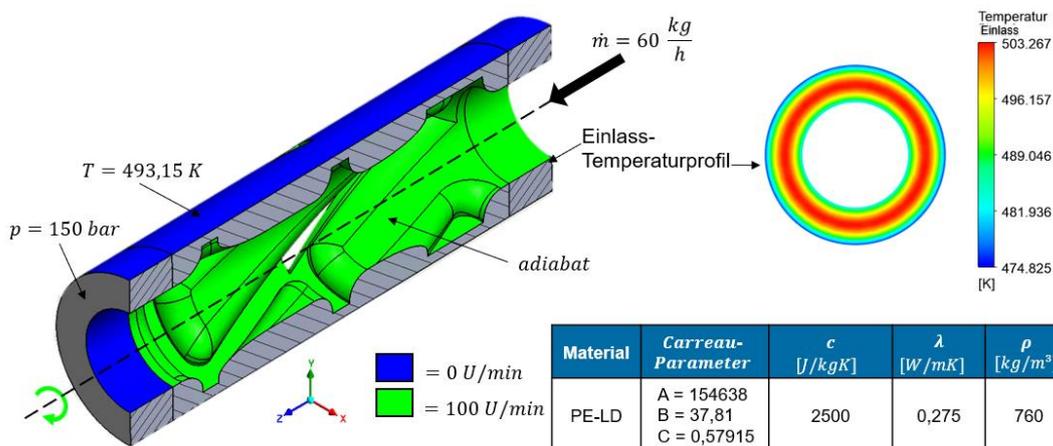


Bild 6: Übersicht der Simulationsrandbedingungen und der Materialeigenschaften

Ähnlich wie in [20, 35, 48] wird ein Temperaturprofil am Einlass des Fluidvolumens aufgeprägt, um sich dem realen Temperaturverlauf über dem Kanalquerschnitt anzunähern. Darüber hinaus werden die vorgegebenen Rotationsgeschwindigkeiten (*grün* = 100 U/min und *blau* = 0 U/min) als Multiple Reference Frame integriert. Der inneren Wand des Einlaufbereichs wird aufgrund der dem Mischelement vorangehenden Schnecke, genau wie dem Mischelement selbst, eine Rotation von 100 U/min zugewiesen. Die Zylinderwand weist keine Rotation auf. Eine Lösung gilt als konvergiert, wenn die Residuen für Masse, Impuls, Energie, Einlaufdruck, Massetemperatur und zusätzlichen Skalaren (mittleres lokales Alter, passiver Skalar) unter einem Wert von $10e^{-5}$ liegen.

Ergebnisse:

Die Auswertung der Qualitätskriterien erfolgt auf unterschiedliche Weise in CFD-Post. Bis auf die Kriterien QK_{FCE} (Fluid Change Effectivness), QK_{LSB} (lokale Scherbelastung) und QK_{GMI} (globaler Mischindex) werden alle übrigen QK auf der Auslassfläche des Systems berechnet.

Für die Auswertung des Kriteriums QK_{LSB} ist es notwendig, einen sich mit der Geometrie ändernden Auswertungsbereich zu generieren, in dem die lokale Scherbelastung berechnet wird. Es wird erwartet, dass über den Scher- und Querstegen des WSE eine signifikante Änderung der Scherbelastung für die verschiedenen Geometrievarianten auftreten wird. Die Grenzen des Auswertungsbereiches sind abhängig von der Stegbreite, der Steglänge, dem Stegwinkel und dem Stegradius und passen sich somit der Geometrie des Spaltes an. Bild 7 zeigt die Positionen der Volumina (Cyan) über den unterschiedlichen Stegen des WSE.

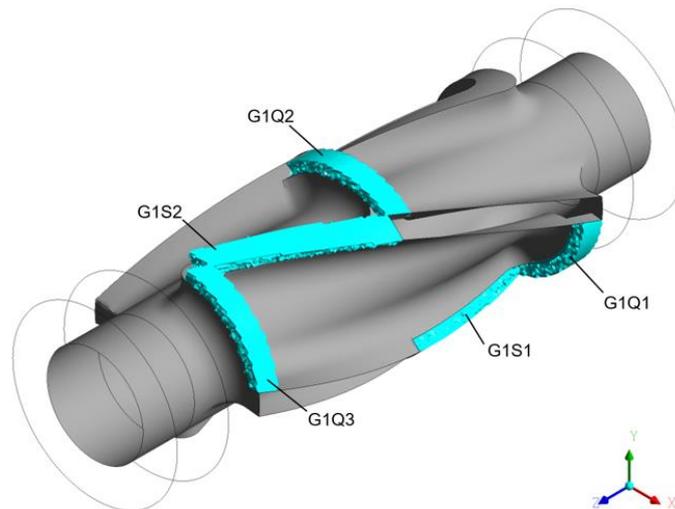


Bild 7: Position der Volumina zur Auswertung von QK_{LSB}

Eine Betrachtung aller Stege ist auf Grund der Rotationssymmetrie des Mischelementes nicht nötig, sodass lediglich eine Gangpaarung für die Auswertung von QK_{LSB} herangezogen wird.

Hingegen erfolgt die Auswertung von QK_{GMI} über ein Isovolumen, welches die gesamte Fluiddomäne berücksichtigt. Für QK_{FCE} wird ein Isovolumen verwendet welches alle Zellen beinhaltet, für die $\varepsilon \leq 0,5$ gilt ($V_\varepsilon = V_{0,5}$). Alle Ergebnisse werden im Anschluss an ein DVS übergeben und dort für die weitere Optimierung mit den entsprechenden Gewichtungsfaktoren aufbereitet.

Optimierung:

Für die Optimierung wird die in Abschnitt 1.3 beschriebene MOGA-Methode (Multi-Objective-Genetic-Algorithm) verwendet und die Einstellungen für diese Methode gemäß Tabelle 5 festgelegt.

Einstellungen	Werte
Methodenname	Multi-Objective-Genetic-Algorithm
Startpopulation	50
Anzahl Stichproben pro Durchlauf	20
Maximal zulässiger Pareto-Prozentsatz	70
Konvegenz-Stabilitätsanteil	2
Maximale Anzahl an Durchläufen	10
Geschätzte Anzahl an Design-Points	230

Tabelle 5: Einstellung für MOGA-Methode

Die geschätzte Anzahl an zu berechnenden Design Points liegt für diese Einstellungen bei 230. Mit der verwendeten Hardware (24 Kerne, 32GB Arbeitsspeicher) und durchschnittlich einer Stunde Berechnungsdauer pro DP, liegt die Dauer der Optimierung demnach bei knapp 230 Stunden. Es ist jedoch zu erwarten, dass die Konvergenz dieser Methode früher eintritt, sodass sich die Rechendauer tendenziell verkürzen wird. Als Zielgröße wird das sich aus den ge-

wichteten einzelnen Kriterien zusammengeführte finale Qualitätskriterium QK_{FINAL} verwendet. Im Laufe der Optimierung soll dieses minimiert werden.

Wie bereits in Abschnitt 2.3 erläutert, ist die Wahl einer optimalen Gewichtung der Kriterien kein triviales Unterfangen, weshalb zunächst eine Gleichgewichtung der Qualitätskriterien erfolgt. Innerhalb der aggregierten Kriterien erhält jedes individuelle Kriterium abhängig von der Anzahl der Kriterien pro Gruppe die gleiche Gewichtung. Für die Kriterien aus der Gruppe Performance bedeutet dies einen Wert von $1/2$, für distributiv $1/4$ und dispersiv $1/3$ je Kriterium. Um die Funktion des Algorithmus zu untersuchen, werden die Kriterien $QK_{Performance}$, $QK_{Distributiv}$ und $QK_{Dispersiv}$ nach dem gleichen Prinzip zunächst mit jeweils $1/3$ gewertet. Es ist denkbar, den Einfluss der Gewichtung auf das Optimierungsergebnis in zukünftigen Arbeiten weiter zu erforschen und bspw. die dispersiven QK stärker zu gewichten.

3.2 Simulationsergebnisse und Analyse

Im Folgenden werden die Ergebnisse des Optimierungsalgorithmus und der als optimal ermittelte Kandidat mit dem Referenzmodell aus Abschnitt 3.1 verglichen. Insgesamt konnten 69 verschiedene DP durch die MOGA-Methode erstellt und berechnet werden. Demnach ergibt sich eine Gesamtsimulationsdauer von ca. 69 h. Vor dem Hintergrund das ein gesamtes 3-D Modell eines Mischelementes simuliert und optimiert wird, ist die Simulationsdauer akzeptabel, aber um den Einsatz für praktische Anwendungen attraktiver zu gestalten, sollten hier in zukünftigen Arbeiten Möglichkeiten identifiziert werden, um die Rechenzeit zu reduzieren. Durch die iterative Vorgehensweise bei der Erstellung von neuen DP mittels Kreuzung und Mutation, sind einige DP mehrfach vorgekommen. Diese mussten nicht neu vom System berechnet werden, wurden jedoch in dieser Auswertung nur einfach berücksichtigt. Eine Gegenüberstellung der Referenzgeometrie und dem „optimalen“ Kandidaten ist in der folgenden Tabelle 6 dargestellt.

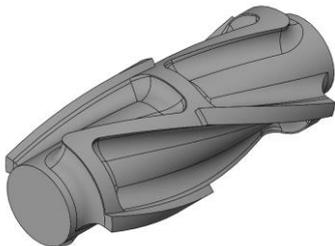
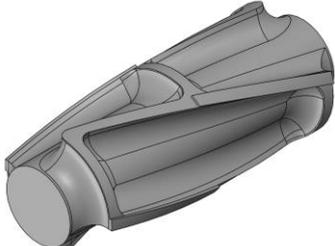
Referenzgeometrie		Optimaler Kandidat	
			
Querstegbreite	6 mm	Querstegbreite	4 mm
Scherstegbreite	5 mm	Scherstegbreite	4 mm
Stegdurchmesser	42 mm	Stegdurchmesser	46 mm
Gangsteigung	350 mm	Gangsteigung	500 mm

Tabelle 6: Gegenüberstellung der Geometrieparameter der Referenz und des durch die Optimierung ermittelten Kandidaten

Die Querstegbreite reduziert sich auf 4 mm. Die Scherstegbreite sinkt ebenfalls um 1 mm auf eine Breite von 4 mm. Der Durchmesser der Stege (Quer- und Schersteg) steigt von 42 mm auf 46 mm an. Die Gangsteigung des optimalen Kandidaten steigt auf 500 mm im Vergleich zu 350 mm der Referenz. Demnach wurden drei von vier Eingangsparameter automatisiert durch den Optimierungsalgorithmus angepasst, um die Zielfunktion der Qualitätskriterien zu minimieren. Nachfolgend sollen die Ergebnisse für die verschiedenen Qualitätskriterien genauer betrachtet werden, Bild 8.

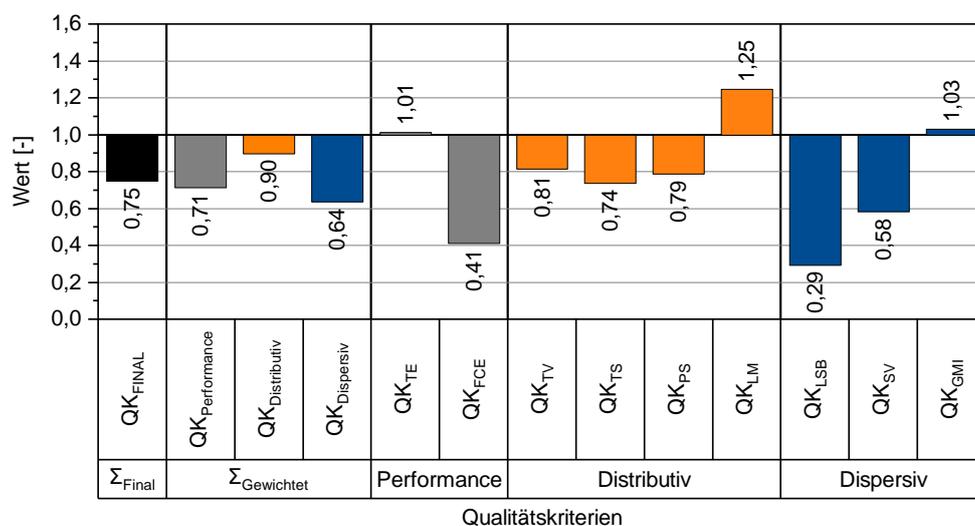


Bild 8: Übersicht Qualitätskriterien des optimalen Kandidaten

Dem Farbschema aus Bild 3 weiter folgend, sind die dispersiven Qualitätskriterien bläulich, die Distributiven orange und die Performance-Kriterien in grau dargestellt. Das Kriterium QK_{FINAL} ist in schwarz dargestellt. Um eine verbesserte Vergleichbarkeit mit der Referenz zu zeigen (Referenz = alle $QK = 1$), wurde der Ursprung der Balken auf den Wert 1 der Ordinate gelegt. Demnach ist ein Ausschlag nach oben (> 1) gleichbedeutend mit einer Verschlechterung und ein Ausschlag nach unten (< 1) gleichbedeutend mit einer Verbesserung. Bei Betrachtung der Werte ist zu beachten, dass es sich um relative Werte im Vergleich zur verwendeten Referenz handelt. Eine Referenz mit alternativen Startwerten würde somit zu anderen absoluten Größen der QK führen. Die Rangfolge der ermittelten Geometrievarianten bleibt jedoch unverändert, sofern es bei den QK zu keinen Ausreißern kommt. Dies offenbart eine Schwäche in der Formulierung der Kriterien. Vergleiche zwischen unterschiedlichen Optimierungen lassen sich nur ziehen, wenn es sich um dasselbe Modell mit derselben Referenz handelt, oder wenn man absolute Größen der Simulation betrachtet. Weiterhin muss die Stabilität der Kriterien gegenüber Ausreißern untersucht werden, um den Einfluss der Startgeometrie auf den optimalen Kandidaten bewerten zu können.

Das finale Kriterium (schwarz) erreicht nach der Optimierung einen Wert von 0,75. Auch für die drei aggregierten Kriterien konnten die Werte reduziert werden. Die größte Verbesserung zeigt hierbei das Kriterium $QK_{Dispersiv}$, welches auf einen Wert von 0,64 gesenkt werden konnte. Dies ist vor allem auf das Kriterium QK_{LSB} zurückzuführen, welches einen Wert von 0,29 erreicht und damit das niedrigste Kriterium darstellt. Einen ebenfalls guten Wert mit 0,58 erreicht das Kriterium QK_{SV} aus der Kategorie der dispersiven Kriterien. Die geringste Verbesserung zeigt die Kategorie der distributiven Kriterien. Es stellt sich zwar mit dem Wert von 0,90 eine leichte Verbesserung ein, diese fällt im Vergleich jedoch sehr gering aus. Dies war zu erwarten, da es sich bei dem WSE um ein primär dispersiv wirkendes Mischelement handelt. Aus der Kategorie der distributiven Kriterien zeigt das Kriterium QK_{PS} mit einem Wert von 0,79 zwar eine Verbesserung, das Kriterium für die Längsmischung QK_{LM} verschlechtert sich jedoch auf einen Wert von 1,25. Zuletzt sei die Kategorie der Performance-Kriterien genannt. Auch hier ist mit einem Wert von 0,71 eine Verbesserung festzustellen. Diese ist auf das Kriterium QK_{FCE} zurückzuführen, welches mit einem Wert von 0,41 deutlich verbessert werden konnte.

Die Stabilität der numerischen Berechnung über alle DP wird als gut bewertet, da es lediglich bei zwei Kriterien zu größeren Abweichungen kommt. In Bild 9 werden die Mittel-, Minimal- und Maximalwerte für die neun Kriterien entsprechend ihrer Zugehörigkeit zu den drei Kategorien dargestellt, um die obige Aussage zu verdeutlichen.

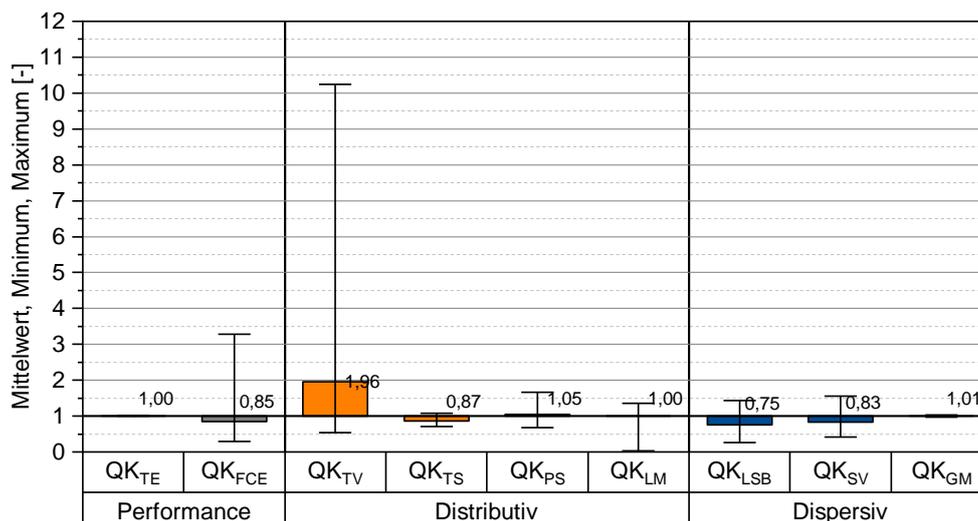


Bild 9: Wertebereich der ermittelten Qualitätskriterien

Es ist zu erkennen, dass die Werte der ermittelten Qualitätskriterien in einem erwartungsgemäßen Bereich um den Referenzwert von 1 schwanken. Lediglich das Kriterium der Temperaturverteilung QK_{TV} weist mit 10,27 eine überdurchschnittlich große Abweichung auf. Hierbei handelt es sich jedoch um einen ein-

zelenen DP, auf dessen erneute Berechnung zur Falsi- bzw. Verifizierung verzichtet wurde, da diese Variante eine nicht vielversprechende Kombination von Geometrieparametern aufwies. Die gleiche Vorgehensweise wurde für das Kriterium der Längsmischung gewählt. Auch hier gibt es mit dem Wert von 0,032 eine auffällige Abweichung, welche jedoch für die gesamte Optimierung vernachlässigbar ist. An dieser Stelle sei erwähnt, dass sich alle DP unterhalb der erlaubten Ausschlusskriterien bewegt haben. Insbesondere die Netzqualität muss hervorgehoben werden, weil hier die schlechteste Variante immer noch eine Elementschiefe von lediglich 0,9182 erreicht hat. Zur vollumfänglichen Bewertung des Potenzials zum Auffinden eines optimalen Kandidaten durch den Algorithmus bedarf es weiterer Untersuchungen. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass im Rahmen einer Folgeuntersuchung ein Wechsel der Startgeometrie durchgeführt wurde. In diesem Fall wurde der optimale Kandidat als Startgeometrie definiert. Das Ergebnis des Wechsels bestätigte den optimalen Kandidaten, da für alle anderen Varianten $QK_{FINAL,j} > 1$ galt. Eine Kontrolle der Ergebnisse, ob Ausreißer in den einzelnen Kriterien vorliegen und gegebenenfalls die aggregierten Kriterien stark beeinflussen, muss nach jeder Optimierung kritisch geprüft werden. Eine Möglichkeit, die o.g. Problematik einzudämmen, ist in zukünftigen Arbeiten eine analytische oder erfahrungsbasierte Vorauslegung zu tätigen, um sicherzustellen, dass die Referenzgeometrie in definierten, technisch-sinnvollen Grenzen liegt.

Auf Basis der Ergebnisse für den optimalen Kandidaten aus Bild 8 wird im Folgenden aus jeder Kategorie ein QK näher betrachtet, welches den stärksten Einfluss auf das gewichtete Ergebnis hat. Weiterhin werden diejenigen Geometrieparameter bestimmt, welche den Wert des jeweiligen QK am stärksten beeinflussen. Hierfür wird der Pearson-Korrelationskoeffizient r zwischen den Geometrieparametern und dem jeweiligen Qualitätskriterium gebildet. Dieser gibt die Stärke des linearen Zusammenhangs zwischen den betrachteten Werten an und lässt sich durch Gl. 18 berechnen.

$$r = \frac{\sum(x_j - \bar{x}) \cdot (y_j - \bar{y})}{\sqrt{\sum(x_j - \bar{x})^2 \cdot \sum(y_j - \bar{y})^2}} \quad \begin{array}{l} \bar{x} : \text{Mittelwert Qualitätsmerkmal} \\ x_j : \text{Qualitätsmerkmal Geometrievariante} \\ \bar{y} : \text{Mittelwert Geometrieparameter} \\ y_j : \text{Geometrieparameter Geometrievariante} \end{array} \quad \text{Gl. 18}$$

Der Korrelationskoeffizient kann Werte zwischen $-1 \leq r \leq 1$ annehmen. Ein positiver Wert drückt einen positiven Zusammenhang der betrachteten Merkmale aus, ein Wert kleiner Null demnach einen Negativen. Der Betrag von r drückt die Stärke des linearen Zusammenhangs aus. Ein Wert von $|r| = 1$ würde demnach einen direkten Zusammenhang der Merkmalswerte bedeuten [45]. Durch diese Vorgehensweise soll die Menge der beeinflussenden Geometrieparameter auf eine Anzahl reduziert werden, welche eine grafische Auswertung innerhalb von drei Dimensionen erlaubt.

Performance:

Aus der Kategorie der Performance-Kriterien hat die Fluid Change Effectivness (FCE) mit einem Wert von 0,41 den größten Einfluss auf das aggregierte Kriterium $QK_{Performance}$. In Bild 10 a) sind die Werte von QK_{FCE} in aufsteigender Reihenfolge dargestellt. Der optimale Kandidat ist mit einem roten Stern gekennzeichnet.

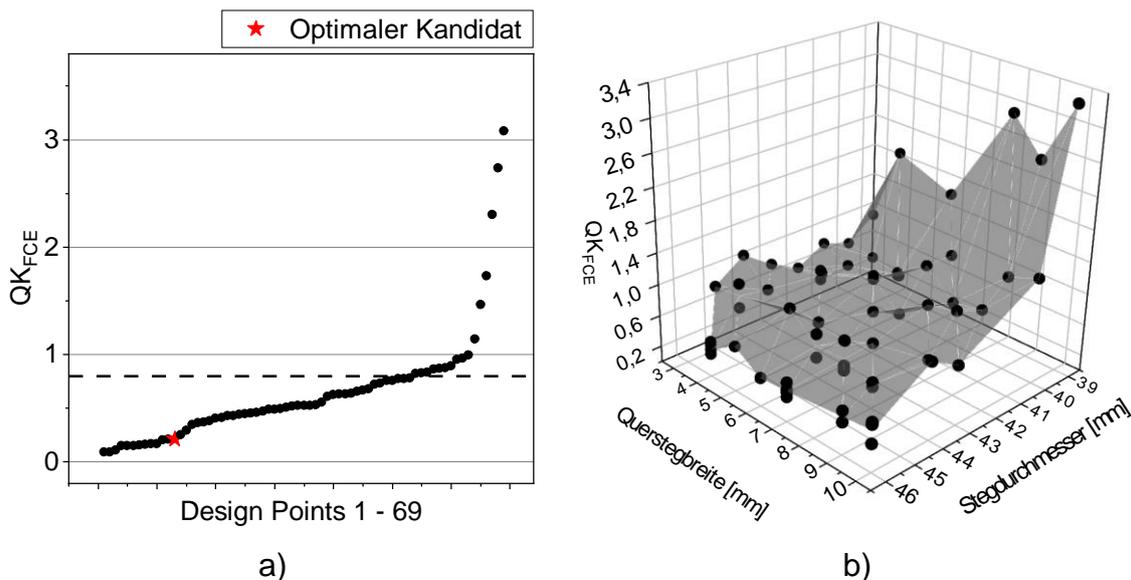


Bild 10: a) Aufsteigende Werte von QK_{FCE} für alle DP und b) Abhängigkeit von QK_{FCE} von Querstegbreite und Stegdurchmesser

Grundsätzlich unterschreitet QK_{FCE} den Wert von 1 für die meisten Designvarianten, sodass sich hier eine Verbesserung der Spülbarkeit im Vergleich zur Referenz festhalten lässt. Lediglich vereinzelte Varianten weisen eine deutlich verschlechterte Spülbarkeit ($QK_{FCE} > 2$) auf. Für QK_{FCE} zeigen sich größte Abhängigkeiten von der Querstegbreite mit $r = -0,217$ und dem Stegdurchmesser mit $r = -0,662$, welche beide negativ mit dem Kriterium korrelieren. In Bild 10 b) ist QK_{FCE} in Abhängigkeit über diese beiden Geometrieparameter grafisch dargestellt.

Um die Ergebnisse grafisch übersichtlich darzustellen, werden die Abhängigkeiten von vier auf die zwei am stärksten beeinflussenden Geometrieparameter reduziert. Aus diesem Grund kann es für eine mögliche Parameterkombination aus Querstegbreite und Stegdurchmesser mehrere Werte für QK_{FCE} geben. Diese werden durch schwarze Punkte in Bild 10 b) dargestellt. Der Wert der grauen Fläche ergibt sich dann aus den Mittelwerten des Kriteriums für diese Kombination. Dies gilt analog für alle weiteren Darstellungen dieser Art. Es ist zu erkennen, dass breitere Querstege und höhere Stegdurchmesser zu einer deutlich besseren Spülbarkeit des Mischelementes führen.

Distributiv:

Aus der Kategorie der distributiven Kriterien weist das Kriterium QK_{PS} (Passiver Skalar) mit einem Wert von 0,79 neben dem Kriterium QK_{TS} (Temperaturspanne) mit einem von 0,74 die größte Verbesserung auf. Da es sich bei dem Kriterium QK_{PS} um das aussagekräftigere Kriterium im Hinblick auf distributive Mischwirkung handelt, wird dieses in aufsteigender Reihenfolge in Bild 11 a) dargestellt.

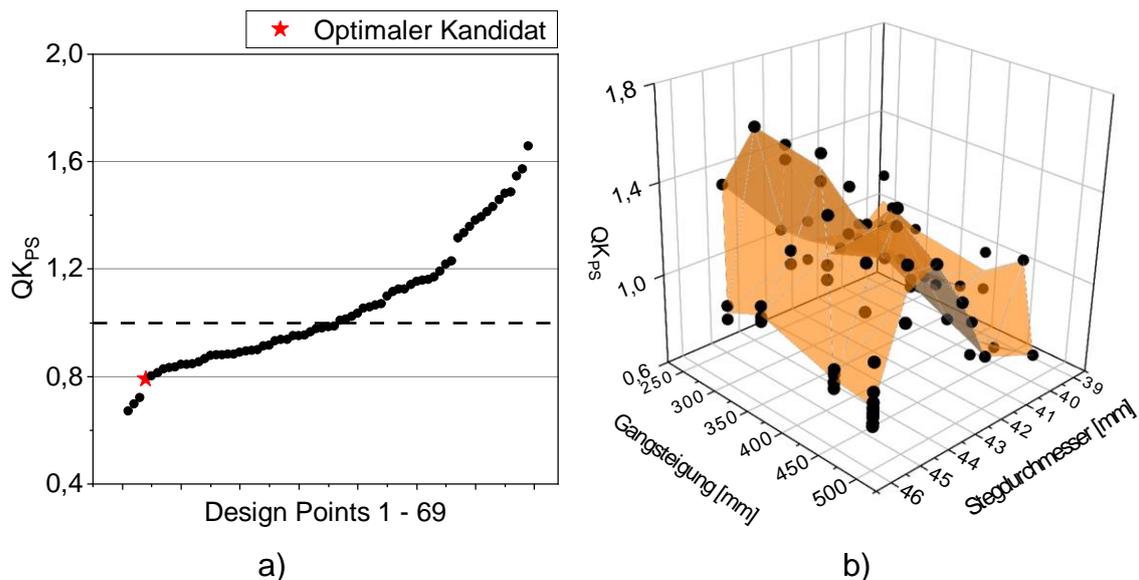


Bild 11: a) Aufsteigende Werte von QK_{PS} für alle DP und b) Abhängigkeit von QK_{PS} von Gangsteigung und Stegdurchmesser

Die ermittelten Werte für QK_{PS} befinden sich über alle DP in einem schmalen Bereich ($0,7 \leq QK_{PS} \leq 1,7$), sodass von einer hohen Stabilität bei der Berechnung dieses Kriteriums ausgegangen werden kann. Die meisten DP führen zu einer Verschlechterung dieses Kriteriums im Vergleich zu Referenzgeometrie. Für die Geometrieparameter Gangsteigung ($r = -0,230$) und Stegdurchmesser ($r = 0,209$) wurden die höchsten Korrelationen zum Kriterium QK_{PS} ermittelt. Die Korrelationen sind in diesem Fall nicht stark ausgeprägt. Dies lässt sich auch in Bild 11 b) erkennen, weil der Einfluss des Stegdurchmessers nicht eindeutig in eine Richtung wirkt. Bis zu einem Stegdurchmesser von ca. 44 mm ist ein Anstieg von QK_{PS} zu verzeichnen. Für Stegdurchmesser >44 mm nimmt QK_{PS} schlagartig niedrigere Werte an. Dieser Wechsel muss in zukünftigen Arbeiten näher untersucht werden, warum sich die Strömungsverhältnisse ab einem bestimmten Durchmesser schlagartig ändern und distributive Mischmechanismen begünstigt werden.

Dispersiv:

Aus der Kategorie der dispersiven Kriterien wurde die größte Verbesserung beim Kriterium QK_{LSB} (lokale Scherbelastung) mit einem Wert von 0,29 erreicht.

Auffällig ist die stufenartige Anordnung der Ergebnisse, welche wieder in aufsteigender Reihenfolge in Bild 12 a) dargestellt sind.

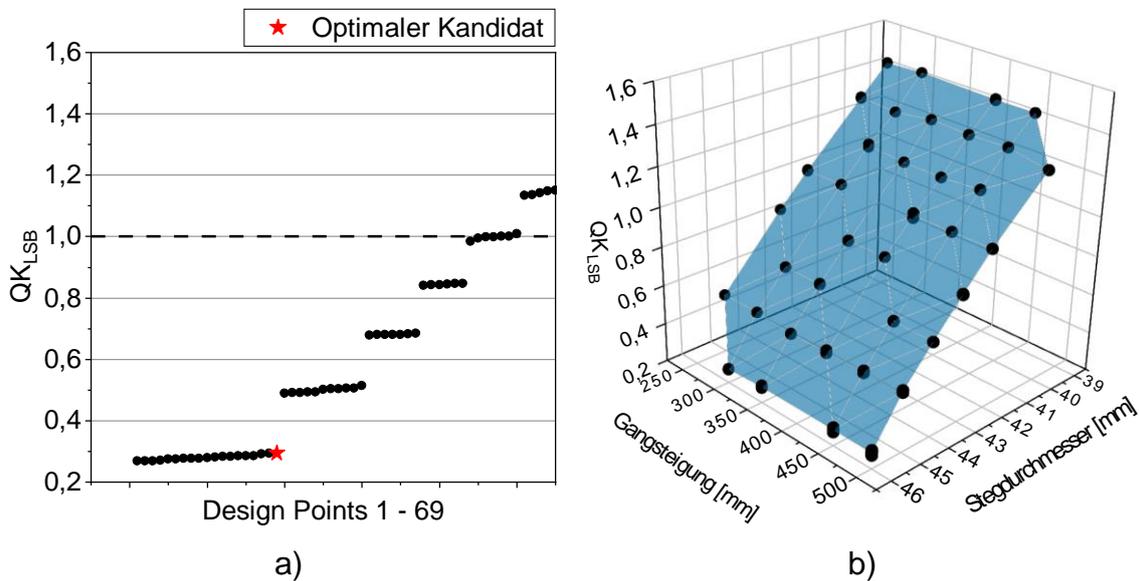


Bild 12: a) Aufsteigende Werte von QK_{LSB} für alle DP und b) Abhängigkeit von QK_{LSB} von Gangsteigung und Stegdurchmesser

Die stufenweisen Sprünge bei QK_{LSB} deuten auf einen sehr starken Zusammenhang mit einem einzelnen Geometrieparameter hin. Die Auswertung des Korrelationskoeffizienten bestätigt diese Vermutung und ergibt einen Wert von $|r| = 0,997$ für den Stegdurchmesser. Dieser Einfluss ist erwartet worden, weil ein Anstieg des Stegdurchmessers zwangsläufig zu einem schmaleren Scherspalt führt, sodass die Scherbelastung steigen muss. Eine deutliche geringere Korrelation lässt sich zur Gangsteigung ermitteln ($|r| = 0,371$). In Bild 12 b) ist die Dominanz des Stegdurchmessers auf QK_{LSB} als nahezu linearer Zusammenhang deutlich sichtbar. Durch die erhöhte lokale Scherbelastung dissipiert zwangsläufig mehr Energie, die jedoch nicht zu einer extrem erhöhten Masse-temperatur am Auslass des Systems führt (vgl. QK_{TE} aus Bild 8). Neben der absoluten Scherbelastung der Schmelze ist die Expositionszeit bzw. die Einwirkzeit der Scherung eine entscheidende Größe. In zukünftigen Arbeiten sollte die Einwirkzeit ebenfalls als Kriterium aufgenommen werden, um die Aussagekraft des Optimierungsalgorithmus weiter zu steigern [16]. Bei Betrachtung der individuellen Stege zeigt sich eine höhere lokale Scherbelastung über den Querstegen als über den Scherstegen. Der Quersteg G1Q2 (siehe Bild 7) weist hierbei die höchsten Werte auf. Dies bedeutet jedoch nicht zwangsweise, dass Querstege den größten Anteil an der dispersiven Mischwirkung besitzen. Es sei an dieser Stelle darauf verwiesen, dass Dehnströmungen, die besonders förderlich für dispersive Mischvorgänge sind, durch QK_{LSB} nicht berücksichtigt

werden. Auch handelt es sich bei QK_{LSB} um eine volumengewichtete und nicht massestromgewichtete Größe.

4 FAZIT / AUSBLICK

Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung und Untersuchung eines Algorithmus für die automatisierte Auslegung und Optimierung von Mischelementen in der Einschneckenextrusion, auf Basis des von Janßen und Schiffers in [8] vorgestellten Konzeptes. Der Fokus lag dabei auf der Integration verschiedener Qualitätskriterien, sowie einer Möglichkeit der Gewichtung.

Dieses Ziel konnte erfolgreich durch die Implementierung einer Auswertungsroutine in die Software ANSYS Fluent erreicht werden. Durch die automatisierte Verknüpfung des Algorithmus mit einem Datenverarbeitungssystem – hier Microsoft Excel – wurde eine benutzerfreundliche Möglichkeit der Integration von Qualitätskriterien und deren anwendungsspezifischer Gewichtung ermöglicht. Insgesamt wurden neun Qualitätskriterien zur Bewertung der Strömungsverhältnisse herangezogen. Eine Kategorisierung in Performance, distributive und dispersive Mischwirkung erlaubte neben der kriterien-spezifischen Gewichtung auch eine Gewichtung der drei Kategorien zu einem finalen Kriterium. Als mathematisches Optimierungsverfahren wurde die MOGA-Methode (Multi-Objective-Genetic-Algorithm) verwendet. Die Untersuchung des Algorithmus erfolgte am Beispiel eines Wendelscherelementes, wobei vier unterschiedliche, geometriebestimmende Parameter in vorab definierten Wertebereichen optimiert wurden.

Durch die Optimierung konnten die aggregierten Qualitätskriterien der drei Kategorien deutlich verbessert werden, wodurch sich auch das finale Kriterium im Vergleich zu einer Referenzgeometrie verbessert hat. Insbesondere die dispersive Mischwirkung konnte verbessert werden, was schwerpunktmäßig auf das Kriterium der lokalen Scherbelastung zurückzuführen ist, welches die durchschnittliche Scherung in den Fluidvolumina oberhalb der Quer- und Scherstege des Wendelscherelementes beschreibt. Hier hat sich der Einfluss des Stegdurchmesser als signifikanter Parameter bestätigt.

Im Rahmen der Ergebnisanalyse sind verschiedene Maßnahmen identifiziert worden, welche in zukünftigen Arbeiten aufgegriffen werden und zu einer Verbesserung des Optimierungsalgorithmus führen können. Das Qualitätskriteriums QK_{PS} , welches mittels eines passiven Skalars die distributive Mischwirkung bewertet, sollte hinsichtlich des Einflusses der Geometrieparameter (insbesondere des Stegdurchmesser) detailliert untersucht werden, um das Verständnis über die Werteentwicklung zu erhöhen. Weiterhin sollte die Einwirkzeit der Scherbelastung als Qualitätskriterium integriert werden, um die Aussagekraft des Optimierungsalgorithmus für dispersive Mischvorgänge zu verbessern. Darüber hinaus ist die Auswirkung unterschiedlicher Gewichtungsfaktoren für die verschiedenen Qualitätskriterien zu untersuchen. Im Rahmen dieser Arbeit

wurden die Qualitätskriterien innerhalb einer Kategorie gleichgewichtet und die Kategorien selbst ebenfalls. In Abhängigkeit des zu optimierenden Mischelementes – bspw. ob dieses primär dispersiv oder distributiv mischt – können unterschiedliche Gewichtungsfaktoren eine optimalere Variante hervorbringen. Andere Optimierungsmethoden können untersucht werden, um die benötigte Rechendauer zu reduzieren.

Literatur

- [1] Rauwendaal, C.;
Osswald, T. A.;
Gramann, P.;
Davis, B.: Design of Dispersive Mixing Devices
In Intern. Polymer Processing, 14, 1, 1999,
S. 28–34
DOI: 10.3139/217.1524
- [2] Moritzer, E.;
Wittke, M.: Simulation-Based Optimization of Advanced Mixing
Elements on Single Screw Extruder
In Proceedings of SPE ANTEC Conference, Detroit
(Michigan), USA, 2019
- [3] Hopmann, C.;
Schön, M.;
Schmithüsen, T.: Bessere statische Mischer dank Simulation und
additiver Fertigung
Blasformen & Extrusionswerkzeuge, 5, 2019,
S. 5–9
- [4] Celik, O.: Neuartiges Simulationsmodell zur Vorhersage der
prozessinduzierten Morphologieausbildung in hete-
rogenen Kunststoffblends
Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2018
- [5] Hopmann, C.;
Schön, M.;
Theunissen, M.;
Meiners, W.;
Shen, L.: Simulative Evaluation Of The Optimization Poten-
tial Of Additively Manufactured Static Mixing Ele-
ments For Extrusion
In Proceedings of the Europe/Africa Conference
Dresden - Polymer-Processing Society (PPS),
2019
DOI: 10.1063/1.5121651

- [6] Heesen, O. t. Ganzheitlicher Ansatz zur Dimensionierung und Optimierung von Extrusionswerkzeugen am Beispiel von Wendelverteiltern
Dissertation, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, 2015
- [7] Erb, T.; Bonten, C. A Novel Method for Evaluation of Particle Tracking Simulations of Mixing Processes
In Proceedings of SPE ANTEC Conference, Cincinnati (Ohio), USA, 2013
- [8] Janßen, M.; Schiffers, R. Design of a Novel Free-Rotating Mixing Sleeve for Single-Screw Extrusion
In Proceedings of SPE ANTEC Conference, San Antonio (Texas), USA, 2020
- [9] Schütz, S. Berechnung und Analyse der Vermischung von Flüssigkeiten im Makro- und Mikromaßstab bei laminarer Strömung
Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2006
- [10] Dörner, M.; Schöppner, V.; Marschik, C. Analysis of the Andventeous Process and Mixing Behaviour of Wave-Dispersion Screws in Single Screw Extrusion
In Proceedings of SPE ANTEC Conference, San Antonio (Texas), USA, 2020
- [11] Janßen, M.; Wortberg, J.; Schiffers, R. Leistungssteigerung in der High-Speed-Extrusion
Zeitschrift Kunststofftechnik, 15, 3, 2019, S. 245–270
DOI: 10.3139/O999.02032019
- [12] Kast, O.; Epple, S.; Bonten, C. Unbestechlich mischen. Die Mischgüte von Extrudaten mittels digitaler Bildauswertung bestimmen
Kunststoffe, 4, 2019, S. 60–63

- [13] Praher, B.;
Straka, K.;
Steinbichler, G. An ultrasound-based system for temperature distribution measurements in injection moulding: system design, simulations and off-line test measurements in water
Measurement Science and Technology, 24. 8, 2013, S. 84004
DOI: 10.1088/0957-0233/24/8/084004
- [14] Abeykoon, C.;
Martin, P. J.;
Kelly, A. L.;
Brown, E. C. A review and evaluation of melt temperature sensors for polymer extrusion
Sensors and Actuators A: Physical. 182, 2012, S. 16–27
DOI: 10.1016/j.sna.2012.04.026
- [15] Epple, S.;
Grünschloss, E.;
Bonten, C. Mischergebnisse im Einschneckenextruder
Kunststoffe, 4, 2012, S. 58–61
- [16] Gorczyca, P. Analyse und Optimierung von Einschneckenextrudern mit schnelldrehenden Schnecken
Dissertation, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, 2011
- [17] Anger, K.;
Potente, H.;
Schöppner, V.;
Enns, E.;
Giese, E. Dynamic Temperature and Pressure Measurement in Polymer Processing
Zeitschrift Kunststofftechnik/Journal of Plastics Technology, 5. 1, 2009, S. 31–47
- [18] Gale, M. Mixing in single screw extrusion
Smithers Rapra, Shawbury, 2009
- [19] Hopmann, C.;
Schön, M. Thermische Homogenisierung von Schmelze durch simulativ optimierte statische Mischer
Extrusion. 5, 2018, S. 36–38
- [20] Hopmann, C.;
Schön, M.;
Reul, M. M.;
Facklam, M. A Method for the Validation of Simulated Mixing Characteristics of Two Dynamic Mixers in Single-Screw Extrusion
Polymers, 12. 10, 2020
DOI: 10.3390/polym12102234

- [21] Hauke, G. An introduction to fluid mechanics and transport phenomena
Springer, Dordrecht, 2009
DOI: 10.1007/978-1-4020-8537-6
- [22] Amann, H. Gewöhnliche Differentialgleichungen
Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1995
DOI: 10.1515/9783110889680
- [23] Roland, W.;
Marschik, C.;
Miethlinger, J. Mixing Study on Different Pineapple Mixer Designs – Simulations Results
In Proceedings of SPE ANTEC Conference, Detroit (Michigan), USA, 2019
- [24] ANSYS Fluent User's Guide 2019R1, 2019
- [25] ANSYS Advanced Physics. Introduction to ANSYS Fluent 2010
- [26] Celik, O.;
Erb, T.;
Bonten, C. Mischgüte in Einschneckenextrudern vorhersagen. Effizientere Einfärbung von Kunststoffen in Hochleistungsextrudern
Kunststoffe. 10, 2017, S. 175–177
- [27] Czyborra, L. Mischvorgänge in Einschneckenextrudern. Eine Analyse am Beispiel von Rautenmischteilen
Dissertation, IKV Aachen, 1991
- [28] Cheng, J. J.;
Manas-Zloczower, I. Flow Field Characterization in a Banbury Mixer
Intern. Polymer Processing, 5. 3, 1990, S. 178–183
DOI: 10.3139/217.900178
- [29] Bastian, M.;
Hochrein, T. Einfärben von Kunststoffen. Produktanforderungen - Verfahrenstechnik - Prüfmethodik
Hanser, München, 2018
DOI: 10.3139/9783446453999.fm
- [30] Agassant, J.-F.;
Manas-Zloczower, I. Mixing and compounding of polymers. Theory and practice
Hanser, München, 2009
DOI: 10.3139/9783446433717.fm

- [31] Lecheler, S. Numerische Strömungsberechnung. Schneller Einstieg in ANSYS CFX 18 durch einfache Beispiele
Springer Vieweg, Wiesbaden, 2018
DOI: 10.1007/978-3-658-19192-4
- [32] Laurien Eckart; Oertel jr., H. Numerische Strömungsmechanik. Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit
Springer Vieweg, Wiesbaden, 2018
DOI: 10.1007/978-3-658-21060-1
- [33] Moukalled, F.; Mangani, L.; Darwish, M. The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics. An Advanced Introduction with Open-FOAM® and Matlab
Springer International Publishing, Cham, s.l., 2016
DOI: 10.1007/978-3-319-16874-6
- [34] Schwarze, R. CFD-Modellierung. Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen
Springer, Berlin, Heidelberg, 2013
DOI: 10.1007/978-3-642-24378-3
- [35] Hopmann, C.; Sasse, J. Automatische Optimierung von additiv gefertigten statischen Mischern
Blasformen & Extrusionswerkzeuge 17,4, 2021
- [36] Saul, K. Automatisierte Auslegung von Extrusionswerkzeugen.
Dissertation, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, 2011
- [37] Cretu, I. M. Analyse, Auslegung und Optimierung von Wendeverteilersystemen.
Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2008
- [38] Michaeli, W. Extrusionswerkzeuge für Kunststoffe und Kautschuk. Bauarten, Gestaltung und Berechnungsmöglichkeiten
Hanser, München, 2009
- [39] Martí, R.; Pardalos, P.M.; Resende, M.G.C. Handbook of Heuristics

- Hrsg.: Springer International Publishing, Cham, 2018
DOI: 10.1007/978-3-319-07124-4
- [40] SCHWEFEL Numerische Optimierung Von Computer-Modellen Mittels der Evolutionsstrategie. Mit Einer Vergleichenden Einführung in Die Hill-Climbing- und Zufallsstrategie
Springer Basel AG, Basel, 1976
DOI: 10.1007/978-3-0348-5927-1
- [41] ANSYS DesignModeler User's Guide, 2019R1, 2019
- [42] Campbell, G. A.; Spalding, M. A. Analyzing and troubleshooting single-screw extruders
Hanser, München, 2013
DOI: 10.3139/9783446432666.fm
- [43] Kummerow, J.; Wortberg, J. Local mean age of melt: New approaches for die optimisation
In Proceedings of PPS-34: the 34th International Conference of the Polymer Processing Society (PPS), Taipei, Taiwan, 2019
DOI: 10.1063/1.5088269
- [44] Spalding, D. B. A note on mean residence-times in steady flows of arbitrary complexity
Chemical Engineering Science, 9. 1, 1958, S. 74–77
DOI: 10.1016/0009-2509(58)87010-4
- [45] Bourier, G. Beschreibende Statistik. Praxisorientierte Einführung - mit Aufgaben und Lösungen
Springer Gabler, Wiesbaden, 2018
DOI: 10.1007/978-3-658-21486-9
- [46] Liu, M.; Tilton, J. N. Spatial Distributions of Mean Age and Higher Moments in Steady Continuous Flows
AIChE, 56, 10, 2010, S.2561-2572
DOI: 10.1002/aic.12151
- [47] BALÉO, J.-N.; Le CLOIREC, P. Validating a prediction method of mean residence

time spatial distributions

Fluid Mechanics and Transport Phenomena, 46. 4,
2000, S. 675–683

DOI: 10.1002/aic.690460403

[48] Neubrech, B.;
Karrenberg, G.;
Wortberg, J.

Virtual and Experimental Comparison of Different
Dynamic Mixing Devices for Single Screw Extrusion

In Proceedings of SPE ANTEC Conference, Anaheim (Kalifornien), USA, 2017

Bibliography

DOI 10.3139/O999.02012022
Zeitschrift Kunststofftechnik / Journal of Plastics
Technology 18 (2022) 1; page 24–61
© Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG
ISSN 1864 – 2217

Stichworte:

Extrusion, dynamische Mischelemente, Wendelscherelement, Simulation, CFD, automatisierte Optimierung

Keywords:

Extrusion, dynamic Mixing-Elements, Spiral-Shear-Mixer, Simulation, CFD, automated Optimization

Autor / author

M.Sc. Mirco Janßen
M.Sc. Lucas Schulz
M.Sc. Felix Vorjohann
Prof. Dr.-Ing. Reinhard Schiffers
Institut für Produkt Engineering
Universität Duisburg-Essen
Lotharstraße 1
47057 Duisburg

E-Mail: mirco.janssen@uni-due.de
Webseite: www.uni-due.de/kkm
Tel.: +49 (0)0203/379-3159
Fax: +49 (0)0203/379-4379

Herausgeber / Editors**Europa / Europe**

Prof. Dr.-Ing. habil. Bodo Fiedler
Institut für Kunststoffe und Verbundwerkstoffe
Technische Universität Hamburg
Denickestr. 15 (K)
21073 Hamburg
Deutschland
Tel.: +49 (0)40 42878 3038
E-Mail: fiedler@kunststofftech.com

Prof. Dr.-Ing. Reinhard Schiffers
Institut für Produkt Engineering
Universität Duisburg-Essen
Lotharstr. 1, MA 222
47057 Duisburg
Deutschland
Tel.: +49 (0)203 379 2500
E-Mail: schiffers@kunststofftech.com

Amerika / The Americas

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

Verlag / Publisher

Carl-Hanser-Verlag GmbH & Co. KG
Jo Lendle, Oliver Rohloff
Geschäftsführer
Kolbergerstraße 22
81679 München
Germany
Tel.: +49 (0)89 99830 0
E-Mail: info@hanser.de

Redaktion / Editorial Office

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

Beirat / Advisory Board

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