

Modellbildung und Simulation



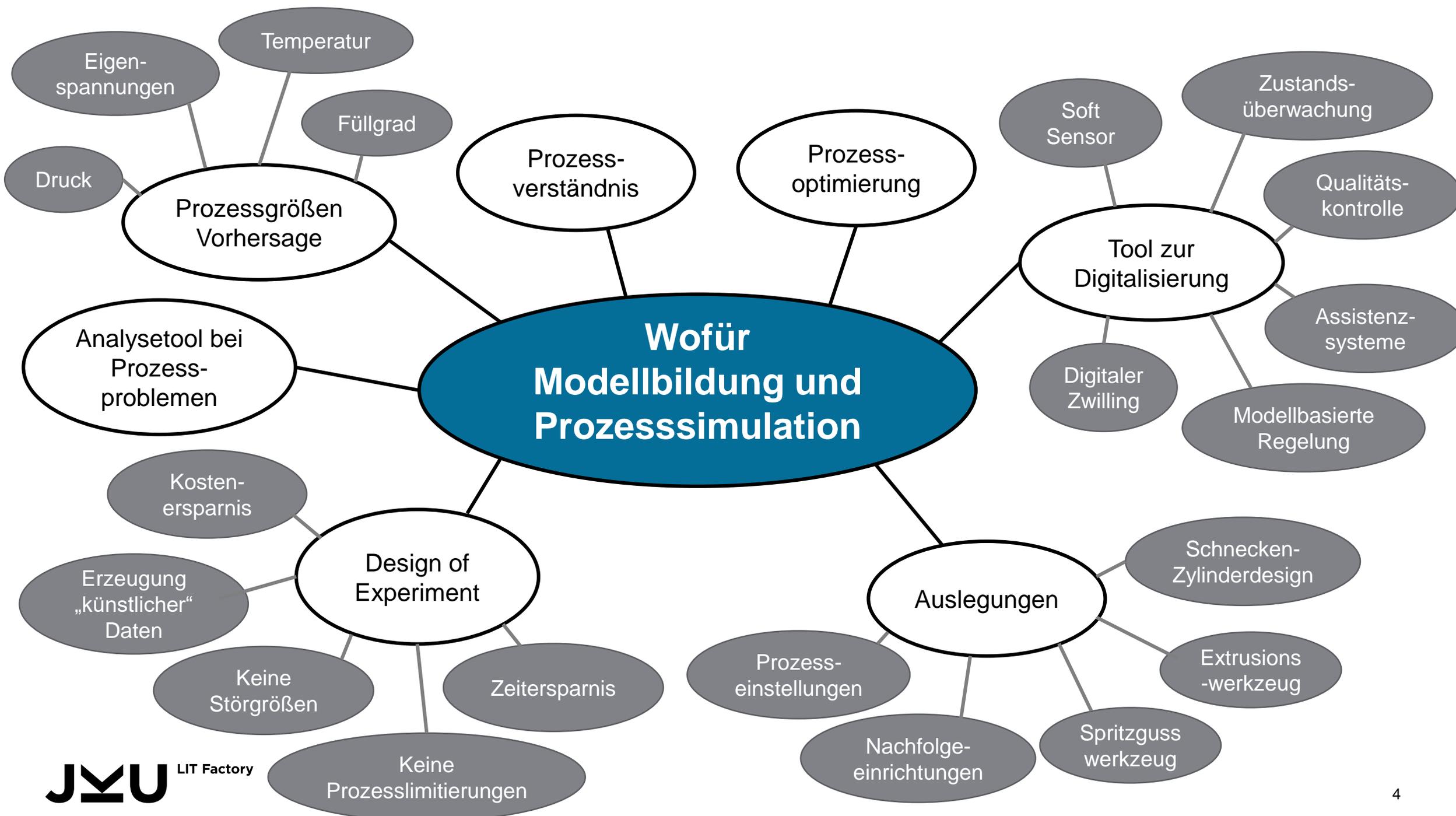
Wolfgang Roland, Institute of Polymer Processing and Digital Transformation

Inhalt

- Modellbildung in der Kunststoffverarbeitung
- Vorgehen in der Modellbildung und Simulation
- Use-Cases
- Zusammenfassung

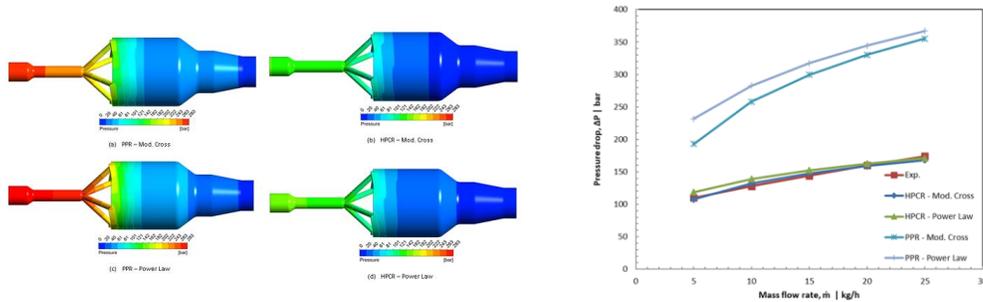
Inhalt

- Modellbildung in der Kunststoffverarbeitung
- Vorgehen in der Modellbildung und Simulation
- Use-Cases
- Zusammenfassung



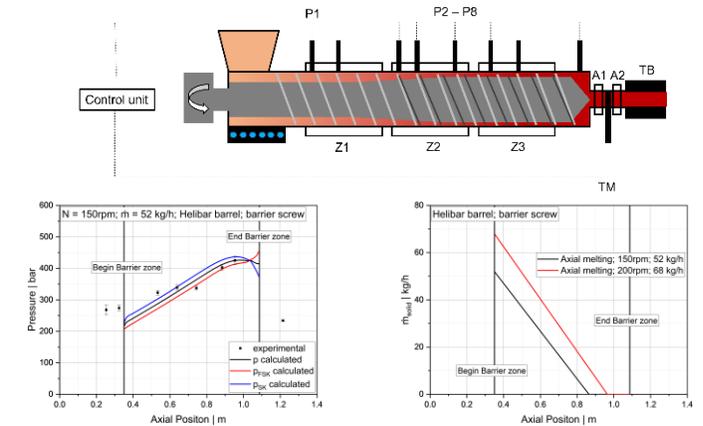
Problemstellungen aus der Kunststoffverarbeitung

Druckverlustberechnung von Extrusionswerkzeugen

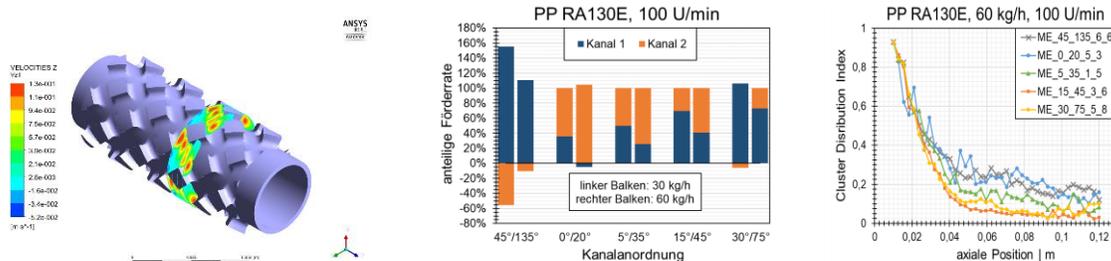


Problemstellungen

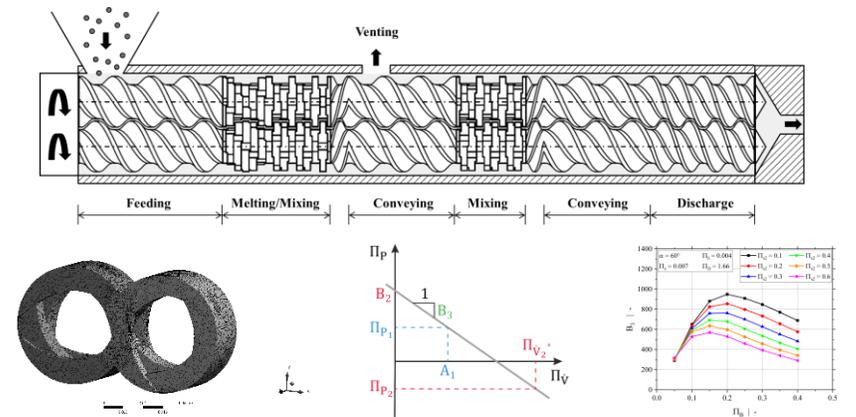
Modellierung Einschneckenextrusion



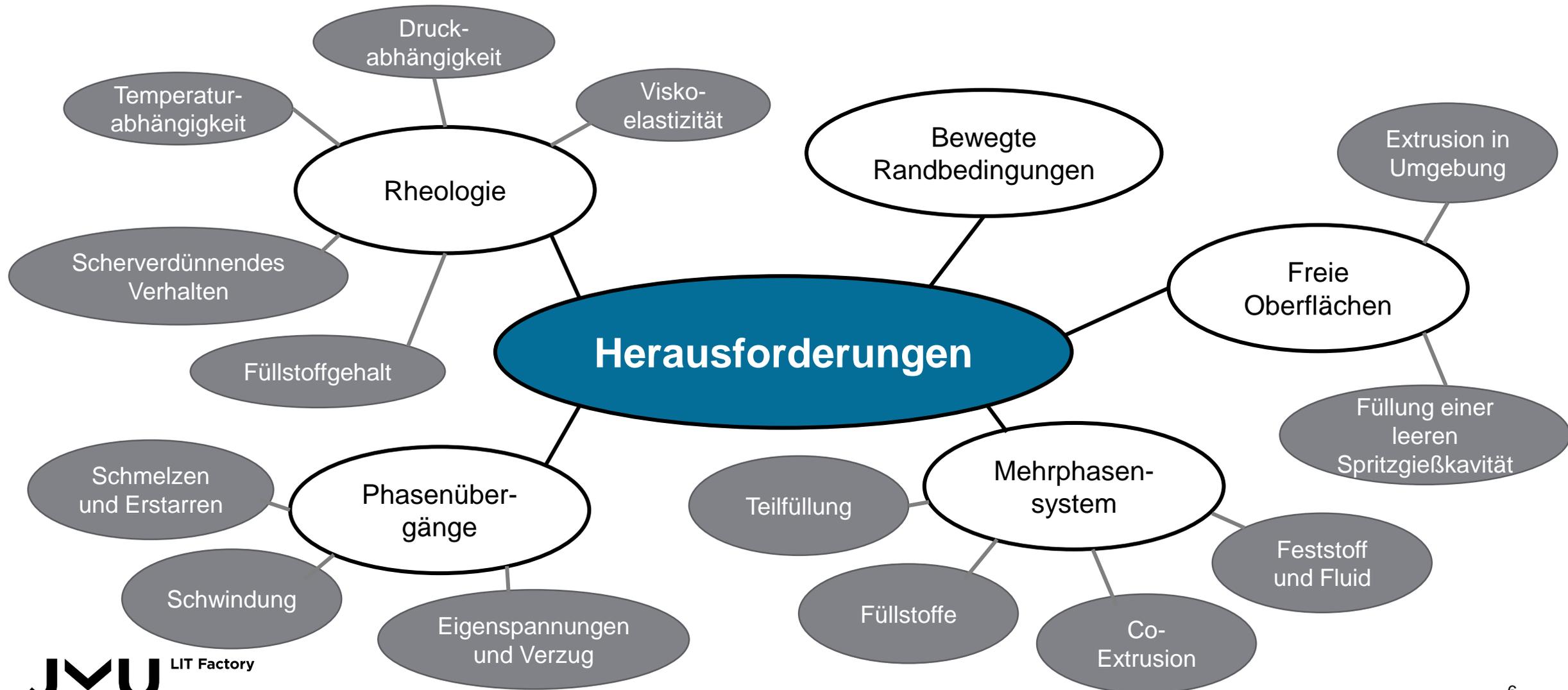
Optimierung von Mischelementen



Modellierung Doppelschneckenextrusion

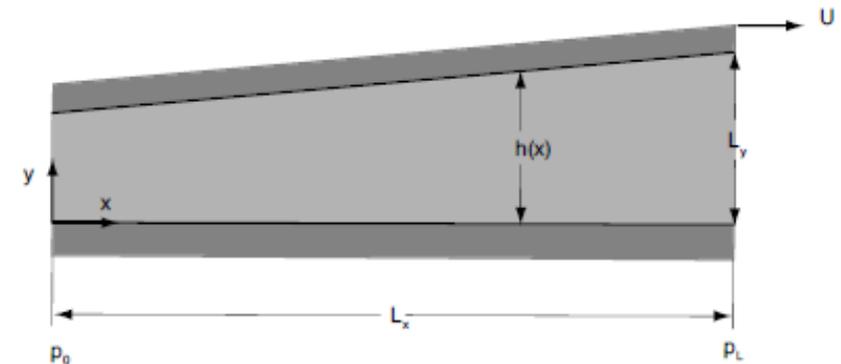
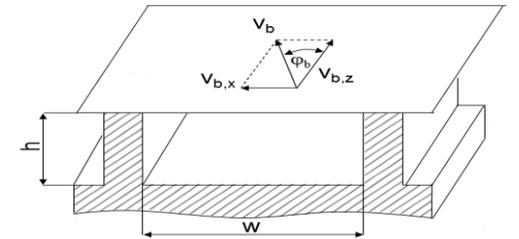
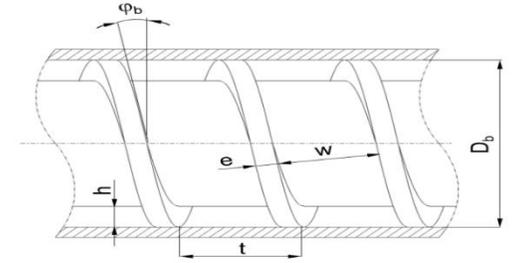


Herausforderungen in der Modellbildung von Kunststoffverarbeitungsprozessen



Typische Modellierungsannahmen in der Kunststoffverarbeitung

- Stationäre Zustände (Der Prozess ist zeitunabhängig, bzw. eingeschwungen)
- Laminare Strömung (für hochzähen Kunststoffschmelzen $Re \ll 1$)
- Voll entwickelte Strömungen
- Wandhaftende Strömungen
- Inkompressibilität des Kunststoffes
- Vernachlässigung der Schwerkraft und Trägheitskräfte
- Abgewinkelte Schneckengänge (Bild)
- Schmierfilmnäherung (Lubrication approximation)



Modellierungsebenen

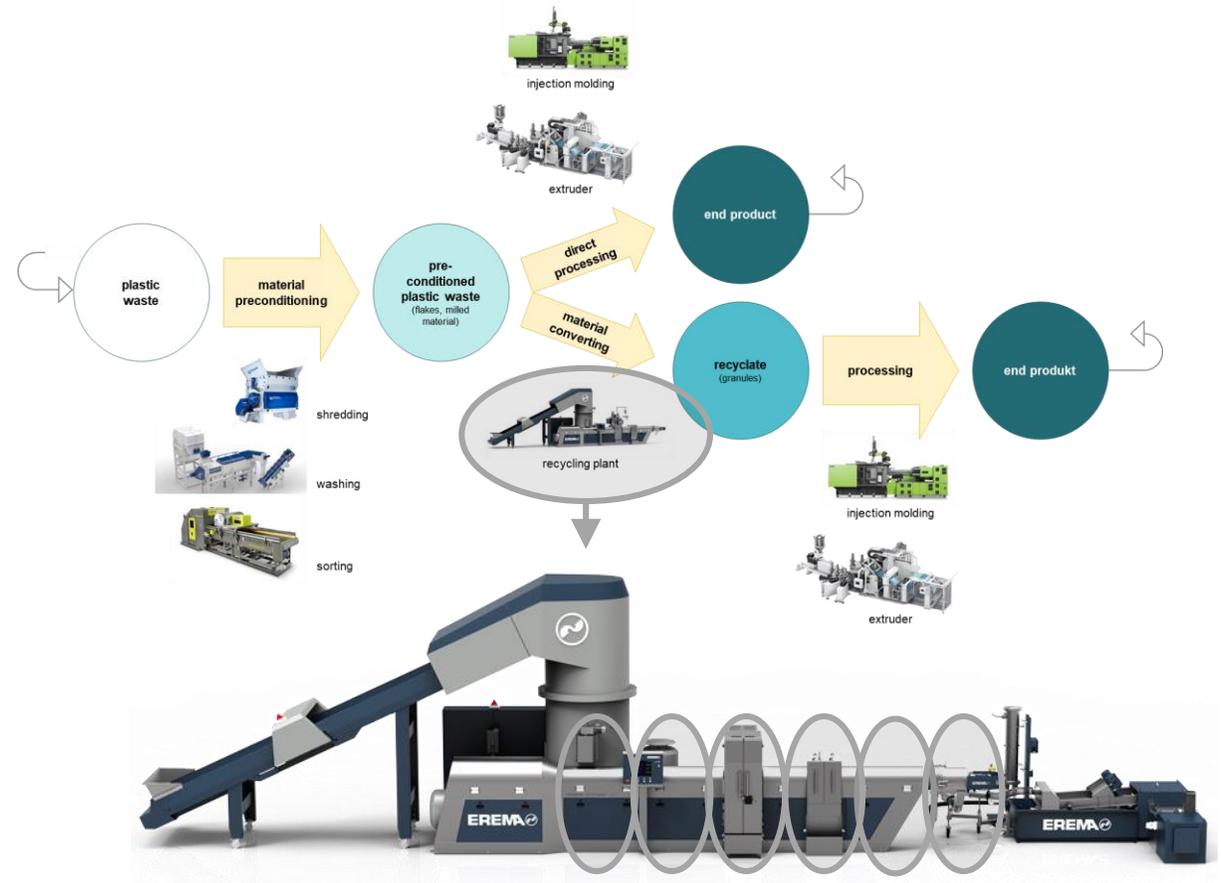
- Ein **Modell** ist **eine Abstraktion der Realität** und unterliegt immer **Annahmen und Vereinfachungen**
 - Abwägung zwischen **Komplexität, Aufwand und Genauigkeit** ist immer erforderlich
- Skalen spielen bei der Modellbildung eine wichtige Rolle
 - Zeitliche Skalen
 - Räumliche Skalen
 - Mikroskopische Betrachtung – Berücksichtigung des molekularen Aufbaus sowie Auflösung auf molekularer Ebene
 - Makroskopische Betrachtung – Mittelung und Betrachtung als homogenen Stoff → Beschreibung des Systems reduziert sich auf wenige makroskopische Feldgrößen (Temperatur, Druck, Dichte, etc.)
 - Prozessebene (Teilprozesse, Prozessmodell, Prozesskette)
- Dimensionalität des Problems
 - 1D, 2D, 3D
 - Zeitabhängig, oder zeitunabhängig

Ebenen von Prozessmodellen

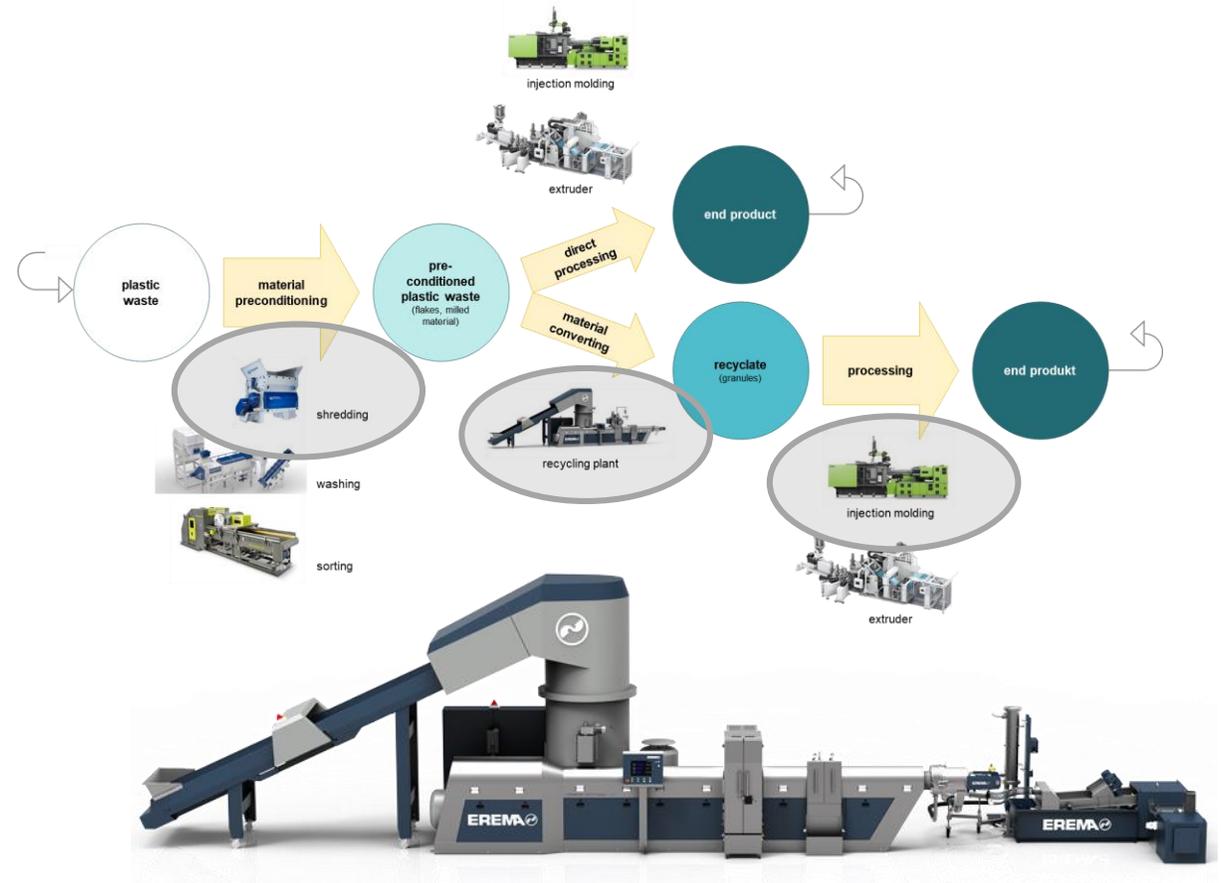
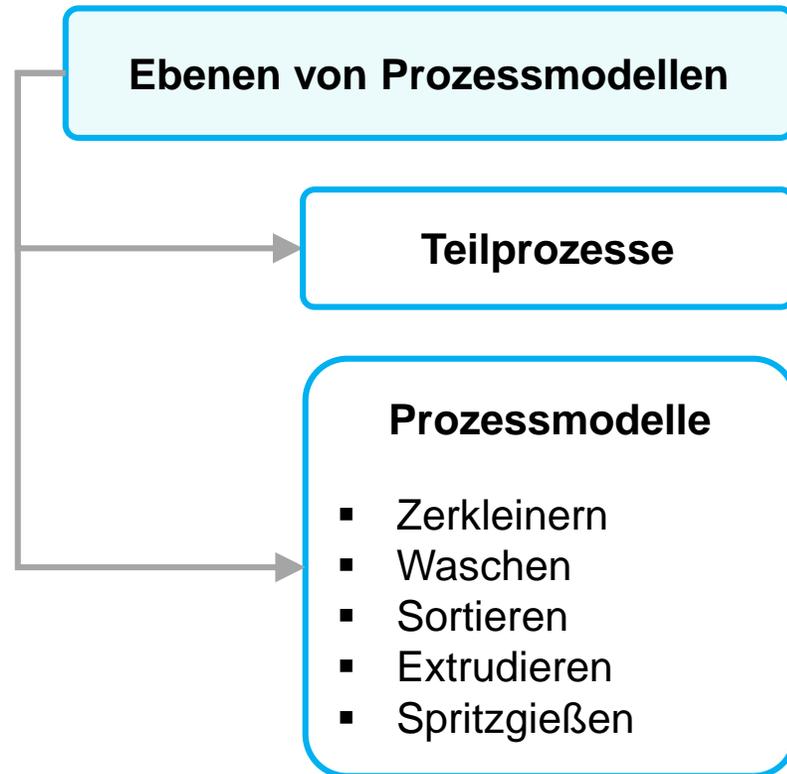
Ebenen von Prozessmodellen

Teilprozesse

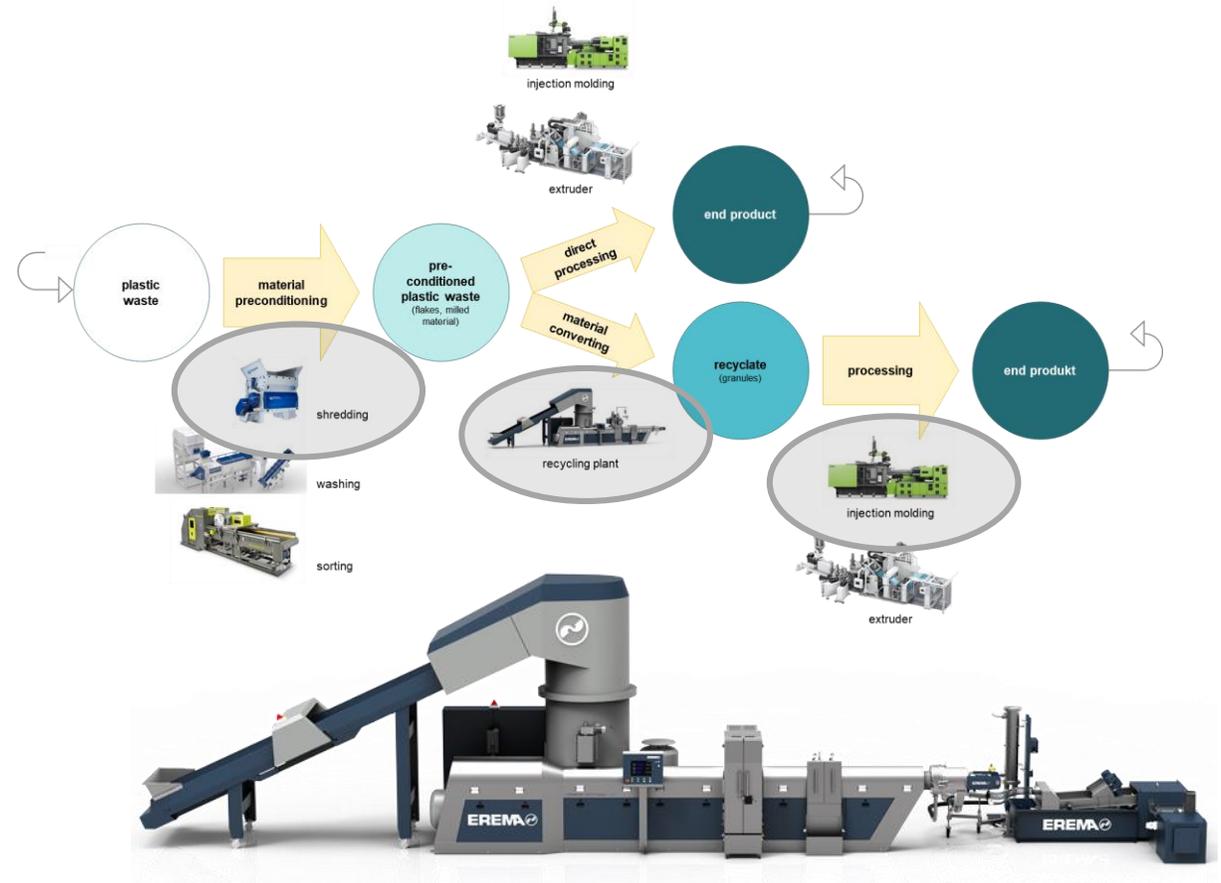
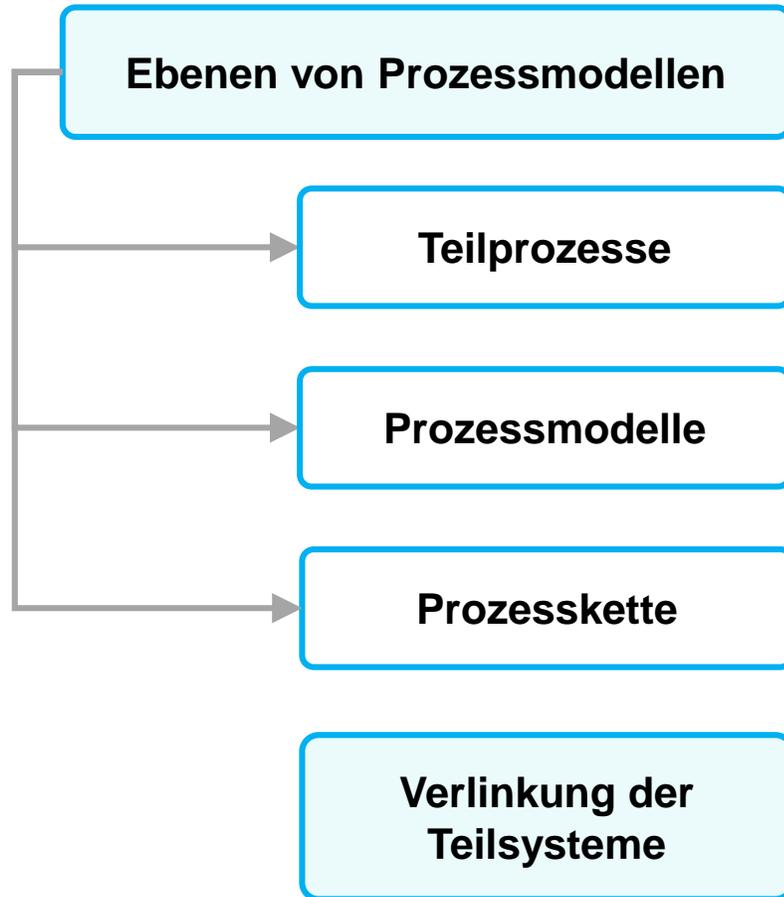
- Feststoffförderung
- Aufschmelzen
- Filtration
- Entgasung
- Homogenisierung
- Granulierung



Ebenen von Prozessmodellen



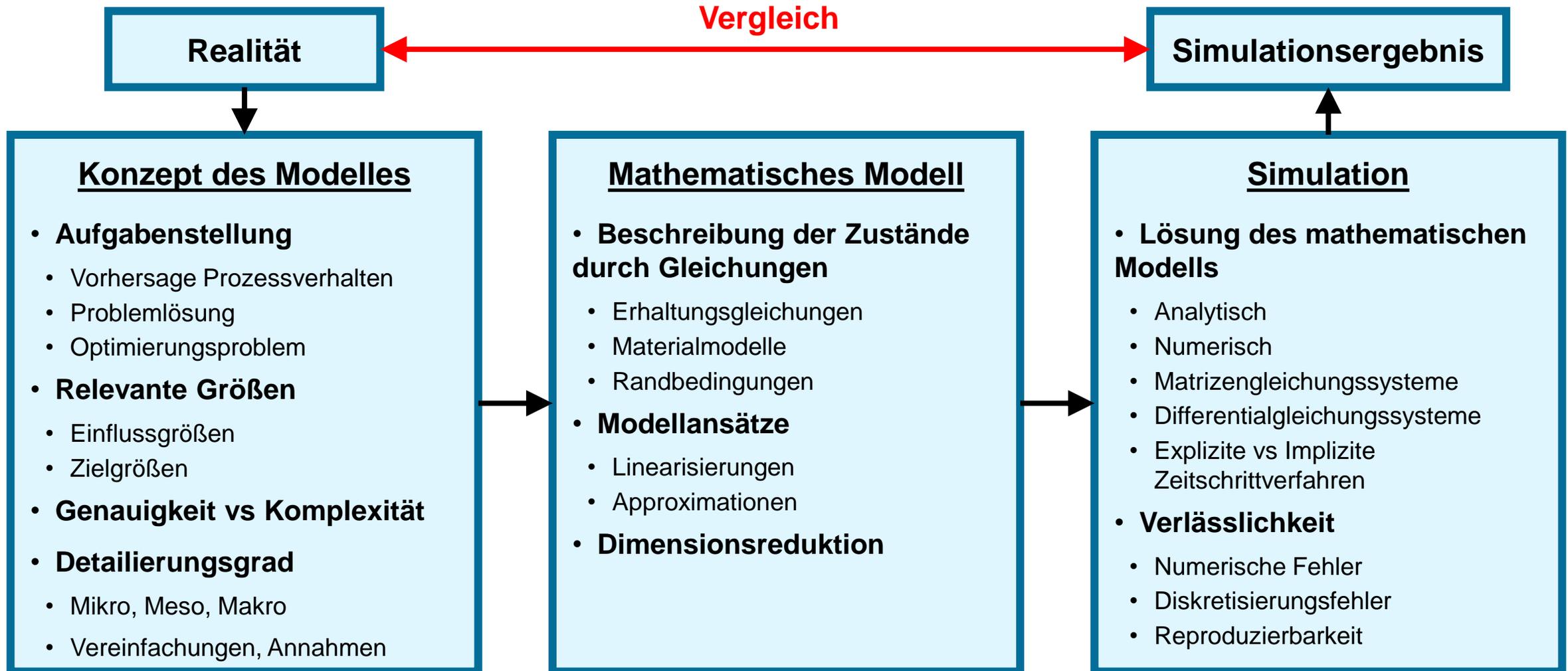
Ebenen von Prozessmodellen



Inhalt

- Modellbildung in der Kunststoffverarbeitung
- Vorgehen in der Modellbildung und Simulation
- Use-Cases
- Zusammenfassung

Allgemeines Vorgehen in Modellbildung und Simulation



Abweichungen zwischen Modell und Realität

- Abgleich der Simulationsergebnisse mit der Realität muss erfolgen!
- Ein **Modell** ist **eine Abstraktion der Realität** und unterliegt immer **Annahmen und Vereinfachungen**
 - Abwägung zwischen **Komplexität, Aufwand und Genauigkeit** ist immer erforderlich

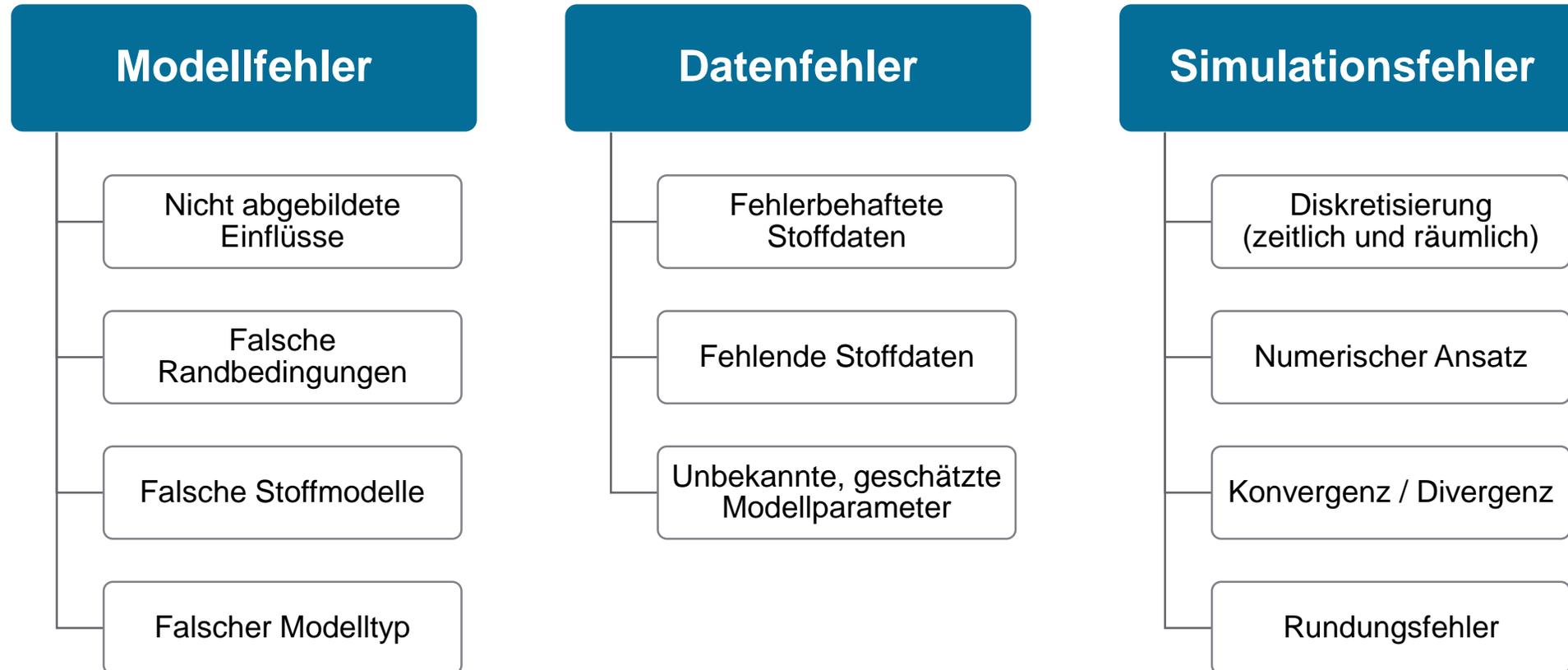
Fehlerfreies Modell ist nicht möglich!

Fehler zulässig? – Modell hinreichend genau?

Entsprechen die Abweichungen den Erwartungen

Werden die Tendenzen abgebildet

Ursachen für Abweichungen zwischen Modell und Realität



Modellkalibrierung

Fehlerfreies Modell ist nicht möglich!

- **Kalibrierung:** Systematische Anpassung des Modelles an die Wirklichkeit durch systematische Veränderung von Modellparametern und Modellstruktur sodass die **Abweichung zwischen Modell und Realität minimal wird**

Kalibrierung

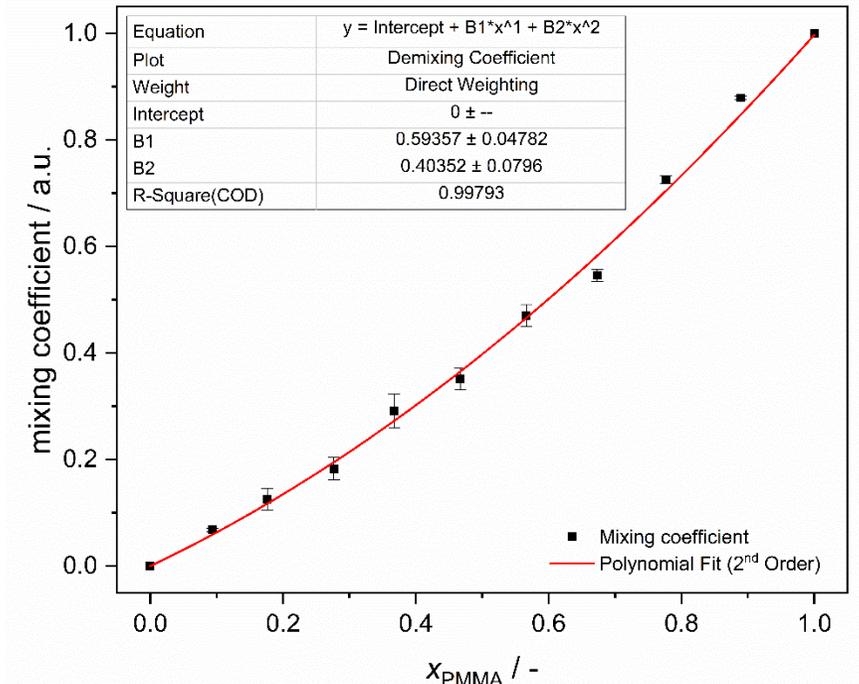
Schätzung von unbekanntem Parametern

Kann zur Parameteridentifikation verwendet werden

Schätzwerte müssen physikalisch und plausibel sein

Messrauschen beachten

Anzahl Messpunkte muss Modellordnung abbilden können



Modellvalidierung

- **Vergleich des kalibrierten Modelles mit der Realität** mit Daten außerhalb der Kalibrierung **ohne weitere Anpassung der Parameter und Modellstruktur**
 - Ähnliche Schlussfolgerungen aus Modell und Realität
 - Abschätzung des zu erwartenden Fehlers
 - Überprüfung ob Abweichungen im zulässigen Bereich

Validiertes Modell – geeignet für den Praxiseinsatz!

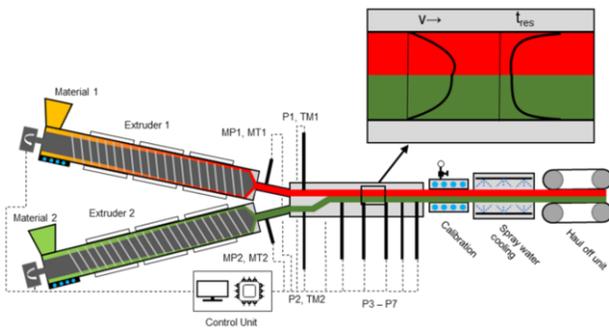
Inhalt

- Modellbildung in der Kunststoffverarbeitung
- Vorgehen in der Modellbildung und Simulation
- Use-Cases
- Zusammenfassung

Use-Case Modellierung Coextrusion

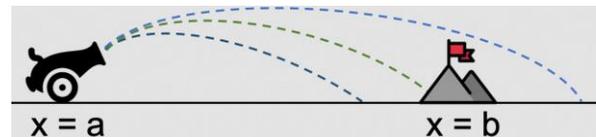
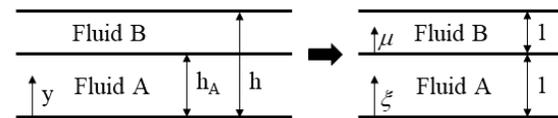
Ziele

- Mathematische Modelle zur Beschreibung von 2-Schicht Coextrusionsströmungen:
 - Schichtverteilung
 - Druckgradient
 - Strömungsparameter an der Grenzfläche
- Universell einsetzbar
- Einfache und schnelle Anwendbarkeit



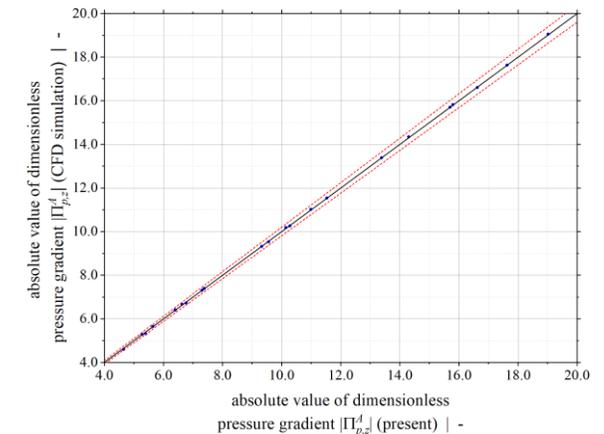
Methoden

- Physikalisch-mathematische Beschreibung des Problems über Erhaltungsgleichungen
- Überführung in dimensionsloses System
- Schießverfahrens zur numerischen Lösung
- Parameterstudie
- Regressionsanalyse



Ergebnisse

- Schnell konvergierender, numerischer Solver
- Analytische Modelle der Zielgrößen als Funktion der Einflussgrößen
- Höchste Genauigkeit

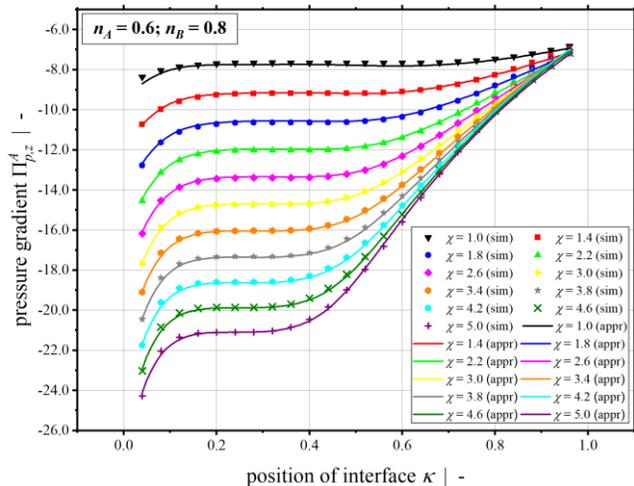


$$\Pi_{pz,A}, \tau_{yz,int}^*, v_{z,int}, \tau_{yzA,wall}^*, \tau_{yzB,wall}^*, \Pi_{V,A}, \Pi_{V,B}, \Pi_{Q,A}, \Pi_{Q,B}, \kappa = f(\kappa \text{ bzw. } \Pi_{V,A}, n_A, n_B, \chi)$$

Use-Case Modellierung Coextrusion

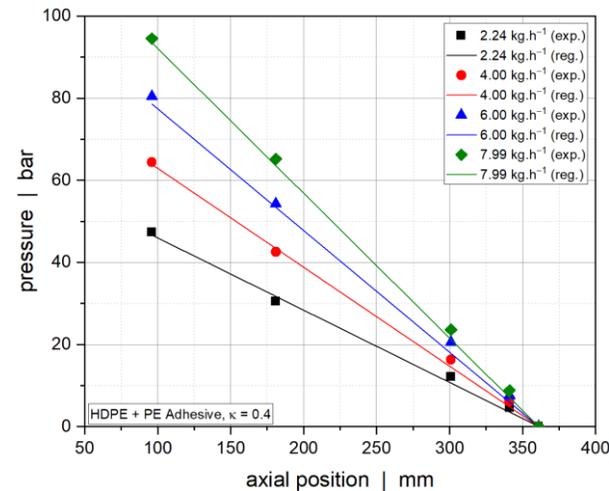
Numerische Validierung

- Unabhängiges Validierungsdatenset
 - Basierend auf 29,000 zufälligen Datenpunkten innerhalb des Parameterraumes



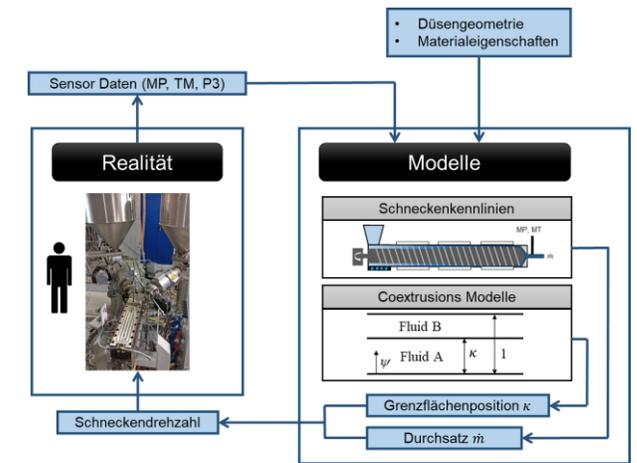
Experimentelle Validierung

- 2-Schicht Demonstrationsdüse ausgestattet mit Sensorik
 - Kontrollierte Fließbedingungen
- Inline Detektion von
 - Druckabfall
 - Schichtdickenverteilung



Anwendungen

- Prozessauslegung
- Prozesseinstellung
- Digitaler Prozesszwilling
- Prozessanalyse (Smart Sensor)
 - Kontaktzeit
 - Grenzflächenschubspannung

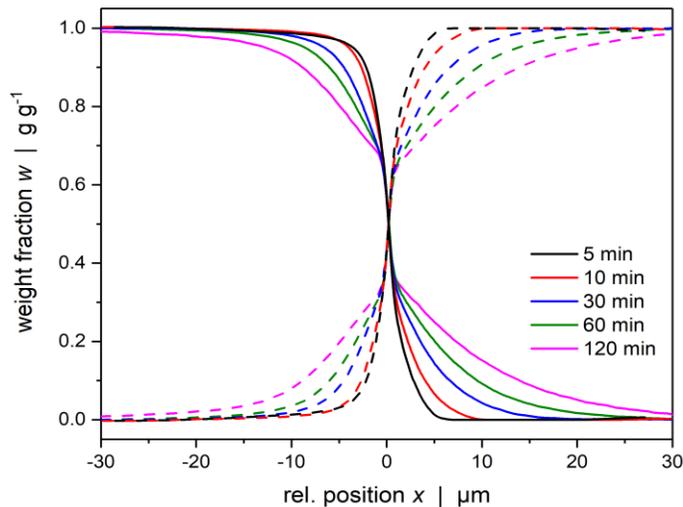


Use-Case Modeling Interdiffusion

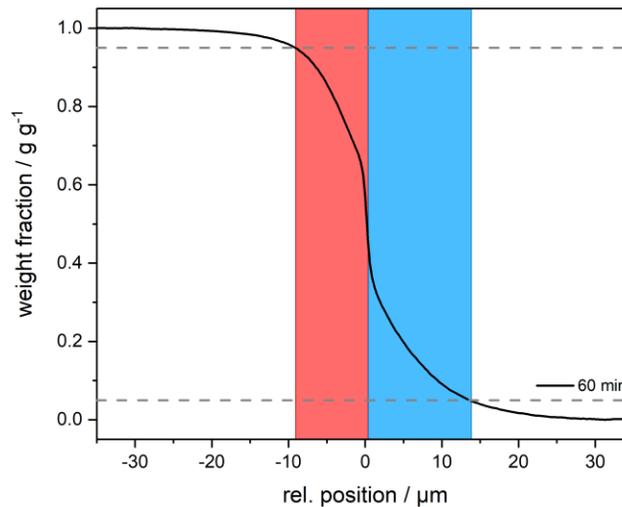
- Interdiffusions Experimente

- Material Kombination SAN – PMMA
- Temperaturbereich: 230 – 260°C
- Kontaktzeiten: 5 – 120 min

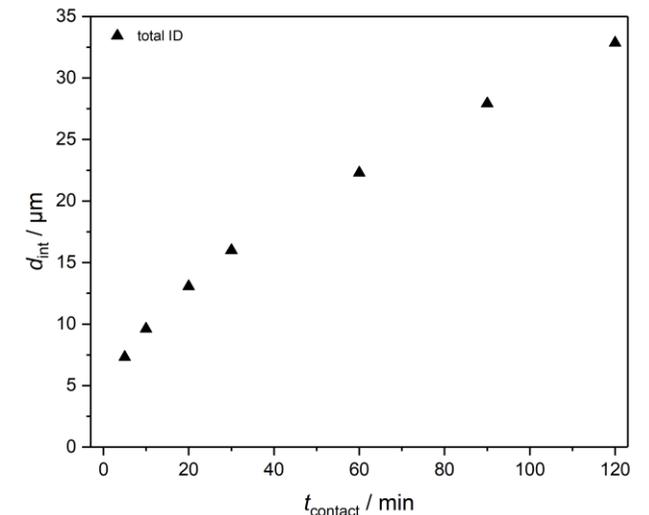
Konzentrationsprofile



Beurteilung Interdiffusions-
schichtdicke d_{int} für Bereich [0.05; 0.95]



Interdiffusionsschichtdicke über
Kontaktzeit



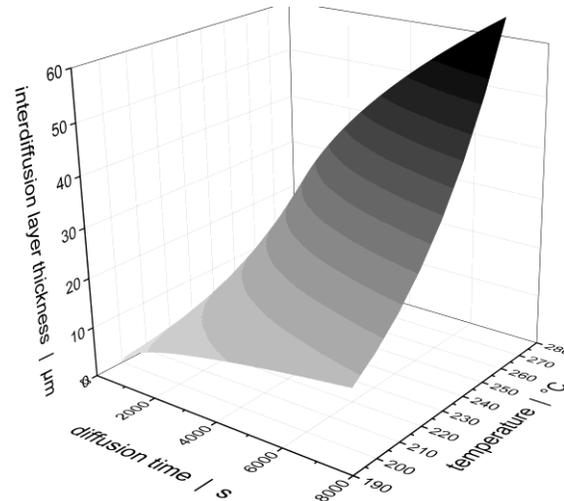
Use-Case Modeling Interdiffusion

- Interdiffusionsmodelle

- Diffusion nach Fick'schen Gesetzen: $d_{int} \sim \sqrt{t}$
- Temperaturabhängigkeit nach Arrhenius Beziehung: $d_{int} \sim e^{\beta \frac{1}{T}}$
- **Kombination zu Gesamtmodell:**

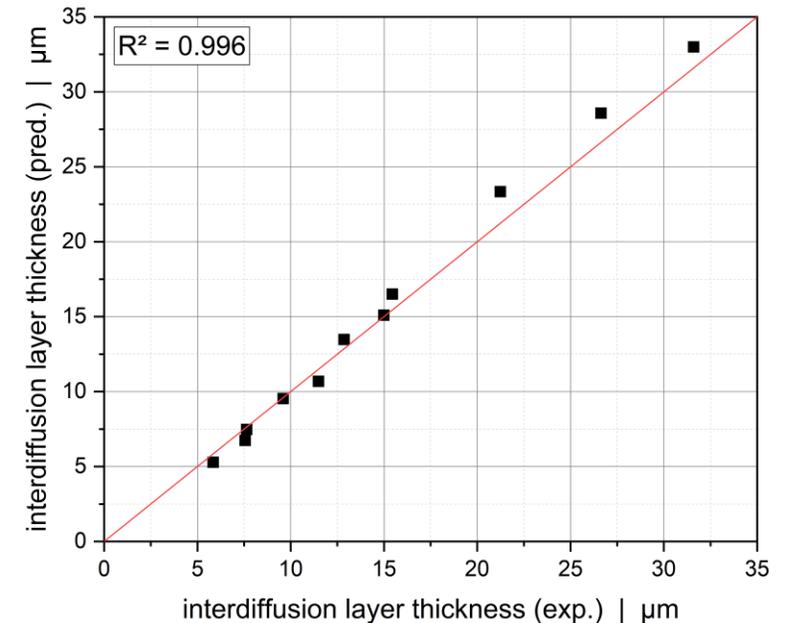
$$d_{int} = d_0 e^{\beta \frac{1}{T}} \sqrt{t}$$

$$\ln(d_{int}) = k + \beta \frac{1}{T} + 0.5 \ln(t)$$



d_{int} als Funktion von Zeit und Temperatur

Vergleich Modell vs Experiment



Inhalt

- Modellbildung in der Kunststoffverarbeitung
- Vorgehen in der Modellbildung und Simulation
- Use-Cases
- Zusammenfassung

Zusammenfassung

- Modellierung und Simulation bietet **Einblick in Prozesszustände die messtechnisch nicht zugänglich sind**
- Können **Zeit und Kosten** in der Anlagen / Produkt-auslegung **einsparen**
- **Modellgüte** wird maßgeblich bestimmt durch **Modellordnung, berücksichtigte Einflüsse** und **verwendeten Stoffwerten**
- Die **erforderliche** Genauigkeit bestimmt maßgeblich den **Aufwand** und die **Komplexität** der Modellbildung
- **Fehlerfreies Modell** ist nicht möglich
 - **Kalibrierung** – Anpassung der Parameter sodass möglichst kleiner Fehler
 - **Validierung** – Überprüfung der Praxistauglichkeit des Modells

Danke für die Aufmerksamkeit



Kontakt:

Wolfgang Roland

wolfgang.roland@jku.at

+43 732 2468 6589