

# Simulation von Mischvorgängen in Schneckenmaschinen

O. Wunsch

*Dieser Artikel behandelt die Analyse und die numerische Simulation von Mischvorgängen in Schneckenmaschinen am Beispiel eines Doppelschneckenextruders. Zunächst wird mittels einer Finite-Element-Approximation das Stromfeld numerisch berechnet. Daraus lassen sich die Bahnen und die Deformationen fluider Partikel bestimmen. Dies führt auf zwei in der Praxis wichtige Mischungsfunktionen für den Schneckenextruder: einerseits auf das Verweilzeitspektrum und andererseits auf ein Maß für die Mischgüte, basierend auf den Deformationen der Fluidpartikel. Der Einfluß der Länge der Doppelschnecke auf die Mischungsfunktionen wird diskutiert, und die Ergebnisse werden mit denjenigen für eine Einwellenschnecke mit geometrisch ähnlichen Abmessungen verglichen.*

## 1 Einleitung

Schneckenmaschinen kommen in der Verfahrenstechnik in unterschiedlichen Gebieten zum Einsatz. In der chemischen Industrie gehört das Fördern von zähen Flüssigkeiten oder viskoplastischen Stoffen gegen einen axialen Druckanstieg im Bereich der Verarbeitung zu den Hauptaufgaben, beispielsweise beim Extrudieren von Halbzeugen und beim Spritzgießen. Doch immer mehr Teilbereiche der Aufbereitung wie das Entgasen von Lösungsmitteln und das Mischen verschiedener Komponenten werden von Schneckenextrudern übernommen.

Zur Auslegung von Prozessen, in denen Schneckenmaschinen eingesetzt werden sollen, müssen die spezifischen Strömungs- und Mischeigenschaften bekannt sein. So wird die Qualität der Produkte davon abhängen, wie lange z.B. eine Kunststoffschmelze in einem Apparat verweilt hat und welchen Beanspruchungen sie unterliegt. Diese Größen hängen wesentlich von der Geometrie und den Betriebsparametern ab. In der Praxis hat sich gezeigt, daß Doppelschneckenmaschinen den Einwellenmaschinen bei der Lösung vieler verfahrenstechnischer Aufgaben überlegen sind (VDI-Kunststofftechnik (1995)). Dies gilt gerade für hohe Durchsätze, für Mischaufgaben und für Aufgaben, die eine Selbstreinigung der Schnecken erfordern.

Untersuchungen in der Literatur zu Mischvorgängen in Schneckenmaschinen beschäftigen sich vielfach mit der Verweilzeitverteilungsfunktion ("residence time distribution", RTD). Experimente von Wolf und White (1976) bzw. Kembrowski und Sek (1981) zeigen den Einfluß der Betriebsparameter auf die RTD-Funktion für eine Einwellenschnecke, Wolf u.a. (1986) bzw. Oberlehner u.a. (1994) untersuchten die Abhängigkeiten für Zweiwellenschnecken. Dabei werden UV-empfindliche oder radioaktive Tracer dem Stoff pulsartig zugeführt und am Ende der Schnecke gezählt. Theoretische Studien basieren meist auf einfachen Modellvorstellungen für die Strömung innerhalb eines Einwellenextruders und führen auf analytische Ergebnisse für die RTD-Funktion (Pinto und Tadmor, 1970; Bigg und Middleman, 1974; Lidor und Tadmor, 1976).

Der Mischvorgang selbst wird durch die Verweilzeitverteilungsfunktion nicht ausreichend beschrieben. Eine Charakterisierung des Mischerfolgs in Schneckenmaschinen erfolgt meist durch experimentelle Grauwertanalysen: Zwei Stoffströme werden anfangs getrennt in den Extruder geführt, von denen einer mit einem Farbstoff (Ruß) angefärbt ist. Der Grauwert einer am Ende der Schnecke entnommenen Probe gibt dann den experimentellen Mischgrad an (Potente, 1988). Grundlage bisheriger theoretischer Ansätze zum Mischen sind Vereinfachungen für das Stromfeld in der Schnecke. Yang und Manas-Zloczower (1992) setzen als Maß für die Mischgüte in einem sogenannten Bunburry-Mischer einen Parameter an, der das Verhältnis der Dehnanteile der Strömung zur Umfangsströmung quantifiziert. Avalosse u.a. (1992) definieren einen Dehnparameter auf der Basis der Deformation materieller Fluidpartikel und wenden diesen auf zweidimensionale Nockenmischer an. Im folgenden sollen Mischvorgänge in Doppelschneckenextrudern mit realistischen, dreidimensionalen Geometrien analysiert und numerisch simuliert werden. Ausgangspunkt der Analyse ist die Strömung in der Schnecke, die zunächst berechnet werden muß.

## 2 Strömungsberechnung in Zweiwellenschnecken

Doppelschnecken werden in gegensinnig und gleichsinnig drehende Maschinen eingeteilt. Bei den hier behandelten Gleichdrallschnecken werden vor allem dichtkämmende Systeme eingesetzt. Die Flanke der einen Schnecke schabt den Grund der anderen Schnecke relativ sauber ab (abhängig von dem Spalt zwischen den Schnecken), so daß man auch von selbstreinigenden Profilen spricht. Die Geometrie einer zweigängigen Schnecke ist in Bild 1 im Längs- und Querschnitt zu sehen. Beide Profile haben den gleichen Querschnitt und drehen mit der Drehzahl  $n$  in die gleiche Richtung. Wesentliche geometrische Parameter sind der Gehäuseeindurchmesser  $d_G$ , der Achsabstand  $a$  zwischen den beiden Schnecken, die Gangsteigung  $T$  in Zusammenhang mit der Gangzahl  $Z$  und das Spiel zwischen Schnecke und Gehäuse.

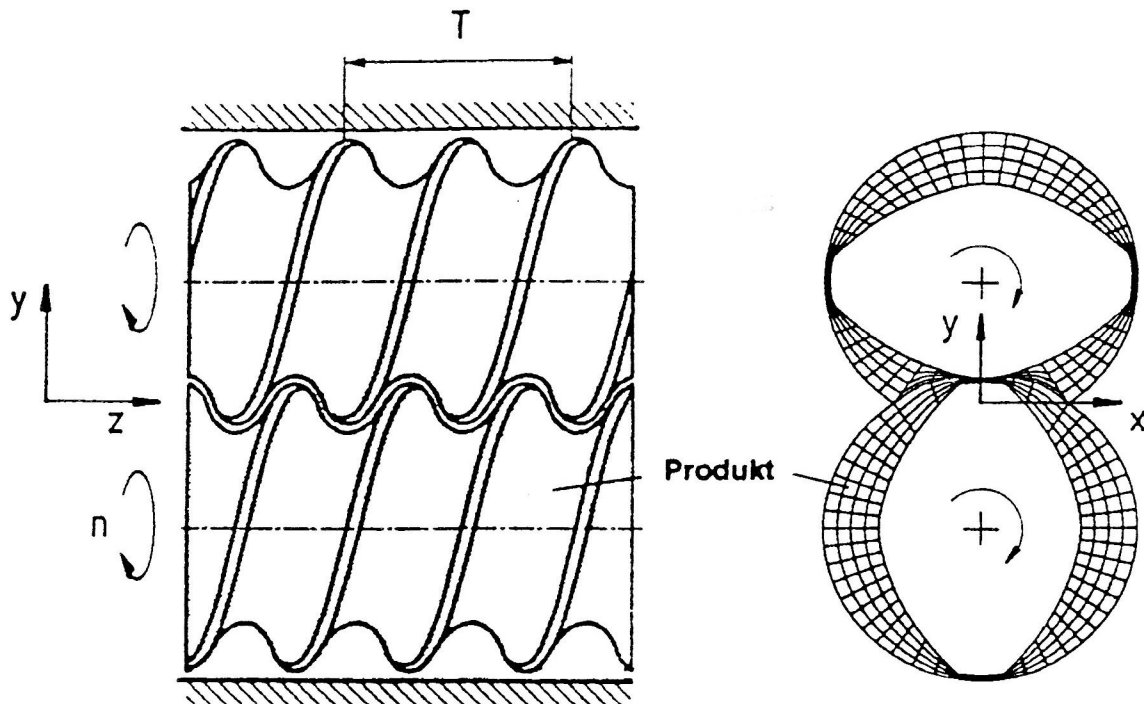


Bild 1. Skizze einer zweigängigen Doppelschnecke im Längs- und im Querschnitt

Zur Beschreibung der Strömung werden als unabhängige Variablen die kartesischen Ortskoordinaten  $x, y, z$  sowie die Zeit  $t$  eingeführt. Es sollen folgende Voraussetzungen gelten: Die Schnecke liegt horizontal; es handelt sich um eine inkompressible, newtonsche Flüssigkeit mit Haftbedingungen sowohl an der Schnecke als auch am Gehäuse; die Strömung sei hydraulisch voll entwickelt und isotherm. Die dreidimensionale Strömung in der Schnecke ist instationär, jedoch besteht zwischen der axialen Ortskoordinate  $z$  und der Zeit  $t$  eine Kopplung durch die „Relativkoordinate“

$$\zeta = z - Tnt \quad (1)$$

denn ein mit der Geschwindigkeit  $Tn$  bewegter Beobachter sieht eine stationäre Strömung. Diese ist unter den o.a. Bedingungen in Achsrichtung periodisch mit einer „Wellenlänge“  $T/Z$ :

$$\mathbf{v}(x, y, \zeta + T/Z) = \mathbf{v}(x, y, \zeta) \quad (2)$$

Somit kann der Bereich, in dem die Strömung berechnet werden muß, auf das Intervall  $0 \leq z \leq T/Z$  eingeschränkt werden. Durch die Symmetrieeigenschaften der Schneckengeometrie läßt sich der Bereich sogar noch auf die Länge  $T/2Z$  begrenzen (Böhme und Wunsch 1997).

Die theoretische Analyse basiert auf der Bewegungs- und der Kontinuitätsgleichung für das fluide Kontinuum:

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \right] = -\text{grad } p + \text{div } \mathbf{T} - \frac{\Delta p}{T} \mathbf{e}_z \quad (3)$$

$$\text{div } \mathbf{v} = 0 \quad (4)$$

Hier bezeichnet  $\mathbf{v}$  den Geschwindigkeitsvektor und  $\rho$  die Fluidichte. Der axiale Druckanstieg pro Gangsteigung kann als Volumenkräftdichte in Gleichung (3) ausgewiesen werden, so daß  $p$  nur noch die Feinstruktur des Drucks beschreibt. Für newtonsche Flüssigkeiten ist der Reibungsspannungstensor  $\mathbf{T}$  über die Scherviskosität  $\eta$  linear mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensor  $\mathbf{D}$  verknüpft:

$$\mathbf{T} = 2 \eta \mathbf{D} \quad 2\mathbf{D} = \text{grad } \mathbf{v} + (\text{grad } \mathbf{v})^T \quad (5)$$

Die Erhaltungsgleichungen (3) und (4) sind in Verbindung mit dem Stoffgesetz (5), den Periodizitätsbedingungen (2) für den betrachteten Schneckenabschnitt und den folgenden Randbedingungen zu lösen. Das Fluid haftet am Gehäuse,  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ , und an der oberen bzw. unteren Schnecke, d.h. dort gilt für die kartesischen Geschwindigkeitskomponenten  $u = \pi n(2y \mp a)$ ,  $v = 2\pi n x$ ,  $w = 0$ . Die Berechnung erfolgt hier auf Grund des komplexen, dreidimensionalen Grundgebiets numerisch auf der Basis einer Finite-Elemente-Methode. Dazu werden die Bilanzgleichungen in eine schwache variationelle Form im Sinne von Galerkin überführt und diskretisiert. Es wird ein dreidimensionales, im Referenzzustand kubisches, isoparametrisches Element mit 27 Knoten für das Geschwindigkeitsfeld und 4 Knoten für den Druck verwendet. Das FE-Netz besteht aus 3840 Elementen mit ca. 100000 unbekanntenen Knotenvariablen. Im Bild 1 ist das Netz in einem Querschnitt zu sehen. Als Lösungsverfahren für das algebraische System wird ein modifizierter Uzawa-Algorithmus eingesetzt. Genauere Ausführungen hierzu sind in Böhme und Wunsch (1997) dargelegt. Aus den berechneten Geschwindigkeiten an den Knoten lassen sich für den Anwender wichtige Zielgrößen ermitteln. Diese sind u.a. der durch jeden Querschnitt der Schnecke fließende Volumenstrom  $\dot{V}$  und die benötigte Antriebsleistung  $P_T$  pro Schneckensteigung als Summe von Nutzleistung und Dissipationsleistung:

$$\dot{V} = \iint_{A_Q} w \, dA \quad P_T = \dot{V} \Delta p + 2\eta \iiint_{V_T} \text{sp } \mathbf{D}^2 \, dV \quad (6)$$

Um die Zahl der unabhängigen Einflußgrößen gering zu halten, ist es sinnvoll, dimensionslose Größen einzuführen. Der Dichte, dem mittleren Druckanstieg, dem Durchsatz und der Antriebsleistung werden folgende Kennzahlen zugeordnet:

$$\begin{aligned} \text{Reynoldszahl} \quad \text{Re} &= \frac{\rho n d_G^2}{\eta}, & \text{Druckparameter} \quad K &= \frac{\Delta p d_G}{\eta n T}, \\ \text{Durchsatzparameter} \quad Q &= \frac{\dot{V}}{n d_G^3}, & \text{Leistungsparameter} \quad \Pi &= \frac{P_T}{\eta n^2 T d_G^2}. \end{aligned}$$

In der Praxis liegen die Viskositäten der verwendeten Flüssigkeiten recht hoch, so daß die Trägheit in der Strömung gegenüber der Reibung keine Rolle spielt. Meist arbeiten die Schneckenmaschinen in einem Bereich, in dem sowohl der axiale Druckanstieg  $K$  als auch der Volumenstrom  $Q$  positiv sind. Daher wurden zwei Betriebspunkte für  $\text{Re} \rightarrow 0$  (schleichende Strömung) numerisch berechnet: der Arbeitspunkt ohne Gegendruck ( $K = 0$ ) und ein Betriebspunkt bei mäßigem Gegendruck ( $K = 1250$ ). In Bild 2 sind die Isotachen der Komponenten  $u$ ,  $v$ ,  $w$  in einem Querschnitt für den Betriebspunkt  $K = 0$  dargestellt. Helle (dunkle) Bereiche kennzeichnen hierbei positive (negative) Geschwindigkeiten. Man erkennt insbesondere bei der für den Volumenstrom maßgeblichen Geschwindigkeitskomponente  $w$ , daß die Hauptförderung der Flüssigkeit im Zwickelbereich stattfindet, in dem beide Schnecken ineinandergreifen. Oberhalb der Kämme entstehen auch beim Betrieb ohne Gegendruck kleine Rückströmgebiete (die wegen der geringen Auflösung im Bild 2 aber nicht sichtbar werden), da durch die Verschraubung der Profile der Druck in der Flüssigkeit hinter dem Kamm höher ist als davor.

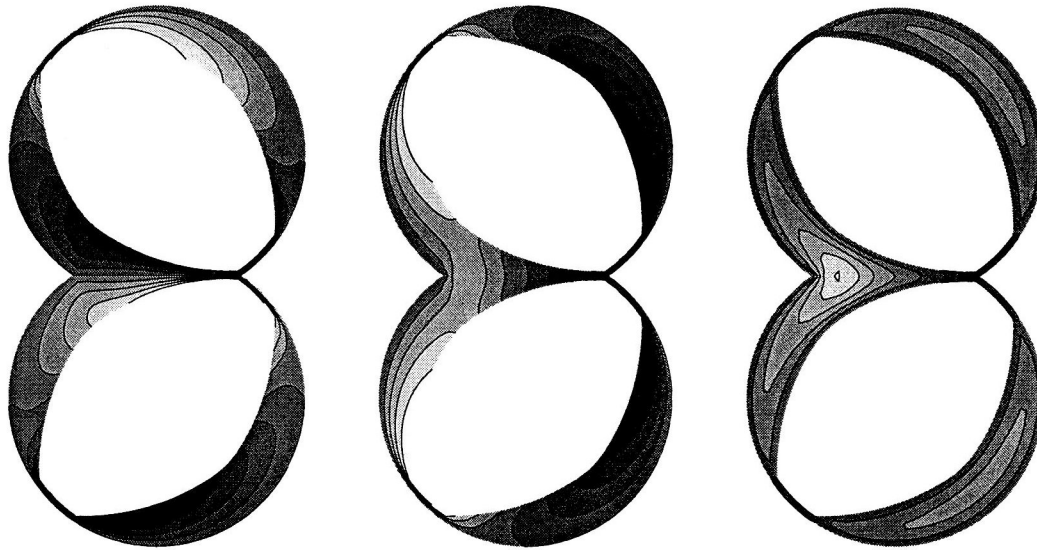


Bild 2. Isotachen der Geschwindigkeitskomponenten  $u$  (links),  $v$  (mitte),  $w$  (rechts) für  $K = 0$

### 3 Verweilzeitverteilung

Durch die Finite-Element Berechnungen ist das Geschwindigkeitsfeld in dem ausgewählten Schneckenabschnitt bekannt. Über die Periodizitätsbedingungen, die die Geschwindigkeiten im Anfangsquerschnitt mit denen im Endquerschnitt verbinden, kann dieses Feld beliebig in Achsrichtung verlängert werden. Zusätzlich ist die  $z$ -Koordinate mit der Zeit  $t$  gekoppelt (vergl. Gleichung (1)). Es liegt hier also ein dreidimensionales, instationäres Eulersches Stromfeld in einer zeitlich veränderlichen Geometrie vor. Daraus lassen sich die Bahnlinien  $\mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t)$  einzelner Partikel durch Integration berechnen:

$$\frac{d\mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t)}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \quad \text{mit} \quad \mathbf{r}(\mathbf{r}_0, t_0) = \mathbf{r}_0 \quad (7)$$

Die Integration erfolgt hier elementweise mit einem Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren 7. und 8. Ordnung (Fehlberg, 1969). Dieses Verfahren ist erfolgreich u.a. bei der numerischen Simulation zweidimensionaler Strömungen viskoelastischer Flüssigkeiten eingesetzt worden (Broszeit, 1995) und hat sich als sehr zuverlässig erwiesen. Exemplarisch ist in Bild 3 das Ergebnis einer solchen Bahnlinienberechnung für den Betriebspunkt  $K = 0$  im Längsschnitt und in der Draufsicht zu sehen. Das Partikel, das bei  $z/d_G = -1.37$  gestartet ist, wird zunächst von der einen Schnecke zur anderen übergeben, kehrt zurück und bleibt dann im Einflußbereich der ersten Schnecke. Die Symbole kennzeichnen gleiche Zeitabstände und machen deutlich, daß das Partikel im Bereich des Gehäuses nur langsam vorankommt, dagegen bewegt es sich im Zwickelbereich deutlich schneller. Auf seiner Bahn gelangt das Partikel mehrfach in den Einflußbereich der Kämme, dort wandert es dann zeitweise zurück (z.B. bei  $z/d_G \approx -0.7$ ).

Durch die Integration von Gleichung (7) sind die Zeiten bekannt, die einzelne Partikel zur Durchquerung der Schnecke mit vorgegebener Länge benötigen. Diese Verweilzeit ist in der Praxis eine wichtige Prozeßgröße. So kann die Verfahrensaufgabe eine Mindestverweilzeit erfordern, die die Flüssigkeit in der Schnecke für einen Reaktionsprozeß verbleiben muß. Andererseits ist bei der Verarbeitung von thermisch empfindlichen Polymeren eine möglichst kurze Verweilzeit anzustreben. Natürlich ergibt sich für die Schnecke als kontinuierlich arbeitende Maschine kein konstanter Wert, sondern ein mehr oder weniger breites Spektrum von Zeiten.



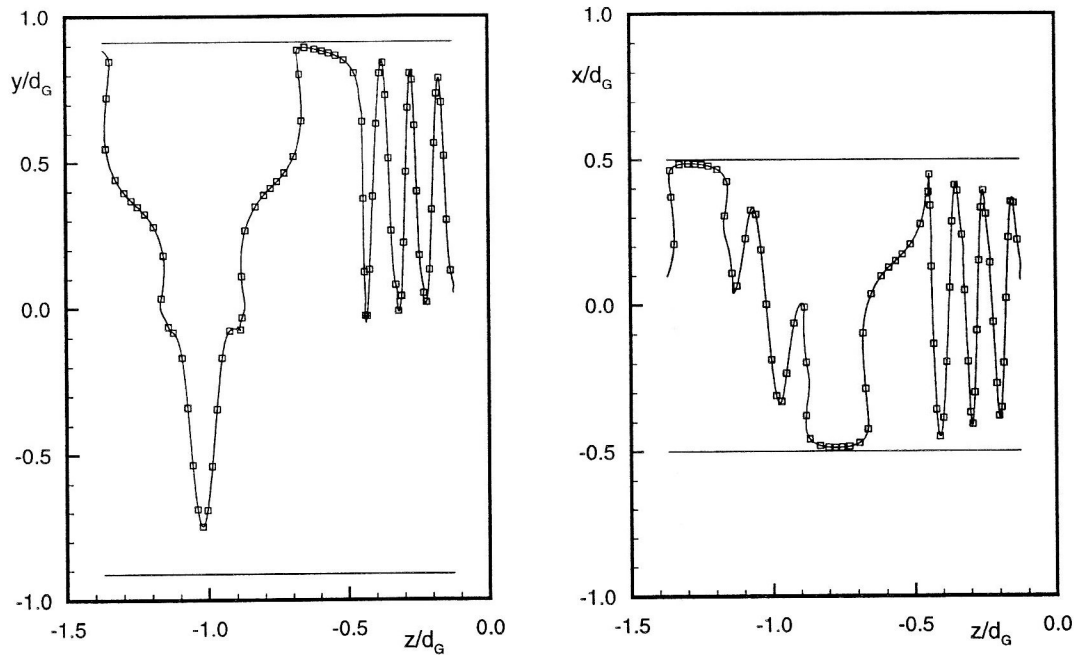


Bild 3. Bahnlinie eines fluiden Partikel für  $K = 0$  in der Seitenansicht (links) und in der Draufsicht (rechts)

Dankwerts (1953) hat in diesem Zusammenhang als erster die Verweilzeitverteilungsfunktion  $E(t)$  eingeführt. Das Produkt  $E(t)dt$  ist definiert als der Anteil des Volumenstroms, der für Zeiten zwischen  $t$  und  $t + dt$  in einem Apparat verweilt hat. Vielfach findet die kumulative Verteilungsfunktion

$$F(t) = \int_0^{\infty} E(\tau) d\tau \quad (8)$$

in der Literatur Verwendung, wobei per definitionem  $\lim_{t \rightarrow \infty} F(t) = 1$  gilt. Die mittlere Verweilzeit ergibt sich aus dem ersten Moment der Verteilungsfunktion

$$\bar{t} = \int_0^{\infty} \tau E(\tau) d\tau = \frac{V}{\dot{V}} \quad (9)$$

Sie kann andererseits auch leicht aus dem Volumen des Apparats  $V$  und dem geförderten Volumenstrom  $\dot{V}$  berechnet werden. Die kumulative Verteilungsfunktion für den Schneckenextruder muß aus den FE-Berechnungen diskret aufgebaut werden. Dabei wird wie folgt vorgegangen: Das gesamte Rechengebiet wird in Achsrichtung in 10 Schichten zerteilt. Die Schichtdicke entspricht gerade einer Elementausdehnung in Achsrichtung. Im Querschnitt jeder Schicht ist in jedem Element (vgl. Bild 1, rechts) ein Partikel positioniert. Bei ca. 400 Elementen im Querschnitt liegen im gesamten Rechengebiet damit ca. 4000 Partikel. Die einzelnen Bahnen dieser Partikel werden in axialer Richtung zurückverfolgt. Haben sie einen Schneckenabschnitt bestimmter Länge durchquert, werden die dafür benötigten Zeiten registriert. Diesen Verweilzeiten wird der Anteil des Volumenstroms zugeordnet, der durch die Seite des Elements fließt, aus dem das Partikel austritt

$$d\dot{V} = \iint_{dA_Q} w(x, y, z) dA \quad (10)$$

mit der Elementfläche  $dA_Q$  des Austrittsquerschnitts bei  $z = \zeta_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 10$ ). Die Volumenstromanteile in Verbindung mit der jeweiligen Verweilzeit führen dann auf die Funktion  $F(t)$ . Da sich in jedem Querschnitt die Lage der Schneckenprofile durch die Verschraubung unterscheidet, ist die hier gebildete Verweilzeitfunktion als örtlich gemittelt zu verstehen. Im Bild 4 sind Ergebnisse der Berechnungen für den Betriebspunkt ohne

Gegendruck ( $K = 0$ ) mit dem Parameter Länge  $L$  als Vielfaches der Schneckensteigung  $T$  dargestellt, wobei die Zeiten auf die mittlere Verweilzeit bezogen sind. Man erkennt, daß sich die Verteilungen für  $L \geq T$  nicht mehr signifikant unterscheiden. Nach einer „Totzeit“ von  $t/\bar{t} \approx 0.6$  verlassen die ersten Partikel den Schneckenabschnitt, danach steigt die Funktion monoton an und erreicht nach ca.  $t/\bar{t} \approx 5.0$  einen Wert von  $F(t/\bar{t}) = 0.99$ . Lediglich für den kurzen Abschnitt  $L = T/4$  beginnt die Verteilungsfunktion schon bei  $t/\bar{t} \approx 0.35$  und auch der weitere Anstieg ist teilweise nicht so stark wie bei den größeren Längen. Die geringere Totzeit läßt sich dadurch erklären, daß einige Fluidpartikel den kurzen Schneckenabschnitt der Länge  $L = T/4$  nur im Zwickelbereich durchlaufen und entsprechend schnell gefördert werden. Andere Partikel in Gehäusenähe bleiben zurück, wodurch der geringere Anstieg der Funktion  $F(t/\bar{t})$  zustande kommt. Ab einer Abschnittslänge von  $L = T$  sind diese Effekte nicht mehr zu erkennen.

Ein Vergleich von Berechnungen für die Länge  $L = 4T$  mit theoretischen Modellen wird in Bild 5 gezeigt: die Verweilzeitverteilung eines idealen Rührkessels, in dem modellartig eine sofortige Vermischung stattfindet, und die eines idealen laminaren Strömungsrohres mit Totzeit. Die Strömung in dem Doppelschneckenextruder verhält sich ab einer gewissen Länge im Betriebspunkt ohne Gegendruck etwa wie eine laminare Rohrströmung, da die Fluidelemente durch die Bewegungen der Schnecke im wesentlichen in axialer Richtung transportiert werden und das Fluid in der Nähe der Wand deutlich langsamer vorankommt. Sobald die Schnecke gegen einen axialen Druckanstieg fördern muß, strömen aber die Fluidelemente im Bereich der Kämme zurück und die Verweilzeiten dieser Elemente verlängern sich. Dies ist deutlich durch den flacheren Verlauf der Funktion für größere Zeiten (Bild 5) zu erkennen. Aus der Verweilzeitverteilung alleine ist noch nicht ablesbar, wie gut ein Apparat mischt. Ein steiler Anstieg der Funktion deutet jedoch auf geringe Mischwirkung hin (VDI-Kunststofftechnik, 1995). Zudem läßt sich aus der maximalen Verweilzeit auf gewisse Selbstreinigungseigenschaften schließen, diese Zeit ist bei Doppelschnecken durch das Abschaben der beiden Wellen untereinander geringer als bei Einwellenschnecken.

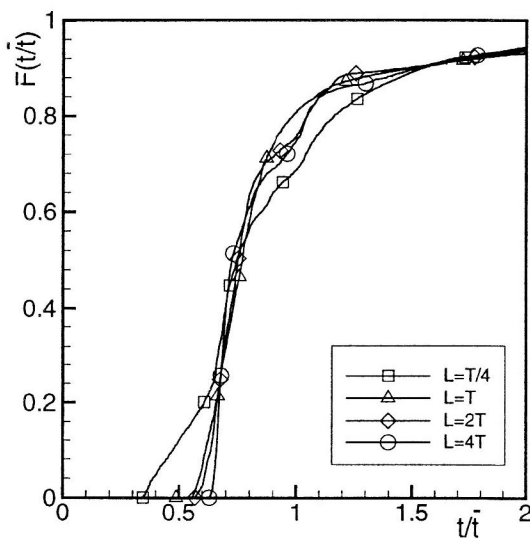


Bild 4. Verweilzeitverteilung in Abhängigkeit des Parameters  $L$

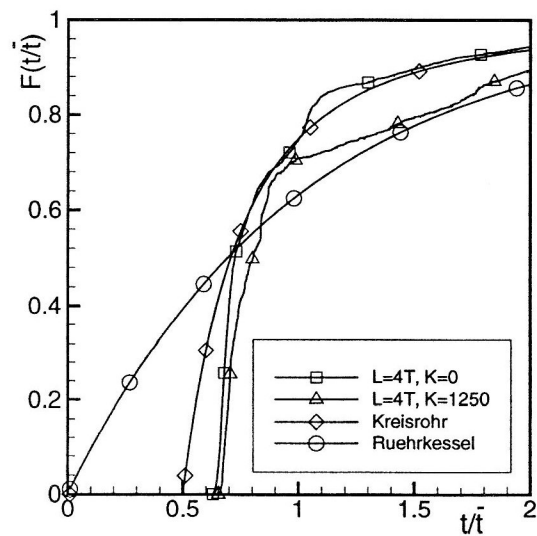


Bild 5. Verweilzeitverteilung für unterschiedliche Betriebszustände und Vergleich mit theoretischen Modellen

#### 4 Mischgüte

Beim laminaren Mischen von Flüssigkeiten unterscheidet man im wesentlichen drei unterschiedliche Basisprozesse (Ottino, 1989): 1. das konvektive Mischen, das durch fortgesetztes Dehnen und Falten materieller Linien- und Flächenelemente entsteht; 2. das diffusive Mischen, welches durch Konzentrationsunterschiede zwischen den Mischpartnern entsteht; und 3. das distributive Mischen, das durch mechanisches Zerteilen von Fluidfragmenten entsteht. In einem Schneckenextruder, in dem zähe Flüssigkeiten verarbeitet werden, ist im wesentlichen der erste Prozeß für das Mischen verantwortlich. Auf der Basis dieser Definition sollen daher aus den Finite-Element-Berechnungen des Strömungsfeldes Größen extrahiert werden, die dann als Mischungsmaße interpretiert werden können.

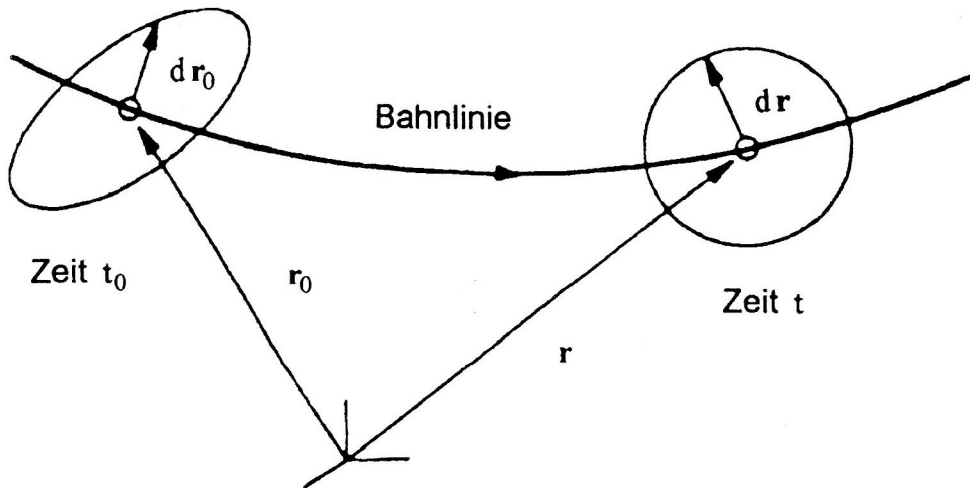


Bild 6. Zur Deformation fluidier Partikel

Die Deformation von materiellen Fluidelementen im Laufe der Zeit wird durch den Deformationsgradienten  $\mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t)$  beschrieben (Giesekus, 1994). Er ist definiert durch

$$d\mathbf{r} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t) \cdot d\mathbf{r}_0 \quad (11)$$

und gibt die relative Lage infinitesimal benachbarter materieller Punkte zur Zeit  $t$  bezogen auf den ursprünglichen Zustand zur Zeit  $t_0$  wieder (vergl. Bild 6). Die zeitliche Entwicklung von  $\mathbf{F}$  genügt der Evolutionsgleichung

$$\frac{d\mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t)}{dt} = \mathbf{L}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t) \quad (12)$$

mit der Anfangsbedingung  $\mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t_0) = \mathbf{1}$  für den unverzerrten Zustand. Hier bezeichnet  $\mathbf{L}(\mathbf{r}, t) = \text{grad } \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$  den Geschwindigkeitsgradiententensor. Bei inkompressiblen Flüssigkeiten ist die Deformation volumen-erhaltend, so daß  $\det \mathbf{F} = 1$  gilt. Durch den Deformationsgradienten  $\mathbf{F}$  wird auch die Drchung eines Fluidelements beschrieben, so daß es sinnvoll ist, den Rechts-Cauchy-Green-Tensor (RCG-Tensor)  $\mathbf{C}(\mathbf{r}_0, t) = \mathbf{F}^T \mathbf{F}(\mathbf{r}_0, t)$  als reines Verzerrungsmaß einzuführen. So lassen sich die Verzerrungen von Linienelementen durch den Tensor  $\mathbf{C}$  selbst beschreiben, da folgendes gilt:

$$(d\mathbf{r})^2 = d\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{C}(\mathbf{r}_0, t) \cdot d\mathbf{r}_0 \quad (13)$$

Andererseits beschreibt die Inverse  $\mathbf{C}^{-1}$  des RCG-Tensors gerade die Dehnung von Flächenelementen:

$$(d\mathbf{A})^2 = d\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{r}_0, t) \cdot d\mathbf{A}_0 \quad (14)$$

Die Spuren der Tensoren  $\mathbf{C}$  bzw.  $\mathbf{C}^{-1}$  geben die mittlere Verzerrung von Linien- bzw. Flächenelementen wieder. Beide Größen können bei sinnvollerweise gleicher Gewichtung zusammengefaßt werden,

$$\lambda(\mathbf{r}_0, t) = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{1}{3} \text{sp } \mathbf{C}} + \sqrt{\frac{1}{3} \text{sp } \mathbf{C}^{-1}} \right) \quad (15)$$

und man erhält damit ein skalares Maß für die Deformation eines Fluidelements. Hohe Werte von  $\lambda$  bedeuten, daß zu Anfang ( $t_0 = 0$ ) infinitesimal benachbarte Fluidpartikel sich weit voneinander entfernen und damit die Wahrscheinlichkeit ansteigt, daß es zu einer homogenen „Vermengung“ aller Fluidelemente kommt. Im unver-

zerrten Zustand gilt  $\lambda = 1$ , da im allgemeinen  $\lambda$  exponentiell mit der Zeit anwächst, ist es sinnvoll, die Größe  $\varepsilon = \log \lambda$  einzuführen.

Für den Doppelschneckenextruder erfolgt die Berechnung dieses Mischungsmaßes entsprechend der Bahnliniensimulation durch numerische Integration mit dem Runge-Kutta-Fehlberg-Verfahren. Neben den drei Differentialgleichungen für die Bahn (7) müssen simultan zusätzlich die neun Differentialgleichungen für die Deformationskomponenten (12) gelöst werden. Der Berechnungsalgorithmus ist sorgfältig getestet worden. U.a. stimmen die numerisch berechneten Deformationen für eine Schraubenströmung in einem konzentrischen Rohr sehr gut mit analytischen Ergebnissen überein. Ein Gütekriterium ist auch die Inkompressibilitätsbedingung  $\det \mathbf{C} = 1$ , die bei allen Rechnungen als Kontrollgröße mitgeführt wurde und sich stets zu 1 ergab.

Die zeitliche Entwicklung der Deformation einzelner Fluidelemente läßt sich durch die Komponenten des RCG-Tensors veranschaulichen. Exemplarisch ist dies im Bild 7 zu sehen. Ein Partikel startet im Kammbereich der Schnecke und bewegt sich zunächst erst langsam an der Wand entlang (links). Die Komponenten des Deformationsgradienten wachsen langsam (rechts), wobei die  $C_{zz}$ -Komponente am geringsten ansteigt. Die „Oberschwingung“, die in jeder Komponente zu sehen ist, veranschaulicht das Vorbeilaufen der Kämme. Bei der zweigängigen Schnecke sind pro Umlauf der Profile zwei Schwingungen zu erkennen. Sobald das Partikel in den Zwickelbereich gelangt, steigen die Deformationen stark an, da hier durch den Hauptförderstrom eine starke Verzerrung stattfindet.

Um auch hier statistische Aussagen über einen gesamten Schneckenabschnitt treffen zu können, wird analog wie bei der Berechnung der Verteilungsfunktion vorgegangen. Das Deformationsmaß  $\varepsilon$  vieler Fluidpartikel nach Durchlaufen eines Schneckenabschnitts bestimmter Länge wird berechnet und als Anzahlverteilungsfunktion  $G(\varepsilon)$

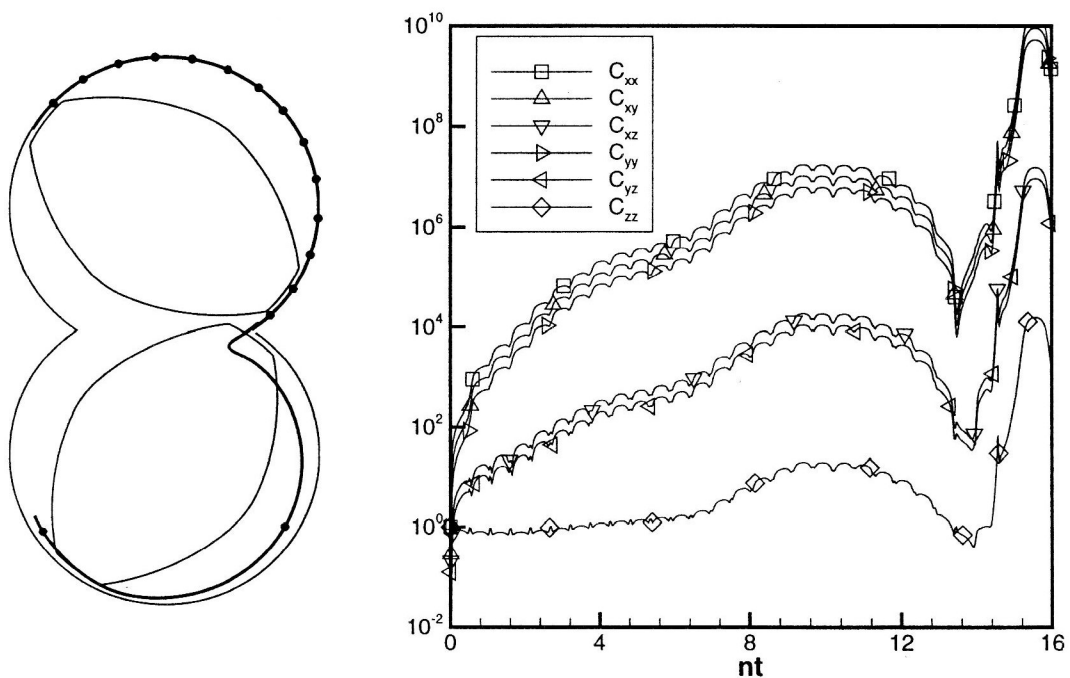


Bild 7. Komponenten des RCG-Tensors eines ausgewählten Fluidelements in Abhängigkeit von der dimensionslosen Zeit ( $K = 0$ )

über der Deformation dargestellt. Im Gegensatz zu der Verweilzeitverteilung macht es hier keinen Sinn, die Deformationen auf den Volumenstrom zu beziehen, da auch bei vollständiger Drosselung der Schnecke ( $Q = 0$ ) die Deformationen natürlich endlich bleiben müssen. Bild 8 zeigt Ergebnisse einer solchen Berechnung

mit der Länge  $L$  als Parameter. Je länger der Schneckenabschnitt ist, desto größer sind die Deformationen. Dies liegt einerseits daran, daß die Partikel länger in der Schnecke verweilen, andererseits die Wahrscheinlichkeit größer wird, daß viele Partikel in den Zwickelbereich gelangen und dort stark deformiert werden.

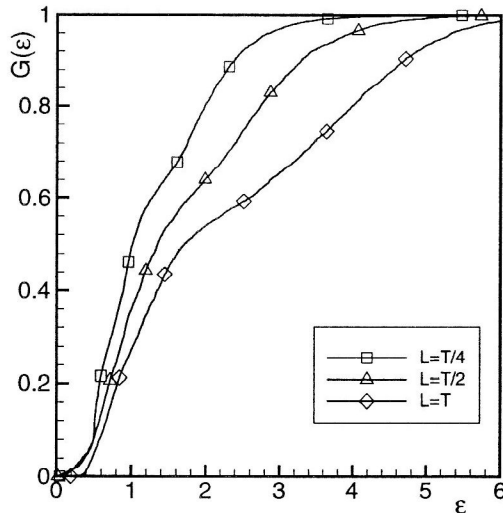


Bild 8. Anzahlverteilung  $G(\epsilon)$  einer Doppelschnecke in Abhängigkeit des Parameters  $L$  ( $K = 0$ )

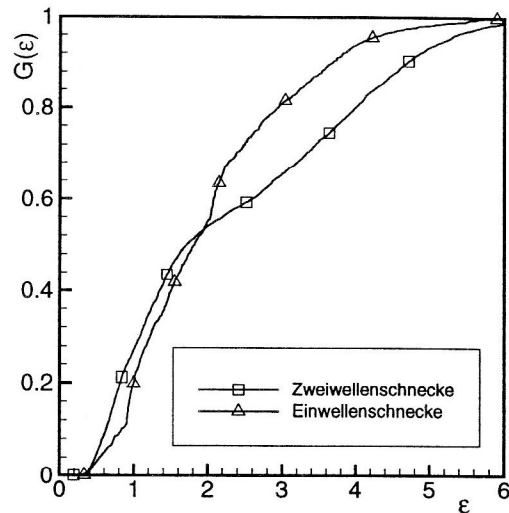


Bild 9. Vergleich der Anzahlverteilung  $G(\epsilon)$  zwischen Zweiwellen- und Einwellenschnecke ( $K = 0, L = T$ )

Daß in einer Doppelschnecke anzahlmäßig größere Deformationen auftreten als in einer Einwellenschnecke, zeigt das Bild 9. Beide Schnecken entsprechen sich in ihren geometrischen Abmessungen, haben also die gleiche Steigung und die gleichen Spaltweiten. Man erkennt, daß ca. die Hälfte der Partikel annähernd gleiche Deformationen erfahren. In der Doppelschnecke kommen diese Partikel offensichtlich nicht in den Einflußbereich der zweiten Schnecke, während die restlichen Partikel den Zwickelbereich kreuzen und dadurch ca. eine Dekade höhere Deformationen aufweisen.

Die untersuchte Schneckengeometrie ist trotz ihrer relativ kurzen Längenausdehnung in Achsrichtung praxisrelevant. Insbesondere Zweiwellenschneckenmaschinen werden vielfach als eine Art Reaktor ausgeführt und sind modular mit unterschiedlichen Elementen (Förderelemente, Knetscheiben, Entgasungszonen) aufgebaut, in denen die Länge einzelner Abschnitte in der Größenordnung der Schneckensteigung liegen. Die eingangs erwähnten Voraussetzungen zur numerischen Berechnung des Stromfelds stellen keine wesentlichen Einschränkungen dar, insbesondere sind die Einlaufängen durch die hohe Viskosität der in der Praxis gebräuchlichen Flüssigkeiten sehr klein.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Die numerische Simulation ergibt einen Einblick in die komplexe, dreidimensionale Strömung in einem Doppelschneckenextruder. Aus diesem Stromfeld lassen sich bei Lagrangescher Betrachtung die Bewegung und Deformation fluider Partikel bestimmen. Dies führt einerseits auf die Verweilzeitverteilung, die den Anwender in der Praxis gerade dann interessiert, wenn thermisch empfindliche Stoffe extrudiert werden. Andererseits lassen die Deformationen, die Fluidpartikel erfahren, auf die Mischeigenschaften der Schnecke schließen. Die aus den Simulationsergebnissen gebildete Mischgüte ist damit ein Instrument zur gezielten Vorhersage der Mischeigenschaften bestimmter Bauformen. Aus vergleichenden Rechnungen für unterschiedliche Geometrien ist es möglich, Schneckenmaschinen in Hinblick auf ihre Fördercharakteristik, Mischeigenschaften und Leistungsaufnahme zu optimieren. Aber auch ein Vergleich mit anderen Apparaten, beispielsweise statischen Mixern, ist möglich. Die Bildung der Mischungsfunktion ist unabhängig von den Stoffeigenschaften der Flüssigkeiten, denn die gehen „nur“ in die Berechnung des Stromfelds ein. So kann auch der Einfluß von z. B. nichtlinearen Fließeigenschaften auf das Mischen leicht untersucht werden, wenn die Strömung erstmalig bekannt ist.

## Danksagung

Der Autor dankt Herrn Prof. Dr. G. Böhme für das ausgeprägte Interesse an dieser Arbeit und Herrn Dr.-Ing. J. Broszeit für die Unterstützung bei der Implementierung der numerischen Integrationstechnik.

## Literatur

1. Avalosse, T. et al: Numerical Simulation of Mixing. Proc. XIth Int. Congr. on Rheology, Brussels, Belgium, August 17-21, (1992).
2. Bigg, D; Middleman, S.: Mixing in a Screw Extruder. A Model for Residence Time Distribution and Strain. Ind. Eng. Chem., Fundam. 13 (1974) 66-71.
3. Böhme G.; Wunsch, O.: Analysis of Shear Shinning Fluid Flow in Intermeshing Twin-screw Extruders. Arch. Appl. Mech. 67 (1997) 167-178.
4. Broszeit, J.: Numerische Simulation stationärer Strömungen in Flüssigkeiten mit Gedächtnis. Fortschr.-Ber. VDI Reihe 7 Nr. 271, VDI-Verlag, Düsseldorf, (1995).
5. Danckwerts, P.V.: Continous Flow System: Distribution of Residence Times. Chem. Eng. Sci 2 (1953) 1-13.
6. Fehlberg, E.: Klassische Runge-Kutta-Formeln fünfter und siebenter Ordnung mit Schrittweitenkontrolle. Computing 4 (1969), 93-106.
7. Giesekus, H.: Phänomenologische Rheologie. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, (1994).
8. Kembrowski, Z.; Sek, J.: Residence Time Distribution in a Real Single Screw Extruder. Poly. Eng. Sci. 21 (1981), 1194-1202.
9. Lidor, G.; Tadmor, Z.: Theoretical Analysis of Residence Time Distribution Functions and Strain Distribution Functions in Plasticating Screw Extruders. Poly. Eng. Sci. 16 (1976), 450-462.
10. Oberlehner, J.; Cassagnau, P.; Michel, A.: Local Residence Time Distribution in a Twin Screw Extruder. Chem. Eng. Sci. 49 (1994) 3897-3906.
11. Ottino, J.M.: The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos, and Transport. Cambrigde University Press, Cambrigde, (1989).
12. Pinto, G.; Tadmor, Z.: Mixing and Residence Time Distribution in Melt Screw Extruders. Poly. Eng. Sci. 10 (1970), 279-288.
13. Potente, H.: Zum Mischen rheologisch inhomogener Stoffsysteme auf Einschneckenmaschinen. Rheol. Acta 27 (1988) 410-417.
14. VDI-Gesellschaft Kunststofftechnik (Hsg.): Der Doppelschneckenextruder: Grundlagen- und Anwendungsgebiete. VDI-Verlag, Düsseldorf, (1995).
15. Wolf, D; White, D.H.: Experimental Study of the Residence Time Distribution in Plasticating Screw Extruders. AIChE Journal 22 (1976) 122-131.
16. Wolf, D.; Holin, N.; White, D.H.: Residence Time Distribution in a Commercial Twin-Screw Extruder. Poly. Eng. Sci. 26 (1986) 640-646.
17. Yuang, H.H., Manas-Zloczower, I.: 3D Flow Field Analysis of a Bunbarry Mixer. Proc. XIth Int. Congr. on Rheology, Brussels, Belgium, August 17-21, (1992).

---

*Anschrift:* Dr.-Ing. O. Wunsch, Institut für Strömungslehre und Strömungsmaschinen, Universität der Bundeswehr Hamburg, D-22039 Hamburg