Numerische Simulation des Abkühl- und Strömungsvorgangs beim Kühldüsen-Extrusionsverfahren

Von der Fakultät Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart genehmigte Abhandlung zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

von
Ralf Mehling
aus Lippstadt

Hauptberichter:	Prof. Dr.-Ing. H.-G. Fritz
Mitberichter:	Prof. Dr.-Ing. habil. M. Piesche
Tag der mündlichen Prüfung:	13.12.2002

Institut für Kunststofftechnologie
der Universität Stuttgart

2002

Mehling, Ralf:
Numerische Simulation des Abkühl- und Strömungsvorgangs beim Kühldüsen-Extrusionsverfahren, Zugl.: Stuttgart, Univ., Diss., 2002
ISBN 3-00-011045-3

Autor:

Ralf Mehling

Copyright 2002, Vervielfältigung zu kommerziellen Zwecken, auch auszugsweise, nicht gestattet, alle Rechte vorbehalten

Herausgeber:

Ralf Mehling
Häberlstraße 19, 80337 München
Tel.: +49(0)89/54321979, e-mail: r.mehli@gmx.de

ISBN 3-00-011045-3

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter des Instituts für Kunststofftechnologie (IKT) der Universität Stuttgart von 01.11.1995 bis 31.01.2001.

An erster Stelle danke ich meinem verehrten akademischen Lehrer Herrn Prof. Dr.-Ing. H.-G. Fritz für die interessante Aufgabenstellung und die Betreuung dieser Arbeit, sowie die stete Förderung und Unterstützung an dem von ihm geleiteten Institut.

Ferner möchte ich auch Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. M. Piesche für die Übernahme des Mitberichts danken.

Allen Mitarbeitern des IKT, besonders meinem Vorgänger Herrn Dr.-Ing. S. Fang, danke ich für die angenehme Zusammenarbeit und die anregenden Fachdiskussionen, mit denen sie zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Stuttgart, 13.12.2002 Ralf Mehling

Inhaltsverzeichnis

Liste der wichtigsten Symbole **8**

Kurzfassung **12**

Abstract **15**

1 Einleitung **17**

1.1 Stand der Technik bei der Kühldüsenextrusion 19

1.2 Simulation von Wärmetransportvorgängen in der Kalibrier- und Kühlsektion 21

1.3 Strömungssimulation im Kalibrator 23

1.4 Zielsetzung und Aufgabenstellung 26

2 Grundlagen **28**

2.1 Kontinuitätsgleichung und Impulssatz 28

2.2 Energiesatz zur Analyse der Wärmeübertragung 30

2.3 Thermische Randbedingungen 34

2.4 Methode der Finiten Elemente und Lösungsansatz nach Galerkin 36

3 Modellierung des Wärmeaustauschvorgangs im Kalibrator **40**

3.1 Beschreibung des zweidimensionalen, instationären Extrudatabkühlvorgangs 41

3.2 Beispiel zur 2D-Temperaturberechnung 44

3.3 Dreidimensionale Modellierung des stationären Abkühlvorgangs 51
3.3.1 Volumenkoordinaten und Formfunktionen 54
3.3.2 Transformation des Volumenintegrals 56
3.3.3 Transformation des Oberflächenintegrals 56
3.4 Lineares Gleichungssystem 59
3.5 Randwerte und Kontaktbedingung 61
3.6 Numerische Integration 64
3.7 Berechnete dreidimensionale Temperaturspektren im gekoppelten System 65
3.7.1 Einfluss des Kontaktwärmestroms zwischen dem Ausformwerkzeug und dem Kalibrator 66
3.7.2 Einfluss des Diskretisierungsgrads auf die dreidimensionalen Temperaturspektren im Extrudat . . . 73

4 Modellierung des Strömungsvorgangs der erstarrenden Schmelze 76

4.1 Zweidimensionale implizit zeitabhängige Impulsgleichung 78
4.2 Lösung der zweidimensionalen implizit zeitabhängigen Impulsgleichung mittels der Methode der Finiten Elemente 80
4.3 Bestimmung des Volumenstroms 82
4.4 Randbedingung des Geschwindigkeitsfelds 84
4.5 Viskosität und Dichte 87
4.6 Einkoppelung der Temperatur in die Impulsgleichung . . . 88
4.7 Berechnungsbeispiel 90

5 Analyse des thermodynamischen und rheologischen Materialverhaltens 108

5.1 Spezifische Wärmekapazität 109
5.1.1 Experimentelle Ergebnisse 110
5.1.2 Theoretischer Kristallinitätsgrad 112

5.1.3 Mathematische Approximation der Wärmekapazität c_p 115

5.2 Dichte und Wärmeleitfähigkeit 116

5.3 Viskosität 119

5.3.1 Experimentelle Analyse mittels Rotationsrheometer 120

5.3.2 Viskositätsmessung mittels Hochdruck-Kapillarrheometer 126

5.3.3 Rheologische Zustandsgleichung strukturviskoser Schmelzen für den nichtisothermen Fall 128

5.3.4 Erweiterter Viskositätsansatz für erstarrende Schmelzen 131

6 Anlagentechnische Entwicklung zur Profilextrusion nach dem Kühldüsenverfahren 137

6.1 Ausformwerkzeug und Kalibrator als Funktionszonen des Kühldüsensystems 137

6.2 Entwicklung eines Kühldüsen-Extrusionsprozesses zur Herstellung eines Führungsprofils 141

6.2.1 Konzeption und Konstruktion des Kühldüsensystems 142

6.2.2 Extrusionslinie mit peripheren Anlagenkomponenten 147

6.3 Meßtechnische Prozessanalyse 153

6.3.1 Axiale Temperaturverteilung im Kalibrator 153

6.3.2 Temperaturverteilung an der Kalibratoroberfläche . 159

6.4 Vergleich zwischen den gemessenen und berechneten Temperaturspektren 161

7 Zusammenfassung und Ausblick 163

Literaturverzeichnis 166

Liste der wichtigsten Symbole

Lateinische Zeichen

A	mm^2	Querschnittsfläche
a	mm^4	Determinante des Metriktensors
$\underline{a_1}$, $\underline{a_2}$	mm	Basisvektoren
$\underline{\underline{a}}$	mm^2	Metriktensor
a_i		Approximationskoeffizienten
a_T		Temperaturverschiebungsfunktion
b	mm	Breite
b_i		Approximationskoeffizienten
C	J/K	Wärmekapazität
c_p	J/(g K)	spezifische Wärmekapazität
c		Koeffizient des Carreau-Ansatzes
c_i		Approximationskoeffizienten
D		Operator der substanziellen Ableitung
D	mm	Schneckendurchmesser
$2\underline{\underline{D}}^*$	s^{-1}	Deviator von $2\underline{\underline{D}}$
$2\underline{\underline{D}}$	s^{-1}	Deformationsgeschwindigkeitstensor
d		Ableitung
E	kJ/kmol	Aktivierungsenergie
E	N/mm^2	Elastizitätsmodul
$\underline{\underline{E}}$		Einheitstensor
F_1, F_2, F_3		Flächenkoordinaten
G	Pa	Modul
G^*	Pa	komplexer Modul
G’	Pa	Speichermodul
G”	Pa	Verlustmodul

h	J/g	spezifische Enthalpie
$\underline{\underline{J}}$	1/m	Jakobische Transformationsmatrix
K		Proportionalitätsfaktor
$\underline{\underline{K}}$	N s/m^2, W/K	Systemmatrix
L		Funktional
L	mm	Verfahrenslänge des Extruders
L_1, L_2, L_3, L_4		Volumenkoordinaten
$\dot{m}$	g/s	Massenstrom
N		Formfunktion
N_i		Komponente des Formfunktionsvektors
n	1/min	Extruderdrehzahl
$\underline{n}$	mm	Normalenvektor
p	bar	Druck
$\underline{\dot{q}}$	J/(mm^2 s)	Vektor der Wärmestromdichte
$\dot{q}$	J/s	Wärmestrom
Re		Reynolds-Zahl
R	kJ/(kmol K)	universelle Gaskonstante
$\underline{R}$	W	Lastvektor
$\underline{r}$	mm	Ortsvektor
S	mm^2	Elementoberfläche
$\dot{S}$	Pa/s	viskose Wärmeerzeugung
$\underline{T}$	K, °C	Vektor der Knotentemperaturen
T	K, °C	Temperatur
$\dot{T}$	K/s,	Abkühlgeschwindigkeit
t	s	Zeit
u	J/g	spezifische innere Energie
V	m^3	Volumen
v	m^3/g	spezifisches Volumen
$\dot{V}$	m^3/s	Volumenstrom
$\bar{v}$	m/s	gemittelte Geschwindigkeit
$\underline{v}$	m/s	Geschwindigkeitsvektor
v_x, v_y, v_z	m/s	Geschwindigkeitskomponenten, skalar
x, y, z	m	kartesische Koordinaten
$\underline{x}$	m	Ortsvektor
W		Wichtungsfunktion

Griechische Zeichen

α	W/(mm^2 K)	Wärmeübergangszahl
α_i		Koeffizienten des Viskositätsansatzes
Δ		Delta-Operator
η	Pa s	Viskosität
η^*	Pa s	komplexe Viskosität
η_0	Pa s	Nullviskosität
$\lvert\dot{\gamma}\rvert$	s^{-1}	Betrag des Deformationsgeschwindigkeitstensors
$\dot{\gamma}_{ü}$	s^{-1}	Übergangs-Schergeschwindigkeit
$\gamma*$	s^{-1}	oszillatorische Deformation
γ	W/K	effektiver Wärmeübergangskoeffizient
Γ	m, m^2	Rand eines Gebiets
λ	W/(m K)	Wärmeleitfähigkeit
∇		Nabla-Operator
Ω	m^2, m^3	Gebiet
ω	s^{-1}	Kreisfrequenz
∂		partielle Ableitung
Φ	mW	Wärmestrom
Φ	Pa^{-m}s^{-1}	Fluidität, Parameter des Potenzansatzes
ϕ		Phasenverschiebung
Ψ	Pa s$^{1/m}$	Konsistenzfaktor
Ψ^i_R	m	Radialkoordinaten
ρ	g/cm^3	Dichte
$\underline{\underline{\sigma}}$	N/mm^2	Gesamtspannungstensor
$\underline{\underline{\tau}}$	Pa	Extraspannungstensor
τ^*	Pa	komplexe Schubspannung
Θ		Gewichtungsfaktor
$\underline{\xi}$		Vektor der lokalen Elementkoordinaten
ξ, η, ζ		lokale Koordinaten
ξ		theoretischer Kristallisationsgrad
ζ		normierte Kalibratorlänge
$\bar{\xi}_i, \bar{\eta}_i, \bar{\zeta}_i$		Gausspunktkoordinaten

Mathematische Schreibweisen

$\underline{()}$	Vektor
$\underline{()}^T$	transponierter Vektor
$:$	Doppelt-Skalarprodukt von Tensoren
$\times$	Kreuzprodukt
$\dot{()}$	zeitliche Ableitung
div	Divergenz-Operator
$grad()$	Gradient
$()'$	Ableitung nach der Temperatur
I_2	zweite Invariante
$det()$	Determinante
$d()$	Differential
$()^{-1}$	inverse Matrix
$()_i\ ()^i$	Summationskonvention nach Einstein
Sp	Spur eines Tensors

Indizes

$()_b$	Basislinie
$()_c$	kennzeichnet den Kristallisationsbeginn
$()_E$	das Extrudat kennzeichnend
$()^e$	dem Element zugeordnet
$()_f$	bezüglich des Ofens
$()_{i,j}$	Tensor- bzw. Matrix-Komponenten
$()_K$	den Kalibrator kennzeichnend
$()^{max}$	charakteristisches Maximum
$()_p$	den Peak des DSC-Signals kennzeichnend
$()_P$	Tiegel
$()_R$	Referenz
$()_S$	Probe
$()_s$	beschreibt erstarrten Zustand
$()_{x,y,z}$	Vektor- bzw. Matrix-Komponenten
$()^*$	dimensionslose Größe
$()_0$	Bezugspunkt

Kurzfassung

Mit dem Kühldüsen-Extrusionsverfahren lassen sich Kunststoffvollprofile und dickwandige Polymerextrudate herstellen, indem man Schmelze kontinuierlich durch ein beheiztes Profilwerkzeug hindurch presst. In der nachgeschalteten Kühl- bzw. Kalibriereinheit wird dann das schmelzeförmige Polymer definiert abgekühlt, um anschließend mit Unterschreiten der Kristallisationstemperatur zu einem Feststoffstrang zu erstarren. Das Extrudat wird mittels einer Abzugsvorrichtung fortlaufend weiterbewegt oder durch Aufbau von Gegendruck zu einem Profil mit dem angestrebten Querschnitt vollständig ausgeformt.

Die vom Extrudat mitgeführte Wärme wird dem Kunststoff im gekühlten Kalibrator entzogen. Dieser als Wärmetransportvorgang bezeichnete Energieaustausch lässt sich einerseits mittels der instationären, zweidimensionalen Energiegleichung mathematisch beschreiben. Dabei wird im Rahmen dieser Arbeit das von der Temperatur und insbesondere der Abkühlgeschwindigkeit abhängende Materialverhalten des teilkristallinen Polymers berücksichtigt. Andererseits schließt der weiterführende stationäre, dreidimensionale Ansatz die axiale Wärmeleitung in das Modell mit ein. Sowohl im zwei- als auch im dreidimensionalen Modell beschreibt eine Isothermiebedingung die Wechselwirkung zwischen dem Kalibrator und Extrudat. Die konvektive Randbedingung quantifiziert den Wärmeaustausch, der an den mit fluiden Medien in Kontakt stehenden Oberflächen auftritt.

Ab dem Zeitpunkt, ab dem die Massetemperatur des Polymers im Kalibrator unter die Kristallisationstemperatur absinkt, verliert die Schmelze ihre Fließfähigkeit. Gleichzeitig kontrahiert das Polymer aufgrund steigender Dichte, was durch nachfließende Schmelze kompensiert wird. Um diese Detailvorgänge zu simulieren, werden die Kontinuitäts-, Impuls- und Energiegleichung miteinander gekoppelt. Die Substitution des konvektiven Impulsterms mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung ermöglicht es, die

Kontraktion mittels der von der Temperatur abhängenden Dichte zu modellieren. Der Verlust der Fließfähigkeit lässt sich durch die mit sinkender Temperatur ansteigende Viskosität, die explizit in den Schubspannungstermen auftritt, beschreiben.

Um die gesuchten Temperatur- und Geschwindigkeitsprofile aus der hergeleiteten Energie- und Impulsgleichung zu berechnen, bietet sich die Methode der Finiten Elemente als Lösungsalgorithmus an, mit dem beliebige Werkzeug- und Kalibratorgeometrien erfasst werden können. Für die 3D-Abkühlsimulation wird ein neues Programmpaket generiert, um dem axialen Wärmestrom insbesondere im Kalibrator Rechnung zu tragen. Darüber hinaus wird in das FEM-Programm SIMFLOW® des IKT ein neues Materialmodell eingefügt. Die Auswirkungen der sich ändernden Stoffparameter auf den Wärmetransport können anhand von 2D-Temperaturspektren gezeigt werden.

Die in den Grundgleichungen enthaltenen thermischen Stoffparameter, zu denen die spezifische Wärmekapazität, die Dichte und die Wärmeleitfähigkeit zählen, werden mittels der thermischen Analyse experimentell bestimmt. Abhängig von der Temperatur und Abkühlgeschwindigkeit zeigen die Stoffparameter ausgeprägte Änderungen beim Phasenübergang von der Schmelze zum Feststoff. Mit Hilfe von mathematischen Polynomansätzen werden die gemessenen Stoffwertverteilungen approximiert.

Aus Viskositätsmessungen am Kapillar- und Rotationsrheometer gewinnt man die von der Temperatur und Schergeschwindigkeit abhängige Viskosität der Schmelze und des Schmelze-/Feststoffgemischs. Die Kristallisation führt zu einem exzessiven Anstieg der Viskosität. Eine konstitutive Gleichung wird entwickelt, um das Materialverhalten des Polymers in diesem Temperaturbereich zu beschreiben. Diese stützt sich auf das Carreau-Modell, um die Viskosität der Schmelze zu beschreiben. Darüber hinaus wird der Arrhenius-Ansatz herangezogen, um die Temperaturabhängigkeit der Viskosität des reinen Liquids abzubilden. Für das Phasenübergangsgebiet ist ein neuer Interpolationsansatz entwickelt worden, der sich an die Messwerte anpassen lässt. Ferner eignet sich das Potenzgesetz von Ostwald-deWaele, um das Feststoffverhalten des erstarrten Polymers durch hinreichend hohe Viskositätswerte zu simulieren.

Ein Kühldüsen-Extrusionsverfahren für die Herstellung eines Führungsprofils wird entwickelt. Unter realen Bedingungen können die Prozessparameter Druck, Schmelzetemperatur, Extruderdrehzahl bzw. Durchsatz

und die Kalibratortemperaturen experimentell studiert werden. Die gemessenen Temperaturen ermöglichen die Verifikation der Berechnungsergebnisse und bilden die Stützpunkte zur Approximation von Randtemperaturfeldern, die in die Berechnung einbezogen werden.

Abstract

The cooled-die extrusion procedure is applied in order to produce solid or thickwalled polymer profiles by pressing polymeric melt continously through a heated die. Inside the attached cooling and calibrating unit the liquid polymer is cooled off. Later the temperature decreases under the cristallization temperature and the melt solidifies. Either the created solid profile can be moved through the calibrator by the pulling device or the movement can be restraint by applying a brake force in order to support a complete cross section shaping.

Inside the cooled calibrator the heat carried by the streaming polymer has to be withdrawn from the extrudate. This energy exchange is called a heat transfer processs and takes place between the extrudate and the calibrator driven by temperature differences. It can be mathematicly modelled by the two dimensional instationary energy equation. Thus, temperature and especially cooling rate depending material behaviour of the semi-crystalline polymer is considered. In contrast to the two dimensional approach a stationary three dimensional model is developed which includes the axial heat transfer into the observation. In both concepts an isothermal condition describes the interaction between the calibrator and the extrudate. Moreover the convective boundary condition quantifies the exchange of heat at the surfaces transmitted to the surrounding fluids.

If the polymer temperature is lower than the crystallization temperature, the extrudate does not further behave as a molten polymer but acts as a solid. At the same time the polymer contracts as a result of increasing density which is compensated by an increased melt velocity. These details are simulated by linking the balance equations for continuity, momentum and energy together. Substituting the convective momentum term and applying the continuity equation enables to simulate the contraction by a temperature depending density. The liquid/solid phase change, especially the

freezing can be prescribed in the model using a viscosity increasing with falling temperature, which is explicitly used in the shear stress terms.

As a powerful procedure suitable to solve the energy and momentum equation for arbitrary die and calibrator geometries the finite element method is used. A new calculation program is established for the three dimensional cool-off simulation. Additionally the FEM code SIMFLOW® is extended by a new material model. The resulting effects on the heat transfer is discussed basing on the two dimensional model.

The thermal material paramters such as heat capacity, density and heat conductivity are experimentally investigated by means of the thermal analysis. Since the parameters depend on the temperature and the cooling speed, they change most significantly in the region of the phase transition from molten material to solid polymer. Mathematical equations as polynomials approximate the measured material parameters.

By means of capillary and rotational rheometers the viscosity of the melt and also of the mixture of molten material and enclosed crystallized polymer particles is measured. The results show a temperature and shear rate depending behaviour in both physical states. Moreover the crystallization leads to an excessive rise in viscosity. In order to describe the material response of the polymer in the relevant temperature range a constitutive equation is established. This is based on the Carreau model used to describe the liquid melt. The Arrhenius equation explains the viscosity temperature dependency of the pure melt. Within the phase transition region a new interpolation scheeme is developed and can be fixed to the experimentally observed results. Furthermore the potential law of Ostwald-deWaele is suitable to simulate the solidified polymer by a sufficiently high viscosity.

A cooled-die extrusion process is developed with the purpose of producing a guide profile. Under real conditions the process variables pressure, melt temperature, extruder speed, throughput and the calibrator temperatures can be experimentally investigated. The measured temperatures allow to verify the calculation results and serve as samples for the approximation of real boundary temperature distributions, which are included into the calculations.

Kapitel 1

Einleitung

Um Profile aus thermoplastischen Kunststoffen herzustellen, kommen **Extrusionsverfahren** zur Anwendung, bei denen Granulat im Extruder kontinuierlich zu einer thermisch und mischtechnisch homogenen Schmelze aufbereitet wird. Das flüssige Polymer durchströmt das Extrusionswerkzeug, wird dabei zur gewünschten Geometrie ausgeformt und kühlt anschließend im Kalibrator definiert ab.

Das **Kühldüsenverfahren** ist ein spezielles Extrusionsverfahren, das besonders geeignet ist, um dickwandige Hohlprofile, Vollprofilhalbzeuge sowie technische Profile mit hoher Maßgenauigkeit aus Kunststoff herzustellen. Es gehört zu den sog. Fließprozessen, bei denen Endlosprodukte unterschiedlichster Querschnittsgeometrie entstehen. Eine Besonderheit des Kühldüsenverfahrens ist ein geschlossener Extrusionskanal, der innerhalb des Ausformwerkzeugs und der Kühleinheit verläuft. In diesem geschlossenen System erstarrt die Schmelze unter Druck. Im Gegensatz zum Kühldüsenverfahren werden bei den konventionellen Extrusionsverfahren die Ausformwerkzeuge in einem Abstand von den Kalibratoren angeordnet, so dass die Schmelze unter Umgebungsdruck aus der Düse austritt, wobei das Polymer relaxiert und drucklos im Kalibrator erstarrt. Für die Profilausformung ist dieser Unterschied relevant. In der unter Druck solidifizierenden Schmelze können keine Lunker entstehen, so dass ein späterer Verzug bzw. eine spätere Verformung ausgeschlossen werden kann. Dadurch wird die hohe Maßhaltigkeit der Extrudate erreicht.

Im Hinblick auf die potentielle Extrusionsgeschwindigkeit zur Herstellung der dickwandigen Extrudate ist die niedrige Wärmeleitfähigkeit der Kunststoffe zu beachten. Die Wärmeabfuhr aus dem Polymer ist folglich

behindert, was eine optimale Gestaltung der Kalibratoren erfordert. An der Kontaktstelle zwischen dem Ausformwerkzeug und der Kühleinheit ist der Wärmeübergang zu minimieren. Dies kann man durch geeignete Maßnahmen erzielen, wie z. B. das Zwischenschalten einer Isolierplatte oder die Minimierung der Querschnittsfläche, über die beide Komponenten durch metallischen Kontakt Wärme austauschen können. Darüber hinaus ist die Lage und Dimensionierung der Kühlmittelbohrungen derart zu gestalten, dass eine schnellstmögliche Wärmeabfuhr erreicht werden kann. Die Effektivität der Produktionsverfahren ist demzufolge Gegenstand von Optimierungsbestrebungen, bei denen hohe Extrusionsgeschwindigkeiten bei gleichzeitig niedrigem Kühlmitteldurchsatz das Optimierungsziel darstellen. Neben der empirischen Vorgehensweise wendet man zur Optimierung zunehmend computergestützte, numerische Berechnungsmethoden an, mit denen die Anlagenkomponenten ausgelegt werden können und mit denen sich der Prozessablauf simulieren lässt.

Vielfach wird die Simulation der Strömungsvorgänge herangezogen, um die Profilausbildung im Werkzeug systematisch zu analysieren, wobei von den berechneten Geschwindigkeitsfeldern auf die zu erwartende Profilgeometrie geschlossen wird. Durch die Beschreibung stationärer oder instationärer Energietransportvorgänge lässt sich der Abkühlvorgang der Extrudate simulieren. Die maximal mögliche Extrusionsgeschwindigkeit kann vorhergesagt werden, indem berechnete Temperaturspektren mit zulässigen Austrittstemperaturfeldern abgeglichen werden. Potentiell auftretender Extrudatverzug ist ebenfalls aus vorab zu berechnenden, nicht optimal ausgebildeten Temperaturfeldern ableitbar.

Die vorgelegte Arbeit liefert einen Beitrag zur numerischen Simulation von Strömungs- und Abkühlvorgängen in Profilextrusionswerkzeugen und Kalibratoren, wobei das Kühldüsenverfahren in den Mittelpunkt gestellt wird. Besondere Bedeutung kommt dabei dem thermodynamischen und rheologischen Materialverhalten der Polymere zu. Gerade der Phasenübergang von der fließfähigen Schmelze zum erstarrten Extrudat führt zu signifikanten Änderungen des Stoffverhaltens.

1.1 Stand der Technik bei der Kühldüsenextrusion

Als Ursprung des Kühldüsenverfahrens kann man das diskontinuierliche Gießen in sog. „Kühlformen“ bezeichnen, welches bereits seit 1961 bekannt ist. Kunststoffhalbzeuge in Form von Vollstäben und Platten lassen sich nach diesem Verfahren herstellen, wobei aufgeschmolzenes Polymer drucklos in die Form gefördert wird und darin abkühlt. Allerdings ist dabei mit Lunkern zu rechnen, die sich im Zuge der Polymerabkühlung bilden. Solche Fehlstellen können vermieden werden, wenn man die Schmelze der Kühlform unter Druck zuführt und die Volumenschwindung durch nachströmende Polymerschmelze kompensiert.

Zur kontinuierlichen Produktion von Polyamidvollstäben im Durchmesserbereich von 6 bis 200 mm stellt Voigt [1] eine Anlage vor, die aus einem Extruder, einem Manometer, einem Druckreduzierventil, der gekühlten Gleitform, einer Sprühwasserkühlung und einem Abzug besteht. Ihr Aufbau ist schematisch in Bild 1.1 dargestellt.

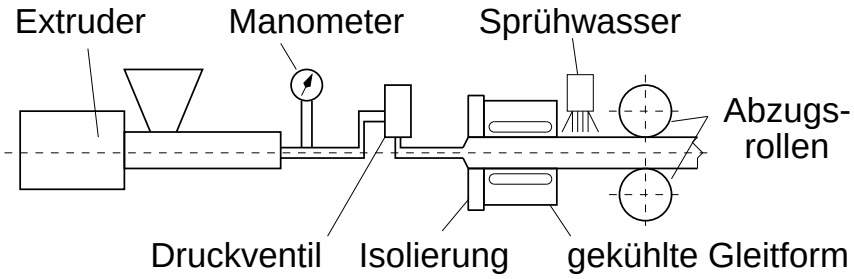


Bild 1.1: Extrusionsanlage mit gekühlter Gleitform für die kontinuierliche Herstellung von PA-Vollprofilen [1]

Vom Extruder kommend strömt die homogenisierte Schmelze durch die Gleitform. Der darin herrschende Extrusionsdruck wird durch das zwischengeschaltete Ventil (patentiert in [2]) auf ein für den Prozess charakteristisches Maximum begrenzt. In der Gleitform und dem nachgeschalteten Sprühbad erfolgt der Übergang vom schmelzflüssigen zum festen Extrudat, welches vom Abzug je nach tribologischem Verhalten gezogen oder gebremst werden muß.

Nachdem der Polymerstrang vom Ausformwerkzeug in die Kühl- bzw. Kaliberiereinrichtung gelangt ist, friert der Kunststoff vom Rand ausgehend ein und bildet dabei einen sog. „Schmelzekegel“ aus. Der darin wirkende Druck p presst die erstarrten Randschichten an die Werkzeugwandung

und initiiert damit eine druckabhängige Reibkraft R, wie dies in Bild 1.2 veranschaulicht ist. Werden die Reibungskräfte zu groß, so kann die Profiloberfläche beschädigt werden oder der Strang kann sich in der Kühldüse verklemmen. Versucht man dann das Extrudat trotzdem weiter zu fördern, so reißt unter der Wirkung der Abzugskräfte vielfach das Profil ab.

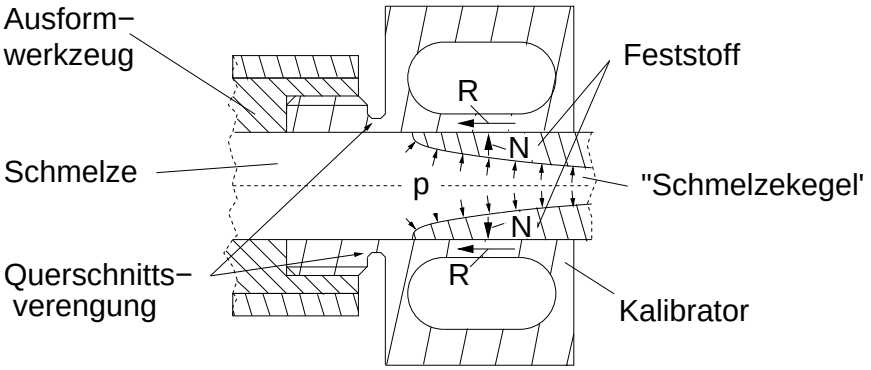


Bild 1.2: Ausbildung eines sog. „Schmelzekegels“ im Zuge des Abkühlvorgangs im Kühldüsensystem mit reduzierter Kontaktfläche zur Minimierung des ausgetauschten Kontaktwärmestroms (nach [3])

Um den Prozess betriebssicher zu praktizieren, ist ein optimaler Massedruck nötig, welcher die Reibungskräfte begrenzt, andererseits aber noch hinreichend hoch ist, um eine Vakuenbildung zu verhindern. Mittels einer Abzugsvorrichtung lässt sich der Massedruck wie gewünscht einstellen. Der Werkzeuginnendruck kann darüber hinaus durch Zuführen eines Schmiermittels beeinflusst werden [4], wodurch sich die Reibkräfte an der Kalibratorwandung reduzieren. In [5] findet man eine weitere Stellgröße, um den Werkzeuginnendruck zu beeinflussen. Steigt der Druck im Extrusionskanal, so wird die Kühlwirkung des Kalibrators abgeschwächt, um den Kunststoff länger fließfähig zu halten. Ein derartiger Regelkreis ist allerdings durch eine erhebliche Trägheit gekennzeichnet.

Da beim Kühldüsenverfahren das Ausformwerkzeug und der Kalibrator ein geschlossenes System bilden, treten Kontaktwärmeströme auf, die vom beheizten Werkzeug zum Kalibrator fließen und den Abkühlvorgang behindern. Um nun eine möglichst schnell wachsende, starre Randschicht zu erhalten, welche die Abzugskräfte ohne Beschädigungen aufzunehmen vermag, ist eine Isolierplatte [1] zwischen dem Ausformwerkzeug und dem Kalibrator vorzusehen, oder die Kontaktfläche zwischen diesen beiden

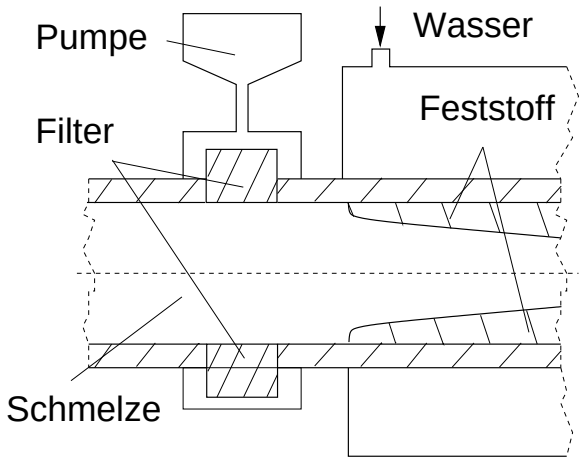


Bild 1.3: Vorrichtung für die Zufuhr eines Schmiermittels am Kalibratoreinlauf zur Verringerung der Reibkräfte (nach [4])

Komponenten zu minimieren [3], wodurch eine möglichst gute Wärmetrennung gewährleistet wird (vgl. Bild 1.2).

Bei der Extrusionstechnik, mit der eine Eigenverstärkung des Polymermaterials initiiert werden soll [6, 7], nutzt man gleichfalls die Direktkopplung von Ausformwerkzeug und Kalibrator. Hierdurch wird prozessführungsbedingt ein potentielles Relaxieren der Orientierungen vermieden. Durch den Abkühlvorgang unter Formzwang werden die Molekülorientierungen eingefroren. Die Folge ist eine Anhebung der mechanischen Extrudateigenschaften. Einige konstruktive Ansätze, mit denen sich die Orientierungszustände von Füll- und Verstärkungsstoffen in der Schmelze beeinflussen lassen, sind in [8] beschrieben.

1.2 Simulation von Wärmetransportvorgängen in der Kalibrier- und Kühlsektion

Beim Kühldüsenverfahren kommt der Abkühlung des Kunststoffs im Kalibrator besondere Bedeutung zu, da diese die erreichbare Extrusionsgeschwindigkeit maßgeblich beeinflusst. Polymere sind durch eine sehr niedrige Wärmeleitfähigkeit gekennzeichnet. Daher erfolgt der Wärmetransport aus dem Kunststoff relativ langsam. Bei dickwandigen Hohlkammer- und Vollprofilen ist die Wärmekonduktion noch mehr behindert, da mit zunehmendem Wandabstand die den Wärmeaustausch induzierenden lokalen Temperaturgradienten sinken.

Neben der Profilgeometrie gibt es weitere Größen, die den Abkühlvorgang beeinflussen. Dazu gehört die Geometrie des Kalibrators, welche durch die Anzahl, Form und Lage der Kühlkanäle gekennzeichnet ist. Darüber hinaus wirkt sich das verwendete Kalibratormaterial über seine Wärmeleitfähigkeit auf das Abkühlen der Extrudate aus. Speziell beim Kühldüsenverfahren kommt zudem der thermischen Wechselwirkung zwischen dem Schmelzeausformwerkzeug und dem Kalibrator besondere Bedeutung zu. Abhängig vom Grad der thermischen Trennung der beiden Komponenten kommt es zu einem axial gerichteten Kontaktwärmestrom in den Kalibrator hinein.

Um den Abkühlvorgang quantitativ beurteilen zu können, müssen die Wärmetransportprozesse modelliert und die Modelle in Berechnungsprogramme umgesetzt werden. Mittels der resultierenden Computerprogrammen kann man dann konkrete Anwendungs- und Betriebsfälle simulieren; es lassen sich Temperaturverteilungen im Extrudat und im Kalibrator vorhersagen. Die Simulationsrechnungen ermöglichen gleichfalls, die Geometrie des Kalibrators zu optimieren.

Es existieren bereits Beiträge [9, 10], in denen die bei unterschiedlichen Formgebungsprozessen ablaufenden Abkühlvorgänge rechnerisch untersucht wurden, um ein tieferes Verständnis für die den Prozess bestimmenden Faktoren zu gewinnen. Als weiteres Beispiel wird in [11] der Abkühlvorgang bei Folienextrusionsprozessen analysiert. In allen genannten Arbeiten wird das Differenzenverfahren zur Lösung der einschlägigen Gleichungen angewendet. Darüber hinaus finden sich Arbeiten [12-15], bei denen zur Simulation von Wärmetransportvorgängen die Methode der Finiten Elemente (FEM) eingesetzt wird.

In [16] wird die Erstarrung einer Polymerschmelze als Problem freier Oberflächen betrachtet. Mit einer Isothermiebedingung an der Grenzfläche zwischen bereits erstarrten Bereichen und der Schmelze, oder alternativ mittels einer Wärmestrombilanz an der Phasengrenze werden die beim Einfrieren ablaufenden thermischen Interaktionen zwischen den Phasen berücksichtigt. Von einem anderen Ansatz geht man in [17] aus. Dort wird das abzukühlende Medium als eine Phase mit einem, abhängig vom thermischen Zustand, variierenden Materialverhalten betrachtet. Mittels einer über die Temperaturen des Phasenwechsels hinaus definierten, kontinuierlichen Beschreibung der Stoffwerte ergibt sich eine Näherung des realen Materialverhaltens.

Ein zur Simulation von Abkühlvorgängen geeignetes Computerprogramm ist das von Fang [18] am Institut für Kunststofftechnologie entwickelte Softwarepaket SIMFLOW®. Das darin enthaltene Modul MULTI-COOLING kann angewendet werden, um den Abkühlvorgang von Extrudaten komplexer Geometrie unter Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen dem Kalibrator und Extrudat zu simulieren.

1.3 Strömungssimulation im Kalibrator

Zur numerischen Analyse von Schmelzeströmungsvorgängen in Extrusionswerkzeugen existiert eine Vielzahl von Beiträgen. Für zwei- und dreidimensionale Strömungsfelder in beliebigen Kanalgeometrien findet man in [18-22] Ansätze, bei denen zur Lösung der Kontinuitäts- und Impulsgleichung die Methode der Finiten Elemente, die Rand-Element-Methode oder die Finite-Differenzen-Methode eingesetzt werden. In diesen Arbeiten wird die Polymerschmelze als strukturviskoses Medium betrachtet. Auch der Einfluss einer ortsabhängigen Temperatur auf die reibungsbehaftete Polymerströmung wird in [23, 24] diskutiert. Darüber hinaus findet man Beiträge mit speziellen Ansätzen zur Berücksichtigung viskoelastischen Stoffverhaltens bei der Auslegung von Extrusionswerkzeugen [25]. Die für derartige Berechnungen erforderlichen Materialgesetze und Stoffdaten sowie deren experimentelle Ermittlung findet man in übersichtlicher Form in [26, 27] zusammengefaßt.

Will man Strömungsvorgänge analysieren, bei denen das Polymer den Phasenübergang flüssig/fest durchläuft, so ist die damit verbundene Änderung des Materialverhaltens zu berücksichtigen. Der teilkristalline Polymerwerkstoff, der in der vorgelegten Arbeit ausschließlich untersucht wird, bildet im Zuge des Erstarrungsvorgangs kristalline Strukturen aus, die sprungartige Veränderungen der thermischen und rheologischen Stoffwerte zur Folge haben. Prinzipiell sind die Schmelze, der Feststoff und Schmelze/Feststoff-Gemische hinsichtlich ihres thermischen und rheologischen Verhaltens gegeneinander abzugrenzen und als unterschiedliche Phasen bei der Formulierung der konstitutiven Gleichung zu betrachten.

Einige Beiträge, die sich mit solchen Mehrphasensystemen beschäftigen, existieren bereits. Bei der Folienextrusion mittels Breitschlitzdüsen mit nachgeschalteten Kühlwalzen tritt das Einfrieren den Kunststoffs während

der Verarbeitung auf. Die Schmelze erstarrt in den Randschichten, die in Kontakt mit den Kühlwalzen kommt. Zur Berechnung des auftretenden Strömungsfeldes zeigen Mitsoulis/Hannachi [11] einen Lösungsansatz, bei dem der Feststoff als schmelzflüssige Phase mit konstanter und hoher Viskosität behandelt wird, so dass sich in der Feststoffregion ein Geschwindigkeitsprofil vergleichbar mit einer Blockströmung einstellt.

Bei der Extrusion von Großrohren können die inneren Extrudatschichten aufgrund der Gravitationswirkung im Kalibrator nachfließen, während die Außenschichten nach dem Kontakt mit der Kalibratorwand oder mit dem Kühlmittel bereits erstarrt sind. Um den erstarrten und fließfähigen Anteilen Rechnung zu tragen, verwenden Githuku und Giacomin [28] einen von der Temperatur abhängigen Viskositätsansatz für die Schmelze. Erreicht die Massetemperatur die Kristallisationstemperatur, so wird ein sprungartiger Viskositätsanstieg auf 10^9 Pa s aufgeprägt, was einem Feststoffverhalten gleichkommt.

Auch beim Kompressionsformen von Thermoplasten wird Schmelze in gekühlte Arbeitswerkzeuge eingelegt und ausgeformt. Dabei erstarrt das Polymer im Bereich der Randschichten und verliert seine Fließfähigkeit. Mittels der sog. Noflow-Temperatur wird abgeprüft, ob das Material lokal als Feststoff oder als Schmelze zu behandeln ist [29].

Ähnliche Effekte treten bei der Verarbeitung von Gießharz auf. Das Materialverhalten des Harzes, insbesondere die Viskosität, ist abhängig von der Temperatur. In [30] findet man einen Zuwachs der Viskosität von mehr als drei Dekaden bei einer von 400 K auf 300 K sinkenden Temperatur, beschrieben mit der WLF- und der Arrhenius-Gleichung. Für sinkende Scherraten ergibt sich eine gegen die sog. Nullviskosität tendierende Viskosität, was mittels des Carreau-Yasuda Modells beschrieben wird.

Der Vorgang der Solidifikation tritt auch auf, wenn Metalle zu Strängen gegossen werden. Um dies numerisch zu beschreiben, werden ebenfalls Viskositätsansätze angewendet. Voller und Prakash [31] betrachten die flüssigen und festen Bestandteile, die nebeneinander auftreten, wenn die Schmelze erstarrt. Dieser Mischzustand tritt innerhalb eines Temperaturintervalls auf, welches durch die Temperatur der reinen Schmelze und des reinen Feststoffs bestimmt ist. Bei der mathematischen Beschreibung werden zusätzliche Quellterme in die Impulsgleichung aufgenommen, mit dem Ziel, das Fließen bei zunehmendem Feststoffanteil zu unterdrücken. Als alternative Vorgehensweise wird eine sog. effektive Viskosität für die

Mischung aus Schmelze und Feststoff angesetzt [32-34], deren Wert zwischen der Vikosität der reinen Schmelze und des reinen Feststoffs liegt. Der Feststoffviskosität wird dann der Wert unendlich zugewiesen. Abhängig vom Feststoffanteil der Mischung wird so die Strömungsgeschwindigkeit in der Mischphase durch die erhöhte Viskosität reduziert.

Im Gegensatz zu den Phasenänderungs-Viskositätsmodellen der bisher aufgelisteten Methoden, sollte sich ein näher an den physikalischen Zusammenhängen orientierter Ansatz zur Beschreibung des Fließverhaltens teilkristalliner Polymere auf das Temperaturintervall der Kristallisationsphase im Übergangsbereich von Schmelze zum Feststoff stützen. Die dazu erforderlichen Grenztemperaturen des Einfrierens, welche die unterschiedlichen Phasen voneinander abgrenzen, lassen sich mittels thermischer Analyse (DSC) bestimmen. Der Temperatureinfluss auf die Viskosität der abkühlenden Schmelze und der Anstieg der Viskosität bei beginnender Kristallisation können mittels rheologischer Messungen untersucht werden. Auch der nach erfolgter Kristallisation entstandene Feststoff kann noch fließen. Allerdings sind hierzu höhere Kräfte erforderlich, als bei den Schmelzeströmungen auftreten. Um dies in den Modellansätzen zu berücksichtigen, muss die Viskosität hinreichend gesteigert werden, um dadurch das Fließen des Feststoffs unter der aus der Schmelzeströmung resultierenden Druckeinwirkung auszuschließen. Durch Simulationsrechnungen lässt sich die Höhe der erforderlichen Viskosität überprüfen. Letztlich ist eine Zustandsgleichung aufzustellen, welche die Viskosität aller drei Zustände beschreibt, wobei ein stetiger Übergang an den Phasengrenzen zu gewährleisten ist. Dieser Zusammenhang wird in den folgenden Kapiteln genutzt, um Polymerströmungsvoränge simulieren zu können, bei denen der Phasenwechsel flüssig/fest auftritt.

Betrachtet man den Einfluss der Temperatur auf das sich einstellende Geschwindigkeitsfeld, so ist neben der Viskosität auch die thermische Dichteänderung zu berücksichtigen. In einigen Arbeiten [11], [28] und [31] wird zwar die temperaturabhängige Änderung der thermischen Parameter berücksichtigt, jedoch wird in der Kontinuitätsgleichung meist eine konstante Dichte angesetzt. In [34] wird die zeitliche Änderung der Dichte berücksichtigt, die allerdings durch die Zusammensetzung des Gemisches bestimmt ist und damit nicht explizit von der Temperatur abhängt. Um das angesprochene, gravitationsbedingte Fließen in dickwandigen Rohrextrudaten zu simulieren, verwenden Pittman et.al [35] eine Form der Kon-

tinuitätsgleichung, in der die thermische Dichteänderung explizit enthalten ist. Nachfolgend soll die Temperaturabhängigkeit der Dichte bei der Strömungssimulation explizit berücksichtigkt werden. Die Impuls- und Kontinuitätsgleichung muß deshalb um einen Term erweitert werden, mit dem sich der Einfluss der Polymerkontraktion auf das Strömungsfeld einbeziehen lässt.

1.4 Zielsetzung und Aufgabenstellung

Das Ziel der vorgelegten Arbeit ist die numerische Analyse des im Kalibrator einer Kühldüsen-Extrusionslinie ablaufenden Abkühl- und Strömungsvorgangs. Die thermische Wechselwirkung zwischen Extrudat und Kalibrator soll als zweidimensionales, instationäres Wärmeleitproblem beschrieben werden. Hierzu wird das MULTICOOLING-Modul des FEM-Programmpakets SIMFLOW® verwendet. Dabei werden als thermische Materialparameter die spezifische Wärmekapazität, die Dichte und die Wärmeleitfähigkeit als Funktion von Temperatur und Abkühlgeschwindigkeit in Form eines erweiterten Materialmodells in die Simulation einbezogen, was durch eine Programmerweiterung zu realisieren ist.

Mittels thermischer Analyse lässt sich das Stoffverhalten des verwendeten TPE-Werkstoffs charakterisieren. Zunächst wird die Wärmekapazität abhängig von der Temperatur und der Abkühlgeschwindigkeit gemessen. Eine Approximationsgleichung soll hergeleitet werden, welche die Meßwerte mathematisch beschreibt. Weiterhin sind die Wärmeleitfähigkeit und Dichte als Funktion der Temperatur zu messen und mathematisch zu beschreiben.

Die bei der Abkühlsimulation bisher vernachlässigte und in axialer Richtung auftretende, konduktive Wärmeleitung, soll in einem neu zu entwickelnden Berechnungsprogramm berücksichtigt werden. Dazu wird der dreidimensionale, stationäre Fall betrachtet, bei dem vereinfachend von konstanten Stoffparametern ausgegangen werden kann. Mittels der Methode der Finiten Elemente ist der Lösungsalgorithmus herzuleiten und anschließend programmtechnisch umzusetzen.

Um die Strömungsfelder zu berechnen, die sich im Kalibrator einstellen, während die Schmelze erstarrt, sind die Kontinuitäts-, Impuls-, und Energiegleichung miteinander zu koppeln. Aufbauend auf dem Programm

SIMFLOW®, insbesondere dem PROFILMODUL zur Strömungssimulation und dem MULTICOOLING-MODUL zur Temperaturberechnung, ist ein Kopplungsterm herzuleiten und zu dessen Berechnung ein Programmmodul zu generieren, welches die sich mit der Temperatur ändernde Viskosität in die Berechnung einbezieht. Dazu muß eine erweiterte, konstitutive Gleichung bereitgestellt werden, welche die mit dem Phasenwechsel flüssig/fest verbundenen Viskositätsänderungen einschließt. Mittels rheologischer Messungen sind Viskositätsdaten zu ermitteln, anhand derer der konstitutive Ansatz überprüft werden kann. Um den Einfluss der von der Temperatur abhängenden Dichte auf die Strömungsgeschwindigkeitsverteilung darzustellen, und insbesondere das Nachfließen der Schmelze zum Ausgleich der thermischen Kontraktion aufzuzeigen, ist ein Term zu formulieren, der den aus der sinkenden Polymertemperatur folgenden Dichteanstieg in Form eines Volumenstromdefizits in die Impulsgleichung integriert.

Neben der mathematischen Modellierung der wichtigsten Effekte, die bei der Kühldüsenextrusion auftreten, ist ein Verfahren zur Herstellung eines Führungsprofils - repräsentativ für dickwandige Extrudate - zu entwickeln und praktisch umzusetzen. Diese Teilaufgabe schließt auch die Konzipierung und Erprobung einer neuartigen Prozessregelung in Form einer Extrusionsdruck-Abzugsgeschwindigkeits-Regelung, des Kalibrators, der Werkzeugkomponenten sowie weiterer Peripheriegeräte mit ein. Unter Realisierung eines praxisrelevanten Produktionsprozesses sind die optimalen Prozessparameter und die sich einstellenden Kalibratortemperaturen meßtechnisch zu ermitteln. Die sich dabei ergebenden experimentellen Resultate sollen die Verifikation der Berechnungsergebnisse ermöglichen.

Kapitel 2

Grundlagen

Zur Modellierung von Schmelzeströmungen in Verbindung mit Extrudatabkühlvorgängen werden Bilanzen der Erhaltungsgrößen Energie, Impuls und Masse gebildet und in Form von Gleichgewichtsbeziehungen mathematisch ausgedrückt. Zusammen mit den konstitutiven Gleichungen und Materialmodellen lassen sich daraus Geschwindigkeits- und Temperaturfelder berechnen.

2.1 Kontinuitätsgleichung und Impulssatz

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt die Massenerhaltung und besagt für offene Systeme: Die zeitliche Änderung der Masse in einem Volumenelement der Größe dV = dx dy dz entspricht der Differenz aus einströmender und ausströmender Masse. In vektorieller Schreibweise erhält man dafür folgende Gleichung [36]:

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \underline{v}). \tag{2.1}$$

Hierin beschreibt ρ die Dichte, $\underline{v}$ den Geschwindigkeitsvektor und t die Zeit. Formuliert man die substanzielle Ableitung $\frac{D}{Dt}$ und den Nabla-Operator ∇ aus, so ergeben sich folgende Terme für das fluide Medium:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + v_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + v_z \frac{\partial \rho}{\partial z} = -\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right). \tag{2.2}$$

Den Gesamtimpuls kann man an einem mit der Strömung bewegten Volumenelement herleiten. Nach Newton ist die Impulsänderung gleich der Summe aller im betrachteten System wirkenden Kräfte. Dazu gehören die viskosen und dynamischen Anteile, wie auch flächenbezogene Kräfte und Gravitationskräfte. Bei der Anwendung des Impulssatzes auf die Kühldüsenextrusion werden die Gravitationskräfte, die im Vergleich zu den Scherkräften klein sind, zur Vereinfachung der Impulsgleichung vernachlässigt. Es gilt:

$$\rho \frac{D\underline{v}}{Dt} = \nabla \underline{\underline{\tau}} - \nabla p, \tag{2.3}$$

wobei $\underline{\underline{\tau}}$ den Extraspannungstensor, p den Druck und $\frac{D\underline{v}}{Dt}$ die substanzielle Ableitung des Geschwindigkeitsvektors bezeichnen. Diese vektorielle Form des Impulssatzes repräsentiert drei Komponentengleichungen für die drei kartesischen Koordinatenrichtungen x, y und z. Davon fallen die Terme der Impulsbeiträge für die Querströmungsanteile heraus, da die Größenordung dieser Komponenten, verglichen mit der in Extrusionsrichtung orientierten Hauptströmungsgeschwindigkeitskomponente, vergleichsweise klein ist. Nimmt man an, die z-Koordinate entspreche der Extrusionsrichtung, so lassen sich die Geschwindigkeitsanteile v_x, $v_y << v_z$ vernachlässigen. Es verbleibt damit von Gl. 2.3 für die z-Komponente:

$$\rho \frac{\partial v_z}{\partial t} + \rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z}$$

$$+\frac{\partial}{\partial x}\left[\eta \frac{\partial v_z}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\eta \frac{\partial v_z}{\partial y}\right] + \frac{4}{3}\frac{\partial}{\partial z}\left[\eta \frac{\partial v_z}{\partial z}\right]. \tag{2.4}$$

Im Falle niedriger Reynolds-Zahlen Re, die bei Polymerströmungen stets realisiert sind, können die konvektiven Terme $\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}$ sowie $\rho v_z \frac{\partial v_z}{\partial z}$ vernachlässigt werden [37], da die viskosen Kräfte dominieren. Dies lässt sich vereinfachend für das newtonsche Fluid zeigen, indem man die dimensionslosen Größen $\underline{x}^*$ (Ortsvektor), t^* (Zeit), $\underline{v}^*$ (Geschwindigkeitsvektor), p^* (Druck) einführt:

$$\underline{x}^* = \frac{\underline{x}}{b}, \; t^* = \frac{t}{t^{max}}, \; \underline{v}^* = \frac{\underline{v}}{v_z^{max}}, \; p^* = \frac{p}{\eta \, \frac{v_z^{max}}{b}}. \tag{2.5}$$

Zur Normierung werden dabei die Größen Kanalbreite b, maximale Kühlzeit t^{max} und Geschwindigkeitsmaximum v_z^{max} im Fließkanalquerschnitt herangezogen. Man erhält damit folgende Form des Impulssatzes in dimensionslosen Größen:

$$\frac{\rho \, v_z^{max} \, b}{\eta} \left[\frac{t_{max}}{v_z^{max} \, b} \, \frac{\partial v_z^*}{\partial t^*} + v_z^* \frac{\partial v_z^*}{\partial z^*} \right] = -\frac{\partial p^*}{\partial z^*}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial x^*} \left[\frac{\partial v_z^*}{\partial x^*} \right] + \frac{\partial}{\partial y^*} \left[\frac{\partial v_z^*}{\partial y^*} \right] + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial z^*} \left[\frac{\partial v_z^*}{\partial z^*} \right] . \tag{2.6}$$

Für kleine Reynolds-Zahlen

$$Re = \frac{\rho \, v_z^{max} \, b}{\eta} \tag{2.7}$$

wird deutlich, dass die aus der substanziellen Ableitung folgenden konvektiven Terme gegen die Zähigkeitsterme vernachlässigt werden können. Betrachtet man lediglich den zweidimensionalen Fall und vernachlässigt zudem die Änderung der Geschwindigkeit in Strömungsrichtung, so erhält man folgende vereinfachte Form des Impulssatzes:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta \frac{\partial v_z}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\eta \frac{\partial v_z}{\partial y} \right] . \tag{2.8}$$

2.2 Energiesatz zur Analyse der Wärmeübertragung

Die in einem nichtisothermen System auftretenden Wärmeaustauschvorgänge lassen sich mit der Energiegleichung beschreiben. In allgemeiner Form besagt die Energiegleichung, dass eine substanzielle Änderung

der inneren Energie in dem strömenden Medium durch folgende Arten äußerer Arbeit erfolgen kann: durch die Arbeit der angreifenden Verformungsspannungen, durch die Volumenänderungsarbeit des Drucks sowie durch Quellen und Senken des Wärmestroms. Zum Studium der einzelnen Anteile sei auf das Standardwerk von Bird, Stewart und Lightfoot [36] verwiesen. An dieser Stelle wird die Energiegleichung in einer tensoriellen und vektoriellen Schreibweise angegeben:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \underline{\underline{\tau}} : \nabla \underline{v} - p \nabla \underline{v} - \nabla \underline{\dot{q}}. \tag{2.9}$$

Hierin beschreibt ρ die Dichte und u die innere Energie eines Massenelements, t die Zeit, p den Druck, $\underline{v}$ den Geschwindigkeitsvektor und $\underline{\dot{q}}$ den Wärmestromdichtevektor. Letzterer ergibt sich unter Verwendung einer konstanten Wärmeleitfähigkeit λ zu

$$\underline{\dot{q}} = - \lambda \nabla T. \tag{2.10}$$

Das Symbol ∇ kennzeichnet den Nablaoperator, während D für die substanzielle Ableitung und (:) für das Doppelt-Skalarprodukt zweier Tensoren stehen. Der Differentialquotient $\rho \frac{Du}{Dt}$ kennzeichnet die zeitliche wie auch räumliche Änderung der inneren Energie, die der Stoff während der Zustandsänderung erfährt. Im Gleichgewicht damit steht die innere Leistung $\underline{\underline{\tau}} : \nabla \underline{v}$, die Volumenänderungsarbeit $p \nabla \underline{v}$ und die Divergenz der Wärmestromdichte $\nabla \underline{\dot{q}}$.

In der vorliegenden Form besitzt der Term $\underline{\underline{\tau}} : \nabla \underline{v}$ ein anderes Vorzeichen als in der Darsellung von [36], was aus der unterschiedlichen Definition der Spannungen, insbesondere deren Richtungen, resultiert. Dazu sei die hier verwendete Identität des Gesamtspannungstensors $\underline{\underline{\sigma}}$, wie man sie u. a. in [38] findet, notiert. Der Gesamtspannungstensor lässt sich aufspalten in den isotropen Druck p und den Extraspannungstensor $\underline{\underline{\tau}}$:

$$\underline{\underline{\sigma}} = - p \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\tau}}. \tag{2.11}$$

Bei einer rheologischen Zustandsgleichung wird der Gesamtspannungstensor mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensor korreliert:

$$\underline{\underline{\sigma}} = - p \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\tau}} = - p \underline{\underline{E}} + \eta \, 2 \, \underline{\underline{D}}^*. \tag{2.12}$$

$2\,\underline{\underline{D}}^*$ steht dabei für den deviatorischen Anteil des Deformationsgeschwindigkeitstensors $2\,\underline{\underline{D}}$. Von den Deformationsgeschwindigkeiten sind die aufgrund von Volumenänderungen auftretenden Deformationen zu subtrahieren [38], um auf die echte Deformationsgeschwindigkeit $2\underline{\underline{D}}^*$ zu kommen:

$$2\,\underline{\underline{D}}^* \;=\; 2\,\underline{\underline{D}} \;-\; \frac{2}{3}\,div\;\underline{v}. \tag{2.13}$$

Damit stellt sich der deviatorische Anteil $2\,\underline{\underline{D}}^*$ des Deformationsgeschwindigkeitstensors $2\,\underline{\underline{D}}$ wie folgt dar:

$$2\underline{\underline{D}}^* = \begin{bmatrix} \left(2\frac{\partial v_x}{\partial x}\right) - \frac{2}{3}div\underline{v} & \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) \\ & \left(2\frac{\partial v_x}{\partial y}\right) - \frac{2}{3}div\underline{v} & \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) \\ sym. & & \left(2\frac{\partial v_z}{\partial z}\right) - \frac{2}{3}div\underline{v} \end{bmatrix}. \tag{2.14}$$

Für den inkompressiblen Fall gilt gemäß der Kontinuitätsgleichung $div\;\underline{v} \;=\; 0$, woraus die Identität $2\,\underline{\underline{D}}^* \;=\; 2\,\underline{\underline{D}}$ folgt. Der verwendete Extraspannungstensor $\underline{\underline{\tau}}$ (auch als deviatorischer Spannungstensor bezeichnet [39]) lässt sich unter Berücksichtigung der Gln. 2.12 - 2.14 für kompressible Medien in Matrizenschreibweise wie folgt darstellen:

$$\underline{\underline{\tau}} = \begin{bmatrix} \left(2\eta\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3}\eta\nabla\underline{v}\right) & \eta\left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) & \eta\left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\right) \\ & \left(2\eta\frac{\partial v_x}{\partial y} - \frac{2}{3}\eta\nabla\underline{v}\right) & \eta\left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right) \\ sym. & & \left(2\eta\frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3}\eta\nabla\underline{v}\right) \end{bmatrix}. \tag{2.15}$$

Bei dem Extraspannungstensor $\underline{\underline{\tau}}$ handelt es sich ebenso wie bei den Tensoren $\underline{\underline{\sigma}}$, $2\,\underline{\underline{D}}$ und $2\,\underline{\underline{D}}^*$ um symmetrische Tensoren, so dass lediglich sechs Komponenten erforderlich sind, um Spannungen und Deformationsvorgänge umfassend zu beschreiben.

Eine vereinfachte Form, die viskose Wärmeerzeugung auszudrücken, findet man bei Tucker [37]. Darin steht $\dot{\gamma}$ für den Betrag des deviatorischen Anteils des Deformationsgeschwindigkeitstensors:

$$\dot{S} \;=\; \eta\,\dot{\gamma}^{\,2} \qquad mit \qquad \dot{\gamma} \;=\; \sqrt{\frac{1}{2}\,I_2\,(2\underline{\underline{D}}^*)}\;. \tag{2.16}$$

Aufgrund der niedrigen Extrusionsgeschwindigkeiten, die bei der Kühldüsenextrusion erzielt werden, sind die dissipativen Effekte nicht signifikant. Aus den Kanalquerschnittsgeometrien im Ausformwerkzeug und Kalibrator folgt, dass die Geschwindigkeitskomponente in Extrusionsrichung dominiert. Somit fallen alle Terme aus dem Extraspannungstensor heraus, die nicht mit der entsprechenden Geschwindigkeitskomponente verknüpft sind. Zudem liegen aufgrund des niedrigen Durchsatzes sehr kleine örtliche Geschwindigkeitsgradienten $\frac{\partial v_i}{\partial \zeta}$ - i kennzeichnet hier die mit der Extrusionsrichtung zusammenfallende Komponente und ζ steht für die zwei dazu orthogonal orientierten Normalenrichtungen - vor, so dass die Dissipation bei den numerischen Analysen vernachlässigt werden kann.

Für die Zwecke der Kunststoffverarbeitung wird die Energiegleichung vorteilhafterweise so umgeschrieben, dass man an Stelle der inneren Energie u die Temperatur und die spezifische Wärmekapazität einführt. Die Änderung der inneren Energie lässt sich mit Hilfe des 1. Hauptsatzes der Thermodynamik

$$du \;=\; -\;p\,dv \;+\; c_p\,dT \tag{2.17}$$

unter Annahme konstanten Drucks umformen. Diese Annahme ist bei der Kühldüsenextrusion näherungsweise erfüllt, da bei der Abkühlung im Kalibrator ein weitgehend einheitliches Druckniveau vorliegt. Berücksichtigt man letztlich, dass die Volumenänderungsarbeit für das inkompressible Medium identisch Null ist, so erhält man mit diesen Umformungen folgende in der Temperatur explizite Form der Energiegleichung:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} \quad = \quad \nabla(\lambda \nabla T). \tag{2.18}$$

Die substanzielle Ableitung $\frac{DT}{Dt}$ und der konduktive Term $\nabla(\lambda\nabla T)$ können ausformuliert werden. Die resultierende Darstellungsform hängt nun davon ab, ob der Abkühlvorgang aus der Sicht eines externen oder eines mitgeführten Beobachters beschrieben werden soll. Aus der Sicht des außen-

stehenden Beobachters handelt es sich um einen stationären Prozess, wodurch die partielle zeitliche Ableitung identisch Null ist. Man erhält für diesen Fall:

$$\rho c_p v_z \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial y}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\right]. \tag{2.19}$$

Bezüglich eines mitgeführten Koordinatensystems ergibt sich in Gl. 2.20 eine instationäre Formulierung in zwei Raumdimensionen, wobei die axiale Wärmeleitung in z-Richtung sowie die konvektiven Terme verschwinden. Man erhält die nach Fourier benannte Wärmeleitungsgleichung:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial y}\right]. \tag{2.20}$$

2.3 Thermische Randbedingungen

Zur Lösung der Energiegleichungen (2.19) und (2.20) für stationäre und instationäre Abkühlvorgänge sind unterschiedliche Anfangs- und Randbedingungen zu formulieren. Bei Gl. 2.20 handelt sich es um eine parabolische Differentialgleichung, die auch als sog. erste Randwertaufgabe bezeichnet wird. Für t $>$ 0 exitstieren nach [40] Lösungen T(x,y,t), welche sowohl die Anfangsbedingung gemäß Gl. 2.21 als auch die Randbedingung nach Gl. 2.22 auf der Umrandung Γ erfüllen.

$$T(t=0) \;=\; f(x,y) \quad Cauchy - Bedingung \tag{2.21}$$

$$T(\Gamma) \;=\; \bar{T}\; für\; \underline{x} \;\in\; \Gamma \qquad Dirichlet - Bedingung \tag{2.22}$$

Die Gl. 2.21 ist gleichbedeutend mit einer vorgegebenen Anfangstemperaturverteilung über dem gesamten Gebiet Γ zum Zeitpunkt t = 0, wie auch dem Gebiet an den Rändern aufgeprägte Temperaturen. Darüber hinaus gibt es weitere Interaktionen, die auf dem Rand wirken können. Dazu gehört der Wärmeaustausch, der aus dem Kontakt zwischen einer festen Wand und einer fluiden Phase resultiert. Dieser Vorgang wird

als Wärmeübergang oder Wärmekonvektion bezeichnet. Der Wärmeübergang ist abhängig von den Materialparametern der beteiligten Stoffe sowie von äußeren Bedingungen, wie beispielsweise des Bewegungszustands des Fluids oder der Form und Beschaffenheit der Oberfläche. Ist das umgebende Fluid wärmer als der Körper, so wird ein in den Körper hineinführender Wärmestrom erzeugt. In Bild 2.1 sind die prinzipiell möglichen Temperaturverläufe und Wärmeströme schematisch dargestellt.

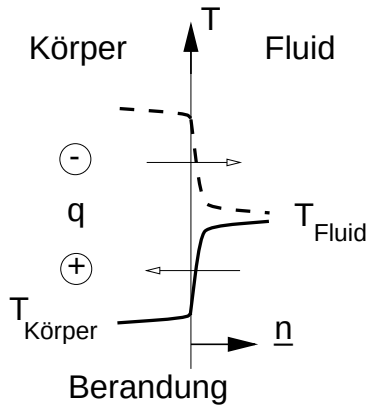


Bild 2.1: Konvektive Randbedingung an der Grenzfläche Feststoff/Fluid

Der resultierende Wärmestrom $\dot{q}$ ergibt sich formal zu

$$\dot{q} \;=\; \alpha\,(T \;-\; T_{Fluid}), \tag{2.23}$$

worin α für die Wärmeübergangszahl und T_{Fluid} für die Temperatur des umgebenden Fluids steht. Ansätze zur rechnerischen Bestimmung von α findet man in [12] und [41]. Ergebnisse von experimentellen Untersuchungen sind in [10] und [42] zusammengestellt.

Betrachtet man die Berandung des festen Körpers, dem Wärme zugeführt wird, so lässt sich der Wärmestrom nach Fourier wie folgt ansetzen [43, 44]:

$$\dot{q} = -\lambda \left[\frac{\partial T}{\partial \underline{n}}\right]. \tag{2.24}$$

Hierin repräsentiert λ die Wärmeleitfähigkeit und $\underline{n}$ den zur Kontaktfläche gehörenden Normalenvektor. Bilanziert man die Energieströme gemäß Gl. 2.23 und Gl. 2.24 am Rand, so erhält man die Beziehung 2.25, vgl. [45, 46]. Die Vorzeichen der darin auftretenden Terme lassen sich

anschaulich erklären. Im Fall der von außen beheizten Wand entsteht im Körper ein positiver Temperaturgradient in Normalenrichtung, da die Wandtemperatur höher ist als die Temperatur im Innern. Dabei ist vorausgesetzt, dass der Normalenvektor $\underline{n}$ aus dem Körper heraus weist. Die Temperaturdifferenz (T - T_{Fluid}) ist negativ, da die Fluidtemperatur höher sein muß als die Wandtemperatur, um in einen den Feststoff hineinführenden Wärmestrom zu erzeugen. Somit ist die Wärmestrombilanz am Rand gemäß Gl. 2.25 qualitativ erfüllt.

$$\alpha \left(T \; - \; T_{Fluid}\right) \; + \; \lambda \; \left[\frac{\partial T}{\partial \underline{n}}\right] \; = \; 0. \tag{2.25}$$

Weitere Randeffekte, beispielsweise hervorgerufen durch Wärmestrahlung oder durch die Zufuhr elektrischer Heizleistung, sind im betrachteten Fall der Kühldüsenextrusion nicht relevant.

2.4 Methode der Finiten Elemente und Lösungsansatz nach Galerkin

Die vorgestellten Gleichungen für die Energieerhaltung (2.19) und (2.20) und die Impulsgleichung (2.8) lassen sich für komplexe Geometrien und kunststoffspezifisches Materialverhalten nicht mehr analytisch lösen. Aus diesem Grund wird ein numerisches Näherungsverfahren angewandt, um die gesuchten Unbekanntenverteilungen bestimmen zu können. Die betrachteten Differentialgleichungen, Feldgleichungen für Strömung und Temperaturverteilung, lassen sich mit Hilfe der Methode der Finiten Elemente (FEM) näherungsweise lösen [47].

Hierfür ist das Problem bzw. die Differentialgleichung zunächst geeignet zu formulieren, wozu man den Galerkin'schen Ansatz [48] gemäß der Methode der gewichteten Residuen anwendet. Geht man von einer linearen oder nichtlinearen, homogenen Differentialgleichung der Fom

$$L(u) \; \equiv \; 0 \tag{2.26}$$

aus, worin L die Differentialoperatoren und u die Unbekanntenfunktion repräsentieren, so ist diese nach der Methode der gewichteten Residuen mit

einer Gewichtungsfunktion W zu multiplizieren und innerhalb des betrachteten Gebiets Ω zu integrieren, was sich wie folgt formulieren lässt:

$$\int_{\Omega} W \; L(u) \; d\tilde{\Omega} \; = \; 0. \tag{2.27}$$

Die Gewichtungsfunktion wird bei der Galerkin'schen Methode durch einen Satz von Funktionen ersetzt. Dabei entspricht die Anzahl der Ansatzfunktionen den Freiwerten des Ansatzes, der zur Lösung der Gleichung (2.26) aufgestellt wird. Während bei der Lösung von Variationsfunktionalen mittels der Galerkin'schen Methode Summationsansätze verwendet werden [49], sind zur Herleitung einer für die Methode der Finiten Elemente benötigte Integralform die Formfunktionen N_i zu benutzen, auf die nachfolgend eingegangen wird. Allgemein lässt sich formulieren:

$$\int_{\Omega} N_i \; L(u) \; d\tilde{\Omega} \; = \; 0. \tag{2.28}$$

Wie der Name „Methode der Finiten Elemente“ besagt, ist der Grundgedanke der Prozedur, das betrachtete Gebiet in die sog. Finiten Elemente aufzuteilen. Die gesuchte Lösung u für das Gesamtgebiet wird aus elementweisen Verteilungen der zu bestimmenden Zustandsvariablen U^e zusammengesetzt. Die betrachtete Differentialgleichung L(u) wird für das einzelne Element als $L(U^e)$ formuliert. Die daraus resultierenden Anteile werden summiert zu einem linearen Gleichungssystem in matrizieller Form, welches das Gesamtgebiet beschreibt. Löst man dieses lineare Gleichungssystem auf, so erhält man den gesuchten Unbekanntenverlauf im Gesamtgebiet, gestützt auf die einzelnen Elemente bzw. deren Knoten. Aus Gl. 2.28 folgt somit:

$$\sum_{Elemente} \int_{\Omega^e} N_i \; L(U^e) \; d\tilde{\Omega}^e \; \approx \; 0. \tag{2.29}$$

Neben dieser gebietsweisen bzw. geometrischen Aufteilung wird eine weitere Diskretisierung vorgenommen. Während u bzw. U^e kontinuierliche oder funktionale Formulierungen der gesuchten Lösung im Gesamtgebiet

bzw. im Element kennzeichnen, wird im Finiten Element selbst eine diskrete Form des Unbekanntenverlaufs aufgestellt. Gestützt auf die sich an den sog. Knotenpunkten ergebenden Zustandswerte und durch Approximation mittels sog. Formfunktionen innerhalb des Elements wird die kontinuierliche Form durch eine diskretisierte Form ersetzt, wie dies in der Standardliteratur zur FEM nachzulesen ist [47, 50, 51].

Allgemein lässt sich als Approximationsgleichung für den Unbekanntenverlauf schreiben:

$$U(\underline{x}) \;=\; N_i(\underline{\xi})\, U^i. \tag{2.30}$$

Hierin stehen U^i für die Zustandswerte an den Knotenpunkten i und N_i für die Ansatzfunktionen. Die Vektoren $\underline{x}$ bzw. $\underline{\xi}$ kennzeichnen das zur Beschreibung des Gesamtgebiets bzw. Elements verwendete Koordinatensystem. Sie werden als globale bzw. lokale Koordinaten bezeichnet. Die jeweilige Ansatzfunktion muß am betrachteten Knoten i identisch 1 und für alle weiteren Knoten identisch 0 sein. Ansonsten ist bisher keine Einschränkung für das Gebiet, die Elemente, die Koordinatensysteme, die mathematische Form der Ansatzfunktionen und die Knotenpunkte vereinbart worden. Die geeignete Wahl der Koordinaten - kartesische, sphärische oder Zylinderkoordinaten, gerad- oder krummlinige, Raum- oder Volumenkoordinaten - ergibt sich aus dem jeweiligen Anwendungsfall. Um die unterschiedlichen Koordinaten allgemein zu beschreiben, wird der Diskretisierungsgedanke des Unbekanntenverlaufs aufgegriffen. Analog zu Gl. 2.30 lassen sich die globalen Koordinaten im Element diskretisiert angeben:

$$\underline{x} \;=\; N_i(\underline{\xi})\, \underline{x}^i. \tag{2.31}$$

Dabei werden dieselben Knoten als Stützstellen und dieselben Ansatzfunktionen gewählt wie in Gl. 2.30. Man spricht von der isoparametrischen Abbildung [52]. Die Vektoren $\underline{x}^i$ kennzeichnen die Werte der globalen Koordinaten am Knoten i. Im Zuge der weiteren Herleitung wird es erforderlich sein, die globalen und lokalen Koordinaten ineinander zu transformieren. Als allgemein gültige Transformationsgleichung für die Ableitung einer beliebigen Funktion nach den lokalen Koordinaten erhält man mittels Differentiation der globalen Koordinaten folgende Gleichungsform:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} = \left[\underline{\underline{J}}\right] \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} . \tag{2.32}$$

Hierin kennzeichnet $\underline{\underline{J}}$ die Jacobi'sche Transformationsmatrix, die man u. a. bei Hinton und Owen [50] findet. Die inverse Form von Gl. 2.32 führt auf die Ableitung nach den globalen Koordinaten, wie sie in den Feldgleichungen auftreten. Dies lässt sich folgendermaßen formulieren:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} = \left[\underline{\underline{J}}^{-1}\right] \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{bmatrix} . \tag{2.33}$$

Kapitel 3

Modellierung des Wärmeaustauschvorgangs im Kalibrator

Die bei der Kühldüsenextrusion auftretenden Wärmeströme können mittels der im Kapitel 2 hergeleiteten Energiegleichung beschrieben werden. Da das Extrudat und der Kalibrator in thermischer Wechselwirkung stehen, ist die Energiebilanz für beide Komponenten anzusetzen, die auftretende Interaktion zu formulieren und eine geschlossene Lösung für das Gleichungssystem zu finden. Ausgehend von der zweidimensionalen, instationären Fourierschen Wärmeleitungsgleichung 2.20 kann beschrieben werden, wie das durch den Kalibrator strömende bzw. gleitende Extrudat aus der Sicht eines mitbewegten Beobachters abkühlt. Dieses Konzept hat Fang [18] in dem MULTICOOLING-Modul des Simulationsprogramms SIMFLOW® umgesetzt (vgl. Kap. 3.1). Auf diesem bereits entwickelten FORTRAN77-Quellcode wird zurückgegriffen, um ein erweitertes Materialgesetz zu integrieren, in dem die thermischen Parameter spezifische Wärmekapazität c_p, Wärmeleitfähigkeit λ und Dichte ρ abhängig von der Temperatur T und der Abkühlgeschwindigkeit $\dot{T}$ enthalten sind.

Im Gegensatz dazu beschreibt die Lösung der dreidimensionalen, stationären Wärmeleitungsgleichung das Temperaturfeld im Extrudat und Kalibrator in Abhängigkeit von den Raumrichtungen x, y, z. In diesem Fall kann die axiale Wärmekonduktion insbesondere im Kalibratormantel, die im instationären, zweidimensionalen Berechnungskonzept nicht enthalten ist, mit einbezogen werden. Die Rechenprozeduren, die erforderlich sind,

das 3D-Problem zu lösen, werden mittels eines, speziell für diese Anwendung generierten C-Programms durchgeführt.

3.1 Beschreibung des zweidimensionalen, instationären Extrudatabkühlvorgangs

Bezogen auf das mit der Abzugsgeschwindigkeit bewegte Koordinatensystem wird beschrieben, wie das Extrudat abkühlt, indem es Wärme über die begrenzenden Wandungen des Extrusionskanals hinweg an den Kalibratormantel abgibt. Dazu ist die Energiegleichung für das Extrudat und den Kalibrator getrennt zu formulieren:

$$Extrudat: \qquad \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda_E \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\lambda_E \frac{\partial T}{\partial y}\right],$$

$$Kalibrator: \qquad 0 = \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda_K \frac{\partial T}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\lambda_K \frac{\partial T}{\partial y}\right]. \qquad (2.20)$$

Hierin sind konvektive Terme vernachlässigt worden. Der Wärmeaustausch an den Rändern des Kalibrators, die mit einem Kühlmittel oder mit der Umgebungsluft, also mit fluiden Medien, in Kontakt stehen, wird mit Hilfe der konvektiven Randbedingung nach Gl. 2.23 beschrieben. Mit dem Ansatz von Galerkin, der räumlichen Diskretisierung mittels isoparametrischer, linearer Dreieckselemente sowie mit der zeitlichen Diskretisierung der Temperatur gemäß

$$T(t) = \Theta T^{k+1} + (1-\Theta)T^k, \qquad (3.1)$$

in der k die diskreten Zeitschritte beschreibt [53], und der Isothermiebedingung

$$T_K = T_E \qquad (3.2)$$

an der Kontaktfläche zwischen dem Extrudat und der Kalibratorinnenwandung erhält man nach [18] das folgende Gleichungssystem, welches mit Hilfe von SIMFLOW® gelöst werden kann:

$$\{\underline{\underline{M}} + \Delta t\ \Theta \underline{\underline{K}}\}\ \underline{T}^{k+1}\ =\ \{(\underline{\underline{M}}\ -\ \Delta t\ (1-\Theta)\underline{\underline{K}}\}\ \underline{T}^{k} +\ \Delta t\ \underline{R}. \quad (3.3)$$

Die verwendeten Temperaturindizes k und $k+1$ kennzeichnen die benachbarten Zeitschritte, Θ dient als Gewichtungsfaktor und $\underline{T}^k$ repräsentiert den unbekannten Temperaturvektor. Die auftretenden und nachstehend angegebenen Matrizen $\underline{\underline{M}}$, $\underline{\underline{K}}$ sowie den Vektor $\underline{R}$ bezeichnet man als Massenmatrix, Systemmatrix und Lastvektor. Sie dienen als Schnittstelle, um die erweiterten Materialmodelle für die thermischen Parameter einzufügen. Sie lauten:

$$\underline{\underline{M}}^e\ =\ \int\limits_{\Omega^e} \rho\ c_p\ N_i\ N_j\ d\tilde{\Omega}^e, \quad (3.4)$$

$$\underline{\underline{K}}^e\ =\ \int\limits_{\Omega^e} \lambda\ \left[\ \frac{\partial N_i}{\partial x}\ \frac{\partial N_j}{\partial x}\ +\ \frac{\partial N_i}{\partial y}\ \frac{\partial N_j}{\partial y}\ \right] d\tilde{\Omega}^e + \int\limits_{\Gamma^e} \alpha\ N_i\ N_j d\tilde{\Gamma}^e, \quad (3.5)$$

$$\underline{R}^e\ =\ \int\limits_{\Gamma^e} \alpha\ T^{Fluid}\ N_i d\tilde{\Gamma}^e. \quad (3.6)$$

Die Materialparameter Dichte ρ, spezifische Wärmekapazität c_p und Wärmleitfähigkeit λ werden abhängig von der Temperatur T und der Abkühlgeschwindigkeit $\dot{T}$ bestimmt und erweiternd in das Programm SIMFLOW® implementiert. $\dot{T}$ kann aus den Temperaturen an aufeinander folgenden Zeitschritten berechnet werden. Eine günstige Formulierung hierfür lautet

$$\dot{T}(t)\ = T(t^k) - T(t^{k-2}), \quad (3.7)$$

mit der die Ableitung geglättet wird, um Oszillationen in der Lösung zu vermeiden. Für die thermischen Stoffgrößen werden abschnittsweise definierte Approximationsgleichungen entwickelt, welche ihre Abhängigkeit von T und $\dot{T}$ wie folgt beschreiben:

$$f(T,\dot{T}) \;=\; \begin{cases} a_1 \;+\; a_2\,T, & mit \quad T_c(\dot{T}) \;<\; T \\ \sum_{i=0}^{n} b_i\,T^i, & mit \quad T_c(\dot{T}) \;\geq\; T \;\geq\; T_p(\dot{T}) \\ c_1 \;+\; c_2\,T, & mit \quad T \;<\; T_p(\dot{T}) \end{cases} \tag{3.8}$$

Die darin auftretenden Konstanten a_i, b_i und c_i werden aus Meßwerten bestimmt. Nachfolgend sind die approximierten und extrapolierten Stoffparameter graphisch dargestellt.

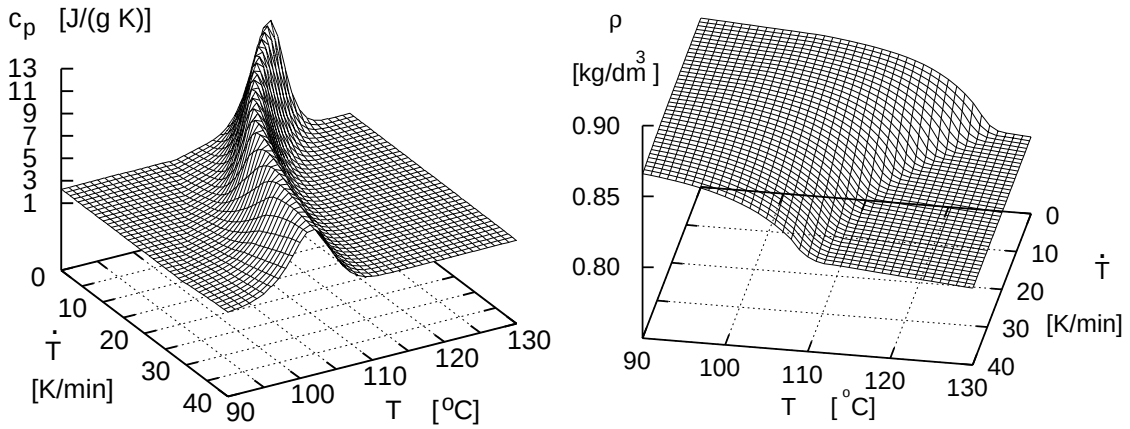


Bild 3.1: Approximation der spezifischen Wärmekapazität c_p(T,$\dot{T}$) und Dichte ρ(T,$\dot{T}$) für den eingesetzten TPV-Typ

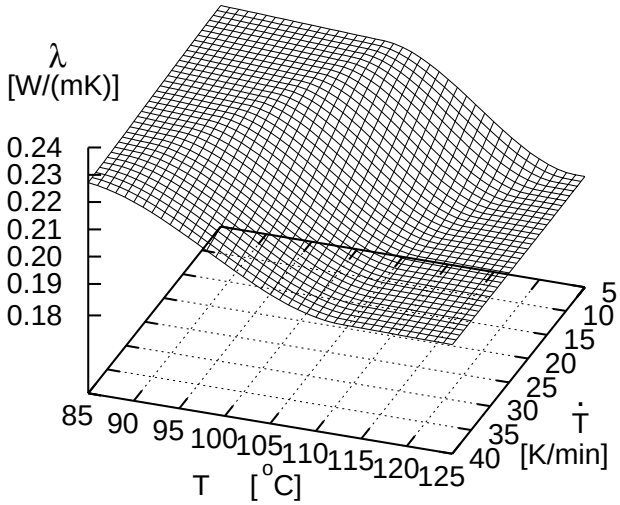


Bild 3.2: Approximation der Wärmeleitfähigkeit λ(T,$\dot{T}$)

Aus Übersichtlichkeitsgründen werden die Messungen, die durchgeführt worden sind, um die experimentellen Daten der Stoffwertfunktionen

$\rho(T, \dot{T})$, $c_p(T, \dot{T})$ und $\lambda(T, \dot{T})$ bereitzustellen, wie auch die Approximationsansätze im Kap. 5 beschrieben.

3.2 Beispiel zur 2D-Temperaturberechnung

Anhand des Herstellvorgangs eines Führungsprofils nach dem Kühldüsenverfahren, das im Kapitel 6 näher erläutert wird, kann die Simulation des Abkühlvorgangs demonstriert werden. Hierbei wird untersucht, wie die Wärme aus dem Extrudat abgeführt und vom Kalibrator aufgenommen wird, bzw. welche Temperaturfelder sich dabei orts- und zeitabhängig einstellen. Insbesondere der Flüssig/Fest-Phasenübergang ist dabei von Interesse, da dieser zu betragsmäßig großen Änderungen der thermischen Stoffparameter führt. Dabei zeigt sich ein Einfluss der Abkühlgeschwindigkeit, die zu einer Veränderung der Übergangstemperaturen führt. Die für dieses Beispiel gewählten Werte der Wärmeübergangskoeffizienten an den Grenzflächen von Kalibratormantel und Umgebung bzw. Kalibratormantel und Kühlwasser, wie auch die Temperaturen der Fluide sind in Tabelle 3.1 zusammengestellt. Für das Kalibratormaterial Stahl beträgt die Wärmeleitfähigkeit 23 W/(mK).

Wärmeübergangskoeffizienten	
$\alpha_{Luft/Stahl}$	10 W/(m^{2}K)
$\alpha_{Wasser/Stahl}$	1000 W/(m^{2}K)
Temperaturen	
Extrudatanfangstemperatur	213°C
Kühlmitteltemperatur	6°C
Kalibratoranfangstemperatur	6°C
Umgebungstemperatur	25°C

Tabelle 3.1: Prozesstemperaturen und Wärmeübergangskoeffizienten

Die aus Bild 3.3 ersichtliche Symmetrie des Kalibratorkanal- und Profilquerschnitts wird beim Generieren des Berechnungsmodells bzw. der Gebietsdiskretisierung ausgenutzt.

Für die Diskretisierung werden 23736 lineare Dreieckselemente mit 12322 Knoten verwendet. In diesem Zusammenhang ist darauf hinzuwei-

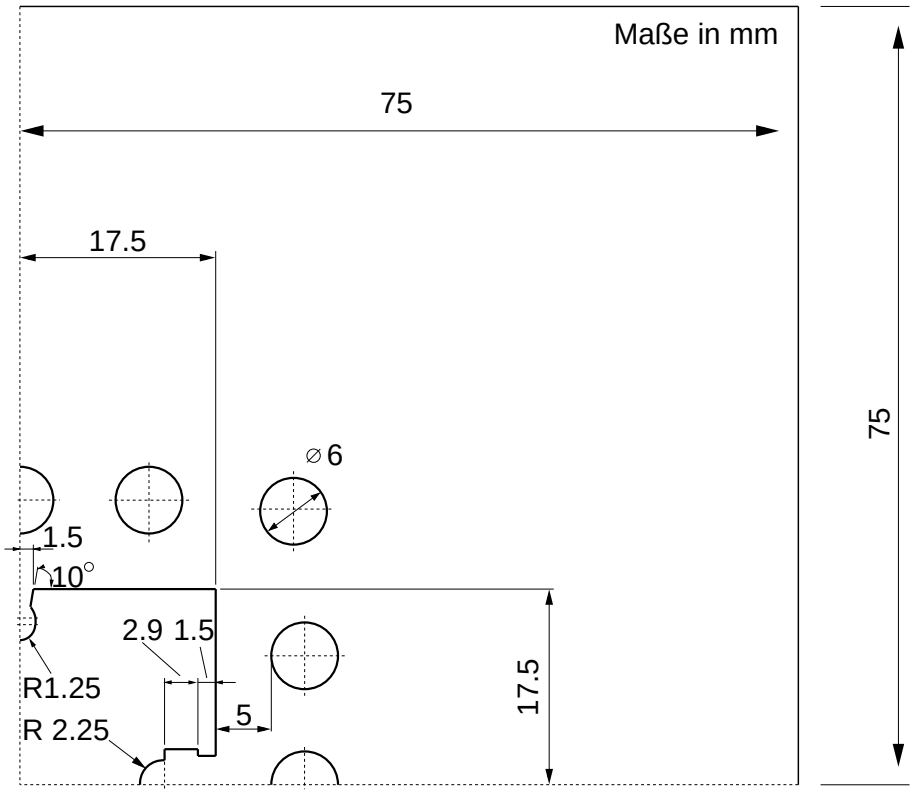


Bild 3.3: Skizze des Kalibrator- und Extrudatquerschnitts

sen, dass im Grenzbereich zwischen Extrudat und Kalibrator eine besonders feine Vernetzung erforderlich ist, da hier große Temperaturgradienten auftreten.

Die berechneten Temperaturen und Abkühlgeschwindigkeiten im Extrudat und Kalibrator lassen sich über dem Querschnitt für unterschiedliche Kühlzeitpunkte auftragen (vgl. hierzu die Bilder 3.4 sowie 3.6 - 3.8). Zu Beginn bildet sich in der äußeren Schicht des strömenden Extrudats, die in Kontakt mit dem gekühlten Stahlmantel steht, eine Temperaturgrenzschicht aus, in der große Temperaturgradienten auftreten. Im Kernbereich des Extrudats bleibt die Temperatur unverändert. Demgegenüber fließt die Wärme im Stahl kontinuierlich ab und wird an das die Axialbohrungen durchströmende Kühlmittel abgegeben. Lediglich in den Nutbereichen, insbesondere im Nutgrund, ergeben sich höhere Temperaturen, da der Abstand dieser Nutoberflächen von den Kühlbohrungen zunimmt. Prinzipiell führt die um etwa 3 Potenzen höhere Wärmeleitfähigkeit des Stahls im Kalibrator zu deutlich kleineren Temperaturdifferenzen als im Polymer.

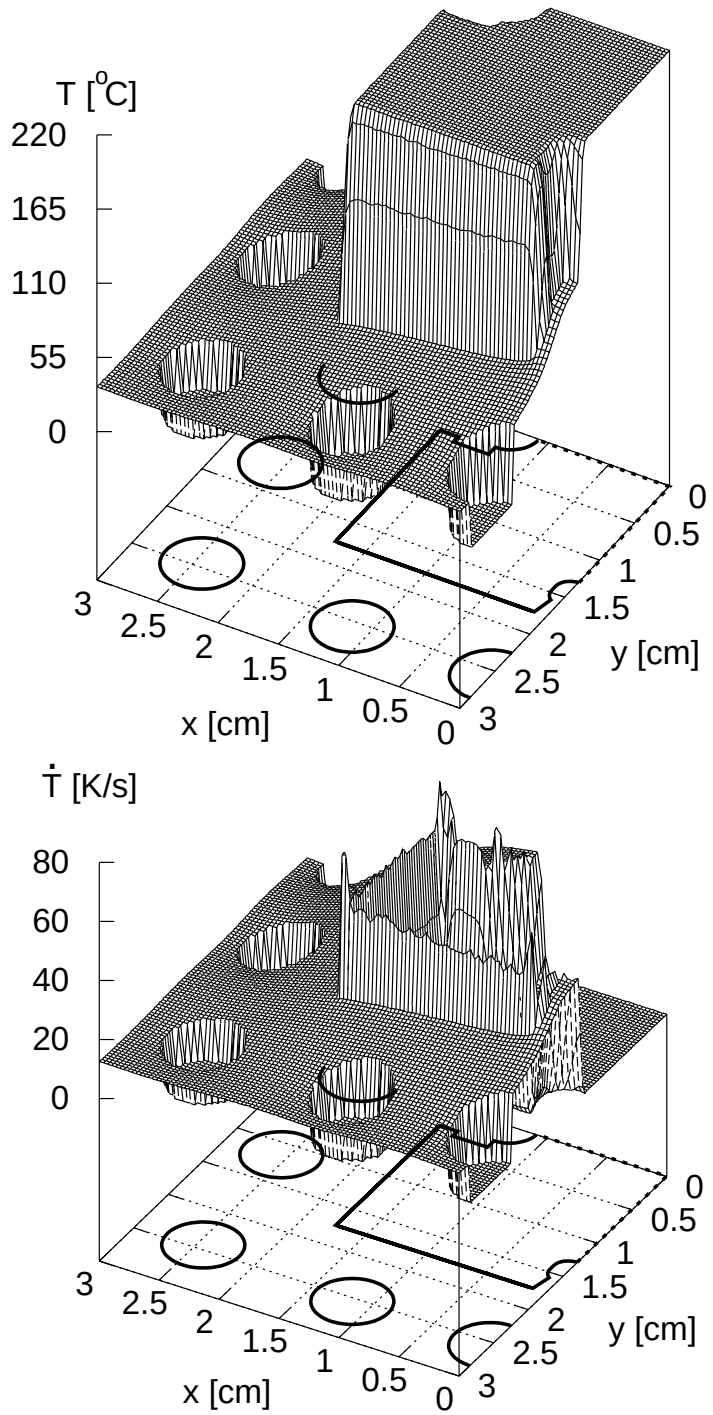


Bild 3.4: Extrudat- und Kalibratortemperaturen T(t = 1s,x,y) sowie Abkühlgeschwindigkeit $\dot{T}$(t = 1s,x,y)

In Grenzflächenbereichen Kunststoff/Stahl zeigen sich die höchsten Temperaturgradienten und Abkühlgeschwindigkeiten; im Kanalzentrum geht $\dot{T}$ gegen Null. Aufgrund des bereits erwähnten Unterschieds zwischen λ_E

und λ_K sinkt die Kalibratortemperatur mit niedrigeren Abkühlraten, wie man aus Bild 3.4 erkennt. An der Kanalecke x = y = 1.75 cm ist die Temperatur im Kunststoff mit 55 °C bereits unter die Kristallisationstemperatur gesunken und die Schmelze ist erstarrt. Der Phasenübergang wird aus den in den Bildern 3.5 aufgetragenen ortsabhängigen Stoffgrößen erkennbar.

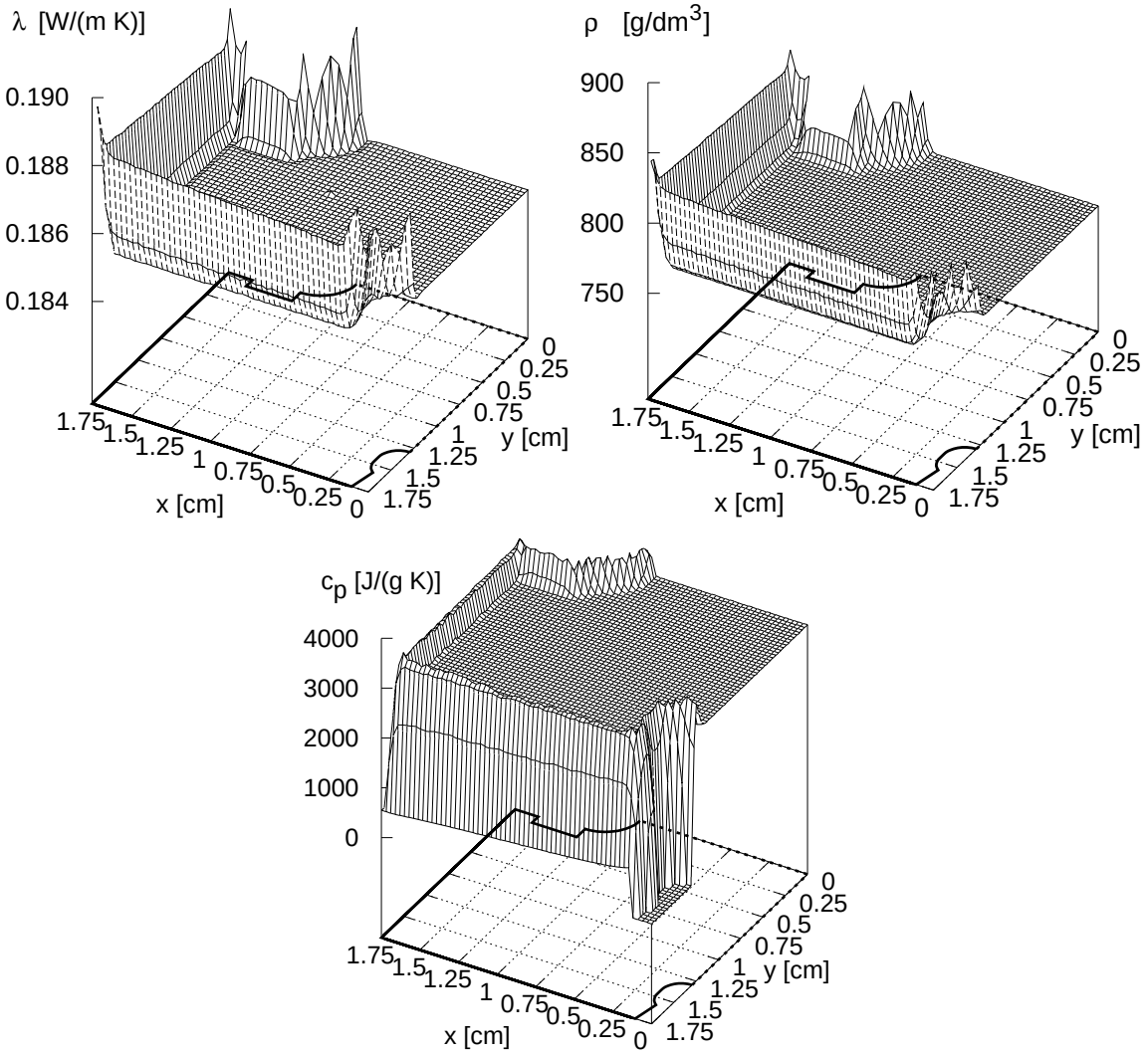


Bild 3.5: Wärmekapazität c_p(t = 1 s,x,y), Wärmeleitfähigkeit λ(t = 1 s,x,y) und Dichte ρ(t = 1 s,x,y) im Extrudat

Die Dichte ρ und die Wärmeleitfähigkeit λ steigen mit sinkenden Temperaturen und bedingt durch den Flüssig/Fest-Phasenübergang am Rand an. Im Querschnittsprofil der spezifischen Wärmekapazität c_p erkennt man im Randbereich einen Anstieg aufgrund des einsetzenden Kristallisationsvorgangs. Nach erfolgtem Phasenwechsel reduziert sich c_p im Bereich der Kanalwand drastisch. Mit fortschreitender Zeit kühlt das Extrudat mit sinken-

den Abkühlgeschwindigkeiten kontinuierlich ab. Während die Feststoffschicht dicker wird, bleiben die Profilkernbereiche unberührt vom Wärmetransfer. Im Zentrum ist die Temperatur gleich der Eintrittstemperatur und $\dot{T}$ ist gleich 0, s. Bild 3.6.

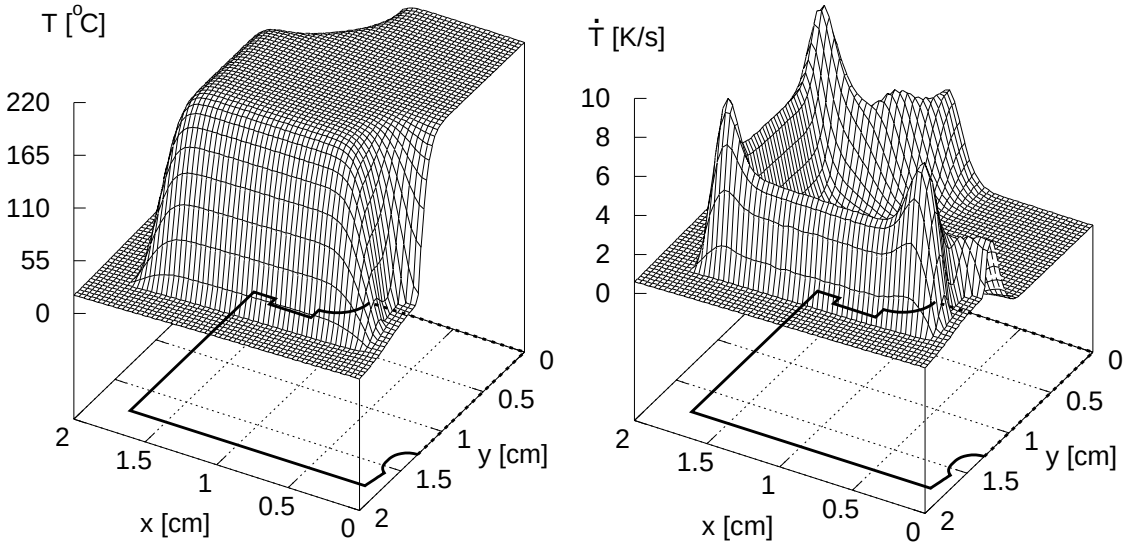


Bild 3.6: Temperatur- und Kühlratenverteilung T, $\dot{T}$ = f(t = 11 s,x,y)

Beobachtet man den Abkühlvorgang über eine längere Zeitspanne, so stellt man fest, dass die Feststoffschichtdicke stetig anwächst, bis schließlich über dem gesamten Extrudatquerschnitt eine Solidifikation eingetreten und eine Temperatur von T(x = y = 0) ≈ 102 °C nach ca. 650 s erreicht ist, wie dies in den Bildern 3.7 und 3.8 gezeigt wird.

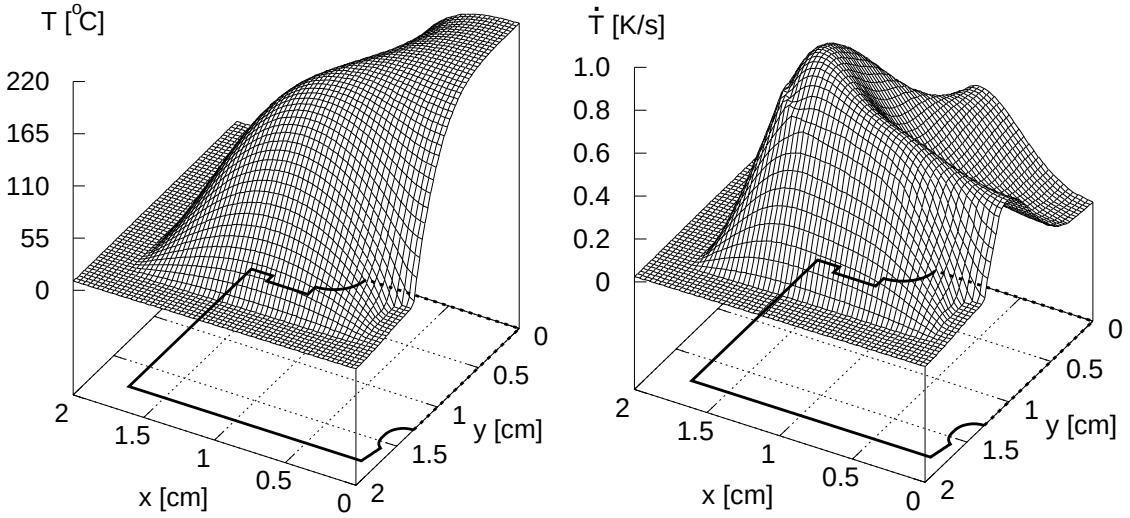


Bild 3.7: Temperatur- und Kühlratenverteilung T, $\dot{T}$ = f(t = 107 s, x, y)

Das Maximum von $\dot{T}$ sinkt weiterhin und wandert hin zum Extrudatmittelpunkt mit ständig sinkendem Niveau.

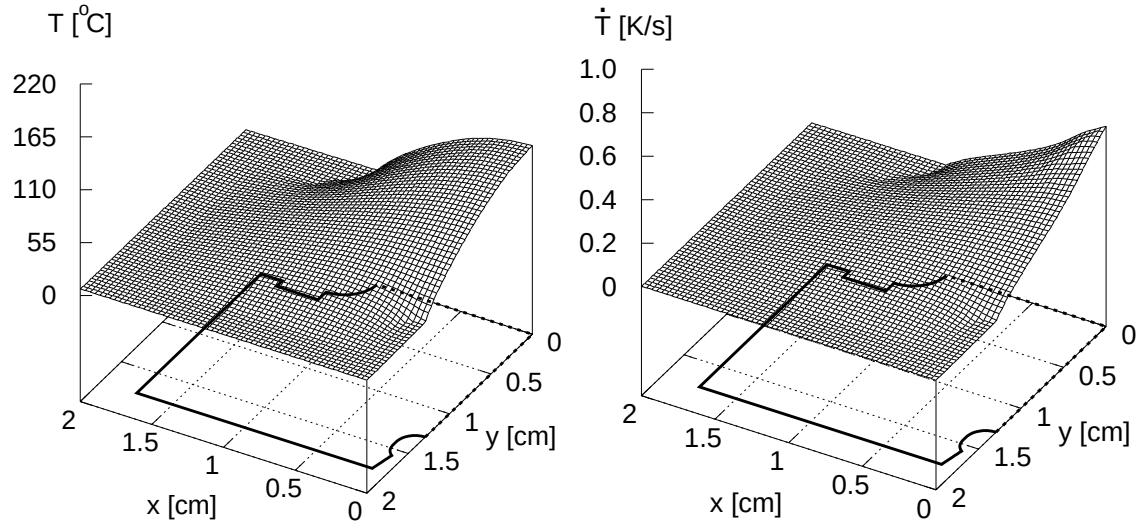
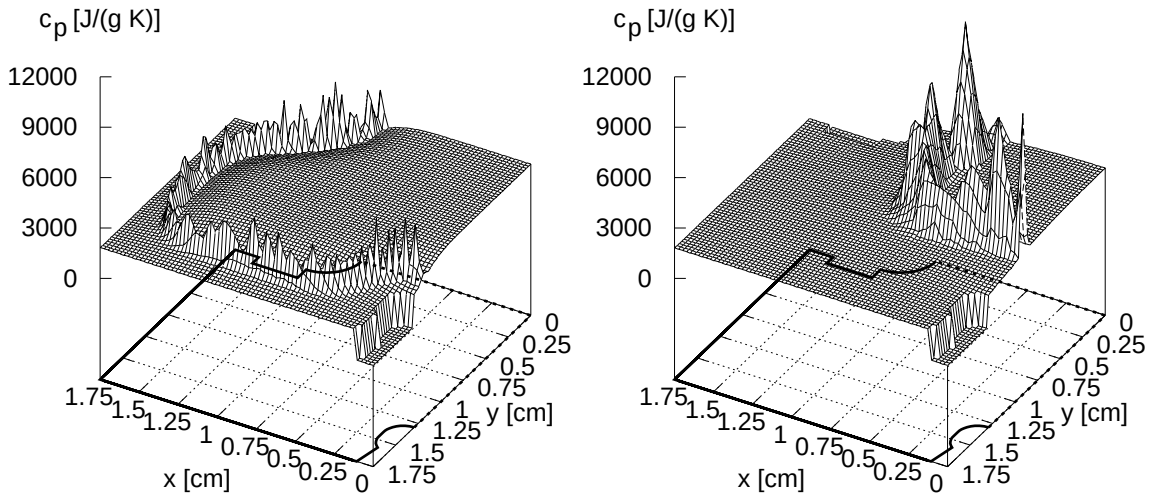


Bild 3.8: Temperatur- und Kühlratenverteilung T, $\dot{T}$ = f(t = 650 s,x,y)

Mit sinkender Abkühlgeschwindigkeit verschiebt sich der Kristallisationspeak zu höheren Temperaturen, was aus DSC-Messungen hervorgeht. Dies ist bei der Approximation der Funktion $c_p(T, \dot{T})$ berücksichtigt worden. Bei der Abkühlung des Extrudats im Kalibrator liegen zu Beginn des Kalibriervorgangs am Rand hohe, und im Kanalzentrum hingegen niedrige Abkühlgeschwindigkeiten vor.



52 s 304 s

Bild 3.9: Wärmekapazität im Extrudat c_p = f(t = 52/304 s,x,y)

Damit stellen sich am Rand weniger stark ausgeprägte Änderungen von c_p als im Innern des Kanals ein, wie man aus Bild 3.9 erkennt. Die Schwankungen resultieren aus der sich ändernden, frei werdenden Wärme, die auf die Temperatur zurückwirkt und insbesondere die Abkühlgeschwindigkeit beeinflusst, die wiederum in die Berechnung der lokalen spezifischen Wärmekapazität eingeht.

Aus dem zeitlichen Verlauf der Temperatur von diagonal im Querschnitt angeordneten Polymerpartikeln, deren Wandabstand variiert, zeigt sich in Bild 3.10 das prinzipielle Temperaturspektrum von Vollprofilen. Während die Randbereiche schnell abkühlen, dauert es deutlich länger, die Wärme aus dem Profilzentrum abzuleiten. Vergleicht man, wie sich die Temperaturen am Rand und im Mittelpunkt über der Zeit entwickeln (T(t)-Graphen für die Positionen x = y = 1.75 cm und x = y = 0 cm) so erkennt man, dass am Rand eine Kristallisation aufgrund zu hoher Abkühlgeschwindigkeit unterbleibt. Das Extrudatzentrum kühlt langsamer ab, so dass es als Folge des einsetzenden Kristallisationsvorgangs zu einem ausgeprägten Haltepunkt kommt, der aus freiwerdender Kristallisationswärme resultiert.

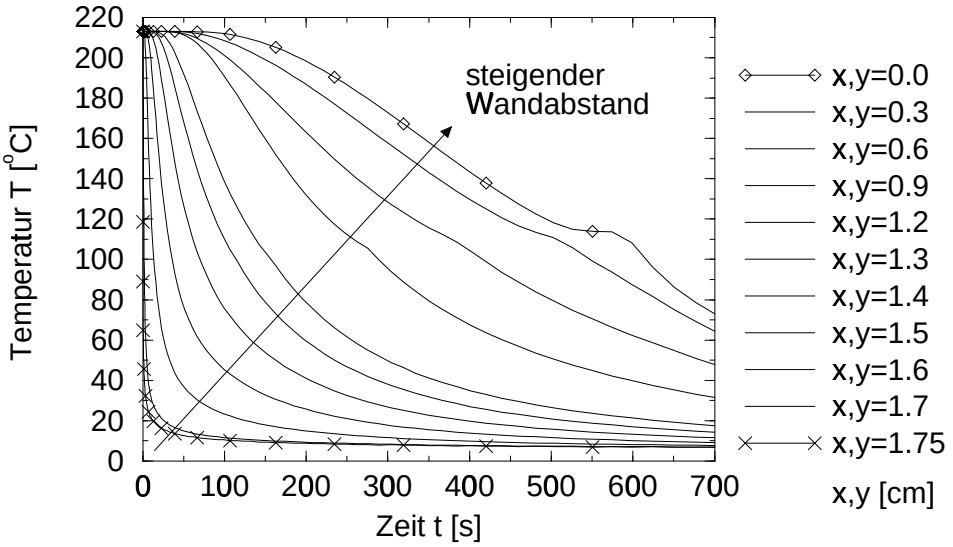


Bild 3.10: Temperaturverteilung T(t,x,y) im Extrudatinneren

Dieser Effekt zeigt sich auch im Abkühlgeschwindigkeitsverlauf in Bild 3.11, in dem die $\dot{T}$-Verläufe über der Zeit für Positionen mit steigendem Wandabstand aufgetragen sind. Im Kanalzentrum bei x = y = 0.0 cm zeigen sich die niedrigsten Abkühlgeschwindigkeiten, was zu einer großen Menge an Kristallisationswärme führt. Die freiwerdende Wärme wirkt sich

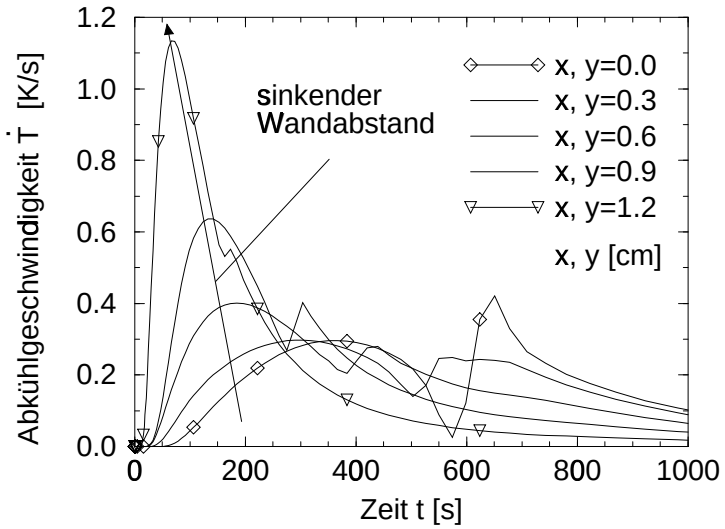


Bild 3.11: Abkühlgeschwindigkeitsverlauf $\dot{T}$(t,x,y) im Extrudatinneren

auf $\dot{T}$ in Form von zunächst sinkenden Werten aus. Nach erfolgter Umwandlung steigt $\dot{T}$ erneut an. Mit sinkendem Wandabstand schwächt sich der Anstieg von $\dot{T}$ ab, weil die steigende Abkühlgeschwindigkeit den Kristallisationsprozess behindert und die abzuführende Menge an Kristallisationswärme sinkt.

3.3 Dreidimensionale Modellierung des stationären Abkühlvorgangs

Betrachtet man das Extrudat und den durchströmten Kalibrator in dreidimensionaler Ausdehnung, so führt der zeitlich eingeschwungene Extrusionsvorgang bzw. Abkühlvorgang auf ein stationäres Wärmeleitungs-Problem. Unabhängig vom betrachteten Zeitpunkt ergibt sich während des Extrudierens an jedem Raumpunkt eine eindeutige Temperatur. Es treten konduktive Wärmeströme in drei Richtungen auf, die induziert sind durch Temperaturdifferenzen zwischen warmem Extrudat und dem Kühlmittel. Der Kalibrator steht mit dem Extrudat in thermischer Wechselwirkung, denn Wärme wird über die begrenzende Kontaktfläche ausgetauscht. Darüber hinaus kommt es an den Oberflächen des Kalibrators zu konvektivem Wärmeaustausch mit der Umgebung und dem Kühlmittel. Je nach Temperatur der Medien nimmt der Kalibrator Wärme auf oder gibt sie ab. Diese auftretenden Effekte lassen sich mittels der Energiegleichung

beschreiben. Wendet man den in Kapitel 2.4 erläuterten Galerkin'schen Ansatz auf die Bilanzgleichung der Form von Gl. 2.19 an, so ergibt sich folgender Integralausdruck für das Extrudat:

$$\int_V N_i \left\{ \rho\, c_p\, v_z \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right] - \frac{\partial}{\partial y}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial y}\right] - \frac{\partial}{\partial z}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial z}\right] \right\} d\tilde{V} \;=\; 0. \tag{3.9}$$

Im Kalibrator gibt es nur konduktive Wärmeleitung, d. h. der konvektive Anteil $\rho\, c_p\, v_z\, \frac{\partial T}{\partial z}$ entfällt bei der Modellierung der Energieströme. In Gl. 3.9 kennzeichnet N_i die Gewichtungsfunktion und V das betrachtete Volumen, über das zu integrieren ist. Im allgemeinen Fall der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit λ lassen sich die konduktiven Terme mit Hilfe der Kettenregel ausdifferenzieren, wie hier am Beispiel der x-Ableitung aufgezeigt ist:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\right] \;=\; \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial \lambda}{\partial x}\frac{\partial T}{\partial x} \;=\; \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial \lambda}{\partial T}\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 . \tag{3.10}$$

Um die Differentialgleichung zu lösen, kann die Methode der Finiten Elemente angewendet werden, wie bereits von Zienkievicz und Parekh [54] für das allgemeine Feldproblem und von Wilson und Nickell [55] für die Analyse der Wärmeleitung gezeigt worden ist. Dazu ist die Ordnung der Differentialoperatoren zu reduzieren, was mittels des Green'schen Satzes [40] erreicht werden kann, der gleichbedeutend ist mit der partiellen Integration. Es ergibt sich das sog. Randintegral, welches über der Oberfläche S des betrachteten Volumens auszuwerten ist. Man erhält eine Form der Integralgleichung, die nur noch Ableitungen erster Ordnung der Temperatur nach den Raumrichtungen enthält, zusätzlich jedoch das Randintegral:

$$\int_V \Big\{ N_i\, \rho\, c_p\, v_z \frac{\partial T}{\partial z} + \lambda \left[\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial T}{\partial z} \right] - N_i \frac{\partial \lambda}{\partial T}\left[\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^2 \right] \Big\}\, d\tilde{V}$$

$$- \int_S N_i \, \lambda \, \frac{\partial T}{\partial \underline{n}} \, d\tilde{S} \; = \; 0. \quad (3.11)$$

Die partielle Ableitung $\frac{\partial T}{\partial \underline{n}}$ kennzeichnet den normal zum Rand auftretenden Temperaturgradienten. Berücksichtigt man den Randwärmestrom aus Gl. 2.25, lässt sich das Randintegral folgendermaßen umformen:

$$\int_S \lambda N_i \frac{\partial T}{\partial \underline{n}} d\tilde{S} \; = \; - \int_S N_i \, \alpha \, (T \; - \; T_{Fluid}) \, d\tilde{S}. \quad (3.12)$$

Nachdem die Diffentialgleichung in gewünschter Form vorliegt, ist das betrachtete Gebiet, also das Volumen V, mittels Finiter Elemente zu diskretisieren und für jedes der Elemente die Gleichung 3.11 zu formulieren. Die Lösung T(x,y,z) für den die nichtlinearen Glieder vernachlässigenden Fall wird dann approximiert mit der Summe über die Teillösungen innerhalb der Elemente:

$$\sum_{Elemente} \Big\{ \int_{V^e} \Big[\, N_i \, \rho \, c_p \, v_z \, \frac{\partial T^e}{\partial z} \; + \; \lambda \Big(\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial T^e}{\partial x} \; + \; \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial T^e}{\partial y}$$
$$+ \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial T^e}{\partial z} \Big) \Big] \, d\tilde{V}^e \; + \; \int_{S^e} N_i \, \alpha \, (T^e \; - \; T_{Fluid}) \, d\tilde{S}^e \Big\} \; \approx \; 0. \quad (3.13)$$

Im Finiten Element werden die kontinuierliche Temperatur T(x,y,z) und die globalen Koordinaten $\underline{x}^T \; = \; (x, y, z)$ diskretisiert durch die Ansätze

$$T(x, y, z) \; = \; N_j(L_1, L_2, L_3, L_4) \, T^j \quad (3.14)$$

und

$$\underline{x} \; = \; N_j(L_1, L_2, L_3, L_4) \, \underline{x}^j, \quad (3.15)$$

wobei N_j die Ansatzfunktionen und T^j bzw. die $\underline{x}^j$ die Temperatur bzw. globalen Koordinatenwerte am Knoten i im betrachteten Element kennzeichnen. Die Koordinaten (L_1, L_2, L_3, L_4) sind die lokalen Koordinaten.

Während (x, y, z) Raumkoordinaten beschreiben, hier kartesische Koordinaten, werden (L_1, L_2, L_3, L_4) als Volumenkoordinaten bezeichnet, die speziell für das Tetraeder benötigt werden. Das hier verwendete, krummlinige und isoparametrische Tetraederelement, das bereits in [56-58] vorgestellt worden ist, hat die in Bild 3.12 dargestellte Form. Den Knoten werden die in der Skizze angegebenen lokalen Knotennummern zugeordnet.

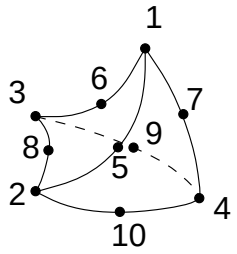


Bild 3.12: Krummliniges, isoparametrisches und parabolisches Tetraederelement mit Knotennummerierung

3.3.1 Volumenkoordinaten und Formfunktionen

Geometrisch lassen sich die Volumenkoordinaten als Verhältnis eines Teilvolumens zum gesamten Tetraedervolumen deuten. Dabei ist das Teilvolumen durch einen beliebigen Punkt innerhalb des Elements und den Knotenpunkten der entsprechenden Elementoberfläche bestimmt.

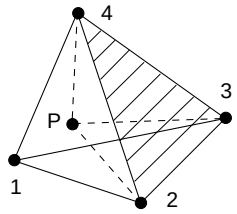


Bild 3.13: Im Tetraeder (1;2;3;4) aufgespanntes Teilvolumen (P;2;3;4) zur geometrischen Deutung der Volumenkoordinaten

Die mit der Oberfläche 2,3,4 zusammenfallende Koordinate $L_1 = 0$, die dem Knoten 1 gegenüber liegt, ergibt sich aus dem Quotient der zugehörigen Volumina wie folgt zu:

$$L_1 = \frac{V_{Tetraeder,\ P,2,3,4}}{V_{Tetraeder,\ 1,2,3,4}}. \tag{3.16}$$

Den Volumenkoordinaten können Richtungen zugewiesen werden, die durch Ebenen konstanter Koordinatenwerte gekennzeichet sind, was in Bild 3.14 verdeutlicht wird.

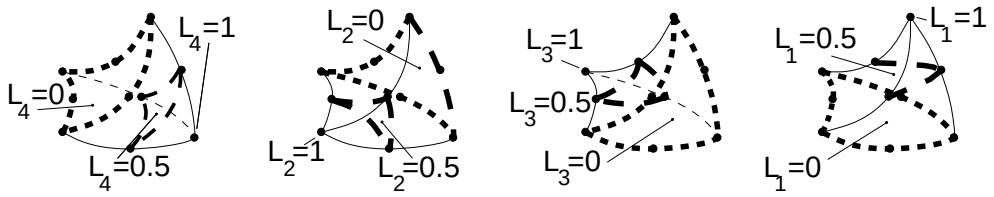


Bild 3.14: Richtungen der Volumenkoordinaten

Offensichtlich sind zur Charakterisierung eines beliebigen Punkts im Tetraeder lediglich drei der vier Volumenkoordinaten erforderlich. Zur Integration über das Tetraederelement und der Assemblierung der Jacobi-Matrix werden die Volumenkoordinaten durch natürliche Koordinaten $\xi,\ \eta,\ \zeta$ beschrieben. Formal gilt entsprechend [47]:

$$\begin{aligned} \xi &= L_1 \\ \eta &= L_2 \\ \zeta &= L_3 \\ 1 - \xi - \eta - \zeta &= L_4. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Daraus folgt für die Ableitung nach den natürlichen Koordinaten $\frac{\partial}{\partial\xi}, \frac{\partial}{\partial\eta}, \frac{\partial}{\partial\zeta}$ innerhalb des Tetraederelements:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial\xi} \\ \frac{\partial}{\partial\eta} \\ \frac{\partial}{\partial\zeta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial L_1}\frac{\partial L_1}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial L_2}\frac{\partial L_2}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial L_3}\frac{\partial L_3}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial L_4}\frac{\partial L_4}{\partial\xi} \\ \frac{\partial}{\partial L_1}\frac{\partial L_1}{\partial\eta} + \frac{\partial}{\partial L_2}\frac{\partial L_2}{\partial\eta} + \frac{\partial}{\partial L_3}\frac{\partial L_3}{\partial\eta} + \frac{\partial}{\partial L_4}\frac{\partial L_4}{\partial\eta} \\ \frac{\partial}{\partial L_1}\frac{\partial L_1}{\partial\zeta} + \frac{\partial}{\partial L_2}\frac{\partial L_2}{\partial\zeta} + \frac{\partial}{\partial L_3}\frac{\partial L_3}{\partial\zeta} + \frac{\partial}{\partial L_4}\frac{\partial L_4}{\partial\zeta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial L_1} \\ \frac{\partial}{\partial L_2} \\ \frac{\partial}{\partial L_3} \end{bmatrix}. \tag{3.18}$$

Diese Ableitungen dienen dazu, die Formfunktionsableitungen aufzustellen, welche explizit im Gebietsintegral 3.13 und in der Jakobi-Matrix Gl. 2.32 auftreten. Allerdings ergeben sich die partiellen Differentiale $\frac{\partial}{\partial L_4}$ identisch 0, wenn die Beziehung $L_4 = 1 - L_1 - L_2 - L_3$ eingesetzt wird, um L_4 zu eliminieren.

Die verwendeten Formfunktionen N_i für das dreidimensionale 10-Knoten Tetraederelement bzw. den parabolischen Ansatz findet man u. a. bei Zienkiewicz [47]. Sie lauten:

$$\begin{array}{lll} N_1 = (2\,L_1 - 1)\,L_1, & N_6 = 4\,L_1\,L_3, \\ N_2 = (2\,L_2 - 1)\,L_2, & N_7 = 4\,L_1\,L_4, \\ N_3 = (2\,L_3 - 1)\,L_3, & N_8 = 4\,L_2\,L_3, \\ N_4 = (2\,L_4 - 1)\,L_4, & N_9 = 4\,L_3\,L_4, \\ N_5 = 4\,L_1\,L_2, & N_{10} = 4\,L_2\,L_4. \end{array} \tag{3.19}$$

Diese Funktionen erfüllen die gewünschte C^0-Stetigkeit über die Elementgrenzen hinweg, d. h. lediglich die Funktion selbst muß stetig sein. Am jeweiligen Knoten erhält man den Wert 1 und an den restlichen den Wert 0.

3.3.2 Transformation des Volumenintegrals

Das Differential dV aus der Integralgleichung 3.13 ist in lokale bzw. in die natürlichen Koordinaten zu transformieren, wie man es bei Ergatoudis [52] für den zweidimensionalen Fall findet. Es gilt:

$$dV = dx\,dy\,dz = det[\underline{\underline{J}}]\,d\xi\,d\eta\,d\zeta. \tag{3.20}$$

Die Determinante der Jakobi-Matrix $det[\underline{\underline{J}}]$ ist unter Anwendung der Transformation vom globalen zum lokalen Koordinatensystem nach Gl. 2.32 und unter Berücksichtigung der Volumenkoordinaten nach Gl. 3.14 zu berechnen.

3.3.3 Transformation des Oberflächenintegrals

Die Oberfläche, über die zu integrieren ist, wird durch die mit dem Rand zusammenfallenden Elementflächen diskretisiert. Somit liegen auf dem Rand „parabolische“ Dreieckselemente mit 6 Knoten, die aus den Tetraederelementen gebildet werden können, was in Bild 3.15 veranschaulicht wird.

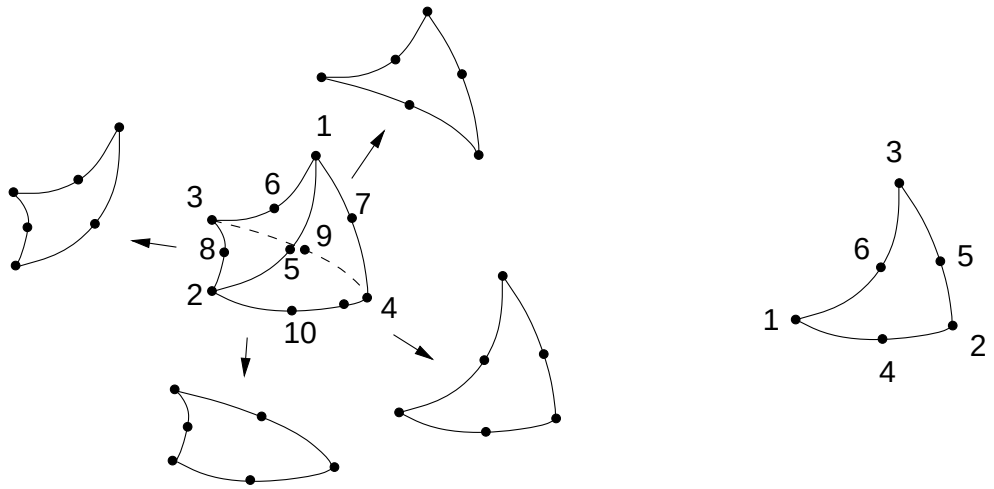


Bild 3.15: Krummlinige und dreieckige Tetraederoberflächen zur Definition der Oberflächenelemente

Das krummlinige Dreiecks-Element wird mit den sog. Flächenkoordinaten $F_1,\ F_2$ und F_3 beschrieben, die als lokale Koordinaten dienen. Die griechischen Buchstaben ξ und η kennzeichnen die natürlichen Koordinaten, die zur eindeutigen Bestimmung eines beliebigen Punkts im Dreieck ausreichen. Zur geometrischen Veranschaulichung der Flächenkoordinaten sei an dieser Stelle auf das Standardwerk von Zienkiewicz [47] verwiesen. Ähnlich wie für die Volumenkoordinaten gelten hier folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned} \xi &= F_1 \\ \eta &= F_2 \\ 1 - \xi - \eta &= F_3. \end{aligned} \tag{3.21}$$

Die Formfunktionen zur Approximation des Unbekanntenverlaufs innerhalb des Dreiecks-Elements stellen eine reduzierte Auswahl von Funktionen des Tetraeders dar. Dies ist leicht verständlich, da die Koordinaten in gleicher Weise definiert sind. Während die lokale Volumenkoordinate im Tertraeder parallel zur Fläche verläuft, ist die Flächenkoordinate im Dreieck kantenparallel gerichtet. Unterschiedlich für Eckknoten und Seitenmittenknoten werden die folgenden Formfunktionen verwendet:

$$\begin{aligned} N_1 &= (2\,F_1 - 1)\,F_1, \quad N_4 = 4\,F_1\,F_2, \\ N_2 &= (2\,F_2 - 1)\,F_2, \quad N_5 = 4\,F_2\,F_3, \\ N_3 &= (2\,F_3 - 1)\,F_3, \quad N_6 = 4\,F_1\,F_3. \end{aligned} \tag{3.22}$$

Die Elementoberfläche kann im dreidimensionalen Raum beliebig angeordnet sein. Formal lässt sich nach Ergatoudis [52] das Flächen-Differential d$\tilde{S}$ auf lokale Koordinaten transformieren:

$$d\tilde{S} = det[\underline{\underline{J}}]\; d\xi\; d\eta. \tag{3.23}$$

Die ersten zwei Zeilen der hierin verwendeten Jakobi-Matrix ergeben sich mit den Ableitungen nach den zwei natürlichen Koordinaten ξ und η wie folgt:

$$[\underline{\underline{J}}] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \tag{3.24}$$

Die dritte Zeile wird gebildet mittels des auf dem Element errichteten Normaleneinheitsvektors. Dieser lässt sich formal durch das Kreuzprodukt der zwei Zeilen der Jakobi-Matrix für die ξ und η-Richtungen angeben:

$$\underline{n} = \left[\frac{\partial x}{\partial \xi}\, \frac{\partial y}{\partial \xi}\, \frac{\partial z}{\partial \xi} \right] \times \left[\frac{\partial x}{\partial \eta}\, \frac{\partial y}{\partial \eta}\, \frac{\partial z}{\partial \eta} \right]. \tag{3.25}$$

Wenn man den Normalenvektor normiert und mit dem Faktor 1/2 skaliert, so erhält man die ζ-Ableitung der Jakobi-Matrix (dritte Zeile) gemäß:

$$\frac{1}{2}\,\frac{\underline{n}}{|\underline{n}|} = \frac{1}{2}\,\underline{n}^* = \left[\frac{\partial x}{\partial \zeta}\, \frac{\partial y}{\partial \zeta}\, \frac{\partial z}{\partial \zeta} \right]. \tag{3.26}$$

Eine anschaulichere Vorgehensweise erhält man, wenn man das Differential $d\tilde{S}$ als Flächeninhalt [49] oder Oberflächenelement der gegebenen Fläche [59] beschreibt mittels

$$d\tilde{S} \;=\; \frac{1}{2}\,|\,\underline{a_1} \;\times\; \underline{a_2}\,|\;d\xi\;d\eta \;=\; \frac{1}{2}\,\sqrt{a}\;d\xi\;d\eta. \tag{3.27}$$

In der Gl. 3.27 stehen $\underline{a_i}$ für die Basisvektoren, die tangential zur gekrümmten Fläche verlaufen, und a für die Determinante des Metriktensors. Der Faktor 1/2 ist hinzuzunehmen, weil das Vektorprodukt den Flächeninhalt des durch die Basisvektoren eingegrenzten Parallelogramms beschreibt, an dieser Stelle jedoch eine Dreiecksfläche vorliegt. Die Basisvektoren $\underline{a_i}$ lassen sich mittels eines beliebigen Ortsvektors bestimmen zu

$$\underline{a_i} \;=\; \frac{\partial \underline{r}}{\partial \xi^i}, \tag{3.28}$$

welche formal mittels der Koordinatendefinition aus Gl. 3.15 anzugeben ist:

$$\underline{r}^T \;=\; [\,x\;,\;y\;,\;z\,] \;=\; \left[\,N_i\,x^i\;,\;N_i\,y^i\;,\;N_i\,z^i\,\right]. \tag{3.29}$$

Die Komponenten des Metriktensors $a_{\psi\chi}$ ergeben sich aus dem Produkt der Basisvektoren

$$a_{\psi\chi} \;=\; \underline{a_\chi}\;\underline{a_\psi}, \tag{3.30}$$

und die Determinante des Metriktensors $\underline{\underline{a}}$ erhält man wie folgt:

$$a \;= det\;\underline{\underline{a}} \;=\; \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}. \tag{3.31}$$

3.4 Lineares Gleichungssystem

Nach der Koordinaten-Transformation für das krummlinige Tetraeder und das Dreieck lassen sich die transformierten Differentiale einsetzen in das Volumen- und Oberflächenintegral aus Gl. 3.13. Man erhält somit:

$$\sum_{Elemente} \Big\{ \int_0^1 \int_0^{1-\eta} \int_0^{1-\xi-\eta} \Big[N_i \, \rho \, c_p \, v_z \, [J^{-1}]_{3u} \, \frac{\partial N_j}{\partial \zeta}$$
$$+ \lambda \Big([J^{-1}]_{1s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \xi} [J^{-1}]_{1t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \; + \; [J^{-1}]_{2s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \eta} [J^{-1}]_{2t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \eta}$$
$$+ [J^{-1}]_{3s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} [J^{-1}]_{3t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \zeta} \Big) \Big] \, T^j \, det[\underline{\underline{J}}^e] \, d\xi \, d\eta \, d\zeta$$
$$+ \int_0^1 \int_0^{1-\xi} N_i \, \alpha \, (N_j \, T^j \; - \; T_{Fluid}) \; \frac{1}{2} \sqrt{a^e} \, d\xi^e \, d\eta^e \Big\} \; \approx \; 0. \qquad (3.32)$$
$$mit \; s, t, u \; = \; 1, 2, 3$$

Eine Besonderheit der verwendeten Tetraeder- und Dreieckselemente zeigt sich, wenn über das Volumen bzw. die Fläche integriert wird. Dabei sind auch im Fall des Einheitstetraeders bzw. -dreiecks die Integrationsgrenzen abhängig von den Koordinaten, was bei der Berechnung der Integrale zu berücksichtigen ist. Die Gleichung 3.33 lautet in Matrizenschreibweise:

$$\underline{\underline{K}} \, \underline{T} \; = \; \underline{R}, \qquad (3.33)$$

mit:

$$\underline{\underline{K}} \; = \; \sum_{Elemente} \Big\{ \int_0^1 \int_0^{1-\eta} \int_0^{1-\xi-\eta} \Big[N_i \, \rho \, c_p \, v_z \, [J^{-1}]_{3u} \, \frac{\partial N_j}{\partial \zeta}$$
$$+ \lambda \Big([J^{-1}]_{1s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \xi} [J^{-1}]_{1t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \; + \; [J^{-1}]_{2s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \eta} [J^{-1}]_{2t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \eta}$$
$$+ [J^{-1}]_{3s} \, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} [J^{-1}]_{3t} \, \frac{\partial N_j}{\partial \zeta} \Big) \Big] \, det[\underline{\underline{J}}^e] \, d\xi \, d\eta \, d\zeta$$
$$+ \int_0^1 \int_0^{1-\xi} N_i \, \alpha \, N_j \, \frac{1}{2} \sqrt{a^e} \, d\xi^e \, d\eta^e \Big\}, \qquad (3.34)$$
$$mit \; s, t, u \; = \; 1, 2, 3$$

$$\underline{R} \;=\; \sum_{Elemente} \Big\{ \int_0^1 \int_0^{1-\xi} N_i \; \alpha \; T_{Fluid} \; \frac{1}{2} \sqrt{a^e} \; d\xi^e \; d\eta^e \Big\}. \qquad (3.35)$$

3.5 Randwerte und Kontaktbedingung

Bei der Lösung des zuvor angegebenen Gleichungssystems haben die Starttemperaturen, sowie Rand- und Kontaktbedingungen wesentliche Bedeutung, denn sie bestimmen direkt das Berechnungsergebnis. Unumstritten führen höhere Schmelzetemperaturen beim Abkühlvorgang zu längeren Kühlzeiten oder höheren Extrudattemperaturen, wenn das Polymer aus dem Kalibrator austritt. Innerhalb des mathematischen Modells wird dieser Effekt durch die Anfangs- bzw. Randwerte berücksichtigt. Diese Werte sind zu Beginn der Simulation bekannt und können als Funktion der Koordinaten vorgegeben werden. An den Knoten der Finiten Elemente liegt somit die konstante Randtemperatur oder eine ortsabhängige Randwertverteilung vor. Dabei kann es sich gleichermaßen um Kalibrator- oder Extrudatknoten handeln, denn für beide Teile sind die Anfangstemperaturen vorzugeben. Im Gleichungssystem resultiert die Forderung für den mit dem Randwert beaufschlagten Knoten

$$T(i) \;=\; T_{Randwert}, \qquad (3.36)$$

wobei T(i) die Komponente des Unbekanntenvektors kennzeichnet. Dieser vorgeschriebene Wert kann mittels Modifikation der Gleichungen aufgeprägt werden. Zunächst wird das lineare Gleichungssystem explizit für den zugehörigen Freiheitsgrad formuliert:

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}^a & \underline{K}^d & \underline{\underline{K}}^b \\ \underline{K}^e & K_{ii} & \underline{K}^f \\ \underline{\underline{K}}^c & \underline{K}^g & \underline{\underline{K}}^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{T}^h \\ T_i \\ \underline{T}^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{R}^k \\ R_i \\ \underline{R}^l \end{bmatrix}. \qquad (3.37)$$

Dabei kennzeichen $\underline{\underline{K}}^\alpha$ bzw. $\underline{K}^\beta$ Untermatrizen bzw. Vektoren von $\underline{\underline{\mathrm{K}}}$ und $\underline{T}^\gamma$ bzw. $\underline{R}^\delta$ sind die entsprechenden Teilvektoren. Anschließend werden die Gleichungen entsprechend modifiziert (vgl. [58]):

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{K}}^a & \underline{0} & \underline{\underline{K}}^b \\ \underline{0} & 1 & \underline{0} \\ \underline{\underline{K}}^c & \underline{0} & \underline{\underline{K}}^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{T}^h \\ T_i \\ \underline{T}^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{R}^k - (\underline{\underline{K}}^a + \underline{\underline{K}}^b) T_{Randwert} \\ T_{Randwert} \\ \underline{R}^l - (\underline{\underline{K}}^c + \underline{\underline{K}}^d) T_{Randwert} \end{bmatrix} . \qquad (3.38)$$

Bei der Profilextrusion steht das im Kalibrator abkühlende Polymer in Wechselwirkung mit dem umgebenden Kalibratormaterial, wobei die Wärme über die Kontaktfläche vom Extrudat abgegeben wird und vom Kalibrator aufgenommen wird, wie dies in Bild 3.16 veranschaulicht ist.

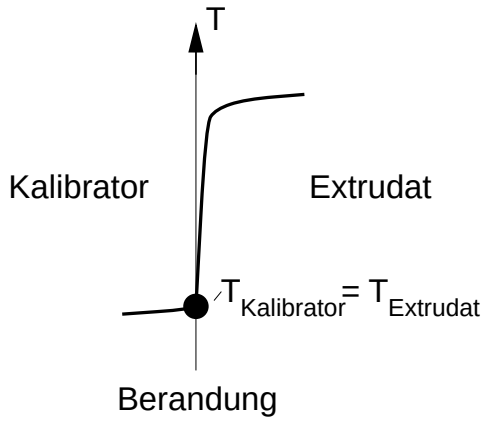


Bild 3.16: Isotherme Randbedingung an der Kalibrator- und Extrudatkontaktfläche

Fordert man hier Isothermie sich berührender Polymer- und Kalibratorpartikel unter der Annahme eines verschwindenden Kontaktwiderstands und formuliert die Gl. 2.25 für beide Teilsysteme, so erhält man die in [14], [18] und [60] angegebenen Beziehungen (3.39) und (3.40):

$$T_{Kalibrator} = T_{Extrudat}, \qquad (3.39)$$

$$\lambda_{Kalibrator} \left[\frac{\partial T}{\partial \underline{n}} \right]_{Kalibrator} = - \quad \lambda_{Extrudat} \left[\frac{\partial T}{\partial \underline{n}} \right]_{Extrudat} . \qquad (3.40)$$

Gl. 3.40 beschreibt das Verhältnis der Temperaturgradienten an der Wand, die quantitativ mit dem Quotienten der Wärmeleitfähigkeiten $\lambda_{Kalibrator}/\lambda_{Extrudat}$ zusammen hängen. Je nach Prozessbedingungen, Materialverhalten und Oberflächenbeschaffenheit kommt es zu Wärmeüber-

gangswiderständen, die durch den zunächst unbekannten Wärmeübergangskoeffizienten berücksichtigt werden. In [14, 15] findet man folgende Bedingung

$$\lambda_K \frac{\partial T_K}{\partial \underline{n}} \; = \; - \; \lambda_E \frac{\partial T_E}{\partial \underline{n}} \; = \; \alpha \, (T_E \; - \; T_K), \tag{3.41}$$

die man alternativ als Interface-Bedingung verwendet, wenn der Übergangswiderstand quantifiziert werden kann. Aufgrund dieser Beziehung ist allerdings an der Kontaktfläche mit unstetigen Temperaturverläufen zu rechnen. In der vorliegenden Arbeit wird durchweg Isothermie an der Kontaktfläche zugrundegelegt.

Die Isothermiebedingung lässt sich mittels der Doppelknoten-Technik programmtechnisch realisieren. Diese findet man zuerst angewendet im Bereich der Polymerströmungen in [61], wo Mehrphasenströmungen beschrieben werden. In [14] findet man die Doppel-Knoten, um Kontaktwärmeströme beim Abkühlen von Profilen zu modellieren. Die dort für den zweidimensionalen Fall genutzte Methode lässt sich auf den allgemeineren Fall von drei Raumdimensionen übertragen. Man erhält für die am Wärmetransport beteiligten Kalibratoren und Schmelzen Netze, die an der Kontaktfläche je einen Knoten für beide Stoffe enthalten, womit jedes Teilsystem über einen Freiheitsgrad an der Kanaloberfläche verfügt.

Realisiert wird die Isothermie der Freiheitsgrade an den Doppelknoten mittels Modifikationen des Gleichungssystems. Zunächst gilt: $T_{Kalibrator} = T(iglc) = T_{Extrudat} = T(igle)$, wobei igle und iglc die Speicherpositionen der Knotentemperatur des Extrudats bzw. des Kalibrators im globalen Unbekanntenvektor $\underline{T}$ beschreiben. Die Einträge in die Spalte und die Zeile der Systemmatrix $\underline{\underline{K}}$ werden dem iglc-ten Freiheitsgrad zugeordnet:

$$\begin{aligned} K(i, iglc) &= K(i, iglc) + K(i, igle), \\ K(iglc, i) &= K(iglc, i) + K(igle, i). \end{aligned} \tag{3.42}$$

Analog dazu modifiziert man den Vektor der rechten Seite $\underline{R}$

$$R(iglc) = R(iglc) + R(igle). \tag{3.43}$$

Die Bedingung $T_{Kalibrator} = T_{Extrudat}$ lässt sich dann durch die modifizierte Zeile:

$$1\,T^E \;-\; 1\,T^K \;=\; 0 \tag{3.44}$$

erreichen, was die Matrixeinträge

$$\begin{aligned} K(igle, iglc) &= -1, \\ K(igle, igle) &= +1 \end{aligned} \tag{3.45}$$

bzw. die Vektorkomponente

$$R(igle) = 0 \tag{3.46}$$

erfordert.

3.6 Numerische Integration

Um die Elementmatrizen 3.34 und 3.35 zu berechnen, sind die Volumen- und Flächenintegrale zu berechnen, wozu GAUSS-Quadraturformeln verwendet werden können. Grundlegende Erläuterungen hierzu findet man beispielsweise in [62, 63]. Prinzipiell wird das Integral näherungsweise bestimmt durch die gewichtete Summe der Funktionswerte des Integranden an bestimmten GAUSS-Punkten. Für den vorliegenden Fall der Mehrfachintegrale mit variablen Integrationsgrenzen geben Abramowitz/Stegun [64], Jinyun [65], Stroud [66], Hammer [67] und Zienkiewicz [47] Integrationsformeln bzw. GAUSS-Punkte an.

In der vorliegenden Arbeit wurden GAUSS-Punkte von Zienkiewicz verwendet, wobei der Satz von 4 Stützstellen, geeignet für Polynome zweiten Grades, zu exakten Lösungen führt. Es sei hier darauf hingewiesen, dass in Gl. 3.47 das Integral durch das Elementvolumen zu dividieren ist, um korrekte Lösungen zu erhalten.

$$\frac{1}{V}\int_{\Omega} g(\xi,\eta,\zeta)\, d\xi d\eta d\zeta = \sum_{i=1}^{n} W_i g(\bar{\xi}_i,\bar{\eta}_i,\bar{\zeta}_i). \tag{3.47}$$

Dies entspricht dem Vorgehen von Jinyun, der die Summanden mit dem Volumen multipliziert. Das Volumen des Einheitstetraeders ergibt sich zu 1/6. Obige GAUSS Quadraturformel kann mit unterschiedlich vielen Stützstellen verwendet werden. Beispielsweise können 29 Stützstellen verwendet werden, die bis zum Grad 6 exakte Ergebnisse liefern. Um der Rechenaufwand klein zu halten, werden möglichst wenig Stützstellen verwendet.

Im zweidimensionalen Fall, also der Integration über die krummlinig umrandete Dreiecksfläche, geht man analog vor. Ergatoudis [52] gibt zum isoparametrischen Dreieckselement die Integrationsformel

$$\int_{\Gamma} g(\xi,\eta)\, d\xi d\eta = \sum_{i=1}^{n} W_i\; g(\bar{\xi}_i,\bar{\eta}_i) \tag{3.48}$$

an und zugehörig dazu die GAUSS-Punkte. Die Integration mit drei und sieben Stützstellen führt zu exakten Ergebnissen. Demgegenüber setzt Cowper [68] die Integrationsformel folgendermaßen an:

$$\int_{\Gamma} g(\xi,\eta)\, d\xi d\eta \;=\; A\; \sum_{i=1}^{n} W'_k\; g(\bar{\xi}'_k,\bar{\eta}'_k). \tag{3.49}$$

Hier ist die Summe der an den Stütztellen gewichteten Funktionswerte mit der Fläche zu multiplizieren. Mit dem Satz von sechs Stützstellen erhält man ebenso exakte Lösungen für das vorliegende Problem.

3.7 Berechnete dreidimensionale Temperaturspektren im gekoppelten System

Berücksichtigt man den räumlich dreidimensionalen und konduktiven Wärmetransport, so zeigen sich unterschiedliche Einflüsse auf die Extrudatbereiche und den Kalibrator. Die Wärmeleitfähigkeiten λ_E und λ_K

sind ausschlaggebend, wie stark sich die Konduktion auswirkt. Bekanntermaßen liegt die Wärmeleitfähigkeit von Polymeren um Größenordnungen niedriger als die der Metalle, woraus zu schließen ist, dass die Konduktion im Metall größer sein wird als im Kunststoff.

Die axiale Komponente des konduktiven Wärmestroms, die mit der Extrusionsgeschwindigkeit gleichgerichtet ist, steht im Vordergrund des Interesses. Diese wird bei der räumlich zweidimensionalen Modellierung nicht berücksichtigt. Es soll gezeigt werden, dass sich im besonderen Anwendungsfall der Kühldüsenextrusion dieser Anteil des gesamten Energietransports auf die Berechnungsergebnisse auswirkt.

3.7.1 Einfluss des Kontaktwärmestroms zwischen dem Ausformwerkzeug und dem Kalibrator

Als Berechnungsbeispiel für den Fall räumlich dreidimensionaler Temperaturverteilungen dient der Kalibriervorgang, der bereits in Kapitel 3.2 bei der zweidimensionalen Modellierung untersucht worden ist. Die Materialparameter des verwendeten TPE sind für dieses Beispiel vereinfachend als konstant angenommen und in Tabelle 3.2 zusammengestellt. Die Extrusionsgeschwindigkeit v_z sei konstant über dem Querschnitt und betrage 1.0 cm/min.

Wärmekapazität	$c_{p,\ Ext.}$	2.0	J/(g K)
Dichte	$\rho_{Ext.}$	0.9	kg/dm^3
Wärmeleitfähigkeit	$\lambda_{Ext.}$	0.18	W/(m K)
Wärmeleitfähigkeit	λ_{Stahl}	23.0	W/(m K)

Tabelle 3.2: Stoffparameter des Extrudats und Kalibrators

Die dreidimensionale Geometrie des gekoppelten Kalibrators und Extrudats ist in Bild 3.17 dargestellt. Um die Wärmeströme am Eintritt in den Kalibrator zu simulieren, wird ein Abschnitt der Länge 5 mm herausgegriffen.

Zwischen dem Kalibrator und der Umgebung bzw. dem Kühlmittel kommt es zu konvektivem Wärmeaustausch, was mittels der jeweiligen Fluidtemperatur und dem zugehörigen Wärmeübergangskoeffizienten aus Tabelle 3.3 beschrieben wird.

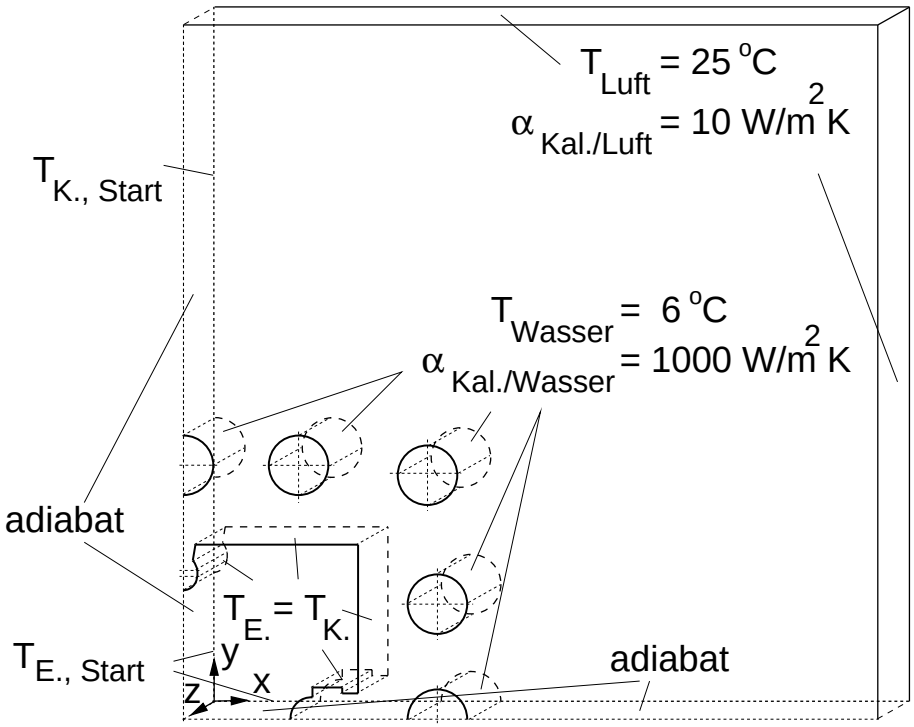


Bild 3.17: Berechnungsmodell mit Geometrie und Randbedingungen

Wärmeübergangskoeffizienten	
$\alpha_{Luft/Stahl}$	10 W/(m^{2}K)
$\alpha_{Wasser/Stahl}$	1000 W/(m^{2}K)

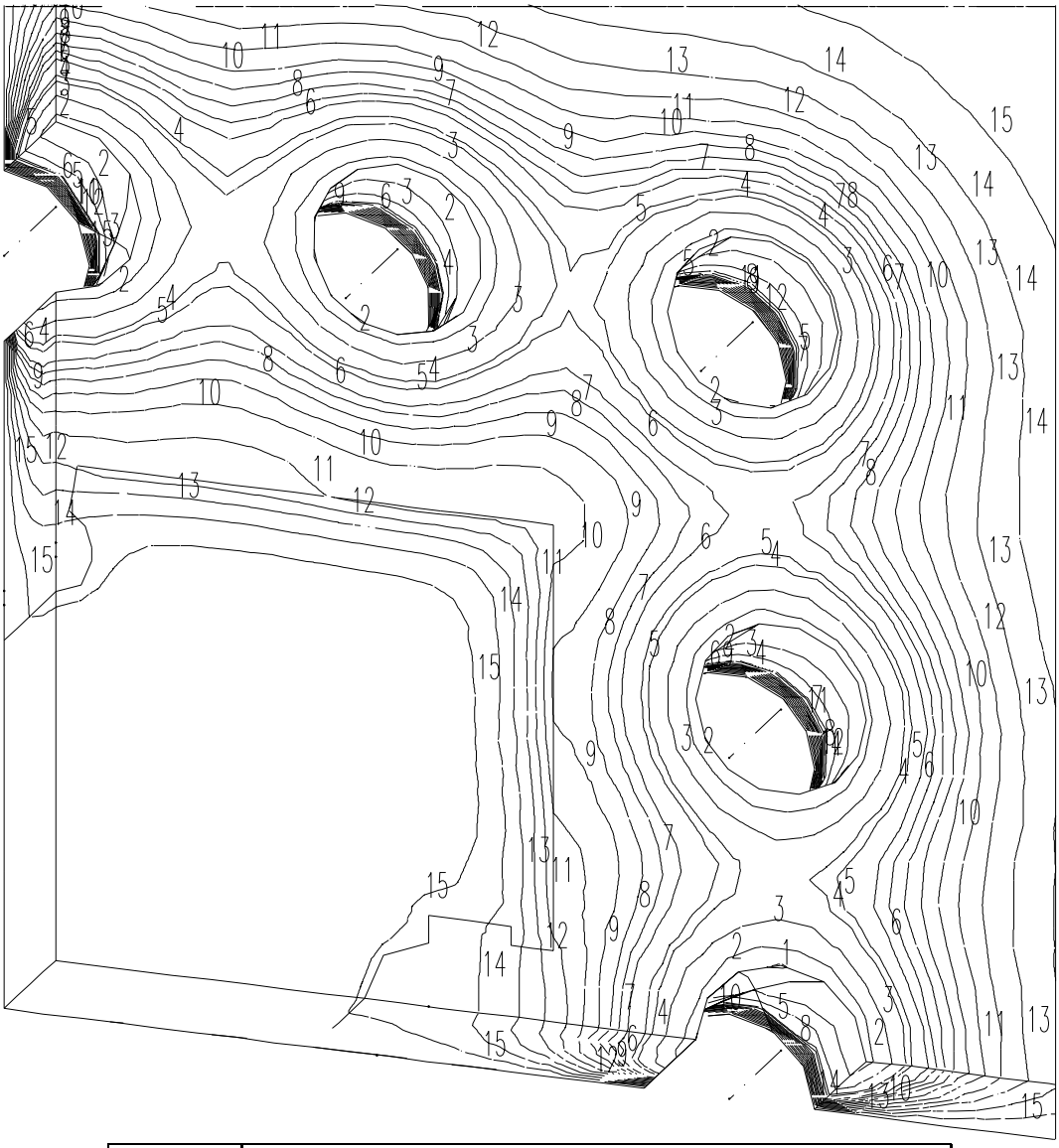
Temperatur	
Extrudatanfangstemperatur	213°C
Kühlmitteltemperatur	6°C
Umgebungstemperatur	25°C

Tabelle 3.3: Randtemperaturen und Wärmeübergangskoeffizienten

Um den Berechnungsaufwand klein zu halten, wird die symmetrische Form des Extrudats und Kalibrators ausgenutzt. Es kann von einem Viertel des Gesamtsystems, das mit 3283 Elementen vernetzt wird, auf die restlichen Bereiche geschlossen werden. Die Symmetrie-Flächen werden als adiabat angenommen. An den Kontakt-Flächen zwischen dem Extrudat und dem Kalibrator gilt die Isothermiebedingung. Über dem Eintrittsquerschnitt wird eine konstante Extrudatanfangstemperatur angenommen.

Typisch für die Kühldüsenextrusion ist der direkte Kontakt zwischen dem Ausformwerkzeug und dem Kalibrator. Im Betrieb stellt sich aufgrund dessen ein Kontaktwärmestrom vom beheizten Ausformwerkzeug zum gekühlten Kalibrator ein, woduch der thermische Zustand des Kalibrators und des Werkzeugs beeinflusst wird. Dieser in den Kalibrator gerichtete Wärmestrom kann beschrieben werden mittels zunächst unbekannten Randtemperaturen, welche als Anfangstemperaturverteilung in die Berechnung mit einbezogen werden. Am Beispiel des nicht isolierten Kalibrators lässt sich die Auswirkung des Kontaktwärmestroms verdeutlichen. Dem Simulationsmodell wird als Anfangstemperatur des Kalibrators, die am Eintrittsquerschnitt vorliegt, der Wert der Schmelzetemperatur von 213 °C zugeordnet.

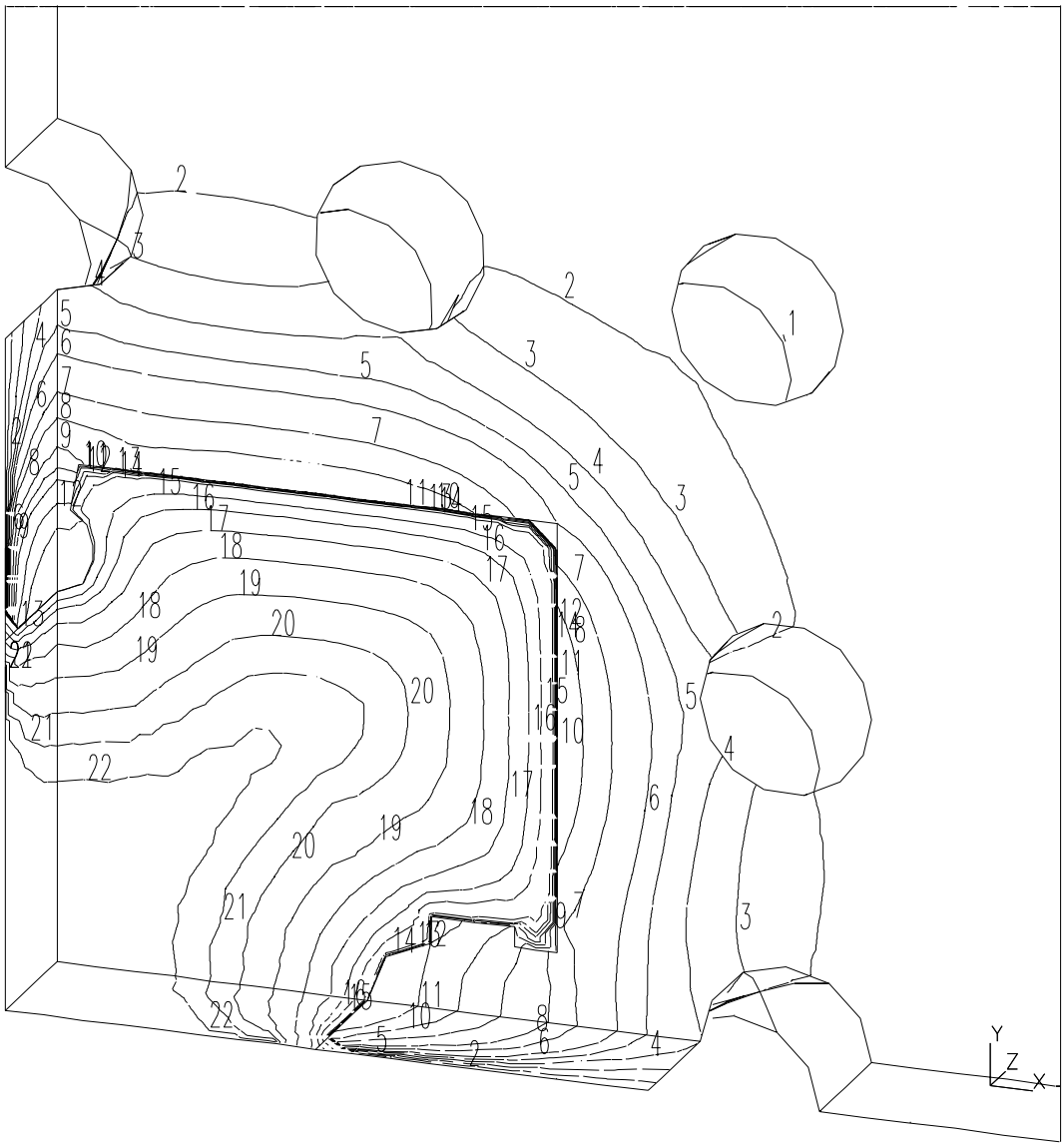
Man erkennt aus den in Bild 3.18 in drei Raumrichtungen aufgetragenen Berechnungsergebnissen, wie zunächst das Kühlmittel den Regionen der Kühlkanäle Wärme entzieht. Die Isothermen bilden nahezu konzentrische Kreise um die Kühlbohrungen herum. Am Ende der betrachteten Kühlstrecke zeigt sich in diesem Fall eine Temperaturdifferenz von 20 K über den gesamten Querschnitt, wobei das Polymer mit eingeschlossen ist. Das Extrudat selbst ist im Randbereich mit der niedrigsten Temperatur von 206 °C nur unwesentlich abgekühlt. Dabei fällt auf, dass die vertikal angeordnete Profilflanke schneller abkühlt als die Kunststoffoberseite. Dies ist eine Folge der größeren Nutenleiste. Offensichtlich kann durch die größere Oberfläche ein größerer, lokaler Wärmestrom aus dem Kunststoff abtransportiert werden, was mit niedrigeren lokalen Temperaturen im angrenzenden Kalibrator einhergeht, da die Wärme vom Stahl besser an das Kühlmittel abgeleitet werden kann, als sie über die Kontaktfläche zwischen Kunststoff und Stahl transferiert wird. Der Abstand der Isothermen an der Kontaktfläche ist im Polymer kleiner als im Stahl, was aus der kleineren Wärmeleitfähigkeit des Polymers resultiert. Man erkennt im Polymer verhältnismäßig hohe Temperaturgradienten, die auf einen Staueffekt hindeuten. Betrachtet man die Isotherme 15 mit 212 °C an der Kontaktfläche zwischen dem Kalibrator und dem Polymer im Bereich der Nutleisten, so wird deutlich, wie sich im Kunststoff eine Tempraturgrenzschicht einstellt. Demgegenüber zeigt sich im Stahl eine relativ weit entfernte Nachbarisotherme 14, was auf kleine Temperaturgradienten hinweist. Darüberhinaus wird deutlich, dass die wandnahen Extrudatschichten verhältnismäßig schnell abkühlen, wohingegen die innen angrenzenden Polymerbereiche lediglich geringe Wärmemengen nach außen transferieren.



i	1	2	3	4	5	6	7	8
T [°C]	189	193	197	200	201	203	204	205
i	9	10	11	12	13	14	15	16
T [°C]	206	207	208	209	210	211	212	213

Bild 3.18: Temperatur T(x,y,z) bei nicht isolierter, isothermer Kontaktfläche

Untersucht man den ideal isolierten Kalibrator mit adiabater Kontaktfläche zur Heizzone (d. h. es wird keine Wärme zwischen dem Ausformwerkzeug und dem Kalibrator ausgetauscht) und verwendet als Anfangswert die Kühlmitteltemperatur, so erhält man die in Bild 3.19 dargestellte Temperaturverteilung.



i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
T [°C]	5.85	6	6.25	6.5	6.75	7	7.5	8	9	10	11
i	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
T [°C]	13	15	20	50	80	120	160	190	205	210	212

Bild 3.19: Temperatur T(x,y,z) bei ideal isolierter, adiabater Kontaktfläche

Die Kalibratortemperaturen im Eintrittsbereich liegen in der Größenordnung der Kühlmitteltemperatur, d. h. an der Kontaktfläche zum Extrudat besteht ein großer Temperaturgradient, der zur Wärmeabfuhr aus dem Polymer führt. Die niedrigsten Extrudattemperaturen ergeben sich im Randbereich, insbesondere an den Ecken. Es stellt sich eine Temperaturdifferenz von ca. 50 K innerhalb der Randschicht ein. Offensichtlich behin-

dert die Wärmeleitfähigkeit des Kunststoffs ein schnelleres Abkühlen. Betrachtet man gegensätzlich zu diesen zwei Grenzfällen der nicht isolierten und ideal isolierten Kontaktfläche zwischen dem Kalibrator und dem Extrusionswerkzeug den realen Anwendungsfall, so sind die tatsächlich auftretenden Randtemperaturen vorzugeben. Der Flächeninhalt an der Kontaktstelle zum Ausformwerkzeug wird minimiert und die Temperatur der verbleibenden Oberfläche gemessen, was mit der im Kapitel 6 vorgestellten anlagentechnischen Entwicklung möglich ist. Die Experimente sind in Kapitel 6.3.2 beschrieben. Um die Meßwerte als Eingangsgrößen nutzen zu können, werden sie abschnittsweise, bi-linear approximiert, was in Bild 3.20 gezeigt wird.

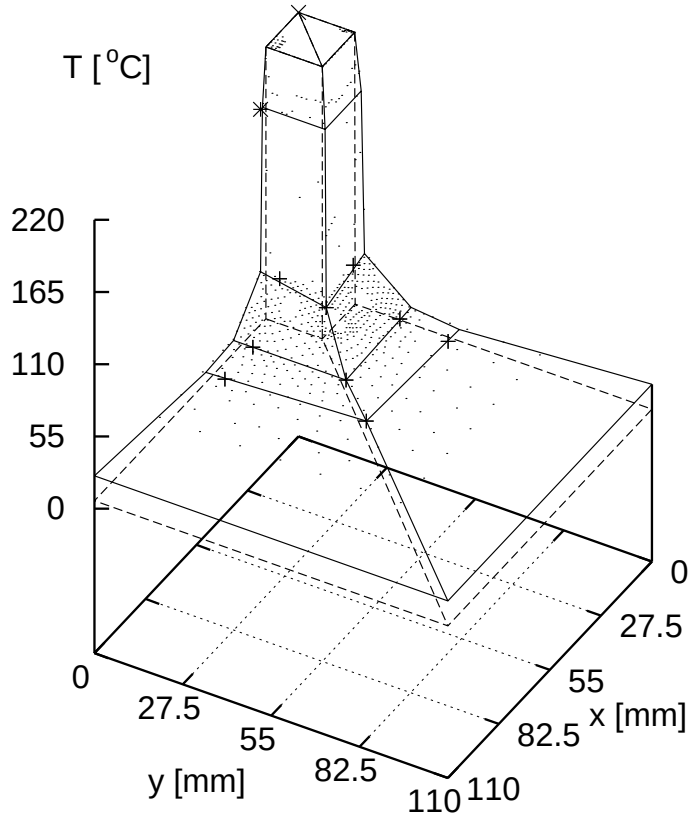
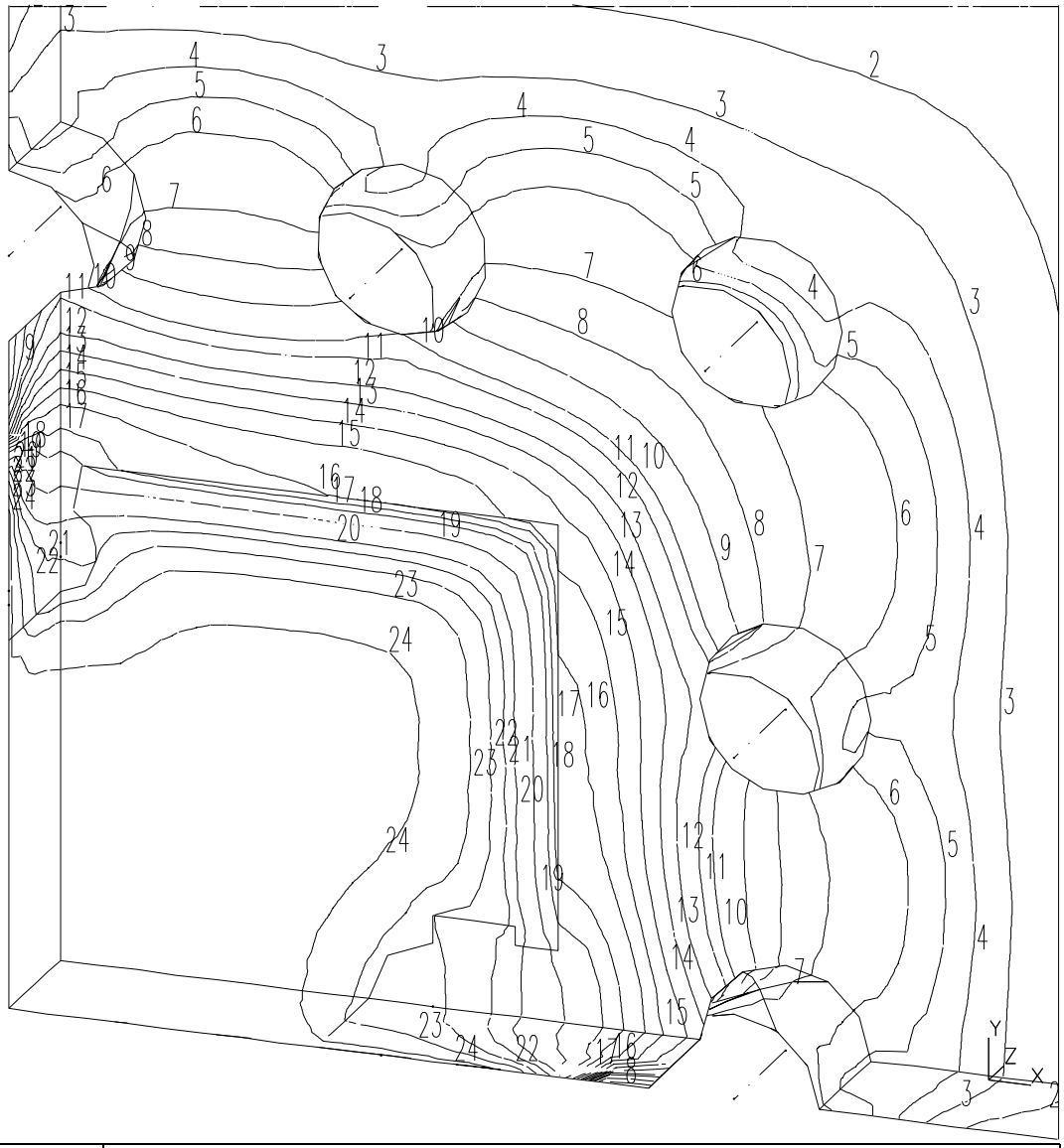


Bild 3.20: Meßwerte(+,×,∗), approximierte Temperatur an den Stützstellen des FE-Netzes (·), approximierter Verlauf (—), Schmelze- und Kühlmitteltemperatur (- - -)

Führt man die Simulation unter den gleichen Bedingungen durch, wie sie in den vorigen Fällen formuliert worden sind, so erhält man die in Bild 3.21 dargestellte Isothermenverteilung im gekoppelten System.



i	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
T [°C]	23	25	27	30	40	50	60	70	75	83	89
i	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
T [°C]	96	103	110	120	130	150	170	180	190	200	210

Bild 3.21: Temperatur T(x,y,z) bei Vorgabe gemessener Randwerte

Die Auswirkung der vorgegebenen Eintrittstemperatur des Kalibrators auf die Temperaturverteilung des Extrudats lässt sich anschaulich anhand des Verlaufs der 210 °C-Isothermen diskutieren. Vergleicht man diese Isolinie in den drei gezeigten Ergebnisdarstellungen (Bilder 3.18, 3.19, 3.21), so kommt die 210 °C-Isotherme zwischen denen der beiden Grenzfälle zu liegen. D. h. bereits die inneren Extrudatschichten kühlen in höherem Ma-

ße ab als beim nicht isolierten Fall. Darüber hinaus zeigt sich die niedrigste Extrudattemperatur von etwa 103 $°C$ im Bereich der Profilecke. Aber auch die Profilflanken und die Nutbereiche sind bereits deutlich abgekühlt. Der Vergleich mit dem ideal isolierten Fall verdeutlicht, dass die Kühlleistung überschätzt wird, wenn man die Interaktion zwischen dem Werkzeug und dem Kalibrator vernachlässigt. Die Randbereiche wie auch das Profilzentrum zeigen eine zu schnelle Abkühlung. Der Kontaktwärmestrom verursacht auch im Fall der in anlagentechnischer Sicht minimierten Kontaktfläche Auswirkungen auf die Extrudattemperatur, die zu berücksichtigen sind.

3.7.2 Einfluss des Diskretisierungsgrads auf die dreidimensionalen Temperaturspektren im Extrudat

Bekanntermaßen bestimmt der Diskretisierungsgrad die Qualität der mittels der Methode der Finiten Elemente berechneten Ergebnisse. Die Anzahl der Elemente bzw. der Stützstellen entscheiden, ob hinreichende Genauigkeit erzielt wird. Je komplexer das erwartete Profil der zu berechnenden Unbekannten ist, desto feiner müssen die in den Elementen durch die Ansatzfunktionen, hier parabolisch, beschriebenen Approximationen aufgeteilt werden. Darüber hinaus beeinflussen auch die Geometrie und die Randbedingungen die Ergebnisse. Anhand der mit steigender Elementanzahl berechneten Temperaturfelder lässt sich die Abhängigkeit der Resultate von der Netzfeinheit veranschaulichen.

Als Berechnungsbeispiel wird ein Extrudatstrang gewählt, der ins Wasserbad austritt und durch die an das umgebende Kühlwasser abgeführte Wärme abkühlt. Im Extrudat tritt konvektive und konduktive Wärmeleitung auf. Am Rand des Extrudats wird die Wärme durch einen konvektiven Wämestrom an das Kühlwasser abgegeben. Die Geometrie des verwendeten Simulations-Modells ist in Bild 3.22 dargestellt.

Die Stoffwerte, die bei diesem Fall angenommen werden, entsprechen denen des vorigen Anwendungsbeispiels und können der Tabelle 3.2 entnommen werden. Die Randbedingungen sind durch die in Tabelle 3.4 dargestellten Temperaturen und den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen dem Wasser und dem Extrudat bestimmt.

Betrachtet man die in Bild 3.23 aufgetragenen dreidimensionalen Temperaturfelder, so zeigen sich mit steigender Elementanzahl geglättete Re-

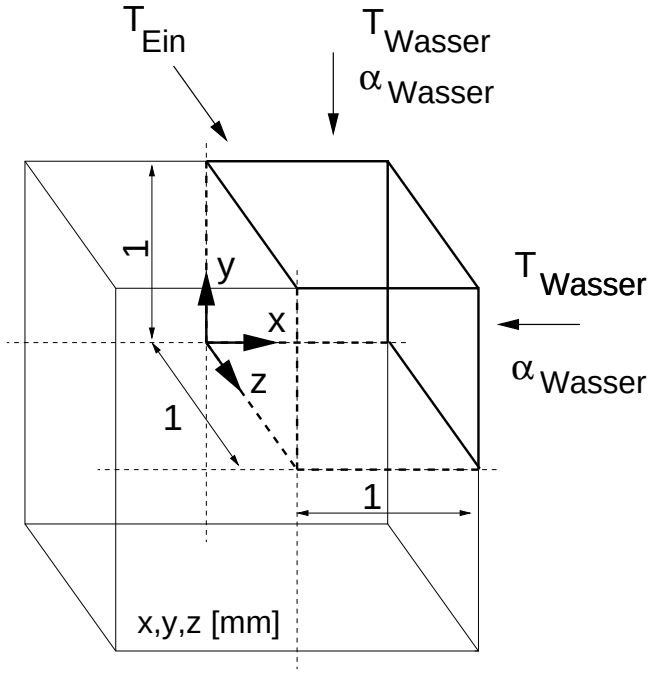
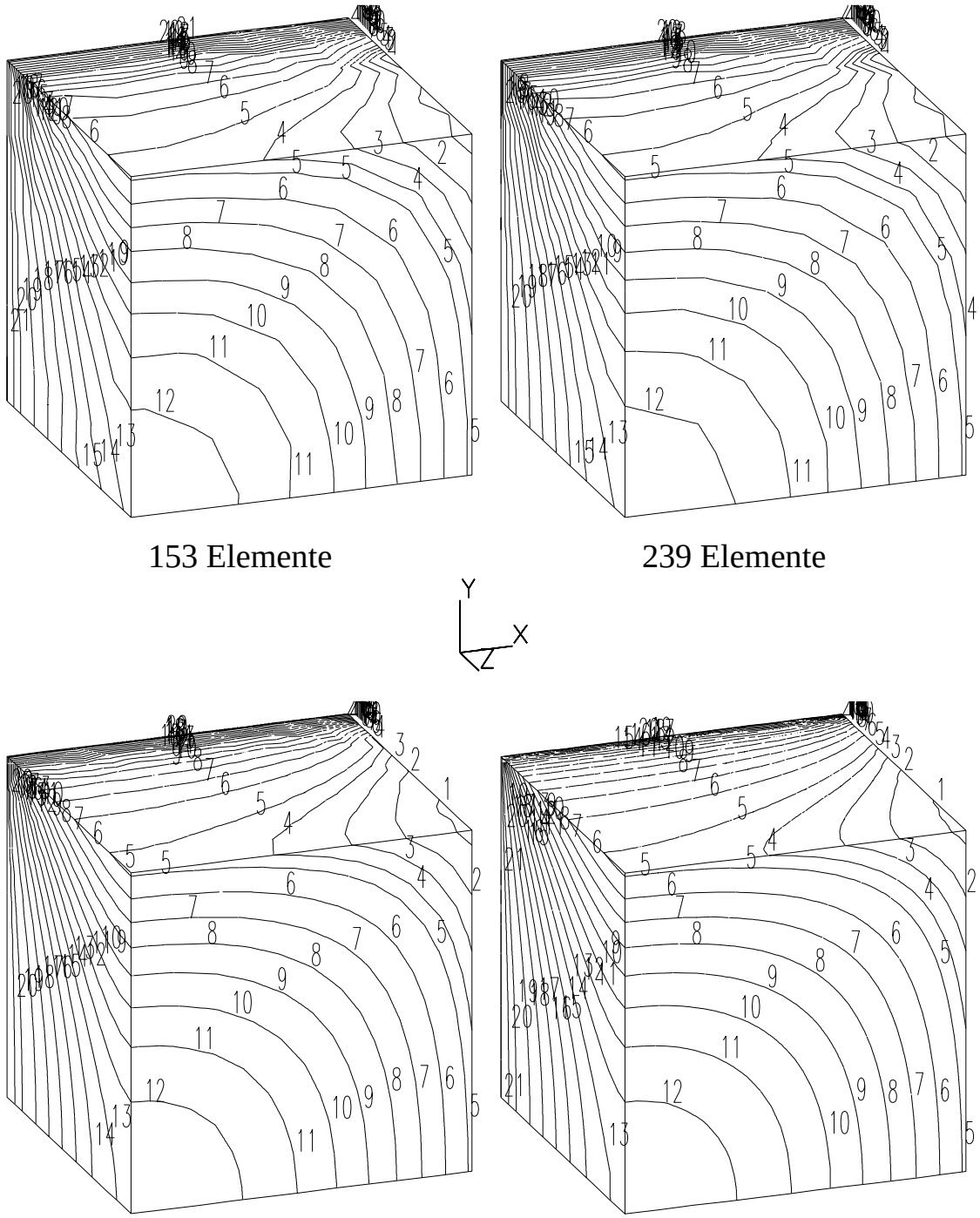


Bild 3.22: Geometrie und Randbedingungen

Wärmeübergangskoeffizienten	
$\alpha_{Wasser/Extrudat}$	1000 W/(m^{2}K)
Temperatur	
Eintrittstemperatur	200°C
Kühlwassertemperatur	10°C

Tabelle 3.4: Zahlenwerte für Anfangs- und -Randtemperaturen

sultate. Bei den groben Diskretisierungen mit 153 und 239 Elementen ergeben sich qualitativ richtige und physikalisch sinnvolle Ergebnisse, trotz der teilweise unstetigen Isothermen. Die scharfkantige Geometrie bei x = y = 1 mm und die hohen Temperaturgradienten bei z = 0 führen allerdings zu oszillierenden Temperaturen entlang der Profilkante, die mit steigender Elementanzahl abklingt.



i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
T [°C]	29	35	40	45	50	60	70	80	90	100	110
i	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	-
T [°C]	120	130	140	150	160	170	180	190	195	200	-

Bild 3.23: Einfluss der Diskretisierung auf die 3D-Temperaturverteilung