

Untersuchung der Strömung von Polymerschmelzen in Düsen

Gewidmet Prof. Meißner zum Anlaß seiner Emeritierung

Investigations of Die Entry Flows of Polymer Melts

Dedicated to Prof. J. Meißner on the occasion of his retirement

1 Einleitung

Das Ziel der Arbeit von Ingenieuren, unabhängig von deren Fachrichtung, ist die Auslegung und Konstruktion von Apparaten oder Maschinen, die optimal an die auszuführende Aufgabe angepaßt sind. Für Ingenieure im Bereich der Polymertechnik sind insbesondere die Düsenlaufströmungen von großer Bedeutung, da diese häufig in den verschiedensten Prozessen anzutreffen sind. Seitdem leistungsfähige Computer zur Verfügung stehen, setzen Ingenieure numerische Simulationen zur Optimierung von Prozessen ein. Wegen der offensichtlichen Vorteile von Simulationen im Vergleich zu alternativen Experimenten im Labor oder an Pilotanlagen, stehen Simulationen oft als einziges mögliches Werkzeug zur Verfügung. Numerische Simulationen lassen sich schnell, billig und flexibel durchführen. Oft lassen sich eine Reihe von Parametern und Geometrien untersuchen indem lediglich einige Zahlen in einer Eingabedatei verändert werden. Vielleicht wichtiger ist die Fülle von Informationen über den betrachteten Prozeß, die entweder direkt oder indirekt vorliegen, und die entweder nur schwer oder gar nicht mit Hilfe von Experimenten erzeugt werden können. Besonders Informationen, die zur Optimierung von Geometrieauslegungen benötigt werden, wie zum Beispiel detaillierte Ergebnisse zur Schubspannungsverteilung, Energiedissipation und Druckverlust, lassen sich mit Hilfe von Experimenten kaum gewinnen.

Der Grad des Erfolgs und der Verwendbarkeit numerischer Simulationen als Hilfe für den Prozeßingenieur ist für verschiedene Gebiete und Anwendungen unterschiedlich. In der Polymertechnik bereitet das komplexe rheologische Verhalten der Polymere eine Herausforderung für diejenigen, die sich mit numerischen Simulationen beschäftigen. Insbesondere haben Probleme mit der korrekten Simulation der Strömung von Polymerschmelzen und -lösungen durch Düsen die Entwicklung optimaler Geometrien behindert. In den letzten Jahren jedoch ist ein großer Fortschritt bei der korrekten Simulation dieses komplexen Strömungsfeldes möglich geworden. Dies läßt sich primär auf verbesserte numerische Verfahren und auf genauere rheologische Daten für die Modelle zurückführen. Die verbesserte Verfügbarkeit von Messungen der Geschwindigkeitsfelder (mit Hilfe von LDV) und manchmal sogar der Spannungsverteilungen (mit Hilfe der Strömungsdoppelbrechung) in Experimenten erleichtert dem Numeriker die Entwicklung der Algorithmen. Der Fortschritt der Entwicklung ist so schnell, daß Polymertechniker in ein paar Jahren die Entwicklung von Strömungsgeometrien zu einem großen Teil, wenn nicht sogar vollständig, mit Hilfe von numerischen Simulationen durchführen werden.

1 Introduction

The ultimate goal of the engineer in any field is the design and construction of a given apparatus or device of interest which achieves optimal performance. For the polymer processing engineer, the die entry geometry is of great interest due to its frequent occurrence in many processing devices. Since the advent of the high-powered computer, numerical simulations have been used by the engineer as a tool for achieving the goal of optimal performance. In fact, the clear practical benefits of numerical simulations over the alternative use of laboratory or pilot-plant experiments make numerical simulations the only feasible tool available to the engineer for reaching this goal. Numerical simulations are fast, inexpensive, and flexible; a variety of conditions and designs can be easily studied, sometimes with as little effort as changing a few numbers in a data file. Perhaps even more important is the vast wealth of information about the process that is readily available or extractable from the simulation, but that is either difficult or impossible to obtain from an experiment. In particular, the information which is needed to optimize geometry designs – e. g. detailed information about stress distributions, energy dissipation, and pressure loss – are usually not obtainable from experiments.

How successful and useful numerical simulations have been in aiding engineers has varied from field to field, or from application to application. In the polymer processing field, the complex rheological character of polymeric materials has proved to be a challenge for those involved in numerical simulations. Specifically, the difficulty in accurately simulating the complex die entry flow behavior of polymer melts and solutions has led to difficulties in developing die geometries with optimal design. Over the last few years, however, there has been great progress in the ability of researchers to accurately simulate this complex flow behavior. This is due primarily to improved numerical algorithms and better and more accurate rheological data on which to build models. The increased availability of velocity field measurements (via Laser Doppler) and sometimes stress measurements (via flow birefringence) taken during flow experiments has also helped the numerical analyst in algorithm development. So fast is the pace of advancements that several years from now, the polymer processing engineer will be relying heavily, if not solely, on numerical simulations for geometry designing.

* ETH Zürich, Institut für Polymere, ML J 22, Zürich, Switzerland

Beiträge
Papers

K. Feigl*,
H. C. Öttinger*,
Switzerland



net, Ebenfalls dargestellt sind Partikelpositionen für verschiedene Zeiten t vor Erreichen des Austrittsquerschnitt bei $X_1 = 0$ ($t = 0$ für $X_1 = 0$). Es ist zu beachten, daß die berechneten und gemessenen Stromlinien sehr gut übereinstimmen obwohl die Anordnung der Punkte darauf hindeutet, das die Geschwindigkeit der Partikel im Experiment geringer ist als in der Simulation. Ein Beispiel für die Informationen, die über die Partikel entlang der Stromlinien zur Verfügung stehen ist in Abb. 4 wiedergegeben, wo Dehnraten ($\dot{\epsilon}_{11}$ und $\dot{\epsilon}_{22}$) für verschiedene Partikelbahnen gegenübergestellt sind.

Für den Ingenieur, der sich mit der Optimierung derartiger Düsengeometrien beschäftigt, sind Informationen über die Energiedissipation von großer Bedeutung. Derartige Informationen lassen sich nicht mit Hilfe von Experimenten erhalten, so daß der Ingenieur hierfür numerische Simulationen verwenden muß. Von Feigl und Öttinger [3] wurde der Zusammenhang zwischen der lokalen Energiedissipation, d. h. die Energiedissipation aufgrund der Kontraktion, und dem Druckverlust, d. h. Druckverlust aufgrund der Kontraktion, aufgezeigt und erläutert, wie der Einfluß der Scher- und Dehnströmung identifiziert werden kann.

Abb. 5 enthält eine farbige Darstellung der lokalen Energiedissipation, gewichtet mit dem Faktor r . Die Simulation wurden für die achsensymmetrische Düse mit einer scheinbaren Schergeschwindigkeit von $D = 33 \text{ s}^{-1}$ durchgeführt. Der Faktor r wurde berücksichtigt, um eine vereinfachte Abschätzung des Druckverlusts mit Hilfe eines Volumenintegrals (Gleichung (22) in [3]) zu ermöglichen. Ohne jeglichen Informationsverlust ist lediglich eine Region des Eintritts dargestellt. Die weiße Kurve bezeichnet die Stromlinie, die die Primär- und Sekundärströmung trennt. Schwarze Bereiche bedeuten eine negativ gewichtete Energiedissipation und die hellsten Bereiche maximal positiv gewichtete Energiedissipation. Die Maxima befinden sich in der Wiedereintrittsecke und die Werte sinken für zunehmende Entfernung von diesem Bereich.

Die dargestellten Farben geben ebenfalls den Beitrag bestimmter Regionen zum Druckverlust an. Jede der Regionen, die mit einer der zehn Farben (ausgenommen Schwarz) bezeichnet ist, trägt etwa 10% am Gesamtdruckverlust bei. Damit ist der Einfluß einer kleinen hellen Region in der Nähe der Wiedereintrittsecke auf den Druckverlust nahezu so groß wie der der dunklen Region, die sich über den in Abb. 5 dargestellten Bereich hinaus erstreckt.

5 Zusammenfassung

Die Düseneinlaufströmung wird in einer Vielzahl von Apparaten der Polymertechnik beobachtet. Über die Jahre hinweg wurde eine Fülle von Zeit und Forschungsgeldern in die Untersuchungen zum Verständnis des komplexen Strömungsverhaltens der Polymer-schmelzen in derartigen Geometrien investiert. Das Ziel, das Prozeßingenieure mit derartigen Untersuchungen anstreben, ist die Entwicklung von Geometrien mit optimalen Prozeßeigenschaften. Zum Erreichen dieses Ziels sind numerische Simulationen, zum Beispiel auf der Basis von finite-Elemente-Simulationen, ein wertvolles Werkzeug. Mit Hilfe von numerischen Simulationen lassen sich Informationen über das Strömungsverhalten von Polymeren gewin-

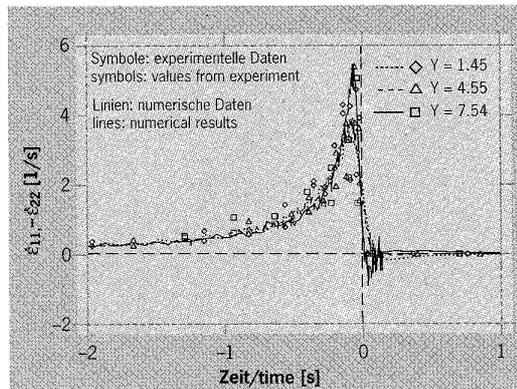


Abb. 4: Vergleich der gemessenen und berechneten Dehngeschwindigkeiten für die Spaltgeometrie und $D = 25 \text{ s}^{-1}$

Fig. 4: Comparison of the elongation rates from the slit die experiment and simulation at $D = 25 \text{ s}^{-1}$

readily extract information about the entrance pressure loss via a volume integral (in Eqn (22) of [3]). Without loss of information, only a portion of the domain around the die entry is shown. The white curve indicates the separating streamline between the primary and secondary flows. Black regions denote areas of negative values of (weighted) energy dissipation, with brightest denoting areas of maximum (weighted) energy dissipation. The maximum values occur near the reentrant corner and as we move away from this corner the magnitudes decrease.

The colors also indicate the contribution of certain regions to the entrance pressure loss. The region marked by each of the ten colors (black excluded) represents approximately a 10% contribution to the entrance pressure loss. Therefore, the small, brightest region near the reentrant corner contributes approximately as much to the entrance pressure loss as the large dark region (which actually extends beyond the portion of the domain shown in figure 5).

5 Conclusions

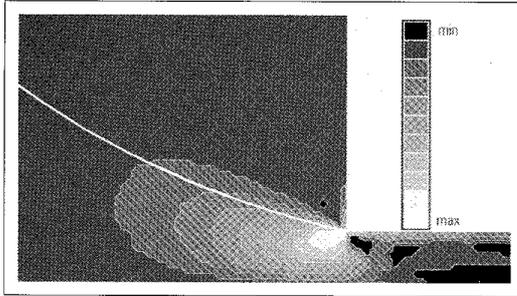
The die entry geometry appears frequently in many processing apparatus in the polymer industry. Over the years, an enormous amount of research time and money has been devoted to the characterization and understanding the very complex flow behavior of polymer melts in this type of geometry. The ultimate goal from the perspective of the polymer processing engineer is the design of die geometries with optimal performance properties. To achieve this goal, numerical simulations of polymer flows, using for example finite element techniques, are a necessary tool. Numerical simulations provide us with vital information about the flow behavior of polymers which usually cannot be obtained from a flow experiment. Examples include local information about the stresses, the energy dissipation, and the entrance pressure loss.

However, the complicated rheology of polymer melts, which is not yet completely understood, presently makes the success of numerical simulations of polymer flow in complex geometries less than certain. Therefore, flow experiments such as the two described in this article still have an important role to play today. Flow experiments provide informations about how these complex rheological materials behave in a variety of mixed deformations, where conventional rheometry fails us. In addition, flow experiments provide useful data (e. g. streamline



Abb. 5:
Farbdarstellung der gewichteten Energie-dissipation aufgrund der Kontraktion für einen Bereich $-6 \leq z \leq 3$, $0 \leq r \leq 5$ und $D = 33 \text{ s}^{-1}$

Fig. 5:
Colored graph of the weighted energy dissipation due to the contraction in the portion of the domain given by $-6 \leq z \leq 3$, $0 \leq r \leq 5$ for $D = 33 \text{ s}^{-1}$. From the axisymmetric die entry simulation



nen, die mit Hilfe experimenteller Untersuchungen nicht zur Verfügung stehen. Als Beispiele seien Informationen über die Spannungen, die lokale Energiedissipation und den Druckverlust genannt.

Die komplizierte Rheologie von Polymerschmelzen, die bislang zum Teil nicht vollständig verstanden ist, macht den Erfolg des Einsatzes numerischer Verfahren unsicher. Deshalb spielen die in diesem Artikel vorgestellten Strömungsexperimente eine wichtige Rolle. Derartige Strömungsexperimente liefern Informationen über das komplexe rheologische Verhalten dieser Materialien für verschiedenste Deformationsfälle, für die die konventionelle Rheologie keine Daten bietet. Weiterhin ermöglichen derartige Experimente das Messen wichtiger Größen (wie zum Beispiel Stromlinien und Geschwindigkeitsfelder), mit Hilfe derer die Validität numerischer Simulationen getestet werden kann und Grundmodelle verbessert werden können.

Es besteht Übereinstimmung zwischen Entwicklern und Anwendern numerischer Verfahren für die Strömungssimulation viskoelastischer Materialien, daß der Weg zum Erfolg über die Entwicklung realistischer Materialgesetze (Grundgleichungen) und die Berücksichtigung relevanter physikalischer Randbedingungen (Temperatur und transiente Einflüsse, Grenzschichten und deren Randbedingungen, dreidimensionale Strömungen) sowie deren Implementation in den Algorithmen führt. Die derzeitige Entwicklung ist bereits auf diesem Weg und innovative Ansätze wie CONNFESSIT (Calculation of Non-Newtonian Flow: Finite Elements and Stochastic Simulation Technique) ist ein solcher Schritt. Hier wird die Dynamik der Polymere auf der molekularen Ebene modelliert, so daß Grundgleichungen überflüssig werden, in denen physikalische Eigenschaften der Polymere nicht berücksichtigt sind [11], [12].

Trotz der derzeitigen Vereinfachungen läßt die rasante Entwicklung der letzten Jahre im Bereich numerischer Verfahren für Polymere die Folgerung zu, daß das Ziel der vollständigen numerischen Simulation erreichbar ist.

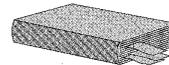
Rh

patterns, velocity field measurements) with which the validity of numerical simulations can be tested and constitutive models can be fine-tuned.

It is the overwhelming consensus among both developers and users of numerical algorithms for viscoelastic flow calculation that the road to increased success is in the direction of the development of more realistic material descriptions (e.g. constitutive equations) and the incorporation of additional physically relevant effects and conditions into the numerical algorithms (e.g. thermal and transient effects, boundary layers and more realistic boundary conditions, three-dimensional flow). Current research is focused in these directions, leading at times to innovative approaches such as the CONNFESSIT approach (Calculation of Non-Newtonian Flow: Finite Elements and Stochastic Simulation Technique). In CONNFESSIT the polymer dynamics are simulated at the molecular level, eliminating the need for a constitutive equation in which important polymer physics is often lost [11], [12].

Despite any current imperfection, the rapid pace of progress that numerical simulations of polymeric fluids has enjoyed over the past several years gives one reason to believe that the ultimate goal of the engineer is well within reach.

Rh



- [1] Knobel, B.: „Untersuchung der Einlaufströmung einer Polyethylen-Schmelze in eine Düse von kreisförmigem Querschnitt mit der Laser-Doppler Anemometrie“, Ph.D. Thesis, Diss. ETH Nr. 9480, Zürich, 1991
- [2] Kramer, H.: „Geschwindigkeitsfelder und Deformation bei der Strömung einer Polyethylen-Schmelze durch eine Schlitzdüse“, Ph.D. Thesis, Diss. ETH Nr. 10024, Zürich, 1993
- [3] Feigl, K.; Öttinger, H.C.: J. Rheol. 38 (1994), No. 4, p. 847–874
- [4] Feigl, K.; Öttinger, H.C.: J. Rheol. 40 (1996), No. 1, p. 21–35
- [5] Wagner, M.H.; Demarmels, A.: J. Rheol. 34 (1990), p. 943–958
- [6] Bernstein, B.; Feigl, K.A.; Olsen, E.T.: J. Rheol. 38 (1994), p. 53–71
- [7] Bernstein, B.; Malkus, D.S.; Olsen, E.T.: Int. J. Num. Meth. Fluids 5 (1985), p. 43–70
- [8] Meissner, J.: Trans. Soc. Rheol. 16 (1972), p. 405–420
- [9] Meissner, J.: Ann. Rev. Fluid Mech. 17 (1985), p. 45–64
- [10] Winter, H.H.: J. Non-Newt. Fluid Mech. 10 (1982), p. 157–167
- [11] Laso, M.; Öttinger, H.C.: J. Non-Newt. Fluid Mech. 47 (1993), p. 1–20
- [12] Öttinger, H.C.: Stochastic Processes in Polymeric Fluids; Springer: Berlin, 1996