

***Ein Beitrag zur Bewertung der Mischwirkung von Schneckenelementen auf
dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder***

zur Erlangung des akademischen Grades
DOKTOR DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Paderborn

genehmigte
DISSERTATION

von
Jan Philipp Oldemeier, M.Sc.
aus Herford

Tag des Kolloquiums: 22.06.2026

Referent: Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner

Korreferent: Prof. Dr. Thomas Tröster

Vorwort

Die vorliegende Dissertation entstand während meiner Tätigkeit am Lehrstuhl für Kunststoffverarbeitung der Universität Paderborn in der Fachgruppe Compoundierung. An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei allen Menschen bedanken, die mich während meiner Promotionszeit begleitet haben. Durch ihre fachliche Unterstützung, ihren Zuspruch und ihre Motivation haben sie einen wichtigen Beitrag zum erfolgreichen Abschluss dieser Arbeit geleistet.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr.-Ing. Volker Schöppner, für die kontinuierliche Unterstützung, das entgegengebrachte Vertrauen sowie die stets konstruktive fachliche und persönliche Begleitung während meiner Promotionszeit. Seine wertvollen Anregungen und sein offenes Ohr haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Thomas Tröster für die Übernahme des Zweitgutachtens und sein Interesse an meiner Arbeit. Frau Prof. Dr.-Ing. Julia Riese danke ich herzlich für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission. Mein Dank gilt darüber hinaus Herrn Dr.-Ing. Steffen Jesinghausen für seine Bereitschaft, als weiteres Mitglied der Prüfungskommission mitzuwirken.

Ein besonderer Dank richtet sich außerdem an meine Kolleginnen und Kollegen am KTP. Die tägliche Zusammenarbeit, die kurzen Wege bei fachlichen und organisatorischen Fragestellungen sowie die jederzeit vorhandene Hilfsbereitschaft haben wesentlich zu einer angenehmen und produktiven Arbeitsatmosphäre beigetragen. Nicht zuletzt bleiben die gemeinsamen Teamevents, Exkursionen und die vielen persönlichen Gespräche in bester Erinnerung.

Von Herzen danke ich meinen Freunden und meiner Familie. Ihre Unterstützung, ihr Zuspruch und ihre Motivation haben mich während der gesamten Promotionszeit begleitet. Sie haben mich in herausfordernden Phasen bestärkt und mir stets den nötigen Rückhalt gegeben. Ohne ihre Geduld, ihr Vertrauen und ihre Ermutigung wäre die erfolgreiche Fertigstellung dieser Dissertation nicht möglich gewesen.

Jan Philipp Oldemeier

Paderborn im Juli 2026

Zusammenfassung:

Der Doppelschneckenextruder ist ein zentrales Arbeitsaggregat der Kunststoffverarbeitung. Durch seine modulare Zylinder- und Schneckenkonfiguration lässt er sich flexibel an unterschiedliche Anwendungen anpassen. Beim Compoundieren verschiedener Materialien ist eine möglichst homogene Verteilung der Zuschlagstoffe in der Schmelze entscheidend. Dabei spielen sowohl distributive als auch dispersive Mischmechanismen eine wichtige Rolle. Da bislang keine einheitlichen Bewertungskriterien für die Mischleistung existieren, erfolgt die Auswahl geeigneter Schneckenelemente meist empirisch. Ziel der Arbeit ist daher, die Mischwirkung verschiedener Elementgeometrien systematisch zu bewerten. Hierzu wurden zunächst geeignete Bewertungs- und Auswertungsmethoden entwickelt. Auf Basis von 3D CFD-Strömungssimulationen mit Partikelverfolgung konnte das Strömungs- und Mischverhalten im Extruder detailliert abgebildet werden. Die Analyse erfolgte automatisiert über eigens programmierte Python-Skripte. Das distributive Mischen wurde mithilfe statistischer Kennwerte der Partikelverteilung bewertet, während beim dispersiven Mischen insbesondere Schubspannungen entlang der Partikelpfade untersucht wurden. Zur Validierung der Simulationsergebnisse wurden ergänzende Experimente durchgeführt.

Summary:

The twin-screw extruder is a key piece of equipment in plastics processing. Its modular cylinder and screw configuration allows it to be flexibly adapted to different applications. When compounding different materials, it is crucial to achieve the most homogeneous distribution of additives in the melt possible. Both distributive and dispersive mixing mechanisms play an important role in this process. Since there are currently no uniform evaluation criteria for mixing performance, the selection of suitable screw elements is usually done empirically. The aim of this work is therefore to systematically evaluate the mixing effect of different element geometries. To this end, suitable evaluation and analysis methods were first developed. Based on 3D CFD flow simulations with particle tracking, the flow and mixing behaviour in the extruder could be mapped in detail. The analysis was performed automatically using specially programmed Python scripts. Distributive mixing was evaluated using statistical parameters of particle distribution, while shear stresses along the particle paths were examined in particular for dispersive mixing. Supplementary experiments were carried out to validate the simulation results.

Liste der eigenen Vorveröffentlichungen

- [OS24] Oldemeier, J. P.; Schöppner, V.: Analysis of the Dispersive and Distributive Mixing Effect of Screw Elements on the Co-Rotating Twin-Screw Extruder with Particle Tracking. *Polymers*, (16)21, 2024, 10.3390/polym16212952
- [RWO+22] Rüppel, A.; Wolff, S.; Oldemeier, J. P.; Schöppner, V.; Heim, H.-P.: Influence of Processing Glass-Fiber Filled Plastics on Different Twin-Screw Extruders and Varying Screw Designs on Fiber Length and Particle Distribution. *Polymers*, (14)15, 2022, 10.3390/polym14153113
- [SBO+23] Schöppner, V.; Brüning, F.; Oldemeier, J.; Brandt, O.; Austermeier, L.; Hanselle, F.: Recycling-Ansatz für mehrkomponentige Kunststoffprodukte durch thermische Verbundtrennung. *Extrusion*, 8, 2023, S. 56–59

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	1
Abkürzungsverzeichnis	3
1 Einleitung und Problematik	10
2 Stand der Technik	11
2.1 Compoundierung	11
2.2 Der gleichläufige Doppelschneckenextruder	11
2.2.1 Verfahrenszonen	13
2.2.2 Schneckenelemente	14
2.3 Zuschlagstoffe	21
2.3.1 Additive	21
2.3.2 Füllstoffe	22
2.3.3 Pigmente	24
2.4 Mischen	24
2.4.1 Mischarten	25
2.4.2 Bewertung der Mischgüte	31
3 Zielsetzung und Lösungsweg	33
4 Simulation der Mischgüte	35
4.1 Stand der Technik Strömungssimulation	35
4.1.1 Einleitung CFD – Möglichkeiten und Grenzen	35
4.1.2 Inhalte einer numerischen Simulation	36
4.1.3 Fehler und Genauigkeit einer numerischen Simulation	38
4.1.4 DEM Simulation – Möglichkeiten und Grenzen	38
4.2 Vorgehensweise (Simulation)	39
4.2.1 Aufbau der Simulation	40
4.2.2 Verwendete Doppelschneckenextruder	43
4.2.3 Verwendete Schneckenelemente	43
4.2.4 Verwendete Materialien	45

4.3	Methoden zur Analyse der Mischgüte (simulativ).....	46
4.3.1	Distributives Mischen	46
4.3.2	Dispersives Mischen	65
4.4	Auswertung	67
4.4.1	Distributives Mischen	67
4.4.2	Dispersives Mischen	75
5	Experimentelle Bestimmung der Mischgüte	85
5.1	Stand der Technik Partikeltechnologie.....	85
5.1.1	Charakterisierung von einzelnen Partikeln.....	86
5.1.2	Formfaktoren von Partikeln	87
5.1.3	Partikelgrößenverteilungen	88
5.1.4	Messverfahren	90
5.2	Vorgehensweise (Experimentelle Untersuchung)	99
5.2.1	Versuchsaufbau	99
5.2.2	Verwendete Materialien	103
5.2.3	Verwendete Schneckenkonfigurationen.....	112
5.3	Methoden zur Analyse der Mischgüte (experimentell)	113
5.3.1	Distributives Mischen	114
5.3.2	Dispersives Mischen	116
5.4	Auswertung	117
5.4.1	Distributives Mischen	117
5.4.2	Dispersives Mischen	121
6	Korrelation der simulativen und experimentell bestimmten Mischgütembewertung	128
7	Zusammenfassung	132
8	Literaturverzeichnis	135
	Studentische Arbeiten	143
	Erklärung zur Zitation von Inhalten aus studentischen Arbeiten	145
	Anhang	146

Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Symbole

3D	dreidimensional
A	Fläche
A_H	Hamaker-Konstante
$Al(OH)_3$	Aluminiumhydroxid
A_p	Partikeloberfläche
As	Amperesekunde
a	Achsabstand / Abstand
a_a	Steigungswinkel
a_0	Kontaktabstand
$BaSO_4$	Bariumsulfat
bzw.	beziehungsweise
CAD	Computer-Aided Design
$CaCO_3$	Calciumcarbonat
$CaSO_4$	Calciumsulfat
C	Coulomb
C-Fasern	Carbonfasern
CFD	Computational Fluid Dynamics
CSV	comma-separated values
cm^3	Kubikzentimeter
c_m	Massenkonzentration
c_v	Volumenkonzentration
D	Durchmesser
D_a	Außendurchmesser
DEM	Diskrete-Elemente-Methode
D_i	Innendurchmesser

D _{vv}	Durchmesser bei vv % der Summenverteilung
d_{St}	Stokesdurchmesser
d_p	mittlerer idealisierter Partikeldurchmesser
d _s	Durchmesser der oberflächengleichen Kugel
d _v	Durchmesser der volumengleichen Kugel
d ₃₂	Sauterdurchmesser
d 50%, d50	mittlere Teilchendurchmesser
d 98%	oberer Schnitt (englisch top cut)
e	Elementarladung
engl.	englisch
et al.	et alia (deutsch: und andere)
FDM	Finite-Differenzen-Methode
FEM	Finite-Elemente-Methode
F_{Kap}	Kapillarkräfte
$F_{N,max}$	Maximale Normalkraft
F_{el}	Elektrostatische Kräfte
F_{vdW}	Van-der-Waals Kräfte
FVM	Finiten-Volumen-Methode
f	Heywoodfaktor
G	Schubmodul
G	Grenzen
Gew.-%	Gewichtsprozent
G_{oben}	Grenzwert oben
g	Gramm
g_1	Erdbeschleunigung
HDPE	High Density Polyethylen
h	Steigung
h	Stunde

$h\omega$	Lifshitz-Konstante
Int.	Integral
i	Partikel-Klassen
J	Joule
KB	Knetblock
k	Anzahl der Kontaktstellen
kg	Kilogramm
L	Länge
M	Motor
Max.	maximale Schubspannung
Mech.	Mechanisch
MFR-Wert	Schmelze-Massefließrate
MPa	Megapascal
MQ	Mischkennzahl nach Frank
M_q	Kennzahl distributives Mischen
$M_{q_{dist. (Sim.)}}$	Kennzahl distributives Mischen der Simulation
$M_{q_{dist. (Exp.)}}$	Kennzahl distributives Mischen der Experimentellen Untersuchungen
$M_{q_{disp. (Sim.)}}$	Kennzahl dispersives Mischen der Simulation
$M_{q_{disp. (Sim. Int)}}$	Kennzahl dispersives Mischen der Simulation für den Fall „Erosion“
$M_{q_{disp. (Sim. max)}}$	Kennzahl dispersives Mischen der Simulation für den Fall „Bruch“
M_{q_F}	Kennzahl distributives Mischen nach Frank
$M_{q_{neu}}$	Kennzahl distributives Mischen
$M_{q_{neu\ normiert}}$	normierte Mischkennzahl
m	Meter
min	Minute
mJ	Millijoule

mm	Millimeter
mm ²	Quadratmillimeter
m ²	Quadratmeter
m ³	Kubikmeter
N	Newton
n	Drehzahl
n_1	Anzahl der Dreiecke
nm	Nanometer
P	Nur Punkte
PP	Polypropylen
Pa	Pascal
$Q_r(x)$	Summenhäufigkeit
Q_x	x-tes Perzentil
Q_0	Verteilungssumme nach Anzahl
Q_3	Verteilungssumme nach Volumen
q_3	Verteilungsdichte nach Volumen
$q_r(x)$	Dichteverteilung
$q_r(\ln(x))$	logarithmische Dichteverteilung
REM	Rasterelektronenmikroskop
Re_p	Partikel-Reynoldszahl
Ref.	Referenz
ROI	Return On Investment
r	Index zur Bestimmung der Mengen Art
r_a	Radius des Zylinders der Doppelschnecke
r_i	Innenradius
r_k	Charakteristischer Abstand
r_m	Radius der Punktquellen
r_1	Partikeldurchmesser

SE	Schneckenfördererelement
SIGMA	Simulation gleichläufiger Doppelschneckenmaschinen
SiO ₂	Siliciumdioxid
S _m	massenbezogene spezifische Oberfläche
S _v	volumenbezogene spezifische Oberfläche
S _{v1}	spezifische Oberfläche
s	Sekunde
<i>s</i>	Standardabweichung der Dreiecksflächeninhalte
<i>s_{max}</i>	maximale Standardabweichung
Tab.	Tabelle
TB	Terabyte
TiO ₂	Titandioxid
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
U	Umdrehung
<i>U</i> ₁	Kontakt Potenzial
u	Umfangsgeschwindigkeit
<i>u_{ges}</i>	Anzahl der Partikel in der Partikelverteilung
<i>u_z</i>	Anzahl der Partikel im Intervall z
V	Volt
<i>Var</i>	Variationskoeffizient
<i>Var_{Ausgang}</i>	Variationskoeffizient der Ausgangsverteilung
Ver.	verascht
VP	Versuchspunkte
v	Geschwindigkeit
vgl.	vergleiche
<i>W</i> ₁₂	Adhäsionsarbeit pro Fläche
w	Maschen- bzw. Lochweite
<i>w</i>	Relativgeschwindigkeit

x	Partikelgröße
x_{Cmax}	längste Sehne
x_{Fe}	Feretdurchmesser
$x_{h,r}$	Modalwert der Mengenart r
x_{Ma}	Martindurchmesser
x_{α}, x_{β}	unabhängige Größen eines Partikels
x_1	Partikeldurchmesser
$x_{50,r}$	Medianwert der Mengenart r
$\bar{x}$	Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte, Mittelwert der Grauwertverteilung
$\bar{x}_{ideal}$	Idealer Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte
$\bar{x}_r$	mittlere Partikelgröße der Mengenart r
$\bar{x}_z$	mittlere Partikelgröße im Intervall z
ZME	Zahnmischelement
z. B.	Zum Beispiel

Griechische Symbole

α	Versatzwinkel der Punktquellen
α_a	Steigungswinkel
$\dot{\gamma}$	Scherrate
$\Delta t_{Rayleigh}$	Rayleigh-Zeitstufe
Δx_i	Intervallbreite der Partikelklasse i
δ	Spaltmaß
ϵ	Porosität des Agglomerats
ϵ_{ges}	Gesamtfehler
ϵ_h	Diskretisierungsfehler
ϵ_{it}	Iterationsfehler
ϵ_{mod}	Modellfehler
ϵ_{num}	numerischer Fehler

ε_r	Dielektrizitätszahl
ε_0	Elektrische Feldkonstante
η	Viskosität
μm	Mikrometer
ρ	Dichte
ρ_f	Fluiddichte
ρ_p	Partikeldichte
ρ_s	Schüttdichte
σ_F	Flächenladungsdichte
σ_Z	Zugfestigkeit
σ_{11}	Oberflächenenergie Material 1
τ	Schubspannung
Φ	Modellgröße
Φ_{phys}	reale physikalische Größe
φ_{max}	Ladungsdichte
$\Psi_{\alpha,\beta}$	Formfaktor
ω_f	Fluidgeschwindigkeit
ω_{st}	Sinkgeschwindigkeit

Sonstige Symbole

- ° Grad
- °C Grad Celsius

1 Einleitung und Problematik

Der gegenwärtige Kunststoffmarkt ist durch eine signifikante Diversität an unterschiedlichen Polymergrundtypen charakterisiert, die sich hinsichtlich ihrer chemischen Struktur, Eigenschaften und Anwendungsfelder deutlich unterscheiden. Die technischen Anforderungen, die der Verarbeiter an das jeweilige Kunststoffgranulat stellt, erfordern eine gezielte Aufbereitung der Polymere im Rahmen der Compoundierung auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder [KB19].

Die Compoundierung umfasst im Wesentlichen die gezielte Einarbeitung von Zuschlagstoffen [KB19]. Dazu zählen Additive, die beispielsweise die chemische Beständigkeit beeinflussen, Füllstoffe, welche die mechanischen Eigenschaften verbessern, sowie Pigmente zur Farbgebung [Sch19]. Um ein homogenes Endprodukt zu erhalten, ist es essenziell, dass diese Zuschlagstoffe sowohl distributiv (Verteilen der Komponenten) als auch dispersiv (Zerteilen der Komponenten) gemischt werden [Koh19]. Diese Mischvorgänge werden von verschiedenen Schneckenelementen im Extruder übernommen.

Zur Verfügung stehen bei dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder unterschiedliche Arten von Schneckenelementen, wie Fördererlemente, Knetblöcke, Mischelemente oder spezielle Sondergeometrien. Charakteristische Größen wie die Elementlänge, die Gangzahl, die Steigung und die Steigungsrichtung (bei Fördererlementen) oder die Anzahl der Knetscheiben und der Versatzwinkel (bei Knetblöcken) dienen der Unterscheidung.[Küh16]

Bei der Konfiguration der Schnecke ergibt sich jedoch eine zentrale Fragestellung: Welches Element eignet sich am besten, um einen bestimmten Zuschlagstoff optimal homogen einzumischen? Die tatsächlich erzielte Mischleistung der einzelnen Schneckenelemente ist bislang nicht ausreichend erforscht, sodass eine gezielte Auswahl für spezifische Anwendungsfälle erschwert wird. Dies ist ebenso auf neu entwickelte Geometrien anzuwenden, deren Mischwirkungen anfänglich unzureichend charakterisiert sind und daher in der Praxis selten zum Einsatz kommen.

Daraus ergibt sich die grundlegende Problematik: Die Mischwirkung von Schneckenelementen ist bislang nicht hinreichend beschrieben und klassifiziert. Für die Compoundierung fehlen daher belastbare Kriterien, um eine differenzierte und anwendungsspezifische Auswahl der Schneckenelemente für eine Schneckenkonfiguration in einer Mischzone treffen zu können.

2 Stand der Technik

2.1 Compoundierung

Das Compoundieren ist ein wichtiger Schritt bei der Aufbereitung/Modifikation von Basiskunststoffen, indem die Eigenschaften dieser Basiskunststoffe gezielt durch die Zugabe von Zuschlagstoffen beeinflusst werden und erfolgt in der Regel auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. Die Auswahl des Zuschlagstoffs wie z.B. Kohlefasern, Talkum, Flammenschutzmittel oder Farbpigmente wird individuell an den Anwendungsfall angepasst. Die Compoundierung ist somit ein Zwischenschritt bei der Verarbeitung von Kunststoffen und ermöglicht die Bereitstellung von vielen unterschiedlichen Kunststoffcompounds für die Herstellung von Kunststoffendprodukten aus einer geringen Anzahl an Basiskunststoffen. Dabei hat die Aufbereitung von Basiskunststoffen gegenüber der Neuentwicklung neuer Basiskunststoffe mehrere Vorteile, die das Compoundieren so interessant machen. Für die Entwicklung neuer Basiskunststoffe sind viele kleine Schritte notwendig, bevor der neue Basiskunststoff von der Idee in die Serienproduktion geht. Gerade das Hochskalieren von dem Labormaßstab zum Industriemaßstab ist mit vielen Risiken verbunden. Bei der Compoundierung sind die Verarbeiter deutlich schneller, da sowohl die Anlagen- als auch die Prozesskenntnis bereits vorhanden ist. Dadurch ist ein ROI (Return On Investment) bei der Compoundierung deutlich eher erreicht als bei der Neuentwicklung von Basispolymeren. Ein weiterer Vorteil bei der Compoundierung ist der modulare Aufbau des Doppelschneckenextruders, der somit eine flexible Anpassung des Compoundierprozesses an das Produkt ermöglicht. [KBR19, Koh16, Sch19]

2.2 Der gleichläufige Doppelschneckenextruder

Die Kernaufgaben des Extruders in der Kunststoffverarbeitung sind das Aufschmelzen von Kunststoffgranulaten oder -pulvern und das Einarbeiten von Zuschlagstoffen oder anderen Polymeren [Koh16]. Für diese Aufgaben können unterschiedliche Arten von Extrudern ausgewählt werden. So existieren aktuell Einwellen-, Doppelwellen- und Mehrwellenextruder mit unterschiedlichen Eigenschaften. Beim Doppelwellenextruder auch Doppelschneckenextruder genannt wird z. B. die Drehrichtung in gleichläufig und gegenläufig sowie das Schneckenprofil in dicht kämmend und nicht kämmend unterschieden. Diese unterschiedlichen Ausführungen des Doppelschneckenextruders sind in Abbildung 2-1 dargestellt. [BBO+13, Koh16]

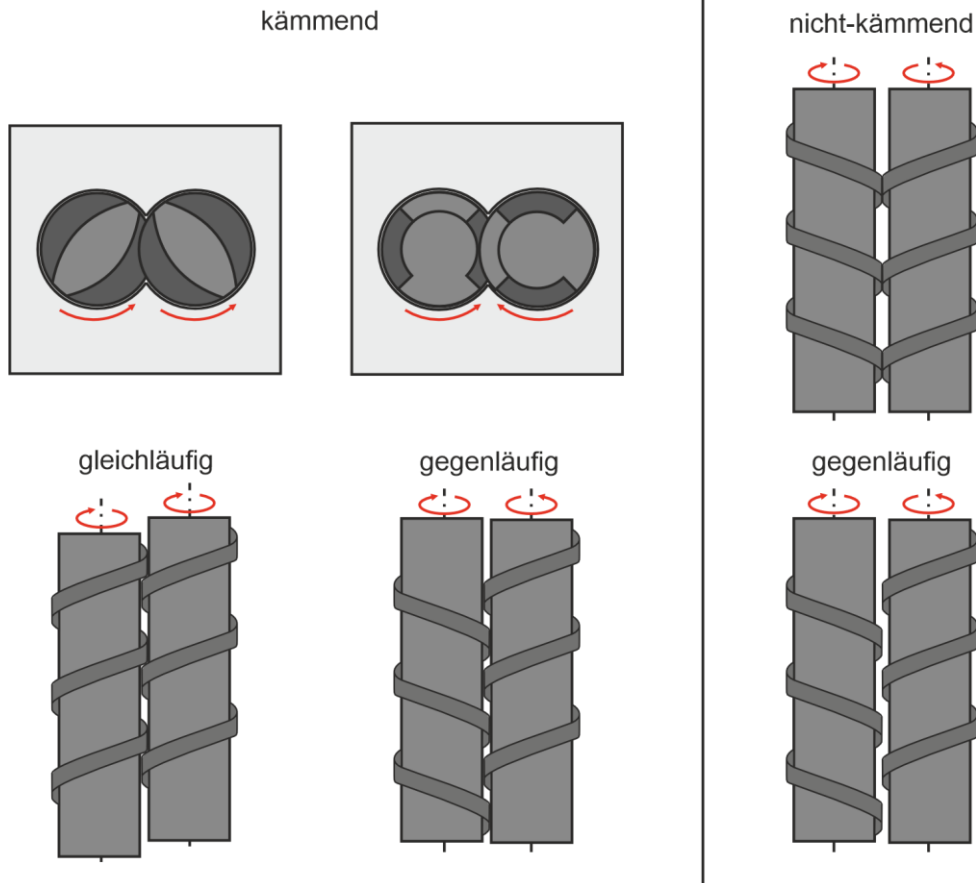


Abbildung 2-1: Darstellung der Anordnungen und Profileigenschaften von Doppelschnecken nach [BBO+13]

Durch die dargestellten Bauweisen ergeben sich gegenüber dem Einschneckenextruder mehrere Vorteile:

- Zwangsförderung des Materials,
 - höhere Durchsätze bei sowohl geringer Verweilzeit als auch einer engen Verweilzeitverteilung,
 - Selbstreinigung der Schneckenprofile und
 - schonende Plastifizierung.
- [BBO+13]

Beim gleichläufigen Doppelschneckenextruder kommen noch eine hohe Flexibilität durch den modularen Aufbau der Zylindergehäuse und die Verwendung von unterschiedlichen Schneckenelementen für die Schneckenkonfiguration sowie eine gute Misch- und Dispergierwirkung im Zwickelbereich (dem Bereich zwischen den beiden Wellen) hinzu. Jedoch besitzen die Doppelschneckenextruder auch einen schlechten Pumpwirkungsgrad zum Druckaufbau und gerade bei großen Doppelschneckenextrudern sind die Möglichkeiten zur Produktkühlung eingeschränkt. [Koh16, Koh19]

2.2.1 Verfahrenszonen

Der modulare Aufbau des Gehäuses des gleichläufigen Doppelschneckenextruders ermöglicht eine Anpassung des Extruderaufbaus an die unterschiedlichen Aufgaben bei der Compoundierung von Kunststoffen. Dadurch können die in Abbildung 2-2 dargestellten Verfahrensschritte entlang der Doppelschneckenkonfiguration realisiert werden.

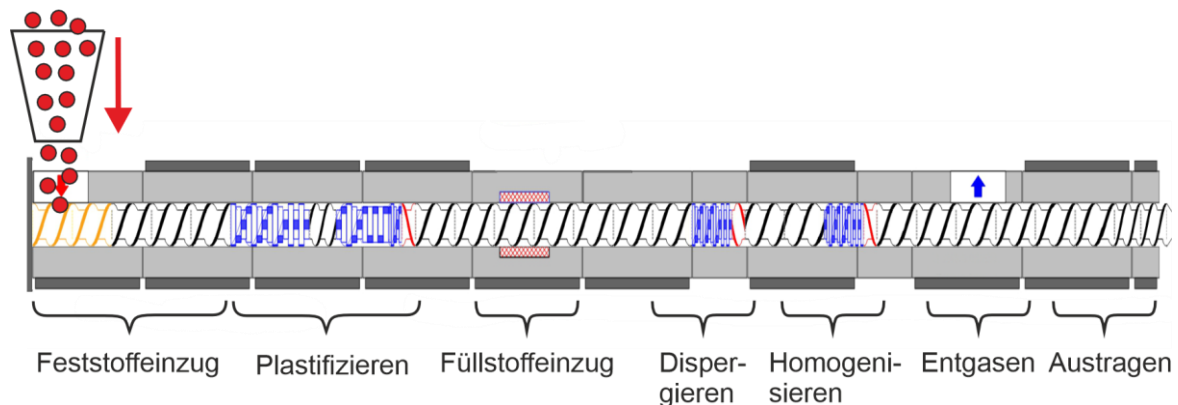


Abbildung 2-2: Unterschiedliche Verfahrenszonen eines Doppelschneckenextruders zum Einarbeiten eines Füllstoffes und der Entfernung von z. B. Wasser nach [Rud16]

Nachfolgend werden die Aufgaben der einzelnen Verfahrenszonen erläutert. In der Praxis lassen sich diese jedoch nicht strikt voneinander abgrenzen, da z.B. Dispergiervorgänge nicht nur in der dispersiven Mischzone, sondern bereits in der Plastifizierungszone stattfinden. [RB19]

Einzugszone

In der Einzugszone wird der Feststoff gefördert und verdichtet, wobei die Luft, die der Feststoff aus dem Trichter mit in den Prozess bringt, entfernt wird. Zu den wichtigsten Einstellgrößen in der Einzugszone gehören die Drehzahl, der Durchsatz und das freie Schnecken volumen. Eine Länge der Einzugszone von 4 bis 6 D ist für einen guten Einzug des Produkts oft ausreichend. Im Gegensatz zu den nachfolgenden Verfahrenszonen wird der Einzugszylinder gekühlt, um ein Anhaften von niedrig schmelzenden Komponenten an dem Zylindergehäuse oder sogar schon im Trichter zu verhindern. [KBR19, RB19, Rud16]

Plastifizierungszone

Die Plastifizierungszone soll das Polymer aufschmelzen und Füllstoffe vordispersieren. Neben dem Füllgrad, der Schmelztemperatur des Kunststoffs und der Granulatgröße beeinflussen auch weitere Material- und Prozessgrößen die Aufschmelzlänge des Kunststoffs und somit die Länge der Plastifizierungszone. [KBR19, RB19, Rud16]

Schmelzeförderzone

Das Fördern der Kunststoffschmelze wird in der Schmelzeförderzone realisiert und erfolgt in der Regel teilgefüllt, mit Ausnahme der Rückstauzone, in der das Material aufgestaut wird und daher eine Vollfüllung vorliegt. Zu den wichtigsten

Einstellgrößen in der Schmelzeförderzone zählen die Drehzahl, der Durchsatz und die Gangsteigung. [KBR19, RB19, Rud16]

Distributive Mischzone

In dieser Zone sollen die Partikel des Kunststoffs oder der Zuschlagstoffe verteilt und die Massetemperatur der Kunststoffschmelze homogenisiert werden, wobei diese Zone durch die Drehzahl, den Durchsatz und die Schneckengeometrie beeinflusst werden kann. [KBR19, RB19, Rud16]

Dispersive Mischzone

In dieser Zone werden die Partikel des Kunststoffs oder der Zuschlagstoffe zerteilt. Die wichtigsten Einstellgrößen sind dabei die Drehzahl, der Durchsatz und die Schneckengeometrie. Hohe Drehzahlen, niedriger Durchsatz, enge Scherspaltweite und eine hohe Schmelzeviskosität begünstigen eine gute Zerteilwirkung in dieser Mischzone. [KBR19, RB19, Rud16]

Entgasungszone

Entstehende Gase oder verbleibende Luft können in der Entgasungszone des Doppelschneckenextruders entfernt werden, entweder durch Vakuum oder Umgebungsdruck. Diese Zone ist teilgefüllt, damit nur die Gase und nicht der Kunststoff aus dem Verarbeitungsprozess entfernt werden. Um zu verhindern, dass ungewollt andere nicht eingearbeitete Zuschlagstoffe entfernt werden, ist die Entgasungszone durch vollgefüllte Zonen von den anderen Verfahrenszonen abgetrennt. Zu den wichtigsten Einstellgrößen gehören die Drehzahl, der Durchsatz und das freie Schnecken volumen. [KBR19, RB19, Rud16]

Druckaufbauzone

In der Druckaufbauzone wird der Druck erzeugt, der für das Durchströmen der Nachfolgeeinrichtungen oder -zonen benötigt wird. Der Druckaufbau findet immer in der Austragszone oder vor abstauenden Elementen statt. Zu den wichtigsten Einstellgrößen gehören die Drehzahl, der Durchsatz und die Gangsteigung. [KBR19, RB19, Rud16]

Die genannten Verfahrenszonen müssen nicht zwingend in jedem Aufbau eines Doppelschneckenextruders vorkommen, können aber auch mehrfach eingesetzt werden. So ist es z. B. bei Füllstoffmengen, die insgesamt größer als 40 Gew.-% sind, sinnvoll, die Zuführung in zwei oder mehr Schritten vorzunehmen. Dies ermöglicht eine ausreichende Benetzung, reduziert die Gasmenge, die pro Zuführstelle hinzugegeben wird und verhindert eine zu starke Abkühlung der Kunststoffschmelze. [Rud16]

2.2.2 Schneckenelemente

Neben den modularen Zylindergehäusen ermöglichen auch die einzelnen Schneckenelemente der Schneckenkonfiguration eines Doppelschneckenextruders eine Anpassung an den Compoundierprozess. Für diesen Zweck existiert eine Vielzahl von unterschiedlichen Schneckenelementen, die in verschiedene Gruppen unterteilt werden können. Neben den selbstreinigenden Standardelementen, wie Förder- und Knetelementen existieren auch Misch-, Scher-, Dehn-, Stau- und Homogenisier-Elemente, die jedoch nur

Abbildung 2-4 (a) und (b) sind die unterschiedlichen Gangzahlen und die Steigung eines Förderelements exemplarisch dargestellt. [Küh16]

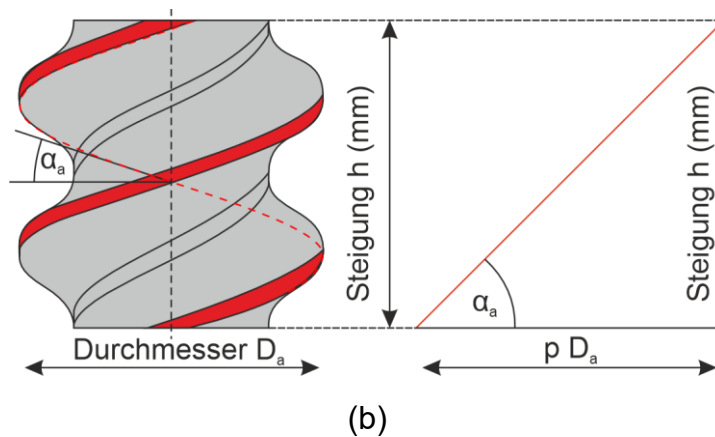
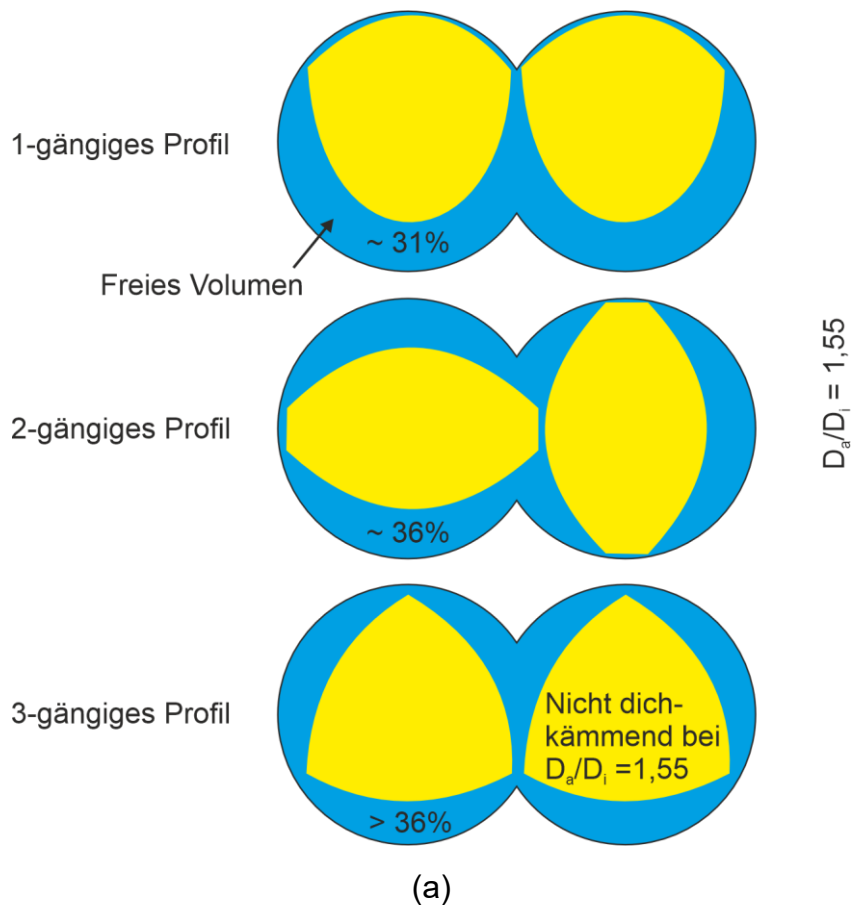


Abbildung 2-4: Darstellung der Querschnitt von Schneckenelementen mit unterschiedlichen Gangzahlen und dem dadurch entstehendem freien Volumen im Kanal nach [Küh16] (a) und der Steigung eines zweigängigen Förderelements (b) nach [Küh16]

Knetelemente

Die Knetelemente werden zum Plastifizieren und Mischen von Kunststoffen eingesetzt. Ein einzelnes Knetelement besteht dabei aus mehreren einzelnen Knetblöcken, die mit einem konstanten Versatzwinkel zueinander verdreht sind. Gängige Versatzwinkel sind beispielsweise 30°, 45° und 90°. Die Knetelemente können mit folgenden charakteristischen Kenngrößen beschrieben werden [Küh16]:

- Gangzahl
- Knetscheibenanzahl
- Versatzwinkel
- Steigungsrichtung
- Elementlänge

Die nachfolgende Abbildung 2-5 veranschaulicht die charakteristischen Kenngrößen eines förderaktiven Knetblocks mit fünf Knetscheiben. Mit diesen charakteristischen Kenngrößen kann bei der Herstellung von Schneckenelementen Einfluss auf die Mischwirkung des Knetelements genommen werden. Die Breite der einzelnen Knetscheibe, die über die Elementlänge und die Anzahl der Knetscheiben in einem Element bestimmt wird, beeinflusst das dispersive Mischverhalten des Knetelements. Breite Knetscheiben erhöhen die Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel beim Durchströmen des Elements die scherintensiven Bereiche zwischen dem Kamm der Scheibe und der Gehäusewand, auch Scherspalt genannt, passiert und somit einer hohen Scherbeanspruchung ausgesetzt wird. Je breiter die Knetscheibe ist, desto größer ist diese Wahrscheinlichkeit. Daher besitzen Knetelemente mit breiten Knetscheiben eine ausgeprägte dispersive Mischwirkung, während Knetelemente mit schmalen Knetscheiben eine bessere distributive Mischwirkung aufweisen. [Küh16]

Im Vergleich zu einem Standardfördererelement erzeugt das Knetelement deutlich höhere Scherbeanspruchungen im Schneckenpalt, die das dispersive Mischen begünstigen. Diese erhöhte Scherbeanspruchung ist jedoch nicht immer erwünscht. Daher existieren Knetelemente mit angepassten Knetscheiben, wie beispielsweise die sogenannten Schulterknetscheiben. Diese zeichnen sich durch eine reduzierte Scheibenbreite aus, wodurch die Scherbeanspruchung durch einen zusätzlichen Spalt verringert wird. Eine reduzierte Scherbeanspruchung ist auch beim Vergleich von zweigängigen und dreigängigen Knetelementen mit großen D_a/D_i -Verhältnisse feststellbar. Dies liegt daran, dass ein symmetrisches, vollständig selbstreinigendes dreigängiges Profil bei einem D_a/D_i -Verhältnis von $>1,4$ nicht realisierbar ist und daher nur noch maximal zwei spitze Kämme das Gehäuse abstreifen. Allerdings bilden sich beim dreigängigen Profil insgesamt fünf Schmelzekanäle, wodurch das Produkt gleichmäßiger beansprucht und intensiver durchmischt wird. Falls die verringerte Selbstreinigung für den Fertigungsprozess problematisch ist, kann dies durch eine exzentrische Anordnung der dreigängigen Knetscheiben zur Drehachse kompensiert werden. Dadurch wird sowohl die Gehäusewand als auch die gegenüberliegende Schnecke gleichzeitig gereinigt. [Küh16, LK95]

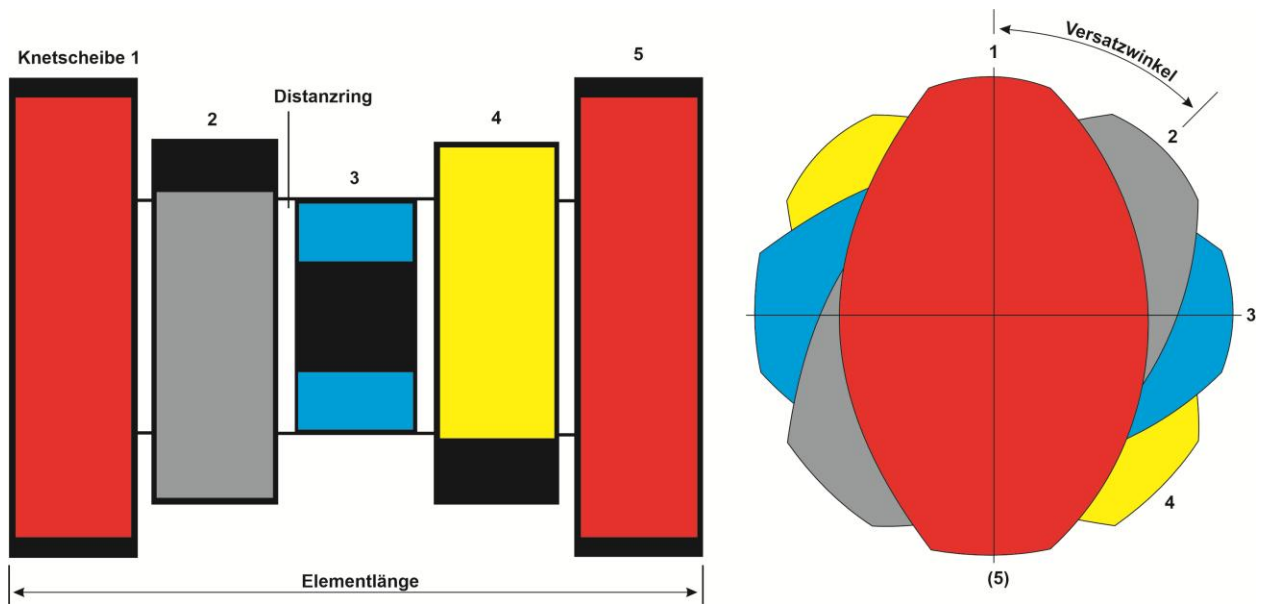
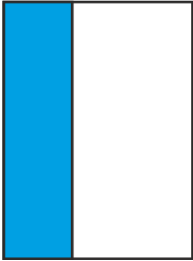
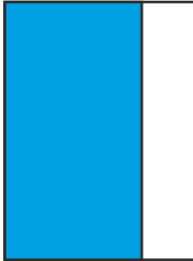
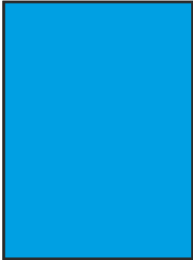
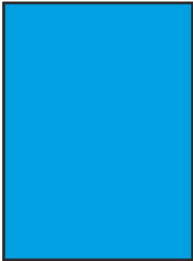
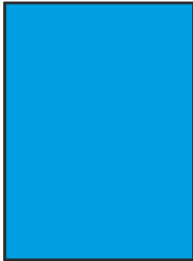
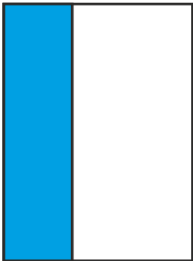
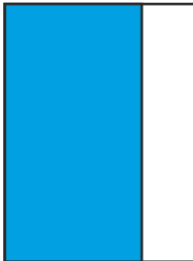
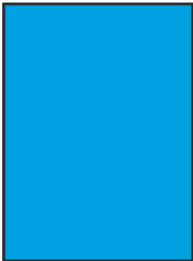
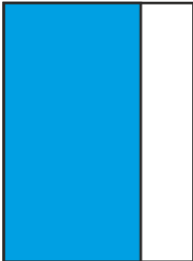
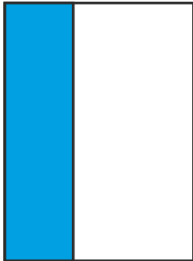
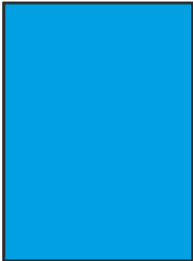


Abbildung 2-5: Charakteristische Kenngrößen eines Knetelement für ein KB mit fünf Knetscheiben und einem Versatzwinkel von 45° nach [Küh16]

Mit der Steigungsrichtung und dem Versatzwinkel können sowohl die Fördereigenschaften als auch die Mischeigenschaften des Knetelements beeinflusst werden. Der Versatzwinkel bestimmt das axiale Mischverhalten sowie das Mischen in der Querschnittsebene. Ein größerer Versatzwinkel verstärkt die Mischwirkung in der Querschnittsebene, während die axiale Mischleistung verringert wird. Eine Umkehrung der Steigungsrichtung führt zu einer Förderung entgegen der Extrusionsrichtung. Bei einem Versatzwinkel von 90° erfolgt hingegen weder eine Förderung in noch entgegen der Extrusionsrichtung, das Knetelement ist somit förderneutral. Alle genannten Varianten haben gemeinsam, dass sie eine abstauende Wirkung besitzen. Sie werden genutzt, um Verfahrenszonen betriebssicher voneinander zu trennen oder in den Bereichen vor dem Element eine Vollfüllung zu gewährleisten. Förderneutrale Elemente und Elemente mit geringen Steigungen sind jedoch weniger geeignet, um Verfahrenszonen betriebssicher voneinander zu trennen. In Tab. 2-1 sind die Wirkungsweisen von Knetelementen in Abhängigkeit des Versatzwinkels und der Scheibenbreite dargestellt. [Küh16, SA13]

Tab. 2-1: Vergleich der Misch- und Fördereigenschaften von Knetelementen nach [Küh16]

Element	Mischeffekt (distributive)	Schereffekt (dispersiv)	Förderwirkung
 45° Versatzwinkel			
 90° Versatzwinkel			
 45° Versatzwinkel			
Lang  45° Versatzwinkel			
Kurz			

Mischelemente

Bei Mischelementen liegt der Fokus auf der distributiven Mischwirkung sowie der Reduzierung bzw. Vermeidung scherintensiver Bereiche. Konstruktiv wird dies erreicht, indem die Spalte zwischen den gegenüberliegenden Elementen sowie zwischen dem Element und der Gehäusewand vergrößert oder komplett neue Spalte in die Elementgeometrie integriert werden. Anhand der Förderwirkung lassen sich Mischelemente in fördernde, förderneutrale und gegenfördernde Elemente unterteilen. [Küh16]

Zu den fördernden Elementen zählen die Segmentschneckenelemente und die Schneckenmischelemente oder Sternfördererelemente. Das Schneckenmischelement basiert auf einem Standardfördererelement, bei dem durch zusätzliche Nuten in den Flanken ein Teilstrom des Produktes fließen kann, der somit in den Schneckenkanal stromaufwärts zurückgeführt wird. [Küh16]

Das Igel-, das TME-Element oder der Zahnblock zählen zu den förderneutralen Mischelementen. Im Fall des Igel-Elements wird ein förderndes Profil mit einem gegenfördernden Element in der Geometrie kombiniert. Dabei besitzen die beiden verwendeten Profile die gleiche Steigung und Gangtiefe. Durch die Überlagerung der beiden Profile entstehen die namensgebenden Stacheln des Elements, die lokale Querströmungen erzeugen und somit eine Durchmischung des Produktes realisieren. [Küh16]

Das Zahnmischelement (ZME) aus Abbildung 2-6 ist ein gegenförderndes Element, das auf einem eingängigen Schneckenelement mit geringer Steigung basiert, in das Nuten eingefräst wurden. Es ist stets vollgefüllt und erzeugt einen Gegendruck, der von den vorgelagerten Schneckenelementen überwunden werden muss. [Küh16]



Abbildung 2-6: Darstellung von einem Zahnmischelement (ZME)

Sonderelemente

Neben den bisher beschriebenen gängigen Basiselementen (Förder-, Knet- und Mischelemente) existieren eine Vielzahl an Sonderelementen. So gibt es z. B. eingängige Knetelemente mit einem schmalen Kammwinkel, die ein großes Volumen besitzen und wenig Scherbeanspruchung in das Produkt eintragen. Ebenfalls werden auch modifizierte Mischelemente mit großer Steigung verwendet, die sich nur noch tangieren, da deren Außendurchmesser reduziert wurde. Es existieren auch sogenannte Stau- und Blisterscheiben, die im Fall der Stauscheibe einen gewissen Spalt zum Zylindergehäuse aufweisen, jedoch sonst den Weg des Produktes komplett versperren. Durch diesen geringen Spalt wird bereits bei geringen Durchsatzänderungen eine große Druckverluständerung an dieser Stauscheibe erzeugt, was dazu führt, dass der Prozess destabilisiert wird und daher nur selten eingesetzt wird. [Küh16]

Diese Übersicht der unterschiedlichen Schneckenelementen repräsentieren die Basiselemente, die am häufigsten verwendet werden. Aufgrund der großen Anzahl an verschiedenen dichtkämmenden Schneckenprofilen ist diese Übersicht jedoch nicht vollständig.

2.3 Zuschlagstoffe

Bei der Compoundierung werden sogenannte Zuschlagsstoffe dem Polymer hinzugefügt, die in die drei folgenden Kategorien aufgeteilt werden:

- Additive
- Füllstoffe
- Pigmente

[Sch19]

Ein großer Unterschied zwischen den Kategorien ist z. B. die verwendete Menge in Gew.-% in den Compounds oder ob die Zuschlagstoffe während der Lebenszeit des Kunststoffes verbraucht oder nicht verbraucht werden. So werden Additive und Pigmente in der Regel zwischen 0,1 – 5 Gew.-% einem Compound hinzugefügt. Füllstoffe hingegen werden mit deutlich größeren Gewichtsanteilen mit bis zu 50 oder mehr Gew.-% dem Compound hinzugefügt. [KBR19, RS16, Sch19]

2.3.1 Additive

Additive werden aus unterschiedlichen Gründen dem Kunststoff hinzugefügt um z. B. vor dem chemischen Abbau durch Wärme, UV-Strahlung und Medien zu schützen. Jedoch gilt grundsätzlich, dass die Additive für diese Schutzfunktionen im Polymer verbraucht werden und die Funktion nicht unendlich lang gewährleistet ist. Ein weiterer Anwendungsfall sind Additive als Verarbeitungshilfen, mit denen die Verarbeitung des Polymers in den verschiedenen Produktionsschritten verbessert wird. Es wird zwischen inneren und äußeren Gleitmitteln unterschieden. Die äußeren Gleitmittel können einem Spritzgussprozess hinzugegeben werden, um die Entformbarkeit zu erleichtern oder bei der Extrusion von Platten den Ausgangsdruck zu verringern. Mit den inneren Gleitmitteln wird hingegen das

Verhalten der Kunststoffschmelze beeinflusst, sodass die Viskosität reduziert und somit die Fließeigenschaften verbessert werden [RS16]. Mit den sogenannten funktionalen Additiven können dem Kunststoff Eigenschaften hinzugefügt werden, über die der Ausgangskunststoff nicht verfügt. Dazu zählen z. B. die Flammschutzmittel, die Antistatika, die Compatibilizer und die Coupling Agents. Wie aus dem Namen der Flammschutzmittel bereits ersichtlich ist, reduzieren diese die Brennbarkeit des Kunststoffs. Mit den Antistatika kann die Leitfähigkeit des Kunststoffs beeinflusst werden, da diese an die Oberfläche des Kunststoffes diffundieren. Eine Verbesserung der Anbindung und Verträglichkeit zwischen Kunststoff und Füllstoff oder Kunststoff und Kunststoff kann mit den Coupling Agents erreicht werden. Diese Aufzählung an Beispielen ist keinesfalls vollständig. Es gibt noch viele weitere Additive, die jeweils für bestimmte Anwendungsbereiche hergestellt werden. [Sch19]

2.3.2 Füllstoffe

Die Füllstoffe sind Zuschlagstoffe, deren Zusammensetzung und Struktur deutlich von der Struktur und Zusammensetzung der Kunststoffmatrix abweicht. Unterschieden werden die Füllstoffe in der chemischen Zusammensetzung und der Funktion. So wird zwischen organischen und anorganischen Materialien sowie aktiven und inaktiven Füllstoffen unterschieden, wobei der größte Teil anorganische Materialien sind. Zu den organischen Füllstoffen zählen Holz, Zellulose, Kork, Holzmehl, Zellstoff und Kohlenstofffasern. Gesteinsmehl, Silikate wie Ton, Lehm und Talk, Karbonate, Oxide oder auch Glaskugeln zählen hingegen zu den anorganischen Füllstoffen. Aktive Füllstoffe beeinflussen die mechanischen Eigenschaften positiv, während inaktive Füllstoffe zur Kostensenkung hinzugegeben werden. Ursprünglich wurden die Füllstoffe zur Kostensenkung von Formmassen eingesetzt, jedoch steht inzwischen die gezielte Veränderung der Eigenschaften des Compounds im Vordergrund. Dazu zählen z. B. der E-Modul, die Biegefestigkeit, das Schwindungsverhalten, das Kriechverhalten und die Wärmeformbeständigkeit. Zu den wichtigsten Füllstoffen zählen: natürliches Calciumcarbonat, Industrieruß, Talk, Kaolin und Naturfasern. [Die19, KBR19, KH16]

Charakteristische Größen der Füllstoffe ermöglichen die Wirkung der Füllstoffe auf den Kunststoff abzuschätzen. Zu diesen charakteristischen Größen gehören die Teilchenform, die Korngrößenverteilung und die Oberflächenenergie.

Teilchenform

Die Teilchenform oder auch Aspektverhältnis (engl.: aspect ratio) ist eine Kenngröße, die das Verhältnis der Länge zur Dicke des Füllstoffes abbildet und wird gerade bei kleinen Partikelgrößen aufwendig mikroskopisch ermittelt. In der Abbildung 2-7 sind die unterschiedlichen Formfaktoren, in die Füllstoffe unterteilt werden mit passenden Beispielen aufgelistet. [Die19, KBR19, KH16]

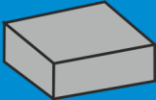
Form	Kugel	Würfel	Quader	Plättchen	Faser
					
Formfaktor	1	~1	1,4-4	5-100	>10
Beispiele	Glaskugeln Silikat-kugeln	CaCO_3 CaSO_4	SiO_2 BaSO_4	Glimmer Talkum Kaolin Graphit $\text{Al}(\text{OH})_3$	Glasfasern Asbest Wollastonit Cellulose-fasern C-Fasern

Abbildung 2-7: Darstellung der unterschiedlichen Formfaktoren der Füllstoffe inklusive Materialbeispielen für die einzelnen Formfaktoren nach [KH16]

Mit hohen Werten für den Formfaktor werden die Kunststoffe in der Regel stärker versteift als mit kleineren Werten. Dies liegt daran, dass die mechanische Belastung von der Kunststoffmatrix aufgenommen und an den Füllstoff weitergegeben wird. Dabei gilt: Je größer der Formfaktor ist, desto besser kann die durch die Spannung erzeugte Energie in den Füllstoff geleitet werden. Plättchenförmige Füllstoffe mit einem Formfaktor von 5 bis 50, wie z. B. Talkum, bieten den Vorteil, dass sie die Endigenschaften des Compounds nahezu isotrop gestalten. Dadurch kann insbesondere bei teilkristallinen Kunststoffen das Schwindungsverhalten positiv beeinflusst werden. [Die19]

Korngrößenverteilung

Die Bestimmung und Darstellung der Korngrößenverteilung erfolgt in der Partikeltechnologie auf unterschiedlichen Wegen. Dabei können Partikelverteilungen als Summenhäufigkeiten bzw. Verteilungssumme $Q_r(x)$, Dichteverteilung $q_r(x)$ oder als logarithmische Dichteverteilung $q_r(\ln(x))$ dargestellt werden. Die Wahl der geeigneten Darstellungsform hängt von der Art der Partikelverteilung ab. So eignet sich die Darstellung der logarithmischen Dichteverteilung für deutlich getrennte bi- oder multimodale Verteilungen. Bei monomodalen Verteilungen, also Verteilungen mit nur einem Maximum, kann zugunsten der Summenhäufigkeit komplett auf die Darstellung der Dichteverteilung verzichtet werden. Eine Verteilung mit zwei Maxima wird als bimodal, eine mit mehreren Maxima als multimodal bezeichnet. [All03, KH16, Sti08, Som00]

Die Bestimmung der Partikelgrößen erfolgt in Abhängigkeit der erwarteten Partikelgröße. Für grobe Pulver hat sich die Siebung als bewährtes Verfahren etabliert. Ist die erwartete Partikelgröße jedoch klein, wird die Laserstreuung, Sedimentationsanalyse oder die optische Bildauswertung angewandt. Diese Methoden bestimmen die Partikelgröße anhand eines einzigen Parameters: dem Durchmesser. Bei nicht runden Partikeln wird ein äquivalenter Kugeldurchmesser berechnet. Besonders bei plättchenförmigen oder faserförmigen Partikeln können zwischen verschiedenen Messverfahren erhebliche Abweichungen auftreten. Daher sollte die Bestimmung der Partikelgrößen idealerweise mit derselben Methode und, wenn möglich, mit demselben Gerät durchgeführt werden, um vergleichbare Ergebnisse zu gewährleisten.[KH16]

Bei der Auswertung der Partikelgrößenverteilung können verschiedene Kennwerte herangezogen werden. Häufig wird der mittlere Teilchendurchmesser ($d_{50\%}$) verwendet, der die Verteilungskurve in zwei Bereiche teilt die auf dem Gewicht, dem Volumen oder der Anzahl basieren, je nachdem, welche Mengenart gewählt wurde. Ein weiterer wichtiger Kennwert ist der obere Schnitt (engl. top cut) $d_{98\%}$ der den Teilchendurchmesser beschreibt, den nur 2 % der Partikel überschreiten. Zusätzlich kann die spezifische Oberfläche zur Charakterisierung der Partikelgrößenverteilung genutzt werden. Sie ist definiert als Gesamtfläche eines Füllstoffs pro Gewichtseinheit. Dieser Kennwert ist gerade bei mineralischen Füllstoffen von besonderer Bedeutung, da mit diesem die möglichen Haftpunkte mit den Polymerketten bestimmt werden können. [KH16]

Oberflächenenergie

Die Oberflächenenergie eines Stoffes gibt an, wie viel Energie erforderlich ist, um die Oberfläche eines Festkörpers zu vergrößern und wird in Millijoule pro Quadratmeter (mJ/m^2) angegeben. Bei Flüssigkeiten entspricht die Oberflächenenergie der Oberflächenspannung. [KH16]

2.3.3 Pigmente

Pigmente verleihen dem Compound die gewünschte und werden in organische und anorganische Stoffe unterteilt. Die Löslichkeit des Pigments im Kunststoff ist ein entscheidender Faktor, da sie bestimmt, ob ein Pigment für einen bestimmten Kunststoff geeignet ist. Mit sogenannten Farbmittelverwendungslisten prüfen die Compoundeure, ab welcher Konzentration eines Pigments negative Einflüsse auf die Eigenschaften des Kunststoffes zu erwarten sind. [Sch19]

2.4 Mischen

Das Ziel von Mischvorgängen ist die gleichmäßige Verteilung einer vorher unzureichend verteilten Komponente A in einer zweiten Komponente B, um einen ausreichenden Homogenitätszustand zu erreichen. Die Verteilung der Komponente A kann sowohl räumlich als auch hinsichtlich der Partikelgröße unzureichend sein. In der Kunststoffverarbeitung werden in der Regel Zuschlagstoffe (Komponente A) in die Kunststoffmatrix (Komponente B) eingearbeitet und vermischt. Dazu werden mit unterschiedlichen Mischarten die räumliche Verteilung und Partikelgrößenverteilung beeinflusst und homogenisiert. In Abbildung 2-8 sind das distributive und dispersive Mischen gegenübergestellt.

Die beiden Mischarten werden in den folgenden Kapiteln detailliert betrachtet.
[SE20]

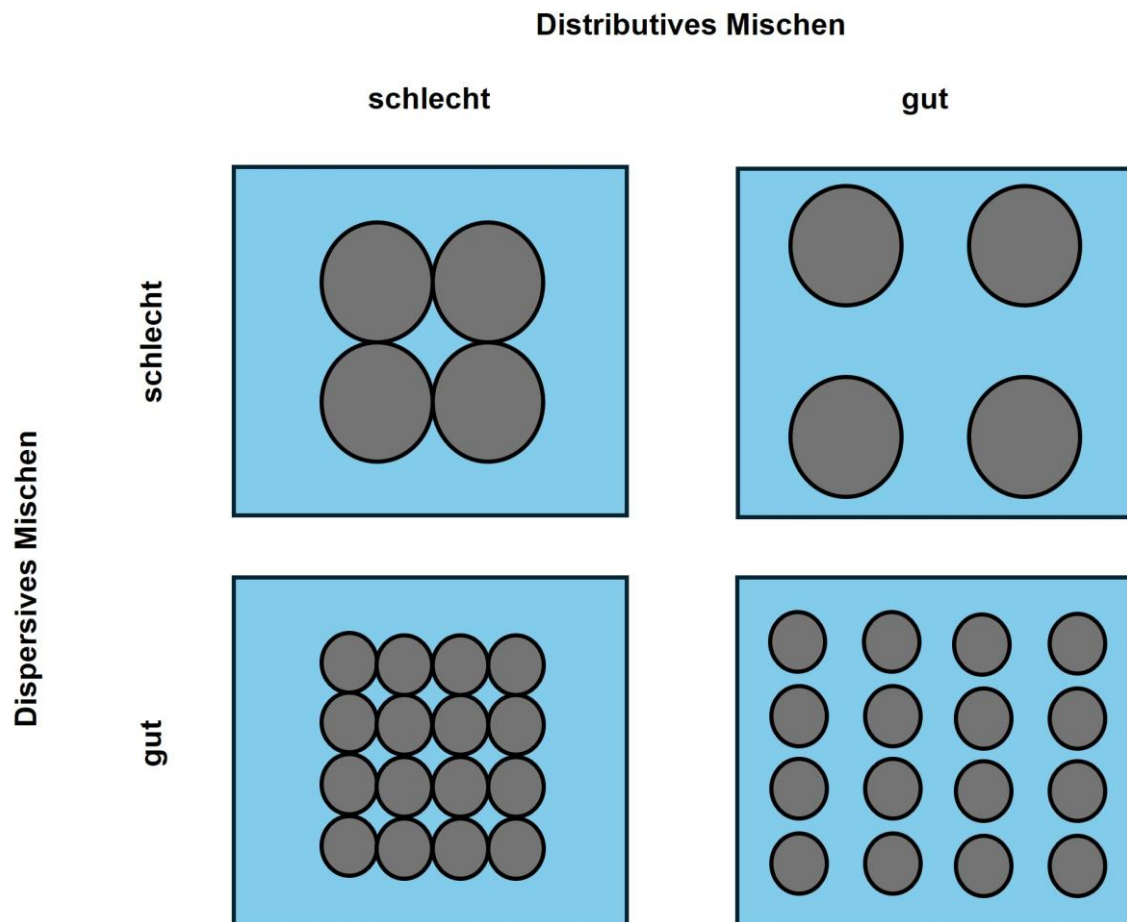


Abbildung 2-8: Darstellung der Ergebnisse von distributiven und dispersen Mischvorgängen nach [Fra24]

2.4.1 Mischarten

Distributive Mischen

Beim distributiven Mischen liegt der Fokus auf der gleichmäßigen räumlichen Umlagerung der Zuschlagstoffe im Kunststoffvolumen [KBR19, Kra20, Pad08, SE20]. Da bei diesem Prozess die Größe der Zuschlagstoffe nicht verändert wird, sind keine hohen Strömungskräfte erforderlich. Entscheidend für die Mischgüte sind die Art und Häufigkeit der Umlagerungsvorgänge, nicht jedoch die Höhe der Scher- und Dehnraten in der Strömung. In der Abbildung 2-9 ist das Mischprinzip beim distributiven Mischen schematisch visualisiert. [KB19]

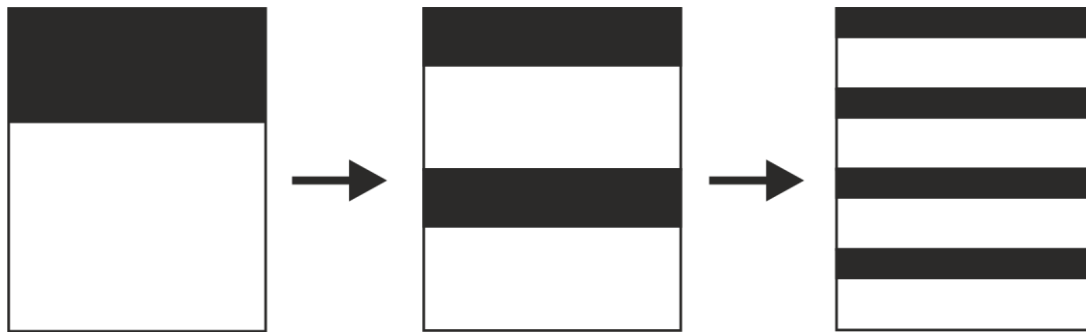


Abbildung 2-9: Veranschaulichung des Mischprinzips beim distributiven Mischen in laminaren Strömungen nach [KB19]

Das distributive Mischen lässt sich in zwei Hauptarten unterteilen: das Längsmischen und das Quermischen. Beim Längsmischen handelt es sich um einen Konzentrationsausgleich in Strömungsrichtung, während das Quermischen Mischvorgänge quer zur Extrusionsrichtung beschreibt. In Abbildung 2-10 sind die Mischergebnisse für verschiedene Kombinationen von Quer- und Längsmischen dargestellt. Es wird deutlich, dass bei der Kombination von Quer- und Längsmischen eine gute Mischgüte erzielt wird. [BH18]

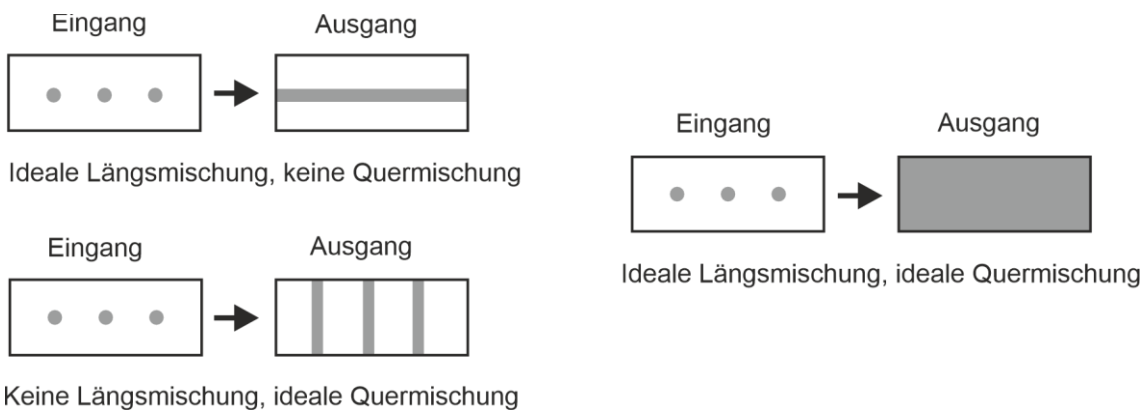
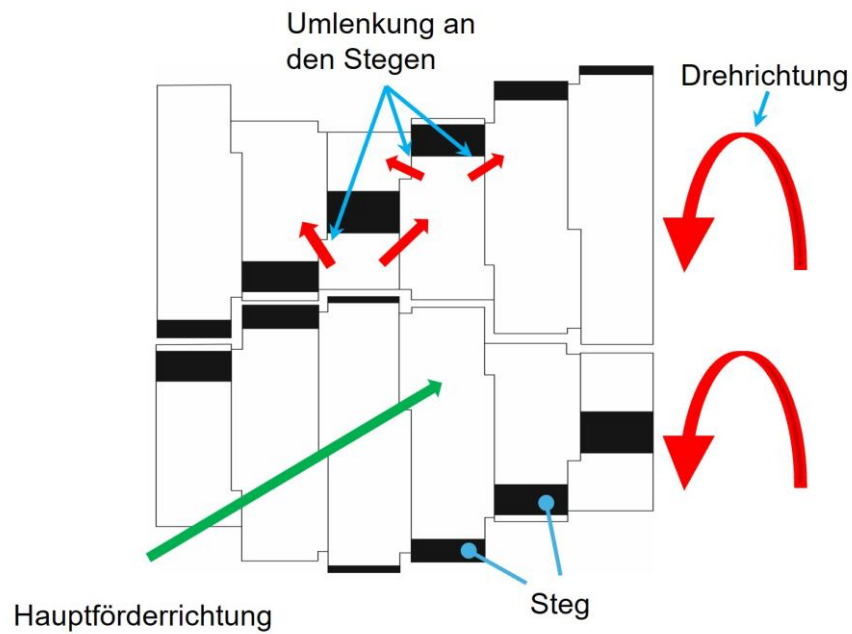
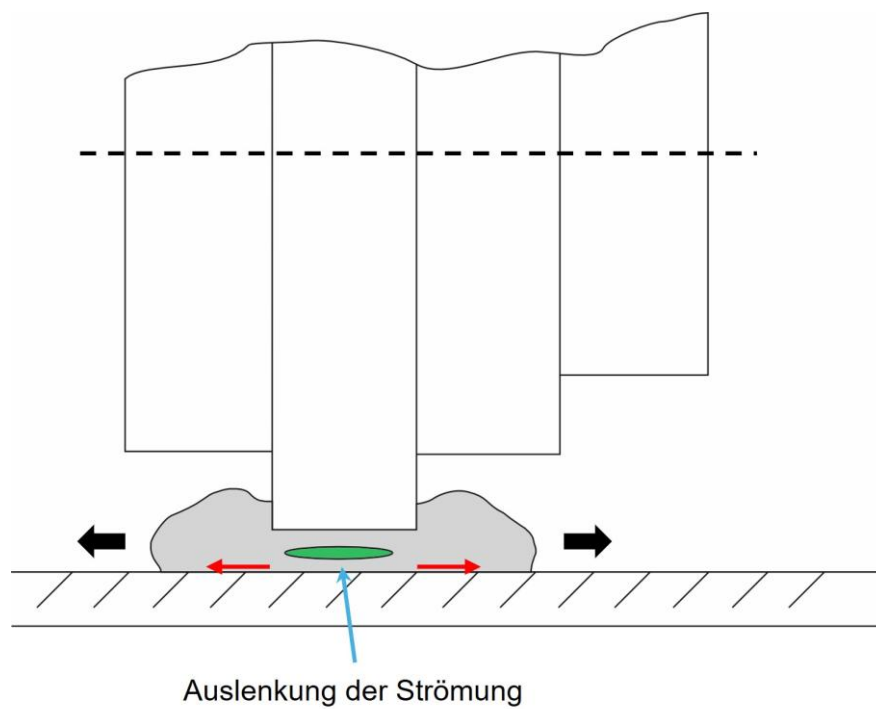


Abbildung 2-10: Vergleich der Verteilung bei unterschiedlich ausgeprägtem Längs- und Quermischen nach [Fra24]

Die Mischwirkung kann durch eine zusätzliche Aufteilung der Strömung verbessert werden. Eine solche Aufteilung der Schmelze kann mit unterschiedlichen Schneckenelementen, wie den Knet- und Mischelementen erreicht werden. In der Abbildung 2-11 (a) und (b) ist diese Aufteilung der Schmelze exemplarisch an einem fördernden Knetelement dargestellt.



(a)



(b)

Abbildung 2-11: Aufteilung des Schmelzestroms in Teilströme am Beispiel eines fördernden Knetelements an den Stegen (a) und zwischen dem Steg und der Zylinderwand (b) jeweils nach [KB19]

Dispersives Mischen

Das dispersive Mischen wird hingegen eingesetzt, um die Größenverteilung der Zuschlagstoffe zu homogenisieren, indem z. B. bei Feststoffteilchen Agglomerate oder Aggregate aufgebrochen bzw. zerkleinert werden. Agglomerate sind aus mehreren Primärpartikel bestehende Partikelverbunde, die über Ecken und Kanten miteinander verknüpft sind und nur schwache Wechselwirkungen ausbilden. Bei Aggregaten sind die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Primärpartikeln größer und es liegen flächige Verknüpfungen vor. Primärpartikel sind in der Regel zwischen 0,05 und 0,5 μm , Aggregate zwischen 0,5 und 5 μm und Agglomerate zwischen 2 bis 100 μm groß. In der Abbildung 2-12 sind die unterschiedlichen Partikelverbunde visualisiert. [BH18, KB19, Kra20, Pad08]

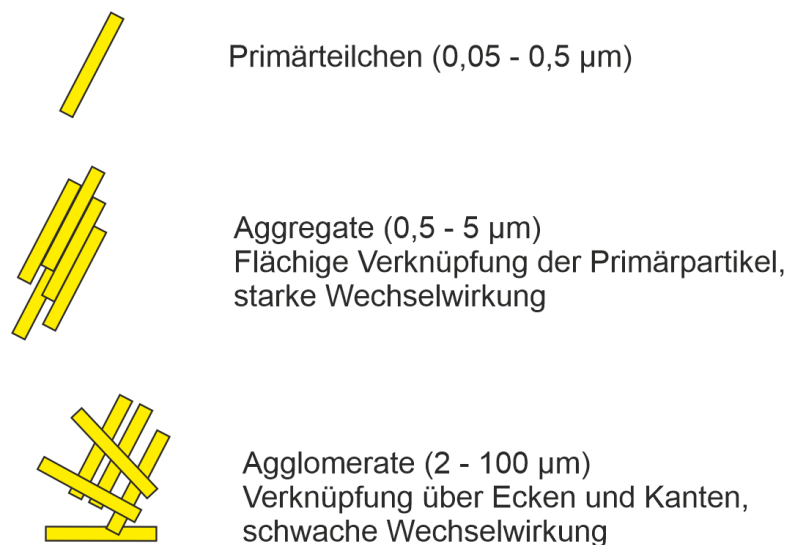


Abbildung 2-12: Darstellung der unterschiedlichen Partikelverbunde nach [BH18]

Das Aufbrechen der Agglomerate wird mit Scher- und Dehnströmungen in der Polymerschmelze erreicht und wird in Erosion und Agglomeratzerteilung (Bruch) unterschieden. Der Prozess der Erosion beschreibt die Ablösung kleiner Fragmente, wie beispielsweise Aggregate oder Primärpartikel, von der Außenfläche der Agglomerate über einen längeren Zeitraum. Demgegenüber zerfällt das Agglomerat bei der Agglomeratzerteilung abrupt in mehrere große Fragmente. Die beiden Verfahren sind in Abbildung 2-13 dargestellt. Zur besseren Veranschaulichung wurden im Fall der Erosion das abgelöste Primärpartikel und das abgelöste Aggregat aus zwei Primärpartikeln jeweils rot dargestellt. Beim Überschreiten der ersten Grenzschubspannung tritt Erosion auf und mit steigender Schubspannung und der Überschreitung der zweiten Grenzschubspannung beginnt die Agglomeratzerteilung. Die erforderliche Kraft ist dabei Materialabhängig und gerade bei Feststoffpartikeln ist die Oberflächenspannung von besonderer Bedeutung. Wird die erforderliche Kraft nicht aufgebracht, erfolgt keine Zerkleinerung. Eine gute Zerkleinerung durch dispersives Mischen wird sowohl von der absoluten Höhe der Scher- und Schubspannungen als auch von der Belastungszeit beeinflusst. [BH18, KB19, RMF90, RMF91, Pad08]

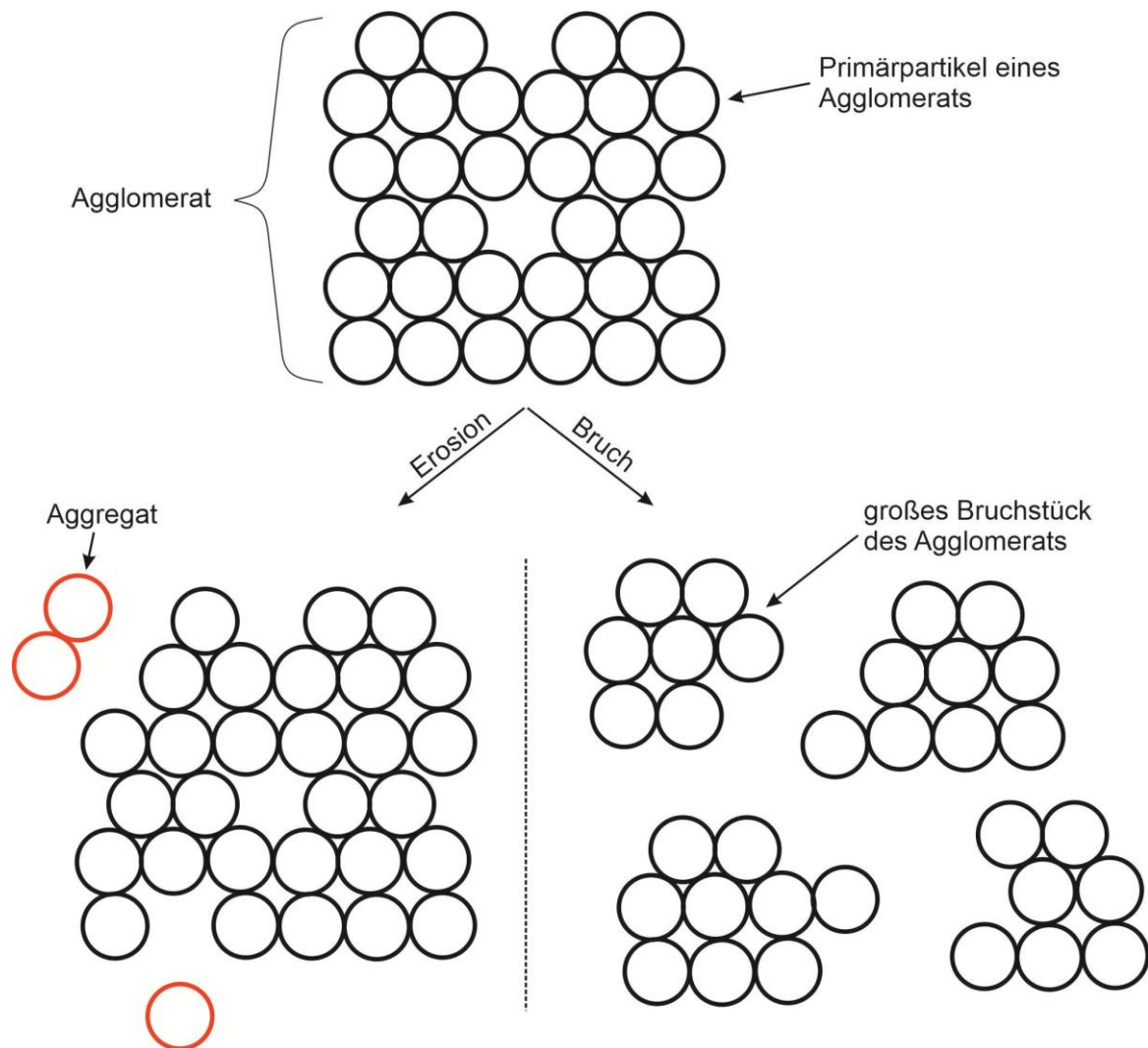


Abbildung 2-13: Vergleich der Erosion und Zerteilung (Bruch) von Agglomeraten

Für das Zerkleinern und Aufbrechen von Feststoffpartikeln in einer Scherströmung wird die wirkende Schubspannung herangezogen, die von der Viskosität und der Scherrate in der Schmelze abhängt. Die Gleichung zur Berechnung der Schubspannung ist in Gleichung 2-1 dargestellt. [KB19]

$$\tau = \eta * \dot{\gamma}$$

Gleichung 2-1

τ : Schubspannung

η : Viskosität

$\dot{\gamma}$: Scherrate

Höhere Schubspannungen und Scherraten führen somit zu größeren Schubspannungen und damit auch zu einer verbesserten Zerkleinerung. Wie in der Gleichung 2-2 dargestellt ist, wird die Scherrate durch das Verhältnis der Relativgeschwindigkeit w zum Spaltmaß δ gebildet.

$$\dot{\gamma} = \frac{w}{\delta}$$

Gleichung 2-2

w: Relativgeschwindigkeit

 δ : Spaltmaß

Somit wirken sich höhere Relativgeschwindigkeiten und kleinere Spaltmaße positiv auf die Zerkleinerung aus, da diese zu einer höheren Scherrate und somit auch zu einer höheren Schubspannung führen. [KB19] Die in der Gleichung 2-1 und Gleichung 2-2 genannten Einflüsse auf die Schubspannung beeinflussen die Belastung der Feststoffpartikel beim dispersiven Mischen. Allerdings hat auch die Belastungszeit oder auch Verweilzeit einen signifikanten Einfluss auf das Mischergebnis. So kann mit einer kurzen Belastungszeit und einer hohen Belastung die gleiche Zerteilgüte erzeugt werden wie bei hoher Belastungszeit und geringer Belastung. [KB19]

Da im Doppelschneckenextruder die auftretenden Scherungen und Dehnungen innerhalb der Strömung nicht gleichmäßig verteilt sind, ergeben sich Zonen mit hoher und niedriger Beanspruchung oder Zonen mit fast reiner Scherströmung oder hoher Dehnung. Welche Beanspruchung und Strömung vorliegen hängt stark von den Zonen ab, in denen die Strömung fließt. Bei einem zweigängigen Schneckenelement werden die folgenden Zonen unterschieden: Schneckengang, Kammspalt und Zwickel. Im Schneckengang ist die Scherrate gering, da die Gangtiefe im Vergleich zum Kammspalt groß ist und die Relativgeschwindigkeit zwischen Schneckengrund und Gehäuse ebenfalls gering ist. Demgegenüber werden im Kammspalt und Zwickel mit geringen Spaltabständen und hohen Relativgeschwindigkeiten hohe Scherraten erzeugt. Hohe Dehnkräfte treten ebenfalls vor diesen beiden Engstellen im Kammspalt und Zwickel auf. Die unterschiedlichen Zonen mit den auftretenden Kräften sind in Abbildung 2-14 dargestellt. [KB19]

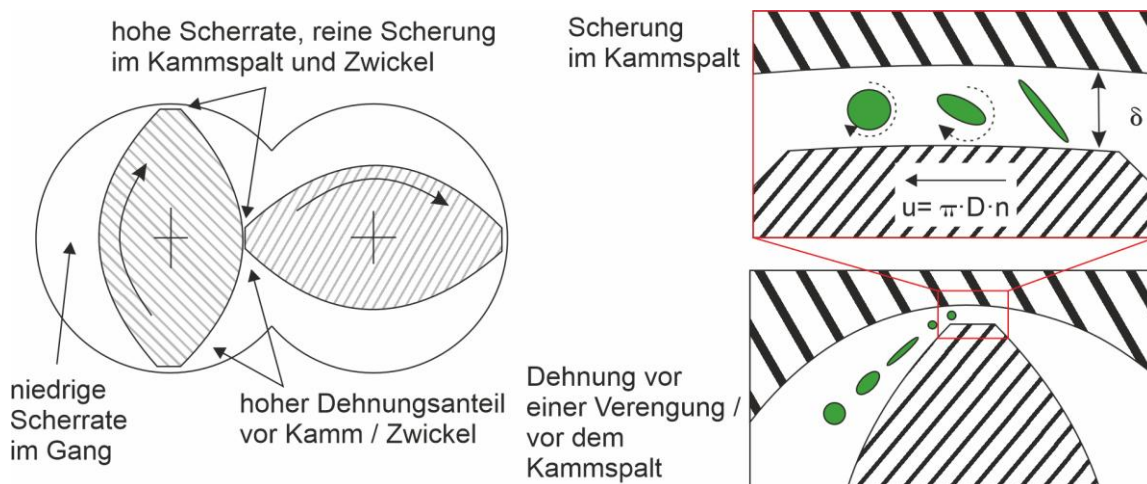


Abbildung 2-14: Auftretende Belastungen durch die Scher- und Dehnströmungen in den unterschiedlichen Schnecken-zonen nach [KB19]

2.4.2 Bewertung der Mischgüte

Die Bestimmung und Bewertung der Mischgüte ist gerade bei der Auslegung oder Optimierung von Mischungsprozessen besonders relevant. Hierbei werden je nach Mischart unterschiedliche Verfahren genutzt, um die Mischgüte zu bestimmen. Die Mischgüte entspricht der Verteilung einer gewünschten Eigenschaft in einem vorgegebenen Volumen oder einer Fläche. Die gewünschte Eigenschaft kann zum Beispiel die Verweilzeit, die räumliche Verteilung oder auch die Partikelgröße sein.

Für das distributive und dispersive Mischen wurden unterschiedliche Methoden erarbeitet, um die Mischgüte zu bestimmen. Nachfolgend werden einige dieser Methoden näher erläutert. Da das Längsmischen direkt mit der Verweilzeitverteilung korreliert, wird die Verweilzeit für das Längsmischen bestimmt. Die Bestimmung der Verweilzeit von Partikeln kann dabei mit unterschiedlichen Ansätzen bestimmt werden. Experimentell kann die Verweilzeit z. B. durch die impulsartige Zugabe eines Tracers und anschließende Ermittlung der Konzentration des Tracers im Extrudat ermittelt werden. So haben Gao et al. [GWB+00] mit TiO_2 als Tracer in einer inline Reflektionsmessung die Verweilzeitverteilung in einem gleichläufigen Doppelschneckenextruder mit HDPE untersucht. Die gemessene Verweilzeitverteilung wurde anschließend mit simulierten Verweilzeitverteilungen verglichen, die als zweite Möglichkeit zur Bestimmung der Verweilzeit verwendet werden kann. Neben der genannten Reflektionsmessung von TiO_2 wurden auch viele weitere Messverfahren eingesetzt, um die Verweilzeit experimentell sowohl inline als auch offline zu bestimmen. [BH18, GWB+00, KB16, PS89, PBA00, WHW86]

Eine optische Auswertungsmethode für das dispersive und distributive Mischen erarbeiteten Bernado et al. [BCC22] Mit einem optischen Inline-Detektionssystem wird in Echtzeit die Mischgüte der Kunststoffschmelze analysiert. Die Analyse basiert auf der Messung der Lichtstreuung und -verzögerung durch die hinzugegebenen Partikel. Aus diesen Messungen wird im Anschluss die Verweilzeitverteilung bestimmt und mit einem Parameter, der mit dem Integral der Verweilzeitkurve korreliert, wird das dispersive Mischen beurteilt. Das distributive Mischen wird mit der Varianz der Verweilzeitverteilung bewertet. [BCC22]

Bereits 1995 wurden simulative Bewertungen der Mischgüte angestrebt und untersucht. Lawal et al. [LK95] untersuchten mit numerischen Simulationen die Mischmechanismen in Einschnecken- und gleichläufigen Doppelschneckenextrudern. Es konnte gezeigt werden, dass mit den Simulationen Unterschiede im Mischverhalten erfasst werden können und somit die Entwicklung neuer Schneckenelementgeometrien unterstützt werden kann. [LK95]

Cheng et al. [CM98] analysierten 1998 mit einem Strömungsdynamik-Analysepaket (FIDAP) ein förderndes Schneckenelement auf einem gleichläufigen Doppelschneckenextruder des Typs ZSK-53. Die 3D-Strömungssimulation basierte dabei auf der Finite-Elemente-Methode, bei der mit einer Partikelverfolgung die Bewegung der Partikel in der Strömung verfolgt wurden. Für die Auswertung des distributiven Mischens wurden die Längen- und Flächenstreckungen sowie die Dehnungsverteilung analysiert. Die Ergebnisse zeigen, dass mit steigender Drehzahl eine bessere distributive Mischung mit den fördernden Schneckenelementen auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder erreicht wird. [CM98]

Mit der Mapping-Methode analysierten Fard et al. [SA13] das distributive Mischverhalten von Mischelementen auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder im Jahr 2013. Sie untersuchten verschiedene Varianten von Knetelementen, ein Zahnmischelement und ein Standard-Förderelement wurde ebenfalls als Referenz untersucht. Für die Mapping-Methode werden 3D-Geschwindigkeitsfelder benötigt, die mit einer erweiterten Finite-Elementen-Methode berechnet werden. Zur Analyse der Mischleistung wurden zusätzlich noch die Partikelbahnen, Verweilzeitverteilungen und das Volumenintegral der Segregation verwendet. Die Simulationen zeigten, dass der Versatzwinkel der Knetblockscheiben sowohl das axiale Mischverhalten als auch das Mischverhalten in der Querschnittsebene beeinflusst. Zudem hat der Versatzwinkel einen größeren Einfluss auf das distributive Mischen als die Scheibenbreite der Knetelemente. Darüber hinaus weist das Schneckenmischelement lediglich eine geringfügig bessere Mischleistung auf als das Standardförderelement. [SA13]

Die Verteilung von Partikeln in der Querschnittsebene einer 3D CFD-Strömungssimulation eines Einschneckenextruders analysierte Frank [Fra24] im Jahr 2024 mithilfe der Delaunay Triangulation und bestimmte die Mischkennzahl MQ für das distributive Mischen. Das dispersive Mischen charakterisierte Frank mit der Manas-Zahl. Bei der Delaunay Triangulation werden in der vorliegenden Partikelverteilung der 3D CFD-Strömungssimulation Dreiecke mit den Partikeln als Eckpunkten gebildet. Dabei wird die Umkreisbedingung erfüllt, um die Innenwinkel der Dreiecke zu maximieren [Kle05, Sch16]. In Abbildung 2-15 sind die Ergebnisse einer Triangulierung und einer Delaunay Triangulierung für eine Punkteverteilung exemplarisch dargestellt. In den roten Umkreisen dürfen sich bei der Delaunay Triangulierung keine weiteren Punkte befinden. [Fra24]

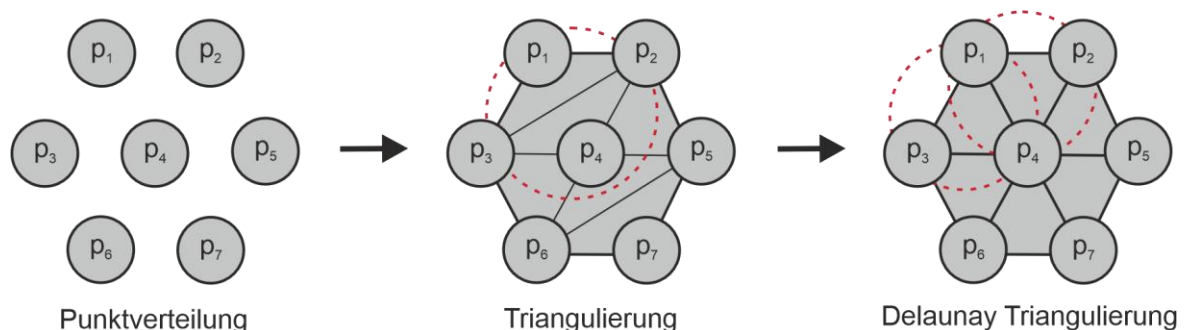


Abbildung 2-15: Vergleich der Delaunay Triangulierung und einer beliebigen Triangulierung einer Punkteverteilung nach [Fra24]

Mit diesen Dreiecksflächen wurde die Mischqualität anschließend beurteilt, indem die Standardabweichung durch den Mittelwert der Dreiecksflächeninhalten geteilt wurde. [Fra24]

Somit ergeben sich eine Vielzahl an unterschiedlichen Analysemethoden, die mit unterschiedlichen Ansätzen das distributive und dispersive Mischen auf dem Doppelschneckenextruder untersuchen und charakterisieren. Die dargestellten Analysemethoden sind nur eine geringe Auswahl und es wurden in den wissenschaftlichen Untersuchungen zum Mischverhalten noch viele weitere Ansätze in den letzten 30 Jahren verfolgt. [ALA04, AMK04, BSC18, CK07, CLZ+17, CM97, DPS+20, JPC13, KNNF96, LM94, LU96, NCP12, NTS+10, PCGM20, RBM+14, VSPC15, YKM+00, YM92, ZFCH09]

3 Zielsetzung und Lösungsweg

Die Bewertung und Vorhersage der Mischgüte in Doppelschneckenextrudern stellt nach wie vor eine anspruchsvolle Aufgabe dar. Zwar wurden die Mischeigenschaften von Schneckenelementen bereits mit unterschiedlichen Ansätzen untersucht, jedoch existiert bislang keine einheitliche und allgemein anerkannte Methodik zur Beurteilung der Mischwirkung. Demzufolge besteht gegenwärtig keine fundierte Grundlage für eine systematische Bewertung einzelner Schneckenelemente.

Ziel dieser Arbeit ist es daher, die Mischwirkung ausgewählter Schneckenelemente exemplarisch zu analysieren und zu bewerten. Die Selektion der zu analysierenden Elemente erfolgt dabei so, dass diese eine repräsentative Basis der in der Praxis relevanten Geometrien und Funktionselemente abdecken. Um eine belastbare Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wird zunächst eine geeignete Auswertungsmethodik entwickelt und im Rahmen dieser Arbeit angewendet. Auf dieser Grundlage erfolgt die Bewertung der Mischwirkung einzelner Schneckenelemente hinsichtlich distributiver und dispersiver Mechanismen.

Die Bewertung der Mischwirkung von Schneckenelementen erfolgt in dieser Arbeit auf Basis von 3D CFD-Strömungssimulationen in Kombination mit Partikelverfolgung (Particle Tracking). Für das distributive Mischen wird eine an die Geometrie der Doppelschnecke angepasste Auswertungsmethodik in Anlehnung an Frank [Fra24] angewendet. Die von Frank eingeführte Mischkennzahl wird dabei weiterentwickelt und in mehreren Modifikationen untersucht. Im Anschluss erfolgt eine Bewertung der Varianten hinsichtlich ihrer Eignung, um eine für den vorliegenden Anwendungsfall belastbare Kennzahl als Bewertungsmethode zu identifizieren. Die Analyse des dispersiven Mischens erfolgt differenziert nach den zugrunde liegenden Mechanismen:

- Für Bruchprozesse erfolgt die Analyse über die Verteilung der maximalen Schubspannungen, denen die Partikel während des Mischens ausgesetzt sind.
- Für Erosionsprozesse wird das Integral der über die Verweilzeit auftretenden Schubspannungen herangezogen.

Auch hierbei wird in Anlehnung an Frank [Fra24] eine spezifische Mischkennzahl gebildet, die als Grundlage zur Bewertung dient.

Im Rahmen der Validierung der aus den Simulationen gewonnenen Ergebnisse werden ergänzend experimentelle Untersuchungen durchgeführt und ausgewertet. Für den vorliegenden Prozess werden Compounds eingesetzt, die sich aus einer Kombination von Polypropylen und Talkum als Füllstoff zusammensetzen. Die Herstellung dieser Compounds erfolgt in einem speziell entwickelten Versuchsaufbau, der einen Einschneckenextruder sowie einen Doppelschneckenextruder umfasst. Direkt vor und hinter der Mischzone werden Materialproben entnommen, anhand derer die Mischgüte bestimmt wird. Die Auswertung der Mischwirkung erfolgt in diesem Kontext erneut unter Berücksichtigung der jeweiligen Mischmechanismen:

- Das distributive Mischen wird über die Analyse der Grauwertverteilung aus geschliffenen Querschnitten beurteilt.
- Das dispersive Mischen wird durch die Ermittlung der Partikelgrößenverteilung des verarbeiteten Talkumpulvers charakterisiert. Hierzu kommt die dynamische Bildanalyse mit einem QICPIC von veraschten Proben zum Einsatz.

4 Simulation der Mischgüte

In diesem Kapitel wird die Simulation und Auswertung der Mischgüte und Mischwirkung der Schneckenelemente mit einer isothermen 3D CFD-Strömungssimulation thematisiert. Zunächst erfolgt eine Darstellung des aktuellen Stands der Technik der Strömungssimulation. Im weiteren Verlauf werden die Vorgehensweise, die Methoden bei der Analyse der Mischgüte sowie die Auswertung der Ergebnisse dargestellt.

4.1 Stand der Technik Strömungssimulation

4.1.1 Einleitung CFD – Möglichkeiten und Grenzen

Die mathematische Beschreibung physikalischer Strömungsprobleme basiert auf den Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie. Die zugehörigen Gleichungen müssen bei einer Simulation entweder analytisch oder numerisch gelöst werden. Während eine analytische Lösung bei stark vereinfachten Modellen möglich ist, geht sie mit einer reduzierten Genauigkeit der Ergebnisse einher. Um jedoch komplexe Schneckengeometrien und die vollständige Kopplung der Impuls- und Energiebilanzgleichungen zu berücksichtigen, ist eine numerische Lösung erforderlich. Diese erfolgt mit Methoden wie der Finite-Differenzen-Methode (FDM), der Finite-Elemente-Methode (FEM) oder der Finite-Volumen-Methode (FVM). Die numerische Untersuchung von Strömungen wird als computergestützte Strömungsmechanik (Computational Fluid Dynamics, CFD) bezeichnet. Ohne Annahmen und Randbedingungen ist auch eine numerische Lösung der Strömungsmechanik nicht möglich. Für die Simulation von Kunststoffschmelzen ergeben sich die folgenden Annahmen, die die mathematische Lösung der Gleichungen vereinfachen:

- Die Kunststoffschmelze wird als laminare und inkompressible Strömung betrachtet.
- An der Zylinderwand herrscht Wandhaftung, sodass die Strömungsgeschwindigkeit dort $v=0$ m/s beträgt.
- Der gesamte Zylinderquerschnitt ist vollständig mit einer einphasigen Kunststoffschmelze gefüllt.
- Es findet kein Wärmeaustausch zwischen Schnecke, Zylinder und Kunststoffschmelze statt. Zudem bleiben die Temperaturen von Schnecke und Zylinderwand konstant.
- Die Temperatur der Schmelze ist im gesamten Strömungsgebiet konstant.
- Die Kunststoffschmelze wird als strukturviskos angenommen, wobei die Materialeigenschaften, insbesondere die Viskosität, temperaturabhängig sind.
- Trägheits- und Gravitationskräfte werden vernachlässigt, da ihr Einfluss auf die Strömung gering ist.

Die Methoden der CFD-Simulation unterscheiden sich in den sogenannten Diskretisierungsmethoden, bei denen die partiellen Ableitungen der Modellgleichungen in endliche Differenzen umgewandelt werden. Nach der Diskretisierung werden diese Gleichungen als Differenzengleichungen bezeichnet

und sind auf einem Rechengitter berechenbar. Das Rechengitter besteht aus einzelnen Netzpunkten, an deren Position die Differenzengleichungen gelöst werden.[Lec14, LO11, Oss03, Sch12]

Die drei verschiedenen Diskretisierungsmethoden weisen jeweils spezifische Vor- und Nachteile auf. In Abbildung 4-1 sind die Unterschiede hinsichtlich Genauigkeit und Flexibilität grafisch dargestellt.

- Die Finite-Elemente-Methode (FEM) bietet eine hohe Flexibilität, jedoch auf Kosten der Genauigkeit.
- Die Finite-Volumen-Methode (FVM) stellt einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Flexibilität dar.
- Die Finite-Differenzen-Methode (FDM) erreicht die höchste Genauigkeit, weist jedoch die geringste Flexibilität auf.

[Lec14]

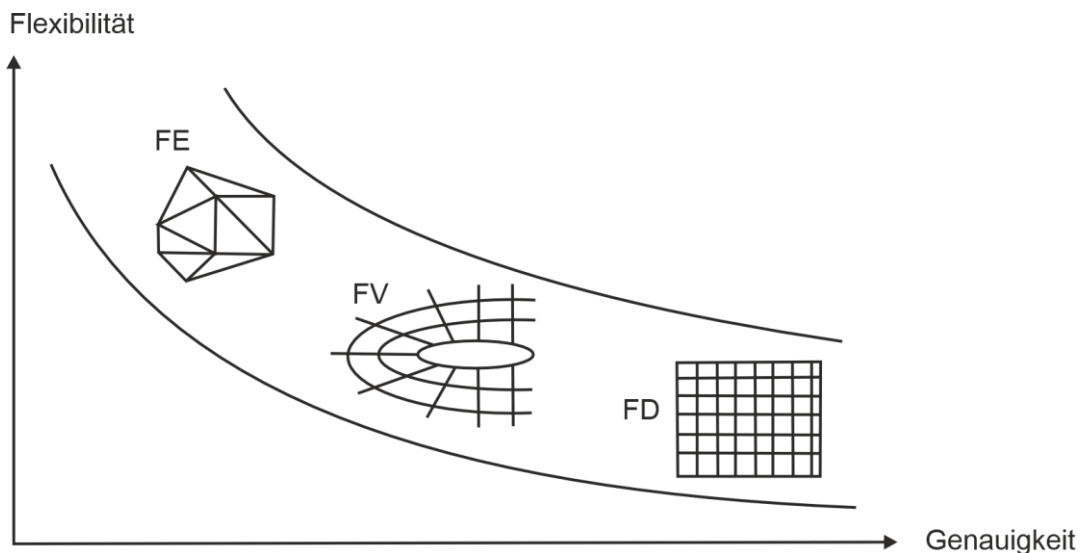


Abbildung 4-1: Übersicht der einzelnen Diskretisierungsmethoden nach [Lec14]

4.1.2 Inhalte einer numerischen Simulation

Die CFD-Strömungssimulation besteht aus mehreren Einzelschritten, die eine detaillierte Simulation der Strömung ermöglichen. Die in Abbildung 4-2 dargestellten Schritte sind typischerweise in kommerziellen Softwarelösungen für CFD-Simulationen integriert. [Lec14]

Zu Beginn jeder Strömungssimulation muss das Rechengebiet definiert werden. Für eine CFD-Simulation von Doppelschneckenelementen auf einem gleichläufigen Doppelschneckenextruder gehören dazu beispielsweise die 3D-Geometrie der Schneckenelemente und des Zylindergehäuses sowie die Gestaltung des Einlauf- und Auslaufbereichs, da diese den Rand der Simulation darstellen. Anschließend wird das Rechengitter mit modernen Programmen wie TURBOGRID, MESHING oder TGRID erzeugt. Die Qualität und Feinheit des Rechnetzes beeinflussen direkt die Genauigkeit der numerischen Lösung. Daher ist es wichtig, das Rechengitter an die spezifische Strömungsumgebung

anzupassen. Zunächst werden Standardnetze basierend auf den Abmessungen des Rechengebiets erstellt und anschließend global sowie lokal verfeinert. Grobe Rechengitter führen zu geringerer Genauigkeit, verkürzen jedoch die Simulationszeit im Vergleich zu feineren Netzen. [Lec14]

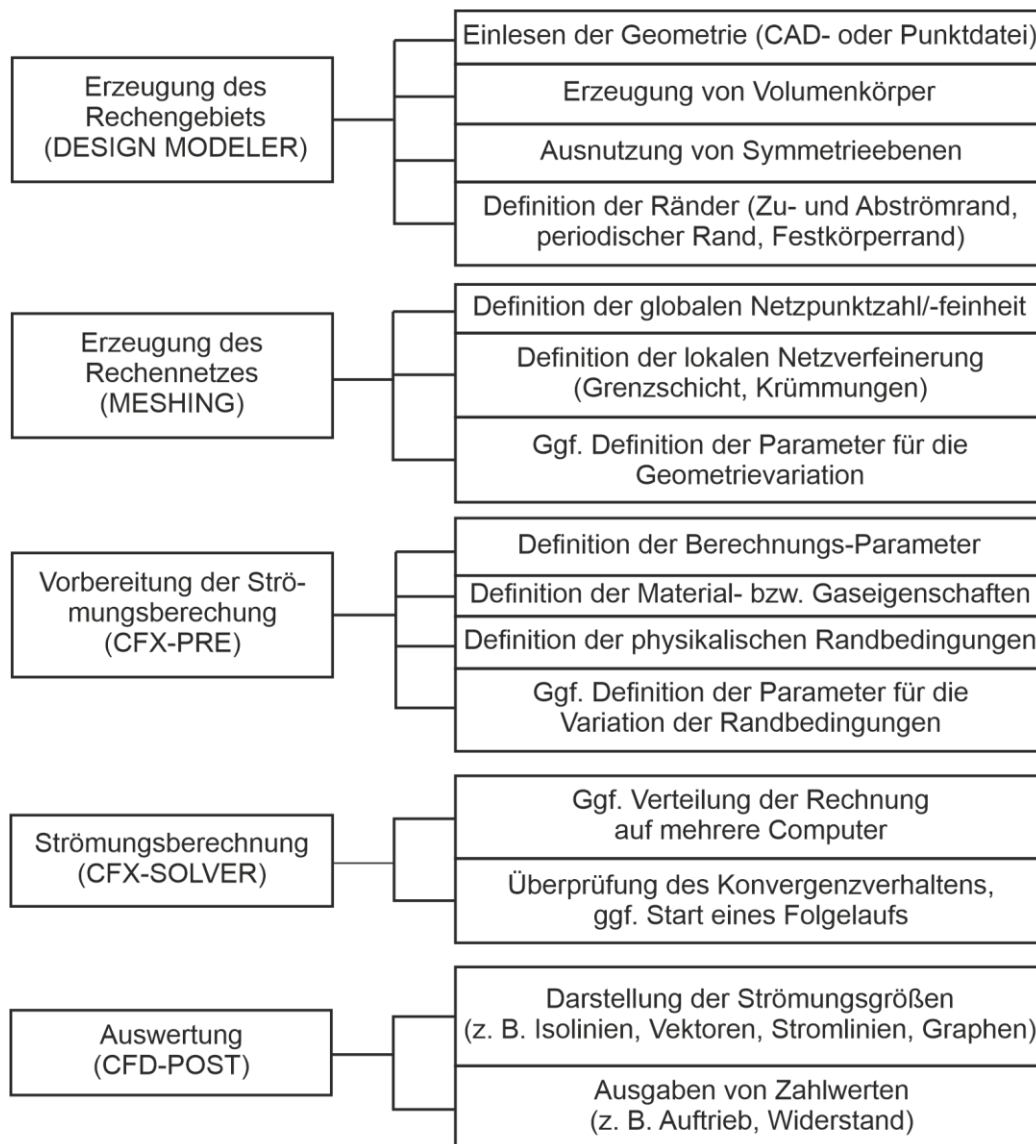


Abbildung 4-2: Darstellung der Reihenfolge einer typischen numerischen Strömungssimulation mit den dazugehörigen Programmbezeichnungen aus ANSYS CFX nach [Lec14]

In der Vorbereitung der Strömungsberechnung werden die notwendigen Berechnungsparameter festgelegt. Dazu gehören die Auswahl zwischen stationärer oder instationärer Strömung, die Eingabe der Materialeigenschaften und der Randbedingungen. Darüber hinaus wird definiert, unter welchen Bedingungen die Simulation automatisch beendet wird. Dies kann zum Beispiel der Fall sein, wenn eine maximale Iterationsanzahl erreicht ist, die Lösung eine festgelegte Genauigkeit unterschreitet oder die Simulationsergebnisse außerhalb eines bestimmten Grenzwerts liegen. Dieser Schritt wird als Pre-Processing bezeichnet. Darauf folgt die eigentliche Strömungssimulation, in der die

mathematischen Gleichungen berechnet werden. Abschließend können die Ergebnisse im Post-Processing analysiert und ausgewertet werden. [Lec14]

Nach diesem Schema können in der Simulationssoftware beispielsweise Strömungsvisualisierungen mit Partikeln, Darstellungen von Strömungsgrößen und Kennzahlen angezeigt oder für den Export in eine andere Software vorbereitet werden. [Lec14]

4.1.3 Fehler und Genauigkeit einer numerischen Simulation

Die CFD-Strömungssimulationen sind also eine mathematische Beschreibung von realen Prozessen. Allerdings weichen sie durch Annahmen, Randbedingungen, Netzgenerierung und zahlreiche weitere Einstellungen von der Realität ab. Daher müssen bei der Auswertung stets die Genauigkeit und mögliche Fehlerquellen berücksichtigt werden. Ein Fehler in der Simulation ist definiert als die Abweichung des Simulationsergebnisses vom erwarteten oder bekannten Ergebnis des realen Prozesses. Der Gesamtfehler ε_{ges} einer numerischen Simulation setzt sich aus dem Modellfehler ε_{mod} und dem numerischen Fehler ε_{num} zusammen. Der Modellfehler beschreibt die Abweichung der Modellgröße Φ von der realen physikalischen Größe Φ_{phys} , die durch die Approximation der diskreten Werte an den Stützstellen entsteht. Der numerische Fehler ε_{num} lässt sich in den Diskretisierungsfehler ε_{h} und den Iterationsfehler ε_{it} unterteilen. Der Diskretisierungsfehler resultiert aus der Diskretisierung der Modellgleichungen, während der Iterationsfehler durch die unvollständige Konvergenz der iterativen Lösung entsteht. Der numerische Fehler beschreibt somit die Differenz zwischen der numerischen Näherungslösung und der exakten Lösung der Modellgleichungen. [LO11, Sch12]

Die Beurteilung dieser einzelnen Fehler erfolgt auf unterschiedliche Weise. Während zur Einordnung des Gesamtfehlers mindestens punktuelle Werte der gesuchten physikalischen Größe bekannt sein müssen, wird der Iterationsfehler nach jedem Iterationsschritt abgeschätzt. Numerische Strömungssimulationen weisen somit stets gewisse Abweichungen vom realen Prozess auf. Im Ingenieurwesen stellt dies jedoch kein Problem dar, solange die Abweichungen quantifiziert werden können und innerhalb tolerierbarer Grenzen bleiben. [LO11, Sch12]

An dieser Stelle wird auf eine detaillierte Erläuterung der Bewertung der einzelnen Fehler verzichtet, da der Aufbau der Simulation, die Bewertung der Fehler und die Simulation der Strömung bei der Firma IANUS Simulation GmbH durchgeführt wurden.

4.1.4 DEM Simulation – Möglichkeiten und Grenzen

Technisch ist die Simulation von Partikeln mit diskreten Elementmethoden umsetzbar und auch Stand der Technik. Jedoch ist auch hier die zur Verfügung stehende Rechenleistung der limitierende Faktor bei der Auswahl von geeigneten Partikelgrößen und -anzahlen. So werden bei kleinen Partikelgrößen die Anzahl stark limitiert, damit die Rechenzeit in einem sinnvollen Zeitrahmen bleibt. Die Kopplung der CFD und DEM Simulation in einer Multiphysik-Simulation ermöglicht somit die Kombination aus Strömungssimulation mit Partikelsimulation. Das

Verhalten beider Bestandteile kann somit berücksichtigt und die Strömung realitätsnah analysiert werden. [[Ans-ol] Übertragen auf die Analyse des Mischverhaltens von Schneckenelemente heißt dies, dass die Geometrie der Füllstoffe berücksichtigt werden kann. Jedoch sind sowohl die Partikelgröße von 2-10 µm als auch der große Anteil von bis zu 50 Gew.-% problematisch. Am Beispiel von Talkum mit einer Partikelgröße von 10 µm wird nachfolgend die Rayleigh-Zeitstufe ($\Delta t_{Rayleigh}$) berechnet, die eine wichtige Kenngröße in der Diskreten Elemente Methode (DEM) ist. Sie definiert den maximal stabilen Zeitschritt, der verwendet werden darf, damit eine Simulation numerisch stabil bleibt und mechanische Schwingungen einzelner Partikel korrekt abgebildet werden. Die Zeitstufe ergibt sich aus der Schwingungsgeschwindigkeit elastischer Wellen in einem Festkörper und wird über folgende Gleichung 4-1 angenähert:

$$\Delta t_{Rayleigh} = 0,1631 * \frac{r_1}{\sqrt{\frac{G}{\rho}}} \quad \text{Gleichung 4-1}$$

- r_1 : Partikelradius
 G : Schubmodul
 ρ : Dichte des Partikelmaterials

Diese Gleichung erlaubt eine erste Abschätzung, wie viele Zeitschritte für eine bestimmte reale Simulationsdauer nötig sind. So ergibt sich z. B. für Talkum mit einer Partikelgröße von 10 µm, einer Dichte von etwa $\rho = 2700 \text{ kg/m}^3$ und einem Schubmodul von $G \approx 22,6 \times 10^9 \text{ Pa}$, eine Rayleigh-Zeitstufe von:

$$\Delta t_{Rayleigh} = 2,82 * 10^{-10} \text{ s}$$

Für die Abbildung von 1 Sekunde Prozesszeit wären somit über

$\frac{1}{2,82 * 10^{-10}} = 3,55 \text{ Milliarden Zeitschritte}$ notwendig. Diese Berechnung berücksichtigt dabei allein die zeitliche Auflösung und ist unabhängig von der Anzahl an Partikeln oder anderen physikalischen Prozessen. In einer realistischen Mischsimulation mit Millionen Partikeln steigt der Rechenaufwand entsprechend ins Extreme, da mit der Anzahl der Partikel die Länge eines einzelnen Zeitschritt beeinflusst wird. Die Rayleigh-Zeitstufe macht somit deutlich, warum DEM-Simulationen mit sehr kleinen Partikeln und hohem Partikelanteil (z. B. Talkum bei 10 µm und 50 Gew.-%) schnell an praktische und technische Grenzen stoßen. [BH00, BPH19, Ele-ol]

4.2 Vorgehensweise (Simulation)

In diesem Kapitel wird die Vorgehensweise bei der Durchführung der Simulation im Detail erklärt. Zuerst wird dabei der Aufbau der Simulation mit der anschließenden Partikelverfolgung beschrieben. Danach werden die in der Simulation verwendeten Geometrien für die Doppelschneckenextruder Schneckenelemente und Materialien dokumentiert.

4.2.1 Aufbau der Simulation

Die Simulationen erfolgten auf dem Rechencluster der Firma IANUS Simulation GmbH. Grundlage bildete eine isotherme, 3D CFD-Strömungssimulation, die um eine Partikelverfolgung ergänzt wurde. Im Folgenden werden die dabei berücksichtigten Eingangs- und Ausgangsgrößen sowie die verwendeten Randbedingungen dargestellt.

- Doppelschneckenextruder: 2 Stück
- Kunststoffe: 2 Stück
- Schneckenelemente: 5 Stück
- Drehzahl: 200, 300, 400 U/min
- Schmelzetemperatur: 220°C
- Massendurchsatz: 20 und 22,4 kg/h
(Angepasst an Extruderdurchmesser)
- Füllgrad des Kanals: Vollfüllung
- Partikelquellen: 2 Stück (mitrotierend)
- Partikelinjektion: 378 pro Quelle pro Zeitschritt
(Freigewählter Parameter im sinnvollen Bereich)
- Zeitschritt: 1/120 Sekunden
- Simulationszeit: 30 Sekunden

Der Versuchsplan für die Simulationen umfasst insgesamt 60 Versuchspunkte, die sich aus der Kombination von zwei Extrudern, zwei Kunststoffen, fünf Schneckenelementen und drei Drehzahlen zusammensetzen.

Das Ziel der Simulationen ist es, das Mischverhalten der einzelnen Schneckenelemente abzubilden. Aus diesem Grund wird ausschließlich die Strömung in dem jeweiligen Schneckenelement betrachtet. Da die Eingangs- und Ausgangsbedingungen im Strömungsgebiet nicht in allen Fällen hinreichend bekannt sind, wurde ein Ein- und Auslauf definiert, wie es bei unvollständig spezifizierten Randbedingungen üblich ist [FP02]. In der Abbildung 4-3 ist dies exemplarisch für einen förderneutralen Knetblock mit einer Länge von 24 mm inklusive der beiden verwendeten grünen Partikelquellen dargestellt. Die Gesamtlänge des Strömungsgebiets ergibt sich hierbei aus der Addition von Einlauf, Auslauf und Schneckenelement. Der Einlauf besitzt für alle Simulationen eine Länge von 2 mm, während der Auslauf 5,5 mm lang ist. Somit variiert die Gesamtlänge des Simulationsgebiets stets in Abhängigkeit von der Länge des eingesetzten Schneckenelements.

In allen Simulationen werden die in Abbildung 4-4 dargestellten zwei Partikelquellen verwendet. Diese sind mittig im Schneckenkanal positioniert und rotieren mit identischer Drehzahl jeweils um eine der Schnecken. Der verwendete Radius r_m für die Partikelquellen ergibt sich aus dem Radius des Zylinders der Doppelschnecke r_a und dem Innenradius r_i des Schneckenelements.

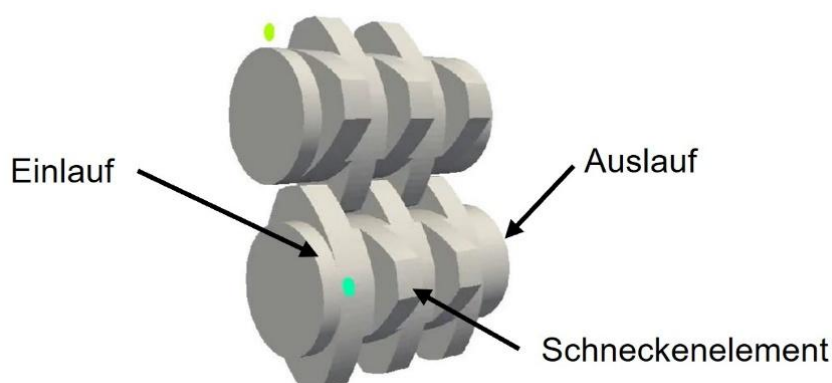


Abbildung 4-3: Schneckenengeometrie in der 3D CFD-Strömungssimulation mit dem Einlauf, dem Schneckenelement, dem Auslauf und den zwei farbigen Partikelquellen

Weitere relevante Größen, die in der Abbildung angegeben sind, sind der Achsabstand a sowie der Versatzwinkel α der Partikelquelle relativ zum Schneckenelementsteg. Aufgrund der symmetrischen Geometrie des Strömungsfeldes wurden bewusst nur zwei Partikelquellen als Startpunkte definiert. Dadurch ließ sich die Anzahl der Partikel und damit auch die benötigte Simulationszeit auf ein notwendiges Minimum reduzieren.

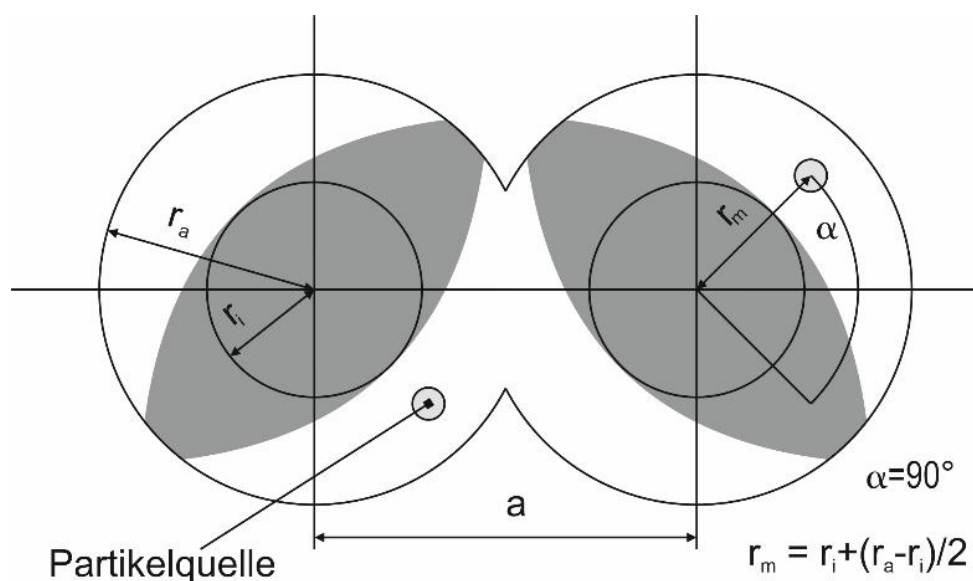


Abbildung 4-4: Schematische Darstellung der Lage der Partikelquellen für die Partikelverfolgung im Strömungsgebiet

Die betrachtete Simulationszeit beträgt 30 Sekunden, wobei die einzelnen Zeitschritte jeweils 1/120 Sekunden lang sind. Daraus ergibt sich eine Gesamtzahl von 3600 Zeitschritten pro Simulation. Für jedes Partikel werden die Ergebnisse pro Zeitschritt in eine separate CSV-Datei gespeichert, sodass pro Simulation 3600 CSV-Dateien entstehen. Bei insgesamt 60 Versuchspunkten mit je 3600 CSV-Dateien pro Partikelquelle resultiert daraus eine Datenmenge von rund 5,5 TB. Die automatisierte Auswertung dieser Dateien wird in Kapitel 4.3 beschrieben.

In Abbildung 4-5 ist exemplarisch das Ergebnis einer Strömungssimulation mit Partikelverfolgung in ParaView für ein Schneckenelementpaar von Förderelementen dargestellt. Der Einlauf, Auslauf sowie das Schneckenelement sind in Hellgrau visualisiert. Die einzelnen Partikel werden in Hellgrün abgebildet, während die zugehörigen Partikelbahnen in Abhängigkeit von der jeweiligen TrailId (Pfadnummer) farblich dargestellt sind. Die Abbildung veranschaulicht die Partikelverteilung zu einem definierten Zeitpunkt. Dadurch ergibt sich zwar eine konsistente Darstellung der Partikelpositionen im Verhältnis zur Schneckengeometrie, gleichzeitig scheinen jedoch einzelne Partikelbahnen die Geometrie zu durchdringen. Ursache hierfür ist, dass die Partikelbahnen in der Visualisierung nicht mit der Schneckendrehung mitgeführt werden. Dieses Phänomen stellt jedoch ausschließlich ein Darstellungsproblem dar; in der Simulation selbst werden die Strömung und die Partikelbewegungen korrekt abgebildet.

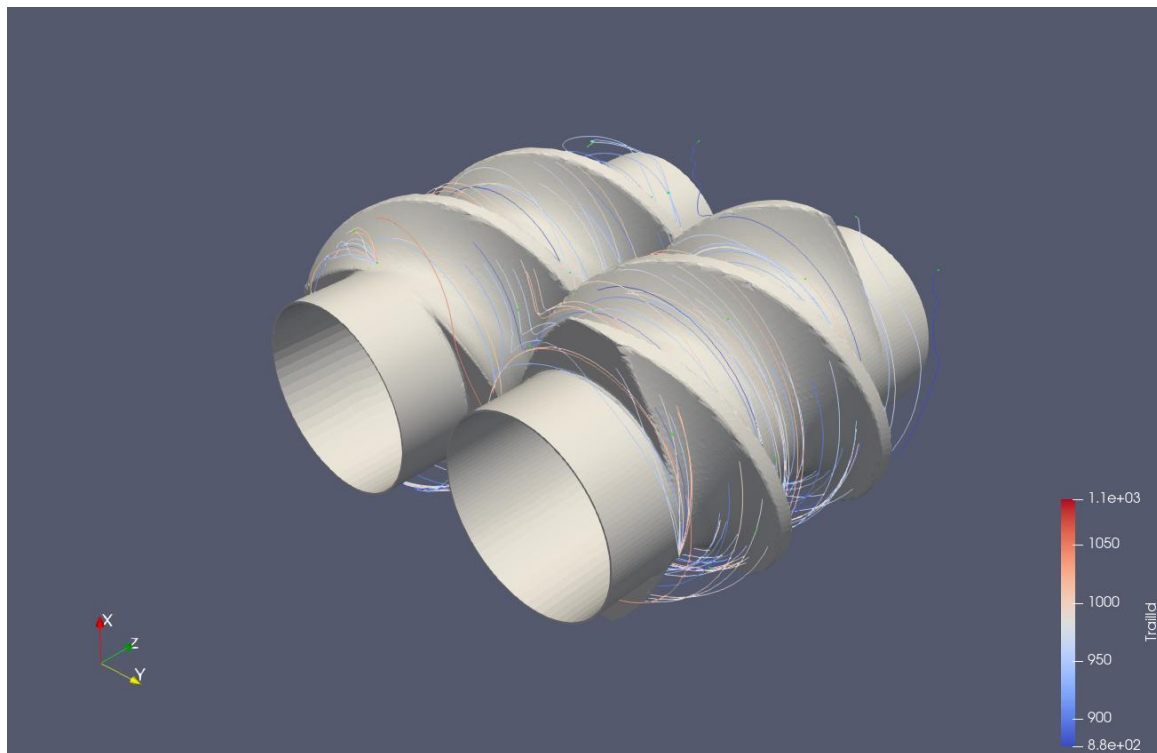


Abbildung 4-5: Ergebnis der Partikelverfolgung in ParaView mit den einzelnen Partikelpfaden farblich markiert und den grünen Partikeln

4.2.2 Verwendete Doppelschneckenextruder

Die Strömungssimulationen wurden für zwei verschiedene gleichläufige Doppelschneckenextruder durchgeführt, die sich hinsichtlich des Durchmessers und des D_a/D_i -Verhältnisses unterscheiden. Die kleinere der beiden Maschinen ist die ZSK25 (Coperion GmbH, Stuttgart, Deutschland) mit einem Schneckendurchmesser von 25 mm und einem D_a/D_i -Verhältnis von 1,55. Die größere Maschine, die ZE28 BluePower (KraussMaffei Group GmbH, Parsdorf, Deutschland), weist einen Schneckendurchmesser von 28 mm und ein D_a/D_i -Verhältnis von 1,65 auf. Zur Charakterisierung des jeweiligen Kanalquerschnitts wurden die in Tab. 4-1 aufgeführten Maße herangezogen.

Tab. 4-1: Übersicht der gemessenen Maschinenparameter der zu simulierenden Doppelschneckenextruder

Parameter	ZSK25	ZE28
Schneckendurchmesser [mm]	25,30	28,30
Achsabstand [mm]	21,10	22,70
Spiel Zylinder/Schnecke [mm]	0,15	0,25

4.2.3 Verwendete Schneckenelemente

Für die Simulationen wurden gezielt unterschiedliche Schneckenelemente ausgewählt, die ein breites Spektrum an Förder- und Mischeigenschaften abdecken. Zusätzlich wurde ein reines Förderelement als Referenzelement berücksichtigt. Somit ergeben sich die in Abbildung 4-6 (a) bis (e) dargestellten Schneckenelemente für die Untersuchungen. Nachfolgend werden die charakteristischen Werte der einzelnen Schneckenelemente aufgelistet:

- (a) Schneckenförderelement (SE), Steigung 24 mm, Elementlänge 24 mm;
- (b) Knetblock (KB12), Versatzwinkel 90°, Anzahl der Knetscheiben 5, Elementlänge 12 mm;
- (c) Knetblock (KB24), Versatzwinkel 90°, Anzahl der Knetscheiben 5, Elementlänge 24 mm;
- (d) Knetblock (KB45), Versatzwinkel 45°, Anzahl der Knetscheiben 5, Elementlänge 24 mm;
- (e) Zahnmischelement (ZME), Steigung 8 mm, Elementlänge 16 mm.



(a)



(b)



(c)



(d)



(e)

Abbildung 4-6: *Darstellung der ausgewählten Schneckenelemente mit dem SE in (a), dem KB12 in (b), dem KB24 in (c), dem KB45 in (d) und dem ZME in (e)*

4.2.4 Verwendete Materialien

Bei der Materialauswahl wurde insbesondere auf die industrielle Relevanz geachtet. Polypropylen (PP) ist ein im industriellen Maßstab häufig eingesetzter Kunststoff und wurde daher aufgrund seiner industriellen Relevanz als Material ausgewählt. Darüber hinaus war es erforderlich, deutliche Unterschiede in den Viskositäten der ausgewählten Kunststoffe zu berücksichtigen, um den Einfluss der Viskosität auf die Mischwirkung gezielt untersuchen zu können. Zudem wurden ungefüllte Kunststoffvarianten bevorzugt, da Füllstoffe oder Fließhilfen die Mischgüte potenziell beeinflussen können. Die beiden in Tab. 4-2 aufgeführten PP-Typen wurden auf Grundlage dieser Anforderungen ausgewählt.

Tab. 4-2: Verwendete Kunststoffe für die Untersuchungen

Material	Name	Bemerkung
Polypropylen	Sabic PP FPH50	MFR-Wert: 50 g/10 min bei 230°C und 2,16 kg
	Sabic PP 505P	MFR-Wert: 2,0 g/10 min bei 230°C und 2,16 kg

Die Materialeigenschaften der beiden Kunststoffe wurden im internen Labor umfassend charakterisiert. In Abbildung 4-7 sind exemplarisch die ermittelten Viskositätsverläufe der Kunststoffe bei 210 °C dargestellt. Wie bereits anhand der MFR-Werte erkennbar war, unterscheiden sich die beiden Materialien hinsichtlich ihrer Nullviskositäten. Im Bereich hoher Scherraten verlaufen die Viskositätskurven jedoch nahezu parallel.

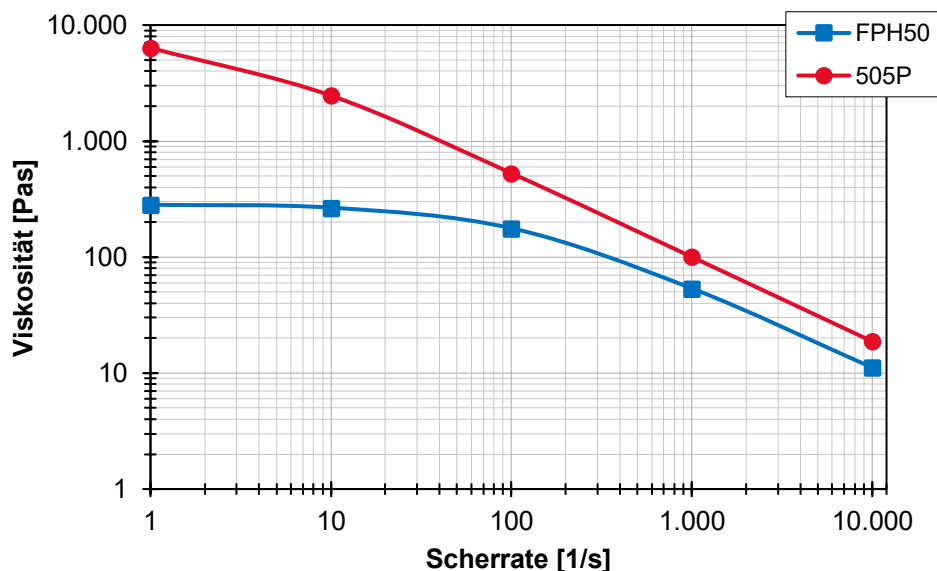


Abbildung 4-7: Verlauf der Viskosität für die beiden verwendeten Kunststoffe bei 210°C

4.3 Methoden zur Analyse der Mischgüte (simulativ)

Die Auswertung der CSV-Dateien erfolgt für jede Mischart separat. Beim distributiven Mischen wird ausschließlich die Punktverteilung zu einem bestimmten Zeitpunkt untersucht, während beim dispersiven Mischen der Verlauf der Schubspannung in Abhängigkeit von den Zeitschritten pro Punkt analysiert wird. Die Bestimmung der Mischgüte erfolgt automatisiert mit spezifischen Methoden, die in Python 3.10 implementiert wurden und in den folgenden Unterkapiteln detailliert beschrieben sind.

4.3.1 Distributives Mischen

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Zho24].

Das distributive Mischen beschreibt das verteilende Mischen, bei dem die Mischgüte über die Gleichmäßigkeit der räumlichen Verteilung der Mischungspartner beurteilt wird. Im Rahmen der hier durchgeführten Strömungssimulationen handelt es sich dabei um die Verteilung der einzelnen Partikel, die in einer definierten Auswertungsebene hinter dem jeweiligen Schneckenelement analysiert werden.

Das für die Auswertung entwickelte Python-Skript automatisiert die folgenden Schritte:

- Identifikation und Kopieren der Partikelpunkte in der variablen Auswertungsebene für ausgewählte Zeitschritte (1000, 1500, 2000, 2500, 3000, 3500, 3600)
- Zusammenführen der Punkte der einzelnen Partikelquellen in einer Datei
- Durchführung einer Delaunay Triangulation der ausgewählten Punkte
- Berechnung der Mischkennzahl $Mq_{dist. (sim.)}$ aus den Ergebnissen der Delaunay Triangulation
- Speichern der Delaunay Triangulation als Bild sowie des Mischindex in einer Excel-Datei

Vor der Ausführung des Skripts wurde die Position der Auswertungsebene für jedes Schneckenelement separat bestimmt. Hierzu wurde die Delaunay-Triangulation für mehrere Intervalle mit einer Breite von 1 mm durchgeführt. Dabei wurden sämtliche Partikelpunkte im Strömungsgebiet berücksichtigt, wobei die Z-Koordinate zur Zuordnung der Punkte zu den jeweiligen Intervallen diente. Für jedes Intervall erfolgte anschließend eine Delaunay-Triangulation, deren Ergebnisse in Form von Grafiken ausgewertet wurden.

Bei der Delaunay-Triangulation werden die Partikelpunkte innerhalb der Auswertungsebene so miteinander verbunden, dass Dreiecke entstehen, in deren Umkreisen keine weiteren Punkte liegen. Ein exemplarisches Resultat ist in Abbildung 4-8 dargestellt. Die schwarze Linie kennzeichnet die Außenkontur des Doppelschneckenextruders und die Innendurchmesser der Schneckenelemente. Die Partikel sind in rot dargestellt, die Dreiecksseiten in Blau.

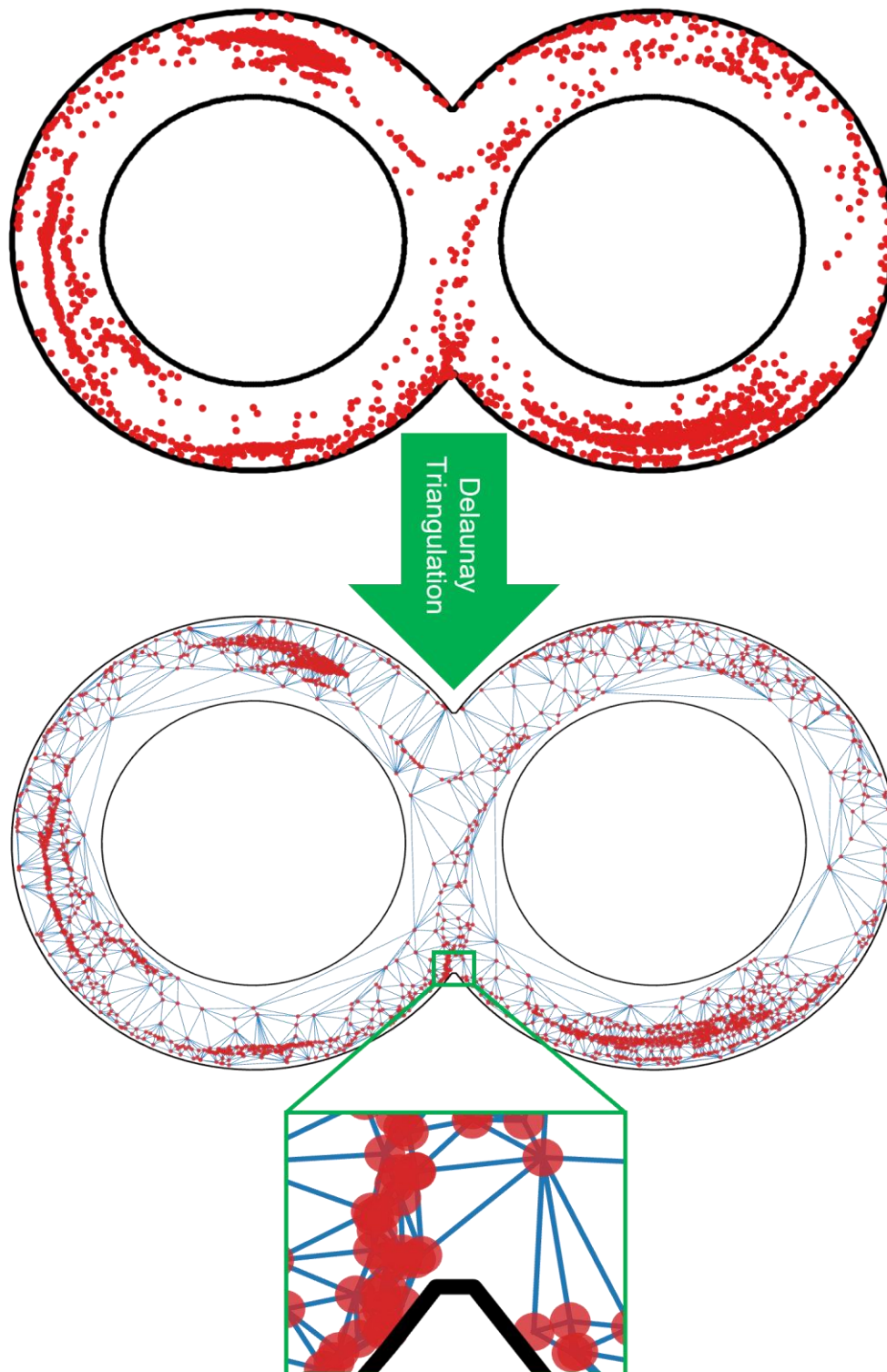


Abbildung 4-8: Darstellung der Punkteverteilung (oben) und der daraus resultierenden Dreiecksflächen nach der Delaunay Triangulation (unten)

Als Auswertungsebene wurde das erste Intervall gewählt, in dem nach dem Schneckenelement kein Einfluss des Steges mehr erkennbar war. In Abbildung 4-9 ist hierzu die Partikelverteilung mit einem KB24 auf der ZE28 im Intervall von 25 bis 26 mm dargestellt. Der verbleibende Stegeinfluss ist diagonal sichtbar und

im rechten Kanal grün markiert. Wird dieses Intervall unmittelbar für die Delaunay-Triangulation verwendet, so führt dies zu einer Fehlinterpretation. In den Bereichen des Stegeinflusses entstehen Dreiecksflächen mit großem Flächeninhalt, was die Berechnung der Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ signifikant verfälscht.

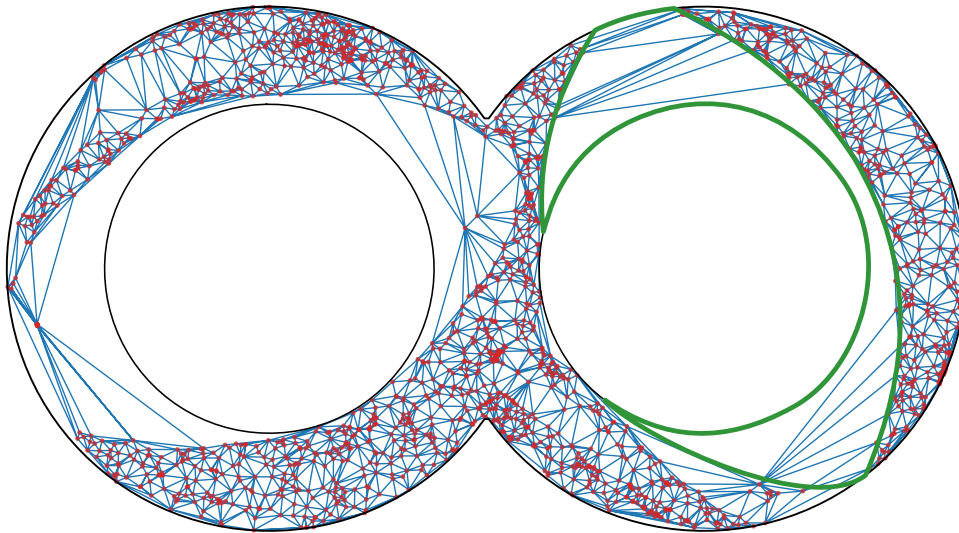


Abbildung 4-9: Delaunay Triangulation einer Partikelverteilung mit Stegeinfluss

In Tab. 4-3 sind die ermittelten Intervallgrenzen der Auswertungsebene in mm für die einzelnen Schneckenelemente aufgelistet.

Tab. 4-3: Intervallgrenzen für die Auswertungsebene [Zho24]

Parameter	505P		FPH50	
	ZE28	ZSK25	ZE28	ZSK25
Element	[mm]	[mm]	[mm]	[mm]
KB12	14-15	12-13	14-15	12-13
KB24	27-28	27-28	27-28	27-28
KB45	27-28	24-25 bei (200 U/min) 27-28 bei (300, 400 U/min)	27-28	27-28
SE	27-28	26-27	27-28	26-27
ZME	19-20	19-20	19-20	19-20

Die automatische Auswertung der CSV-Dateien erfolgt im Bereich der zuvor definierten Auswertungsebenen. Im ersten Schritt des Auswertungsskripts werden die Partikelpunkte jeder CSV-Datei identifiziert, die innerhalb der in Tab. 4-3 dargestellten Auswertungsebene liegen, und in eine neue CSV-Datei übertragen. Dieser Vorgang wird für beide Partikelquellen durchgeführt. Im zweiten Schritt werden die beiden resultierenden CSV-Dateien zu einer gemeinsamen Excel-Datei zusammengeführt, welche anschließend für die Delaunay Triangulation verwendet wird. Dabei erfolgt die Triangulation der Partikelpunkte ohne Berücksichtigung der Randgrenzen. Mit den Flächeninhalten der resultierenden Dreiecke wird schließlich die Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ nach der in der folgenden Gleichung 4-2 angegebenen Definition berechnet.

$$Mq_{dist. (Sim.)} = 1 - \frac{Var}{Var_{Ausgang}}, \quad \text{mit } Var = \frac{s}{\bar{x}} \quad \text{Gleichung 4-2}$$

Var : Variationskoeffizient

s : Standardabweichung der Dreiecksflächeninhalte

$\bar{x}$: Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte

Die berechnete Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ sowie die Standardabweichung und der Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte werden in einer separaten Excel-Datei gespeichert. Zusätzlich wird die Delaunay Triangulation der Partikelverteilung einschließlich der zugehörigen Randgrenzen graphisch ausgegeben und gespeichert (vgl. Abbildung 4-8).

Stabilität der Mischkennzahl

Bei der Analyse der distributiven Mischgüte mit der Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ existieren für die Doppelschneckenengeometrie unterschiedliche Zusammenhängen zwischen den Randbedingungen. Die Extrudergröße beeinflusst die verfügbare Fläche, während durch verschiedene Füllstoffanteile unterschiedliche Punktzahlen resultieren können. Für alle Kombinationen aus Fläche und Punktzahl muss jedoch gelten, dass bei einer idealen Verteilung der Punkte die Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ stets denselben Wert ergibt. Die Kennzahl sollte daher im Idealfall unabhängig von der Extrudergröße (Fläche) und vom Füllstoffanteil (Punktzahl) sein. Die Prüfung des Verhaltens unterschiedlicher Mischkennzahlen erfolgte durch die Entwicklung diverser Szenarien. Im Anschluss wurde eine Analyse und Bewertung der resultierenden Werte der Kennzahlen durchgeführt, um schließlich die Formel für die Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ auszuwählen. Dies soll eine Optimierung der Methode zur Bestimmung der Mischgüte ermöglichen. In Gleichung 4-3 wird zur Berechnung der Mischkennzahl Mq der Variationskoeffizient verwendet, indem die Standardabweichung der Dreiecksflächen durch deren Mittelwert dividiert wird.

$$Mq = Var = \frac{s}{\bar{x}} \quad \text{Gleichung 4-3}$$

Mq :	Mischkennzahl
s :	Standardabweichung der Dreiecksflächeninhalte
$\bar{x}$:	Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte

Den Variationskoeffizient, normiert auf den Variationskoeffizient der Ausgangsverteilung, wird mit der Kennzahl Mq_F nach Gleichung 4-4 angegeben. Die Berechnung nach dieser Gleichung ist am Institut üblich.

$$Mq_F = 1 - \frac{Var}{Var_{Ausgang}} \quad \text{Gleichung 4-4}$$

Mq_F :	Mischkennzahl nach Frank [Fra24]
$Var_{Ausgang}$:	Variationskoeffizient der Ausgangsverteilung

Ein weiterer Ansatz besteht darin, mit Mq_{neu} (vgl. Gleichung 4-5) das Verhältnis aus dem Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte und dem idealen Mittelwert $\bar{x}_{ideal}$ nach Gleichung 4-6 zu verwenden. Auf diese Weise wird die ideale Dreiecksfläche in Abhängigkeit von der Gesamtfläche A und der Anzahl der Dreiecke n_1 berücksichtigt. Damit wird indirekt auch die Partikelanzahl einbezogen, da mit steigender Partikelanzahl gleichzeitig auch die Zahl der Dreiecke zunimmt.

$$Mq_{neu} = 1 - \left| \frac{\bar{x}}{\bar{x}_{ideal}} - 1 \right| \quad \text{Gleichung 4-5}$$

Mq_{neu} :	Mischkennzahl
$\bar{x}$:	Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte
$\bar{x}_{ideal}$:	Idealer Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte

$$\bar{x}_{ideal} = A/n_1 \quad \text{Gleichung 4-6}$$

A :	Fläche
n_1 :	Anzahl der Dreiecke

Der Ansatz mit Mq_{neu} berücksichtigt die Standardabweichung nicht, daher resultieren bei identischen Mittelwerten, aber unterschiedlichen Standardabweichungen theoretisch gleiche Werte für Mq_{neu} . Aus diesem Grund wurde in Mq_{neu} normiert aus Gleichung 4-7 die Standardabweichung zusätzlich einbezogen, indem diese auf die maximale Standardabweichung normiert wurde.

$$Mq_{neu \text{ normiert}} = Mq_{neu} * \left(1 - \frac{s}{s_{max}} \right) \quad \text{Gleichung 4-7}$$

$Mq_{neu \text{ normiert}}$:	Normierte Mischkennzahl
s_{max} :	Maximale Standardabweichung

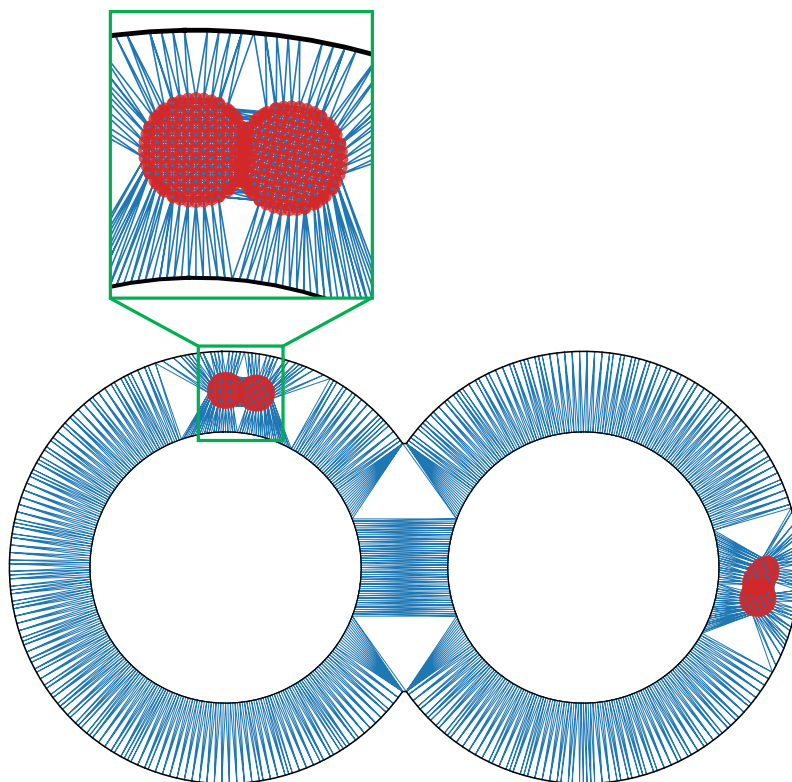
Mit den vier vorgestellten Gleichungen werden die jeweiligen Mischkennzahlen berechnet. Der optimale Wert hängt dabei von der Definition der verwendeten Kennzahl ab.

Für M_q gilt: Kleinere Werte repräsentieren eine bessere Verteilung, da eine gleichmäßigere Partikelverteilung mit einer geringeren Standardabweichung einhergeht und der Wert von M_q entsprechend sinkt. Bei M_{q_F} wird der Wert zunächst auf den Ausgangswert normiert und anschließend von 1 subtrahiert. Dadurch ergibt sich für eine ideale Verteilung ein Kennzahlenwert von 1. Dieser Zusammenhang gilt ebenfalls für die Kennzahlen $M_{q_{neu}}$ und $M_{q_{neu}} \text{ normiert}$, bei denen ebenfalls ein Wert von 1 eine optimale Verteilung anzeigt.

Zusätzlich zur Variation der Berechnung der Mischkennzahl wurde der Einfluss der Geometriegrenzen auf die Delaunay Triangulation untersucht. Dazu wurde das Verfahren in zwei Varianten angewendet:

- In der Variante „Grenzen“ wurden die Randpunkte in die Delaunay-Triangulation einbezogen.
- In der Variante „Nur Punkte“ erfolgte die Triangulation ausschließlich mit den Partikelpunkten, ohne Berücksichtigung der Randpunkte.

Der Unterschied zwischen beiden Ansätzen ist in Abbildung 4-10 dargestellt. Da für die Normierung von M_{q_F} das Ergebnis des Variationskoeffizienten der Ausgangsverteilung verwendet wird, wurde dieser zunächst bestimmt. Hierfür wurde die Partikelverteilung an den Punktquellen, also vor den Schneckenelementen, ermittelt. Die resultierende Ausgangsverteilung ist in Abbildung 4-10 grafisch dargestellt.



(a)

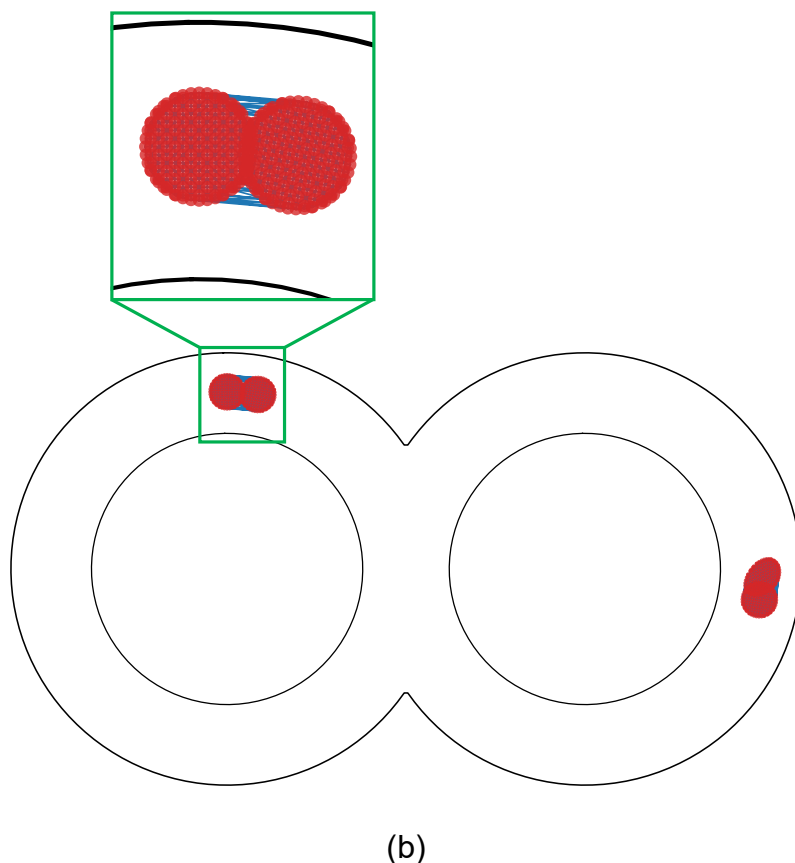


Abbildung 4-10: Darstellung der Ausgangsverteilung für die Geometrie der ZSK25 für die Variante „Grenzen“ (a) und Variante „Nur Punkte“ (b)

Für die in Abbildung 4-10 dargestellte Verteilung ergeben sich die in Tab. 4-4 aufgelisteten Werte für M_q .

Tab. 4-4: Berechnete M_q Werte für die Ausgangsverteilung an der Geometrie der ZKS25

Variante	Wert
Grenzen	3,67
Nur Punkte	0,48

Da das Ergebnis für M_q in der Variante „Nur Punkte“ sehr gering ausfiel und gezeigt werden konnte, dass die realen Verteilungen auch Werte oberhalb von 0,48 erreichen, wurde eine alternative Ausgangsverteilung erstellt und bewertet. Diese überarbeitete Ausgangsverteilung ist in Abbildung 4-11 dargestellt. Hierbei wurden die ursprünglichen Punktquellen aus Abbildung 4-10 mehrfach gespiegelt, sodass insgesamt sieben Bereiche für die Punktquellen entstehen. Im Unterschied

zu Abbildung 4-10 (b) werden in Abbildung 4-11 auch Dreiecke zwischen den unterschiedlichen Bereichen der Punktquellen gebildet. Dadurch steigt der Wert für M_q deutlich an und erreicht 4,21. Mit diesem Referenzwert ist eine Normierung schlüssiger, da die Werte der realen Simulationen kleiner sind und somit auf einen Bereich zwischen 0 und 1 normiert werden können. Für die Variante „Grenzen“ wird die Normierung weiterhin mit einem Wert von 3,67 durchgeführt.

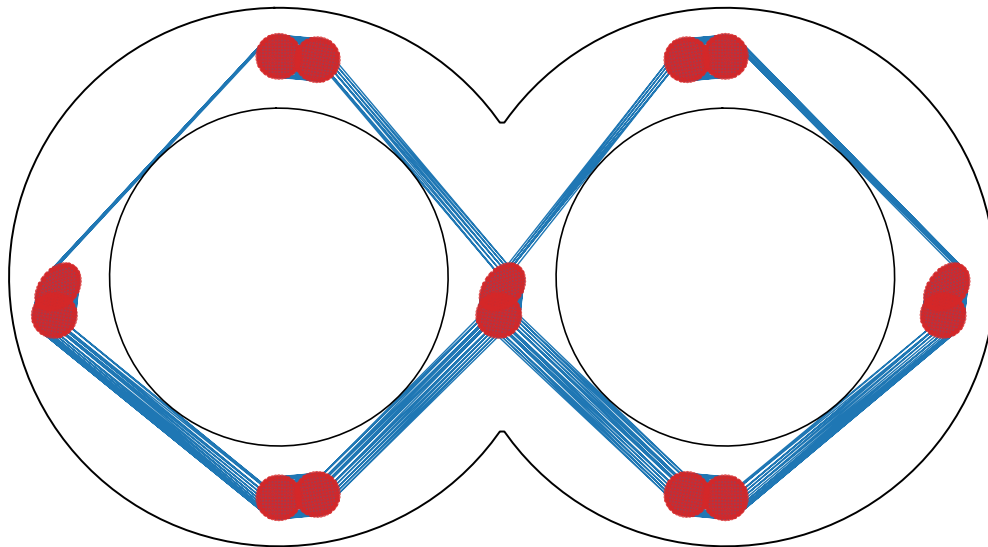
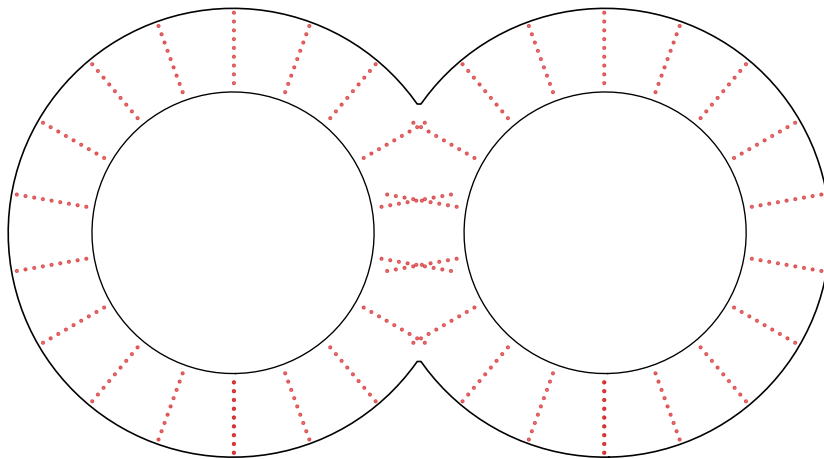
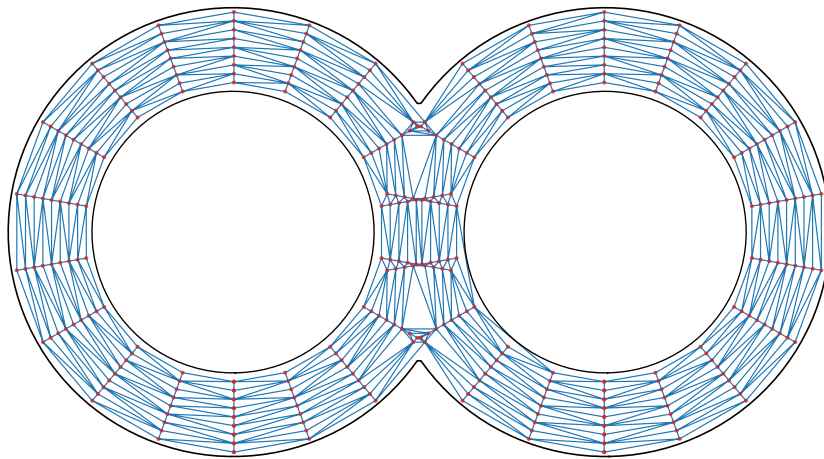


Abbildung 4-11: Darstellung der überarbeiteten Ausgangsverteilung für die Geometrie der ZSK25 für die Variante „Nur Punkte“

Zur Analyse der Abhängigkeit von der Partikelanzahl wurden sowohl Punkte mit vorgegebenen als auch mit zufälligen Positionen generiert. Die Punkte mit vorgegebenen Positionen wurden auf zwei Arten erzeugt: Zum einen mithilfe eines Python-Skripts, das die Punkte automatisch generierte, und zum anderen manuell in Excel, wobei sie jeweils auf fünf beziehungsweise neun Kreisbahnen mit definierten Winkeln zueinander angeordnet wurden. In Abbildung 4-12 (a) sind exemplarisch die resultierenden Punkte für die Variante mit neun Kreise mit unterschiedlichen Radien dargestellt. Zwischen den einzelnen Punkten beträgt der Winkelabstand jeweils 20° . Die zugehörige Delaunay-Triangulation dieser Punkteverteilung für die Variante „Nur Punkte“ ist als Referenz in Abbildung 4-12 (b) gezeigt.



(a)



(b)

Abbildung 4-12: Graphische Darstellung der Punkteverteilung für die neun unterschiedlichen Kreise mit jeweils 20° zwischen den Punkten (a) und die resultierenden Delaunay Triangulation der Punkteverteilung für die Variante „Nur Punkte“ (b)

Die Abhängigkeit der distributiven Kennzahlen von einer variierenden Anzahl an Punkten auf neun unterschiedlichen Kreisen ist in Abbildung 4-13 für die Variante „Nur Punkte“ sowie in Abbildung 4-14 für die Variante „Grenzen“ dargestellt. Für die Variante „Nur Punkte“ sinkt die Mischkennzahl M_q mit zunehmender Punktzahl von etwa 0,6 bei 180 Punkten auf ein Minimum von rund 0,3 bei 828 Punkten. Ab dieser Punktzahl bleibt der Wert nahezu konstant. Die Kennzahl M_{q_F} weist bei 180 Punkten zunächst ein Minimum von etwa 0,85 auf. Bis 666 Punkte steigt der Wert kontinuierlich auf etwa 0,94 an und bleibt danach weitgehend konstant. Die Kennzahl $M_{q_{neu}}$ steigt bis zu einer Punktzahl von 342 sehr steil auf einen Wert von rund 0,84 an und erreicht ab etwa 666 Punkten ihren Endwert von 0,86. Der Verlauf von $M_{q_{neu\ normiert}}$ steigt ebenfalls stark an, erreicht ihr Maximum von etwa 0,85

jedoch erst bei rund 3260 Punkten. Für die Variante „Grenzen“ ergibt sich ein deutlich abweichendes Verhalten. Hier startet der Verlauf von M_q bei rund 2,53, sinkt stark ab und erreicht erst bei etwa 3260 Punkten den Endwert von ca. 0,3. Die Kennzahl M_{qF} weist bei 180 Punkten einen Startwert von etwa 0,31 auf und steigt bis 1638 Punkte kontinuierlich auf den Endwert von ca. 0,92 an. Der Verlauf von $M_{q_{neu}}$ beginnt bei einem Minimum von etwa 0,71 bei 180 Punkten und steigt anschließend auf ein Maximum von 0,97 bei 1638 Punkten an. Die Kennzahl $M_{q_{neu\ normiert}}$ liegt bei einer Punktzahl von 180 zu Beginn bei 0 und steigt kontinuierlich auf ein Maximum von rund 0,97 an, welches erst bei etwa 6700 Punkten erreicht wird.

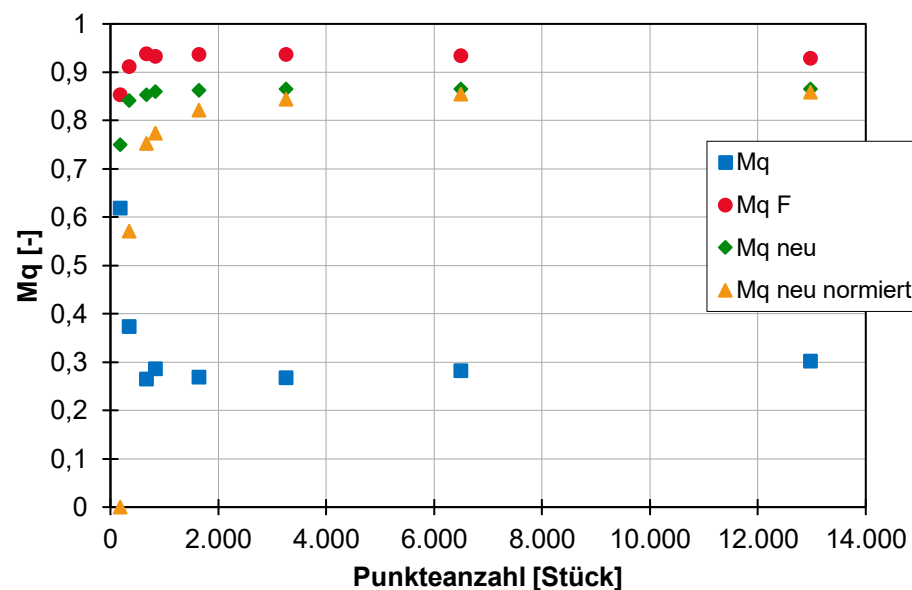


Abbildung 4-13: Verlauf der Mischkennzahlen in Abhängigkeit der Punktzahl für die Variante „Nur Punkte“

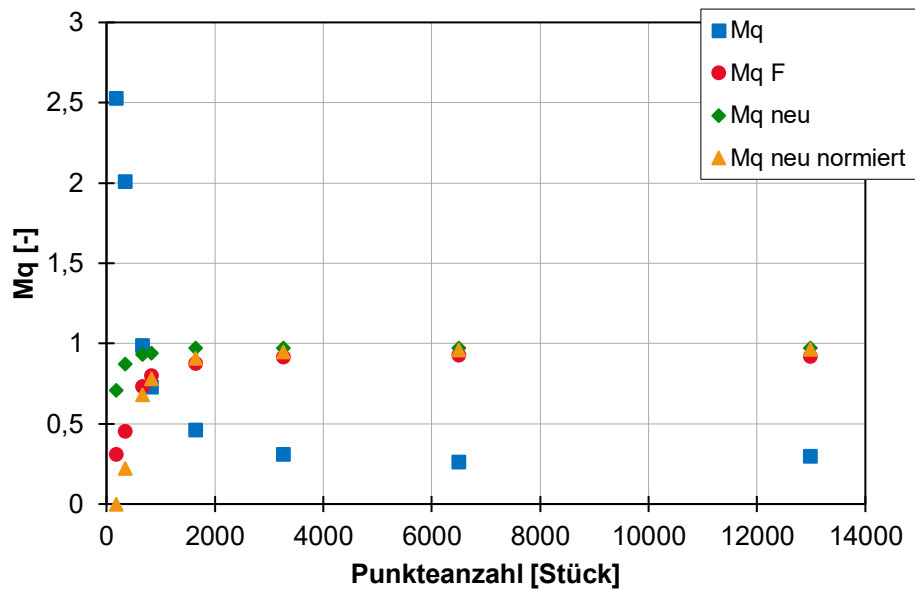
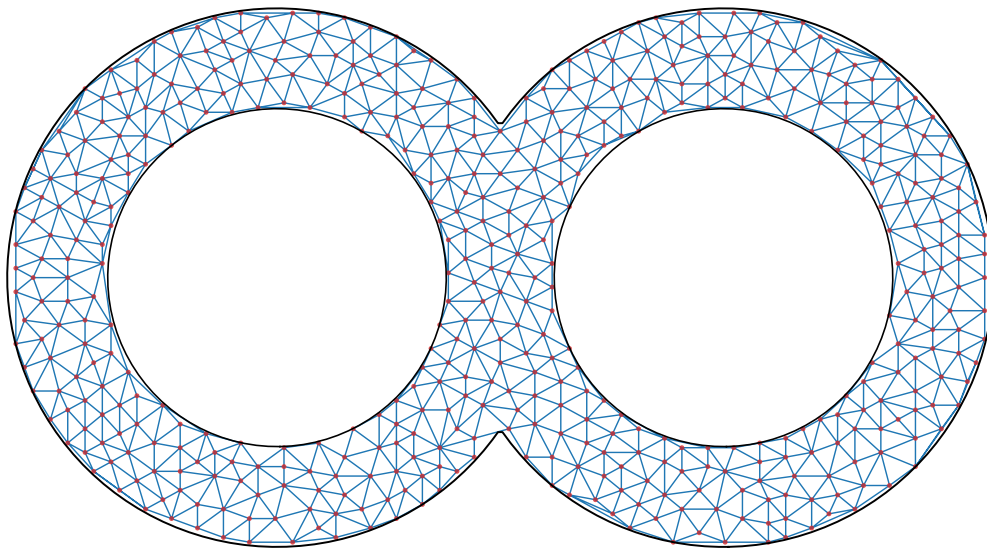
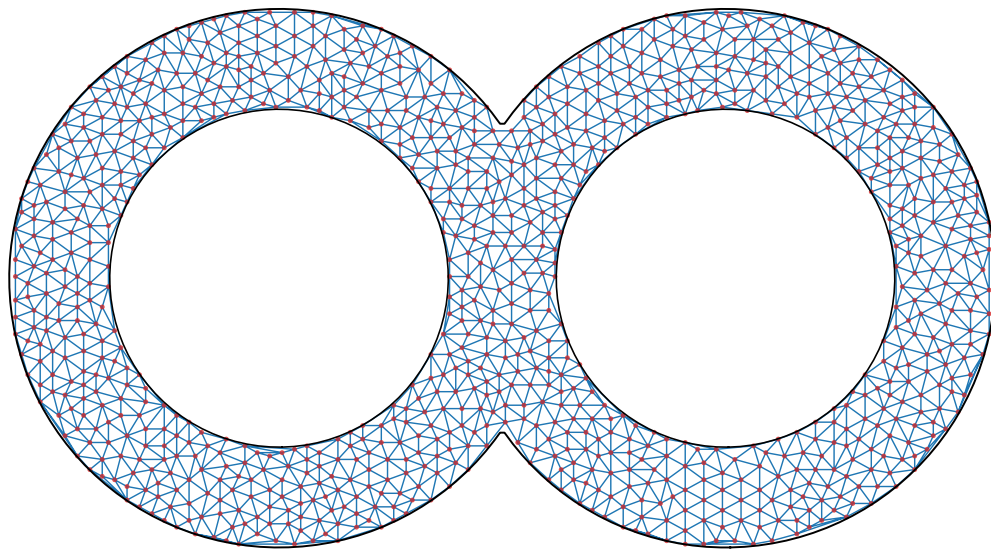


Abbildung 4-14: Verlauf der Mischkennzahlen in Abhängigkeit der Punkteanzahl für die Variante „Grenzen“

Für die Analyse mit gleichmäßig verteilten Punkten wurden bei Punkteanzahlen von 100, 500, 1000 und 2000 Punkten jeweils zehn unterschiedliche Punkteverteilungen erzeugt. Aus diesen Verteilungen wurden die Mittelwerte der jeweiligen Mischkennzahlen bestimmt. In Abbildung 4-15 sind exemplarisch die mit dem Python-Skript generierten gleichmäßig verteilten Punkte für eine Punkteanzahl von 500 (a) sowie 1000 (b) in der Variante „Nur Punkte“ dargestellt.



(a)



(b)

Abbildung 4-15: Gleichmäßig verteilte Punkte mit einer Punktzahl von 500 Stück (a) und 1000 Stück (b) für die Variante „Nur Punkte“

Die Verläufe der Mischkennzahlen in Abhängigkeit von der Punktzahl werden in Abbildung 4-16 und Abbildung 4-17 veranschaulicht. Wie bereits bei den Untersuchungen mit den unterschiedlichen Kreisverteilungen steigen die Werte von $M_{q_{neu}}$ und $M_{q_{neu\ normiert}}$ mit zunehmender Punktzahl an und erreichen bei der Variante „Nur Punkte“ ein Maximum von über 0,9, während bei der Variante „Grenzen“ ein Maximalwert von etwa 0,85 beobachtet wird.

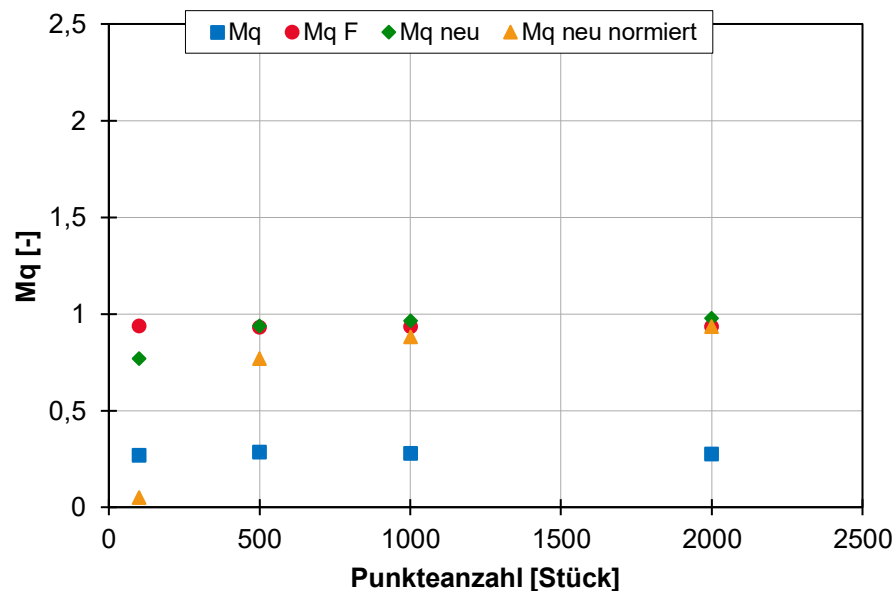


Abbildung 4-16: Verlauf der Mischkennzahlen für gleichmäßig verteilte Punkte in Abhängigkeit der Anzahl der Punkte für die Variante „Nur Punkte“

Die Werte von M_q und M_{q_F} verhalten sich dagegen unterschiedlich: Bei der Variante „Nur Punkte“ bleiben die Werte von M_q und M_{q_F} nahezu konstant und liegen bei rund 0,27 für M_q und 0,93 für M_{q_F} . In der Variante „Grenzen“ nimmt der Wert von M_q dagegen mit steigender Punktzahl ab. Hier wird ein Maximalwert von etwa 1,9 bei 100 Punkten erreicht und ein Minimalwert von rund 0,54 bei 2000 Punkten. Die Werte für M_{q_F} steigen hingegen von anfänglich 0,5 bei 100 Punkten auf 0,85 bei 2000 Punkten an.

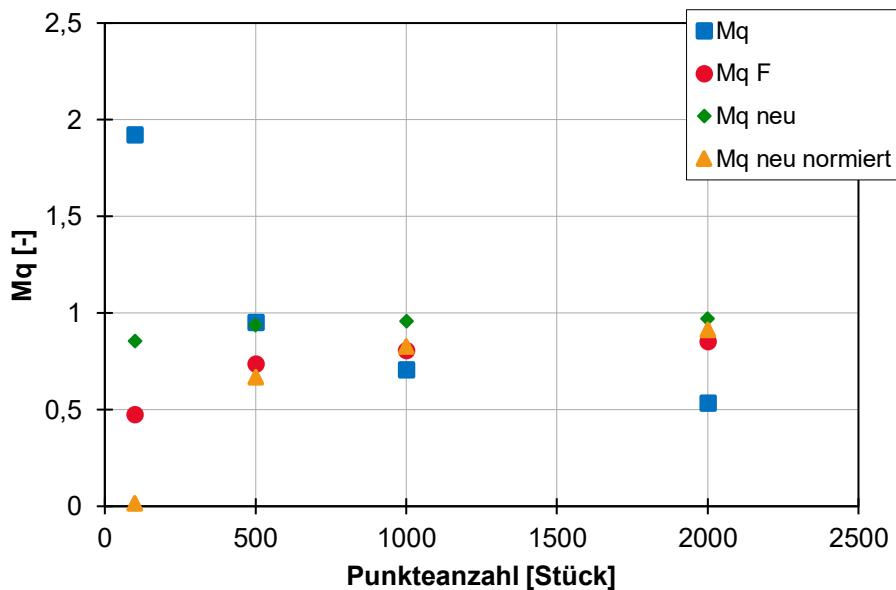


Abbildung 4-17: Verlauf der Mischkennzahlen für gleichmäßig verteilte Punkte in Abhängigkeit der Anzahl der Punkte für die Variante „Grenzen“

Für zufällig verteilte Punkte ergeben sich die in Abbildung 4-18 und Abbildung 4-19 dargestellten Verläufe der Mischkennzahlen. Die distributiven Kennzahlen $M_{q_{neu}}$ und $M_{q_{neu\ normiert}}$ steigen mit zunehmender Punktzahl an und erreichen ab etwa 4000 Punkten einen stationären Wert von rund 0,97, der für beide Varianten gilt. Die Verläufe von M_q und $M_{q_{neu}}$ unterscheiden sich hingegen zwischen den beiden Varianten. Für M_q bleibt der Wert bei der Variante „Nur Punkte“ bereits ab etwa 100 Partikeln nahezu konstant, während er bei der Variante „Grenzen“ kontinuierlich abnimmt; lediglich die Steigung der Kurve flacht bei größeren Punktzahlen ab. Für beide Varianten ergibt sich bei einer Punktzahl von 10000 ein Endwert von etwa 0,98. Der normierte Wert M_{q_F} bleibt in der Variante „Nur Punkte“ über den gesamten betrachteten Bereich stabil bei etwa 0,8. In der Variante „Grenzen“ zeigt sich dagegen ein ansteigender Verlauf, der bei einer Punktzahl von 10000 zu einem Maximalwert von rund 0,76 führt.

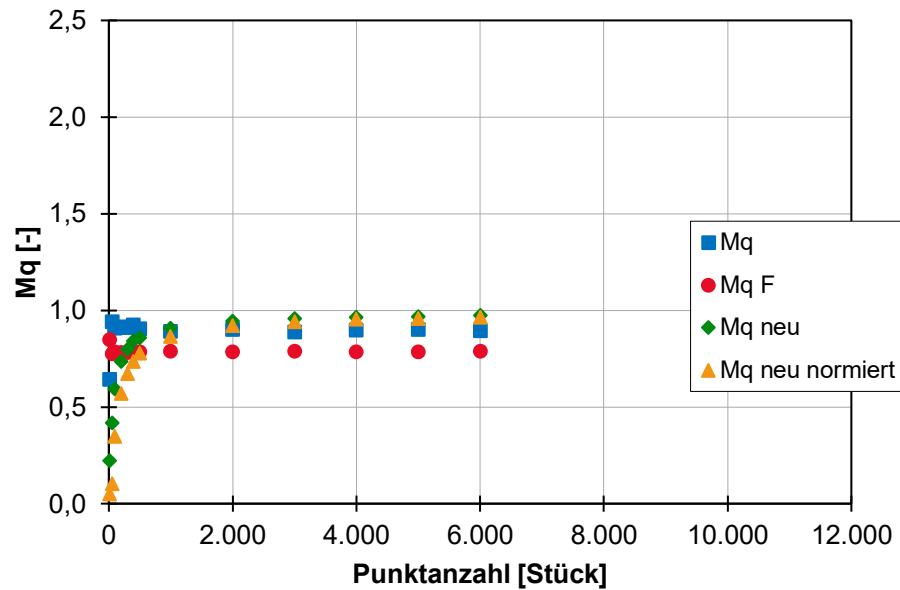


Abbildung 4-18: Verlauf der Mischkennzahlen für zufällig verteilte Punkte für die Variante „Nur Punkte“

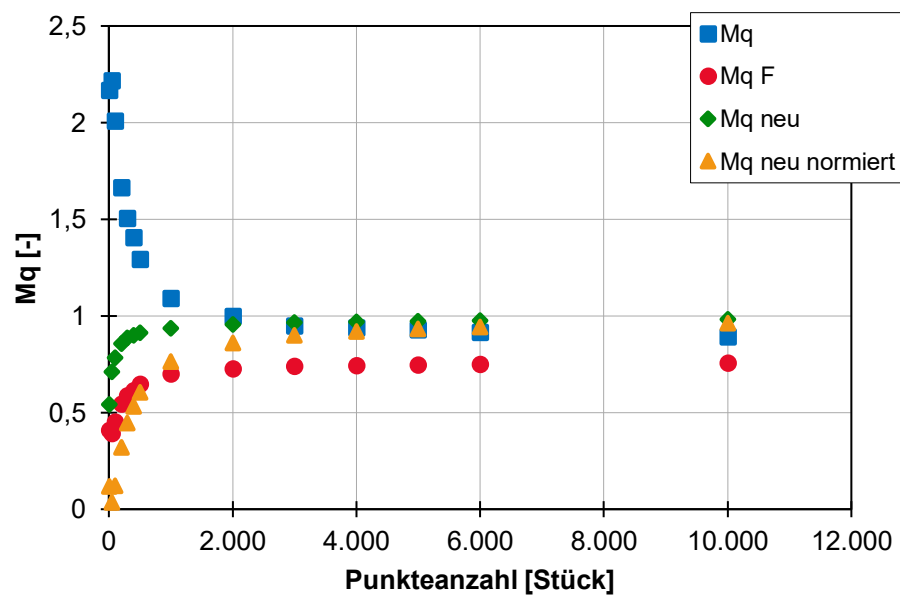


Abbildung 4-19: Verlauf der Mischkennzahlen für zufällig verteilte Punkte für die Variante „Grenzen“

Zur Analyse des Einflusses variierender Flächen auf die Mischkennzahlen wurden drei unterschiedliche Extrudergrößen untersucht, wobei für jede Größe fünf Kreise mit insgesamt 7210 Punkten betrachtet wurden. In Abbildung 4-20 und Abbildung 4-21 werden die Abhängigkeit der Mq-Werte von den drei Extrudergrößen verdeutlicht. Die Kennzahlen M_q , M_{qF} und $M_{q_{neu}}$ zeigen für alle drei Extrudergrößen annähernd konstante Werte. Lediglich die Werte der Kennzahl $M_{q_{neu\ normiert}}$ nehmen mit zunehmendem Durchmesser ab.

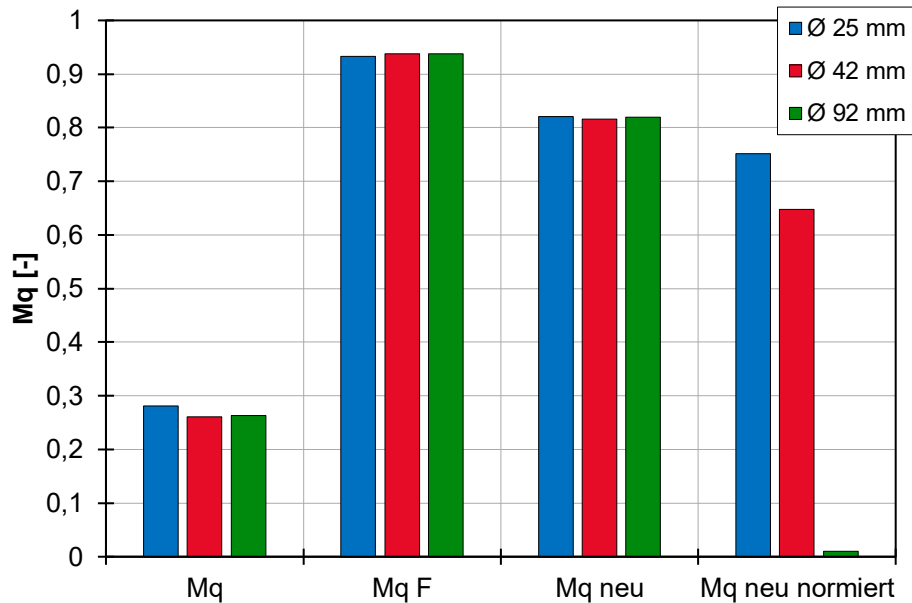


Abbildung 4-20: *Mq-Werte für unterschiedliche Extrudergrößen bei identischer Anzahl an gleichmäßig verteilten Punkten für die Variante „Nur Punkte“*

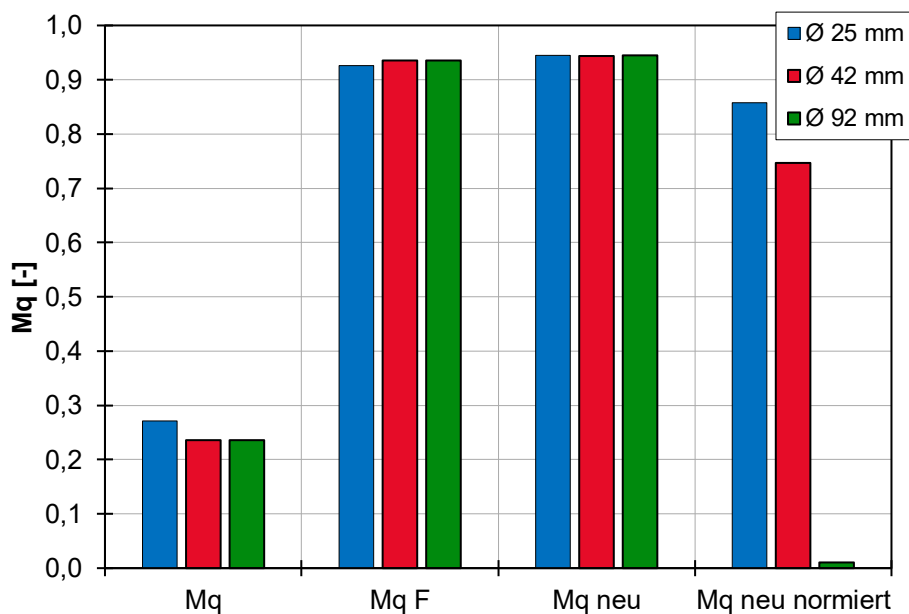


Abbildung 4-21: *Mq-Werte für unterschiedliche Extrudergrößen bei identischer Anzahl an gleichmäßig verteilten Punkten für die Variante „Grenzen“*

Neben den realitätsnahen Szenarien mit gleichmäßiger und zufälliger Punkteverteilung über die gesamte Fläche wurde auch ein fiktives Szenario untersucht, bei dem die Punkte ausschließlich in einem der beiden Schneckenkanäle verteilt vorliegen. Hierzu wurde das Szenario mit fünf Kreisen (vgl. Abbildung 4-22 (b)) so modifiziert, dass die Punkte nur in einem Schneckenkanal gleichmäßig verteilt sind (vgl. Abbildung 4-22 (a)).

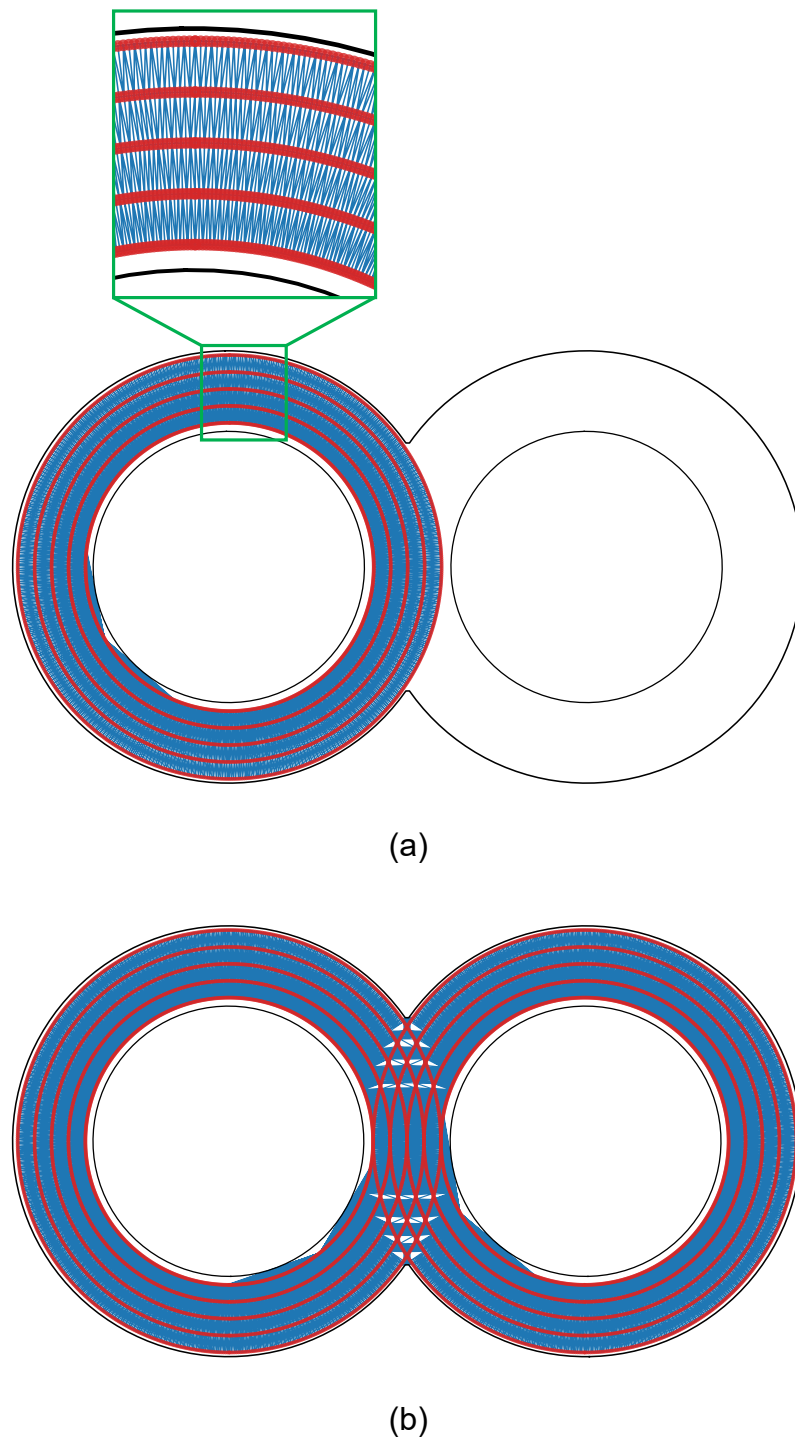


Abbildung 4-22: Delaunay Triangulation für Punkte in nur einem Schneckenkanal (a) und in beiden Schneckenkanälen (b) für die Variante „Nur Punkte“

Die resultierenden Werte für die beiden Fälle „oben“ (O) sowie „oben plus unten“ (O+U) sind in Abbildung 4-23 und Abbildung 4-24 dargestellt. Aus der Abbildung 4-23 wird deutlich, dass bei der Variante „Nur Punkte“ die Kennzahlen M_q , $M_{q_{neu}}$ und $M_{q_{neu\ normiert}}$ deutlich unterschiedliche Werte aufweisen. Lediglich M_{q_F} zeigt nur geringe Abweichungen zwischen den beiden Fällen. Bei der Variante „Grenzen“ (vgl. Abbildung 4-24) kann hingegen mit allen vier Kennzahlen eine klare Differenz zwischen den Verteilungen erkannt werden.

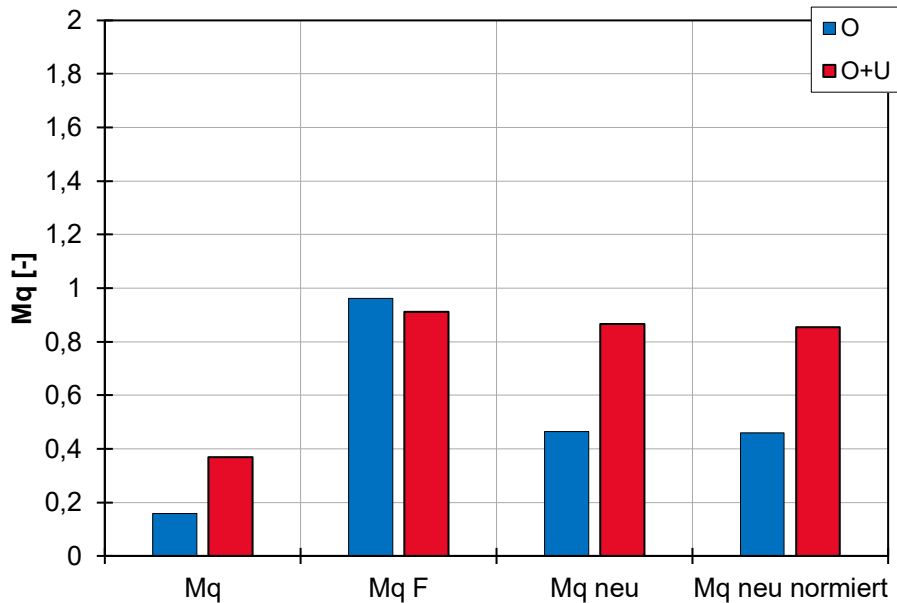


Abbildung 4-23: Resultierende Werte der Mischkennzahlen für die Verteilung der Punkte in einer und beiden Schneckenkanälen für die Variante „Nur Punkte“

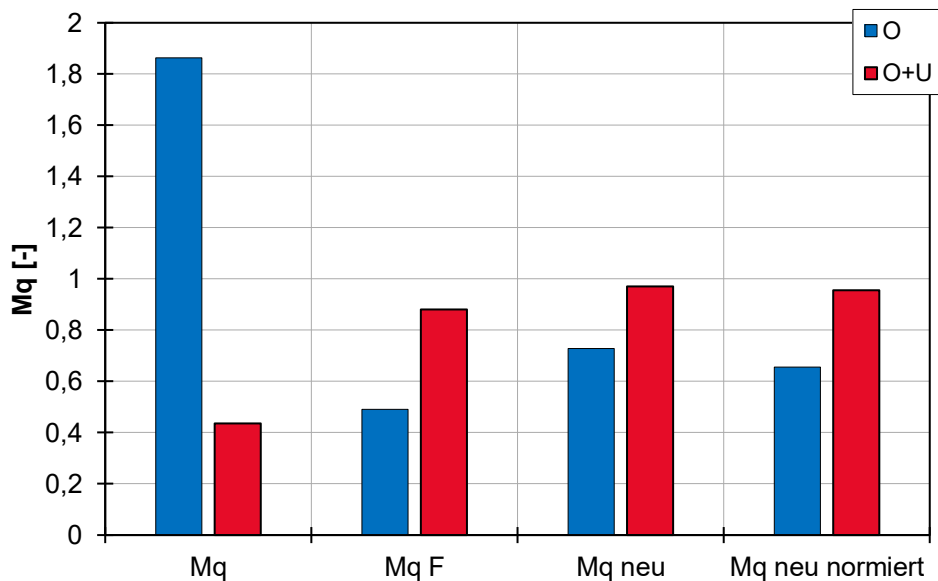
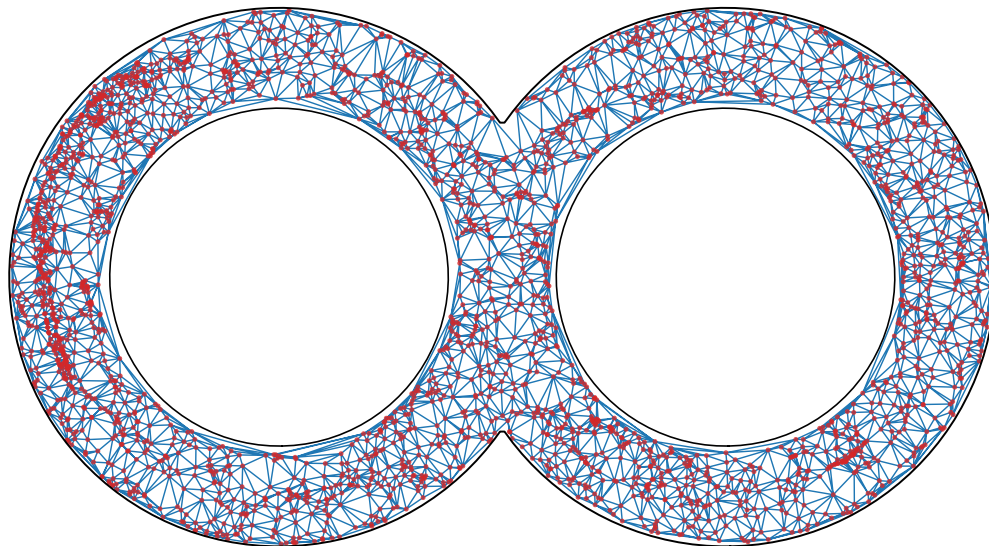


Abbildung 4-24: Resultierende Werte der Mischkennzahlen für die Verteilung der Punkte in einer und beiden Schneckenkanälen für die Variante „Grenzen“

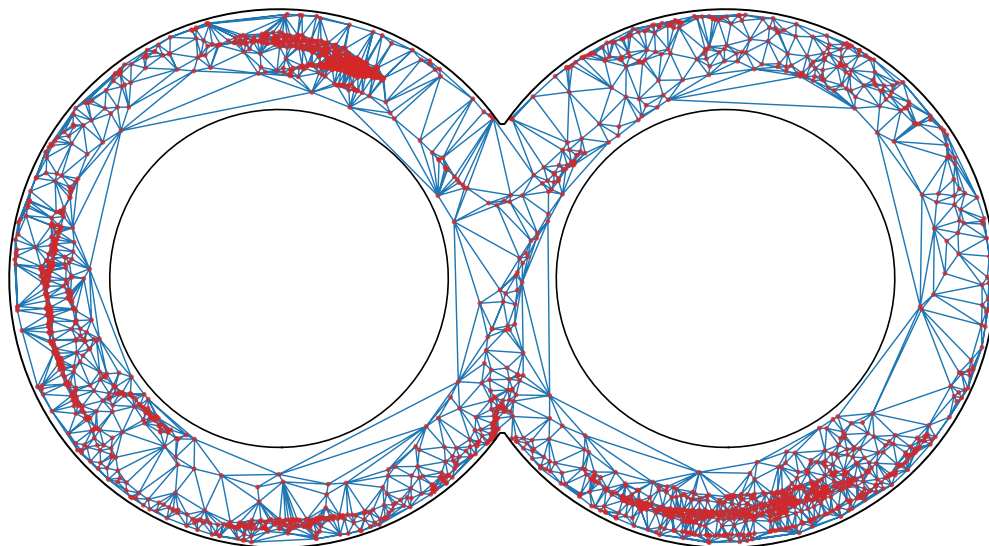
Nach der Betrachtung der unterschiedlichen Szenarien, die nicht auf realen Strömungssimulationen basieren, wurden anschließend zwei Punktverteilungen aus den durchgeführten Strömungssimulationen analysiert. Dabei unterscheiden sich die Simulationen lediglich in den eingesetzten Schneckenelementen. In Abbildung 4-25 (a) wird das Ergebnis der Delaunay Triangulation der Punktverteilung für einen fördernden Knetblock (KB45) dargestellt, während in

Abbildung 4-25 (b) das entsprechende Ergebnis für ein förderndes Schneckenelement (SE) dargestellt wird.

Diese beiden Verteilungen wurden ausgewählt, da das SE in diesem Fall eine visuell deutlich schlechtere Punktverteilung erzeugt als der Knetblock KB45.



(a)



(b)

Abbildung 4-25: Delaunay Triangulationen der Partikelverteilungen der Strömungssimulationen für den KB45 (a) und das SE (b)

Aus der Abbildung 4-26 wird ersichtlich, dass sowohl bei M_q , M_{q_F} und $M_{q_{neu\ normiert}}$ eine signifikante Differenz zwischen den beiden Punktverteilungen bei der Variante „Nur Punkte“ erkennbar ist. Lediglich für $M_{q_{neu}}$ ist die Differenz deutlich geringer und beträgt nur etwa 0,1. Werden die Randpunkte in die

Berechnung einbezogen, ergeben sich die in Abbildung 4-27 dargestellten Werte. Auch in diesem Fall sind für M_q , M_{qF} und $M_{q_{neu}}^{normiert}$ signifikante Unterschiede zwischen den beiden Punktverteilungen erkennbar, während die Abweichung bei $M_{q_{neu}}$ erneut gering bleibt und unter 0,1 liegt.

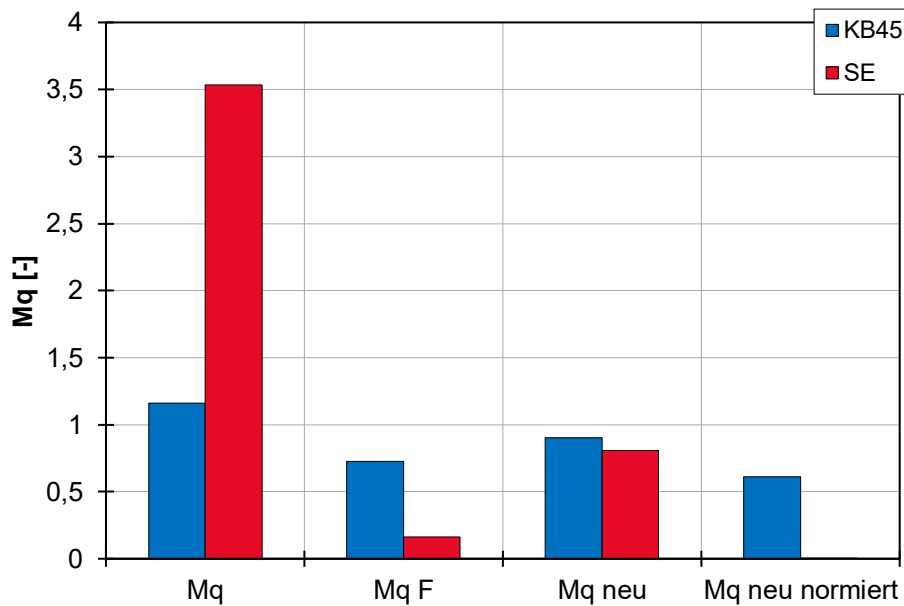


Abbildung 4-26: Werte für die unterschiedlichen Mischkennzahlen für reale Partikelsimulationen für die Variante „Nur Punkte“

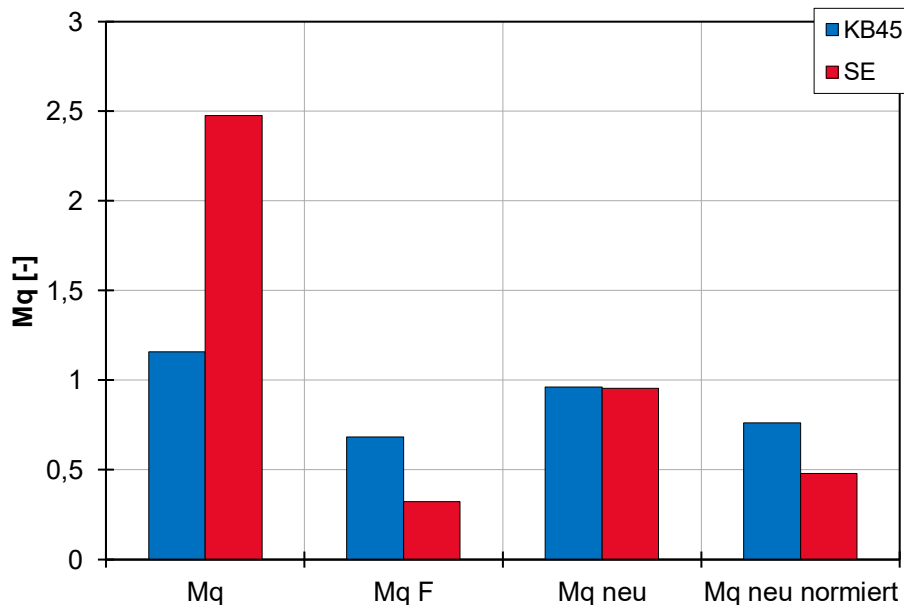


Abbildung 4-27: Werte für die unterschiedlichen Mischkennzahlen für reale Partikelsimulationen für die Variante „Grenzen“

Zusammenfassung:

Für die unterschiedlichen Szenarien wurden die Werte der jeweiligen Kennzahlen ermittelt und analysiert. Das Ziel bestand darin, die am besten geeignete Kennzahl zur Bewertung der Mischgüte zu ermitteln. In Tab. 4-5 ist die Bewertung des Verhaltens der jeweiligen Kennzahl für jedes Szenario zusammengefasst. Eine geeignete Kennzahl muss sowohl von der Partikelanzahl als auch von der Größe der betrachteten Fläche unabhängig sein. Darüber hinaus muss sie eine klare Unterscheidung zwischen guten und schlechten Verteilungen ermöglichen sowohl für fiktive als auch für reale Punktverteilungen. Wie aus Tab. 4-5 hervorgeht, erfüllen die Ansätze mit Mq_{neu} und $Mq_{neu\text{ normiert}}$ diese Anforderungen nicht, da beide Kennzahlen von der Partikelanzahl abhängig sind. Zudem ist mit Mq_{neu} lediglich eine eingeschränkte Differenzierung zwischen guten und schlechten Partikelverteilungen möglich. Auf Basis dieser Bewertung wurde für die Auswertung der simulierten Partikelverteilungen die Berechnung nach Mq_F in der Variante „Nur Punkte“ (vgl. Gleichung 4-4) ausgewählt. Diese Kennzahl wird im Folgenden als $Mq_{dist. (Sim.)}$ bezeichnet.

Tab. 4-5: Bewertung der Abhängigkeit der jeweiligen Kennzahlen in den jeweiligen Szenarien

Kennzahl Szenario	Mq		Mq_F		Mq_{neu}		$Mq_{neu\text{ normiert}}$	
	P	G	P	G	P	G	P	G
Reihen	-	-	+	-	+	-	-	-
Gleichmäßige Punkte	+	-	+	-	0	0	-	-
Zufällige Punkte	+	-	+	-	-	-	-	-
Scale Up	+	+	+	+	+	+	-	-
fiktiv	+	+	0	+	+	+	+	+
Reale Verteilung	+	+	+	+	0	-	+	+
+: gut 0: neutral -: schlecht P: Nur Punkte G: Grenzen								

4.3.2 Dispersives Mischen

Das dispersive Mischen bezeichnet das zerteilende Mischen, das durch Erosion von Partikeln oder durch Gewaltbruch entsteht. Die Bewertung der Mischgüte erfolgt daher anhand zweier Größen. Zum einen durch die Verteilung der maximalen Schubspannungen zur Berücksichtigung des Gewaltbruchs und zum anderen durch das Schubspannungsintegral über die Verweilzeit der einzelnen Partikel für den Fall der Erosion. Das hierfür entwickelte Skript automatisiert die folgenden Schritte:

- Aktualisierung der maximalen Schubspannung und Addition der Schubspannungswerte für jedes einzelne Partikel, sofern sich die Werte innerhalb des Strömungsgebiets des jeweiligen Schneckenelements befinden.
- Löschen der maximalen Schubspannungen und Schubspannungsintegrale von Partikeln, die das Ende des Strömungsgebiets des Schneckenelements noch nicht erreicht haben.
- Bestimmung der Verteilungen der maximalen Schubspannung, des Schubspannungsintegrals und der Verweilzeit für jeden Versuchspunkt, jeweils normiert auf die maximale Partikelanzahl des Versuchspunkts. Bei diesen Verteilungen werden Ausreißer nach oben identifiziert und entfernt, falls ihr Wert den in Gleichung 4-8 definierten Grenzwert überschreitet.

$$G_{oben} = Q_{95} + 1,5 * (Q_{95} - Q_5) \quad \text{Gleichung 4-8}$$

G_{oben} : Grenzwert oben

Q_x : x-te Perzentil

Im ersten Schritt der automatisierten Auswertung wurden sämtliche 3600 Zeitschritte eines Versuchspunktes berücksichtigt, sodass alle Partikel der Simulation in die Analyse eingeflossen sind. Als Ergebnis dieses Schrittes lagen für jedes Partikel die maximalen Schubspannungen, das Schubspannungsintegral, die Verweilzeit sowie die maximale Z-Koordinate vor. Auf Grundlage dieser Z-Koordinate konnten jene Partikel identifiziert und entfernt werden, die sich noch im Bereich des Schneckenelements befanden. Dadurch wurden Schubspannungen und Schubspannungsintegrale nur dann weiter berücksichtigt, wenn das jeweilige Partikel das Schneckenelement vollständig passiert hatte. Im Anschluss wurden die resultierenden Verläufe analysiert und ausgewertet.

Die Bewertung der Verläufe der maximalen Schubspannungen [Pa] und Schubspannungsintegrale [Pa*s] erfolgt dabei gemäß der in Gleichung 4-9 dargestellten mathematischen Beziehung.

$$Mq_{disp. (Sim.)} = 1 - \frac{s}{\bar{x}} \quad \text{Gleichung 4-9}$$

$Mq_{disp. (Sim.)}$: Mischkennzahl dispersives Mischen (Simulation)

s : Standardabweichung

$\bar{x}$: Mittelwert

Bei der Auswertung der Schubspannungsintegrale wurde die Schneckenelementlänge auf 24 mm normiert. Entsprechend wurden die Integralwerte für das KB12 mit dem Faktor 2 und die für das ZME mit dem Faktor 1,5 multipliziert. Ohne diese Normierung führen längere Verweilzeiten aufgrund größerer Schneckenelementlängen fälschlicherweise zu besseren Bewertungen.

4.4 Auswertung

Im Vorfeld der Auswertung wurde überprüft, ob die Strömungssimulation ein stationäres Strömungsverhalten erreicht hat. Dazu wurden die Partikelpfade aller Partikel in einem ausgewählten Versuchspunkt erzeugt und anschließend analysiert, ob identische Pfade für verschiedene Partikel-IDs vorliegen. Am Beispiel des Versuchspunkts mit einem KB12 bei 200 U/min auf der ZSK25 und unter Verwendung des Materials 505P konnte gezeigt werden, dass ab dem 22.681-ten Partikel Wiederholungen auftreten und somit identische Partikelpfade entstehen. Bei einer Injektion von 378 Partikeln pro Zeitschritt (Freigewählter Parameter im sinnvollen Bereich) ergibt sich daraus bereits nach 61 Zeitschritten ein sich wiederholender Verlauf, sodass von einem stationären Strömungsverhalten ausgegangen werden kann.

4.4.1 Distributives Mischen

In diesem Unterkapitel werden die Simulationsergebnisse für das distributive Mischen vorgestellt. Dazu werden sowohl die resultierenden Werte der Mischkennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ als auch die zugehörigen Partikelverteilungen analysiert und dargestellt. In Abbildung 4-28 wird der zeitliche Verlauf der Kennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ für die einzelnen Schneckenelemente der ZSK25 bei 200 U/min und dem Material 505P visualisiert. Es wird deutlich, dass der KB24, KB45 und das ZME nicht nur annähernd identische Werte erreichen, sondern die Kennzahl zugleich nur geringe zeitliche Schwankungen aufweist.

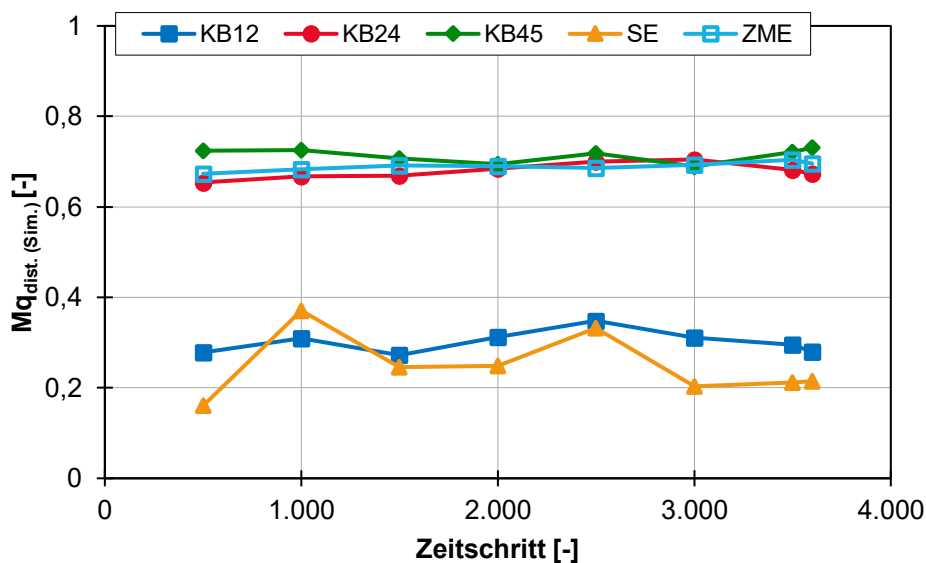


Abbildung 4-28: Zeitlicher Verlauf der Mischkennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ für die einzelnen Schneckenelemente am Beispiel der ZSK25 bei 200 U/min und dem Material 505P

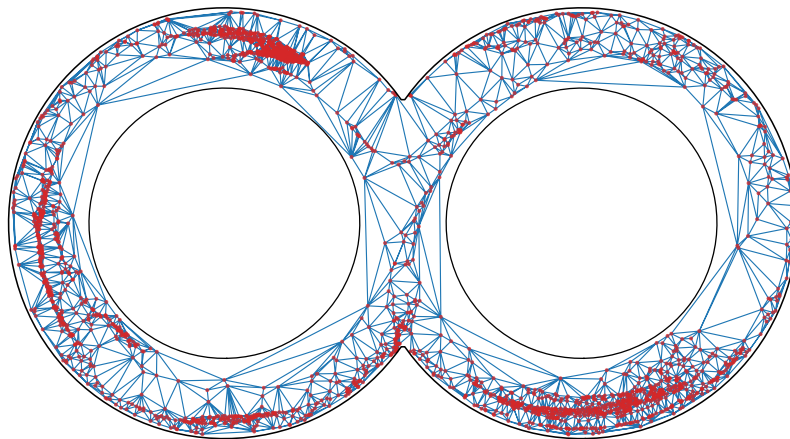
Wie in Tab. 4-6 dargestellt, liegen die Mittelwerte dieser drei Schneckenelemente bei etwa 0,7 mit einer Standardabweichung zwischen 0,01 und 0,02. Demgegenüber liegen die Mittelwerte des SE (0,25) sowie des KB12 (0,3) deutlich

niedriger. Die Standardabweichung des KB12 liegt mit 0,02 auf demselben Niveau wie beim KB24, während das SE mit 0,07 deutlich höhere Schwankungen zeigt.

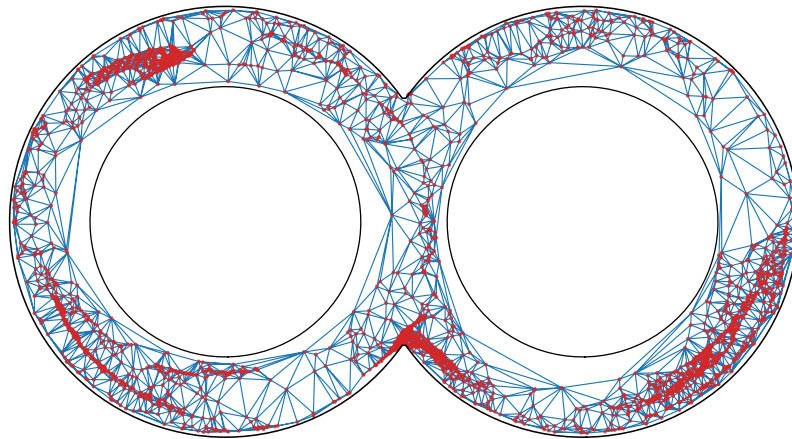
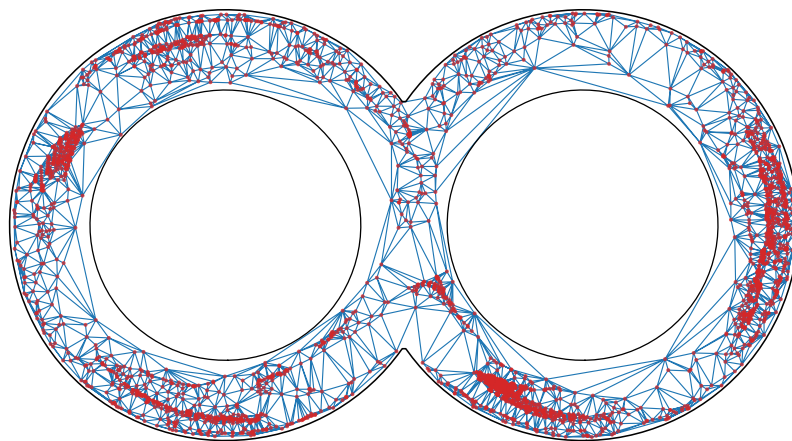
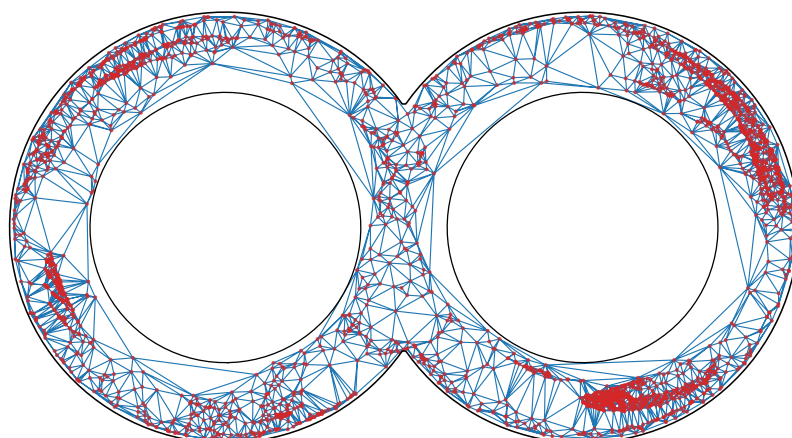
Tab. 4-6: Mittelwert und Standardabweichung der Mischkennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ für die einzelnen Schneckenelemente mit der ZSK25 bei 200 U/min und dem Material 505P

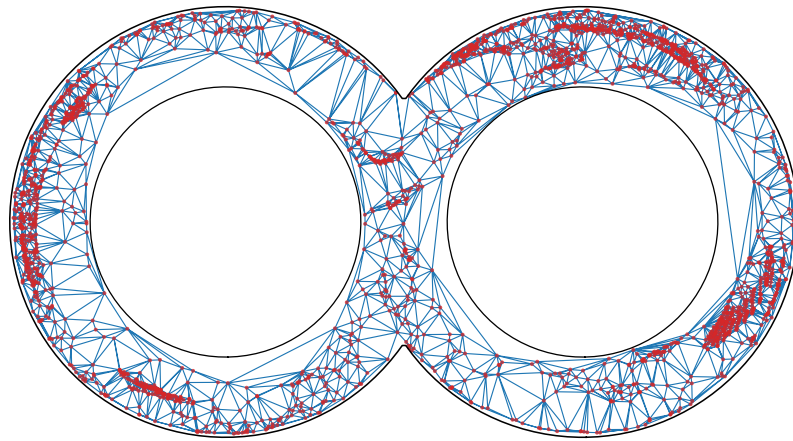
Schneckenelement	Mittelwert	Standardabweichung
KB12	0,30	0,02
KB24	0,68	0,02
KB45	0,71	0,01
SE	0,25	0,07
ZME	0,69	0,01

Die zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung des SE wird in Abbildung 4-29 anhand der resultierenden Partikelverteilungen der Simulation auf der ZSK25 bei 200 U/min mit dem Material 505P veranschaulicht. Die Verteilungen weisen eine ähnliche Struktur auf und enthalten sowohl Bereiche mit erhöhter Partikeldichte als auch Zonen mit nur wenigen Partikeln. Eine detaillierte Analyse dieser Verteilungen erfolgt im weiteren Verlauf des Kapitels.

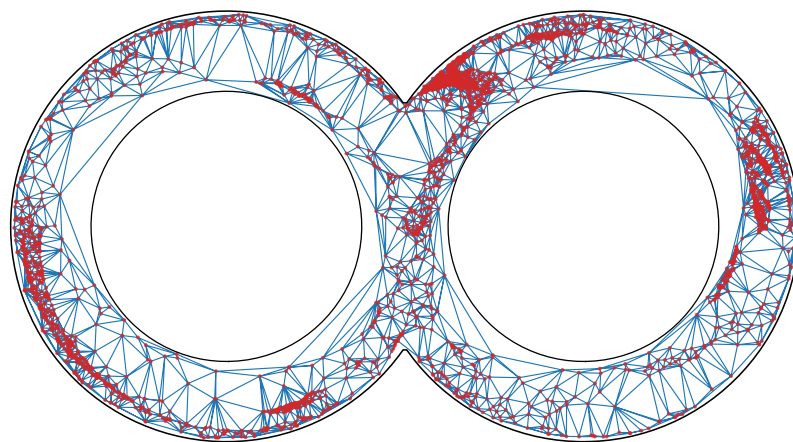


Zeitschritt 500

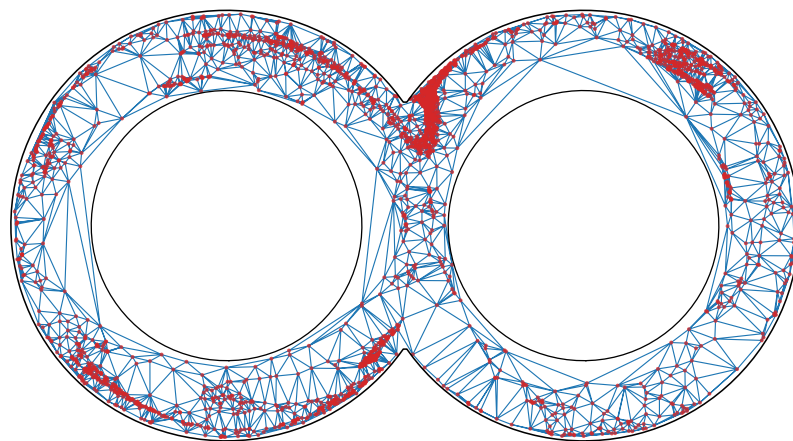
*Zeitschritt 1000**Zeitschritt 1500**Zeitschritt 2000*



Zeitschritt 2500



Zeitschritt 3000



Zeitschritt 3500

Abbildung 4-29: Resultierende Partikelverteilungen für das SE auf der ZSK25 bei 200 U/min und dem Material 505P in Abhängigkeit der Zeitschritte

Der Verlauf der Mittelwerte von $M_{q_{\text{dist. (Sim.)}}}$ sowie deren Standardabweichung in Abhängigkeit von der Drehzahl ist in Abbildung 4-30 dargestellt. Es wird deutlich, dass mit steigender Drehzahl der Mittelwert von $M_{q_{\text{dist. (Sim.)}}}$ für alle Schneckenelemente entweder zunimmt oder konstant bleibt. Besonders beim SE und beim KB12 führt die Erhöhung der Drehzahl zu einem ausgeprägten Anstieg des Kennwertes. Im Gegensatz dazu steigt der Mittelwert für den KB24, KB45 und ZME mit zunehmender Drehzahl nur geringfügig an. Aus der Darstellung der Standardabweichungen wird zudem ersichtlich, dass die maximale Abweichung 5 % nicht überschreitet. Damit kann von einer konstanten Bewertung der Mischgüte über die gesamte Simulationszeit ausgegangen werden.

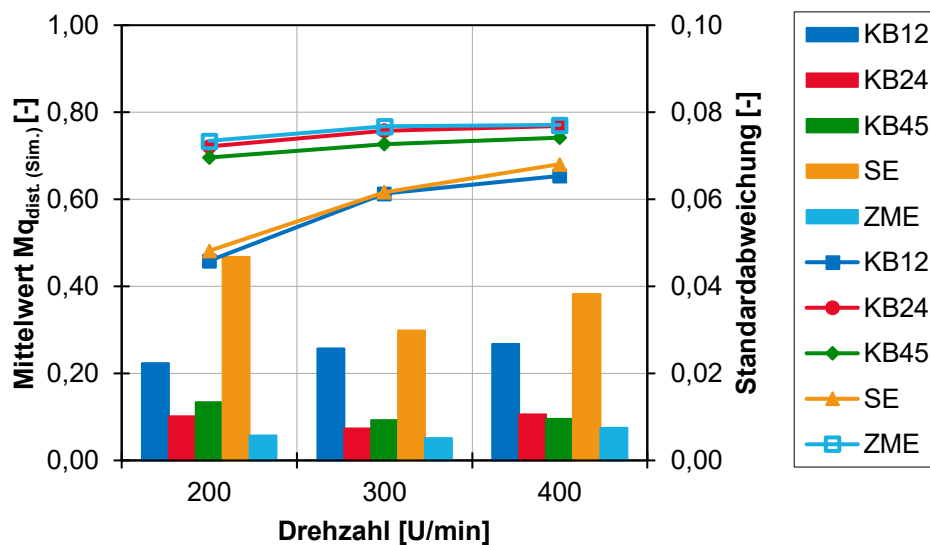
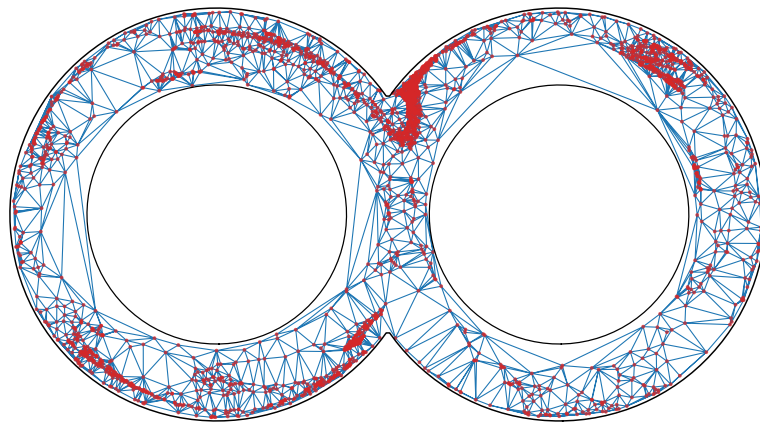


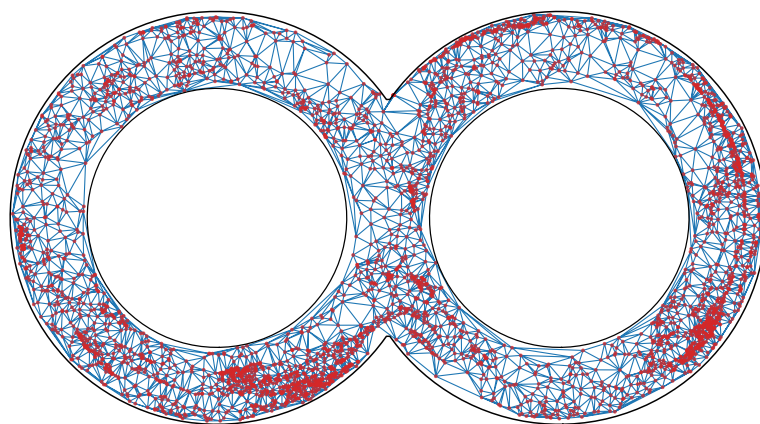
Abbildung 4-30: Verlauf der Mittelwerte von $M_{q_{\text{dist. (Sim.)}}}$ (als Linie) und der Standardabweichung (als Säule) in Abhängigkeit der Drehzahl

Nachfolgend werden zwei der in Abbildung 4-30 dargestellten Verläufe anhand der Partikelverteilungen und der resultierenden Werte für $M_{q_{\text{dist. (Sim.)}}}$ detailliert analysiert. Die resultierenden Partikelverteilungen für das SE im Zeitschritt 3500 mit dem Material 505P auf der ZSK25 sind in Abbildung 4-31 dargestellt. Bei einer Drehzahl von 200 U/min treten im Schneckenkanal große weiße Flächen auf, in denen nur wenige Partikel vorhanden sind (z. B. im Bereich rechts der Mitte). Gleichzeitig sind mehrere Partikelanhäufungen sichtbar, in denen Partikel stark konzentriert und mit nur geringen Abständen zueinander vorliegen. Solche Häufungen treten insbesondere im mittleren linken Bereich sowie oben links an der Zylinderwand auf. Ihre Form folgt dem Außenradius und verläuft entlang der Wand. Wird die Drehzahl auf 300 U/min erhöht, nimmt die Anzahl und Größe der weißen Flächen im Vergleich zum vorherigen Fall ab, einzelne größere Partikellücken bleiben jedoch bestehen, insbesondere links der Mitte. Die Partikelanhäufungen bleiben erkennbar und sind nun oben rechts sowie zentral rechts an der Zylinderwand lokalisiert. Ihre Ausdehnung entspricht in etwa den Strukturen bei 200 U/min. Wird die Drehzahl weiter auf 400 U/min gesteigert, reduziert sich die Anzahl der weißen Flächen nochmals deutlich.



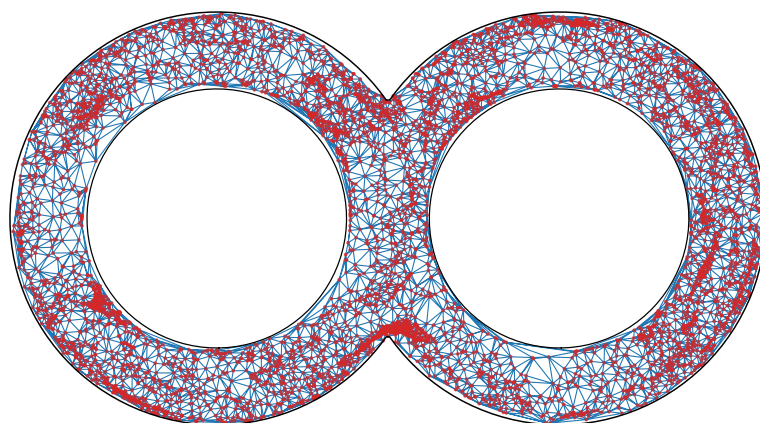
200 U/min

$Mq_{dist. (Sim.)} : 0,25$



300 U/min

$Mq_{dist. (Sim.)} : 0,58$



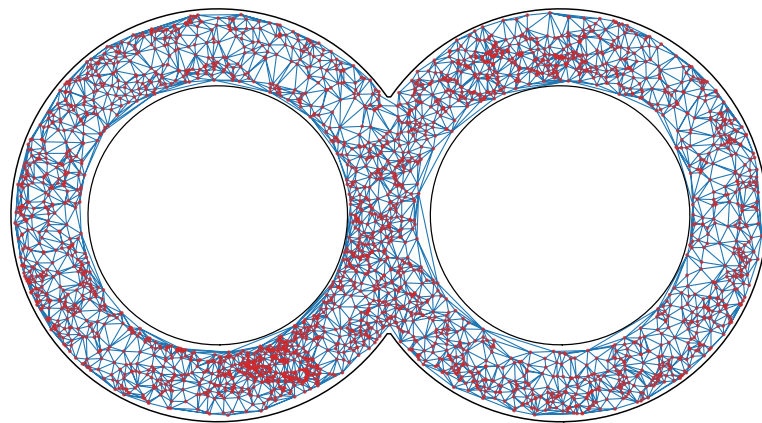
400 U/min

$Mq_{dist. (Sim.)} : 0,63$

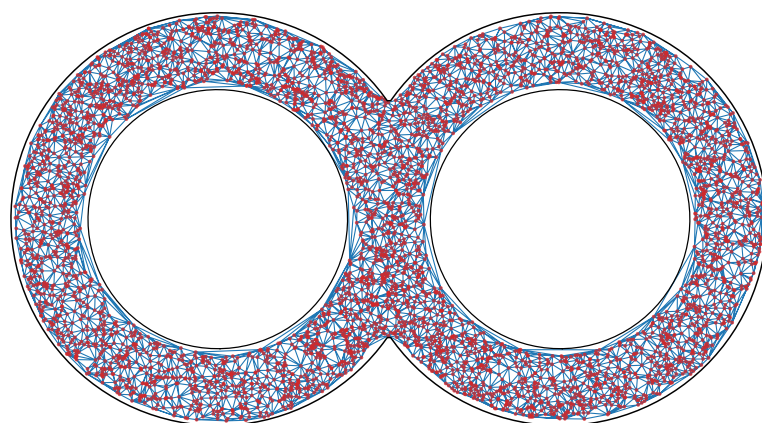
Abbildung 4-31: Partikelverteilung in der Auswertungsebene für das SE bei dem Zeitschritt 3500 mit dem Material 505P auf der ZSK25 in der Abhängigkeit der Drehzahl bei einem Durchsatz von 20 kg/h

Die verbliebenen Lücken sind zudem erheblich kleiner als bei 300 U/min. Partikelanhäufungen sind weiterhin vorhanden, verteilen sich jedoch über die gesamte Kanalhöhe und reichen nun bis an die Schnecke. Ihre Größe fällt dabei etwas geringer aus als in den beiden vorangegangenen Fällen. Der Wert der Mischkennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ liegt bei 0,25 für 200 U/min, erhöht sich auf 0,58 bei 300 U/min und erreicht schließlich 0,63 bei 400 U/min.

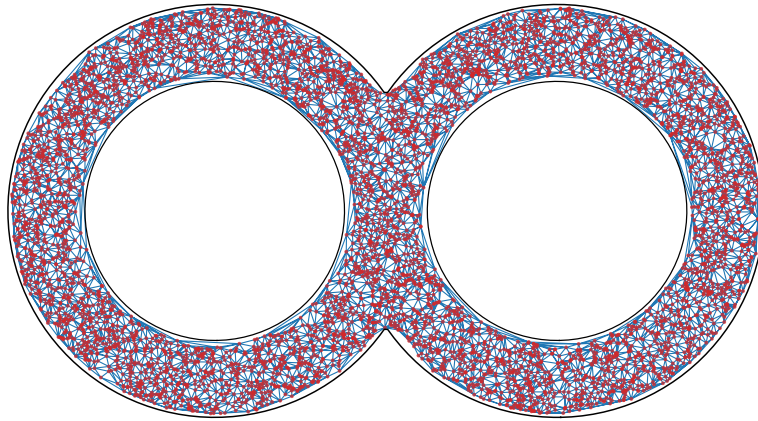
Beim ZME aus Abbildung 4-32 zeigen sich bereits bei einer Drehzahl von 200 U/min sehr gleichmäßige Abstände zwischen den Partikeln. Lediglich unten rechts im Kanalquerschnitt ist eine kleine Partikelanhäufung sichtbar. Mit steigender Drehzahl verschwindet diese vollständig, und die Partikel verteilen sich noch gleichmäßiger über den gesamten Querschnitt. Der Wert der Mischkennzahl $M_{q_{dist. (Sim.)}}$ liegt bei etwa 0,69 für 200 U/min und steigt mit zunehmender Drehzahl auf 0,75 an, wobei sich zwischen 300 und 400 U/min kein weiterer signifikanter Unterschied zeigt.



200 U/min
 $M_{q_{dist. (Sim.)}}: 0,69$



300 U/min
 $M_{q_{dist. (Sim.)}}: 0,75$



400 U/min

$Mq_{dist. (Sim.)} : 0,75$

Abbildung 4-32: *Partikelverteilung in der Auswertungsebene für das ZME bei dem Zeitschritt 3500 mit dem Material 505P auf der ZSK25 in der Abhängigkeit der Drehzahl bei einem Durchsatz von 20 kg/h*

Der Einfluss eines Material- oder Extruderwechsels ist in Abbildung 4-33 dargestellt. Für den KB12 auf der ZSK25 zeigt sich, dass ein Materialwechsel kaum Auswirkungen auf die Mittelwerte von $Mq_{dist. (Sim.)}$ hat. Unabhängig von der Drehzahl beträgt die Differenz zwischen den resultierenden Werten lediglich etwa 0,02.

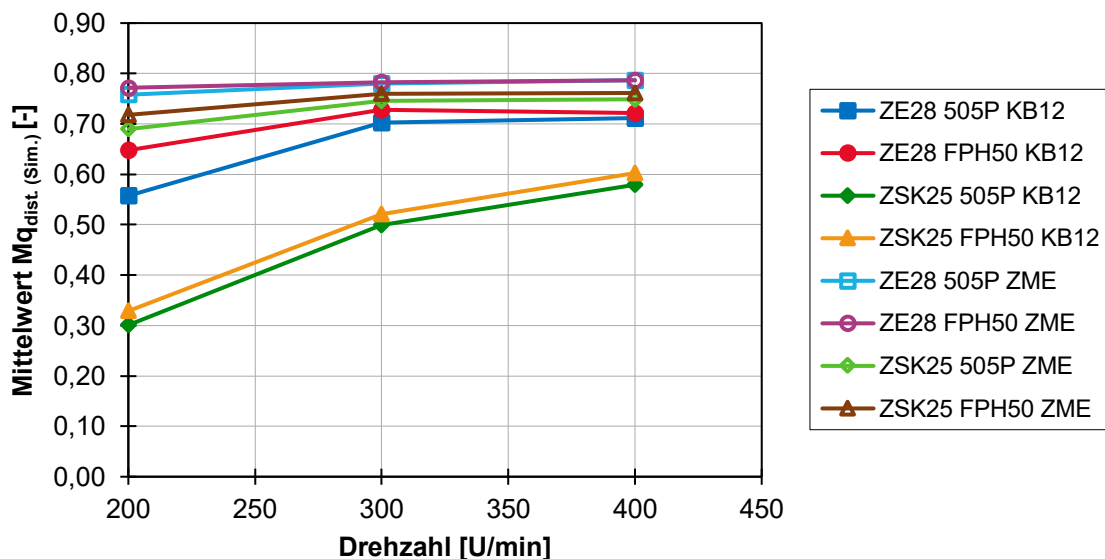


Abbildung 4-33: *Verlauf der Mittelwerte von $Mq_{dist. (Sim.)}$ für das ZME und den KB12 in Abhängigkeit der Drehzahl für die unterschiedlichen Extrudergrößen und Materialien bei einem Durchsatz von 20 kg/h bei der ZSK25 und 22,4 kg/h auf der ZE28*

Auf der ZE28 hingegen wird ein deutlich stärkerer Effekt sichtbar: Der Abstand der Mittelwerte des KB12 verringert sich von rund 0,1 bei einer Drehzahl von 200 U/min auf nur 0,01 bei 400 U/min. Beim ZME fallen die Abweichungen zwischen den Materialien insgesamt geringer aus. Bei 400 U/min stimmen die Mittelwerte auf der ZSK25 und der ZE28 nahezu überein, während bei 200 U/min auf der ZSK25 noch eine Differenz von etwa 0,03 zu beobachten ist.

Ein Wechsel des Extruders von der ZSK25 auf die ZE28 hat beim ZME nur einen geringen Einfluss auf die Werte von $Mq_{dist. (Sim.)}$, da diese weitgehend übereinstimmen. Im Durchschnitt liegt der Wert auf der ZE28 jedoch um etwa 0,03 höher. Deutlich stärker wirkt sich der Extruderwechsel beim KB12 aus. Bei einer Drehzahl von 200 U/min steigt $Mq_{dist. (Sim.)}$ von 0,31 (ZSK25) auf 0,60 (ZE28) an. Bei 400 U/min reduziert sich die Differenz zwischen den beiden Extrudern auf 0,13.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Mischkennzahl $Mq_{dist. (Sim.)}$ in hohem Maße von der Drehzahl sowie der Extrudergröße bzw. dem D_a/D_i -Verhältnis beeinflusst wird. Mit steigender Drehzahl nehmen die Kennwerte für alle untersuchten Schneckenelemente zu. Auch die Geometrie der Schneckenelemente zeigt einen erheblichen Einfluss: Mit dem SE und dem KB12 werden tendenziell geringere Werte erreicht als mit dem KB24, KB45 und ZME. Die höchsten und damit besten Ergebnisse liefert das ZME. Die Mittelwerte der einzelnen Schneckenelemente sind in Tab. 4-7 zusammengefasst. Im Gegensatz dazu wirkt sich der Einfluss unterschiedlicher Materialien bzw. Materialviskositäten nur geringfügig auf die Mischkennzahl aus.

Tab. 4-7: Mittelwerte von $Mq_{dist. (Sim.)}$ der einzelnen Schneckenelemente

Schneckenelement	$\bar{M}q_{dist. (Sim.)}$
KB12	0,58
KB24	0,75
KB45	0,72
SE	0,59
ZME	0,76

4.4.2 Dispersives Mischen

In diesem Unterkapitel werden die Simulationsergebnisse für das dispersive Mischen vorgestellt. Dabei werden die Verläufe der maximalen Schubspannungen sowie der Schubspannungsintegrale für die jeweiligen Verfahrensparameter in Form von Summenverteilungen dargestellt und analysiert.

Maximale Schubspannung:

Die Summenverteilungen der maximalen Schubspannungen für die einzelnen Schneckenelemente auf der ZSK25 bei 200 U/min und dem Material FPH50 sind in Abbildung 4-34 dargestellt. Aus der Abbildung wird deutlich, dass der KB12, KB24, KB45 und das SE eine vergleichbare geringste maximale Schubspannung

von etwa 15.000 Pa aufweisen. Die Kurvenverläufe von dem KB12, KB24 und SE sind bis zu einem Wert von ca. 0,8 nahezu identisch. Der Verlauf des KB45 zeigt bis etwa 0,3 ebenso ein paralleles Verhalten, steigt anschließend jedoch langsamer an und nähert sich erst ab einem Wert von etwa 0,9 wieder den anderen Kurven an. Das ZME unterscheidet sich deutlich: Seine Summenverteilung setzt später ein, steigt dafür jedoch mit einer geringeren, aber konstanten Steigung an.

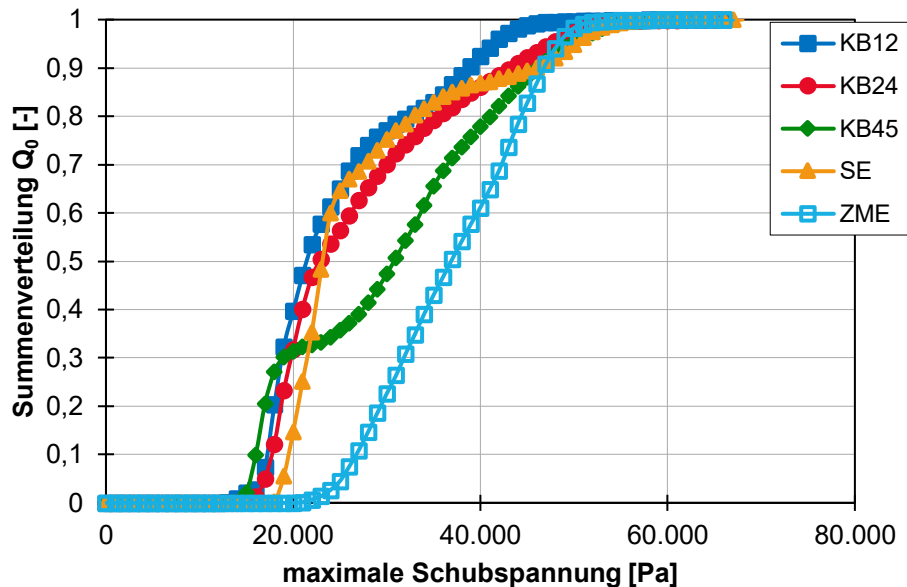


Abbildung 4-34: Summenverteilung der maximalen Schubspannungen der einzelnen Schneckenelemente auf der ZSK25 mit dem FPH50 bei 200 U/min bei einem Durchsatz von 20 kg/h

Die Abbildung 4-35 veranschaulicht den Einfluss der Drehzahl auf die Summenverteilungen der maximalen Schubspannungen, dargestellt am Beispiel des KB24 auf der ZSK25 mit dem Material FPH50. Die Verteilungskurve bei 200 U/min ist im Vergleich zu den beiden höheren Drehzahlen nach links verschoben und beginnt bereits bei etwa 15.000 Pa anzusteigen. Dagegen setzt der Anstieg bei 300 U/min erst bei rund 23.000 Pa ein, während die Kurve für 400 U/min erst bei etwa 27.000 Pa ansteigt. Darüber hinaus unterscheiden sich die Steigungen der Kurven deutlich: Bei 200 U/min ist die Steigung im Bereich niedriger Schubspannungen zunächst sehr hoch und nimmt mit steigenden Werten ab. Im Gegensatz dazu verläuft die Kurve bei 400 U/min nahezu mit konstanter Steigung.

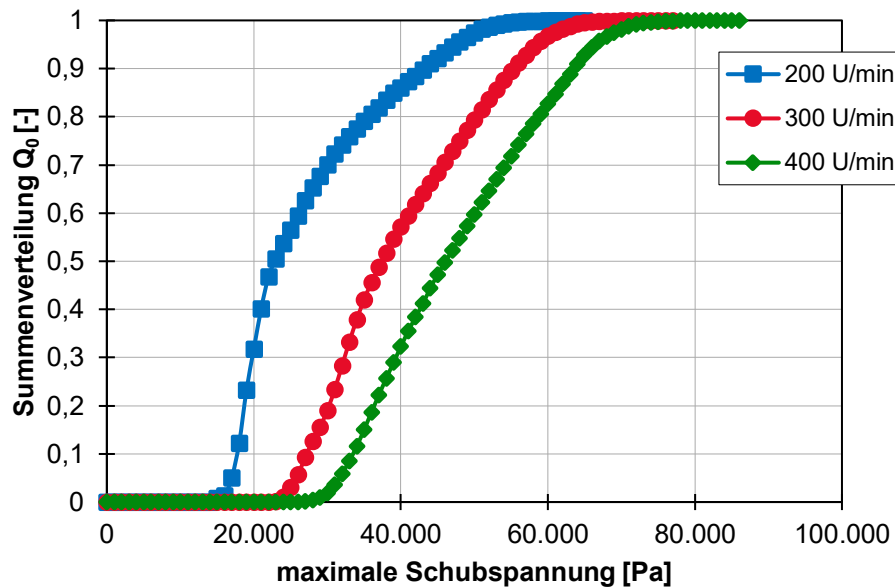


Abbildung 4-35: Summenverteilungen der maximalen Schubspannungen des KB24 auf der ZSK25 mit dem FPH50 für unterschiedliche Drehzahlen bei einem Durchsatz von 20 kg/h

Der Materialwechsel und die damit verbundene Änderung der Viskosität führen zu der in Abbildung 4-36 dargestellten Verschiebung der Summenverteilung, exemplarisch gezeigt für das ZME bei 200 U/min auf der ZSK25. Für das niedrigviskose FPH50 beginnt die Summenverteilung bereits bei etwa 24.000 Pa anzusteigen und steigt linear bis rund 52.000 Pa an.

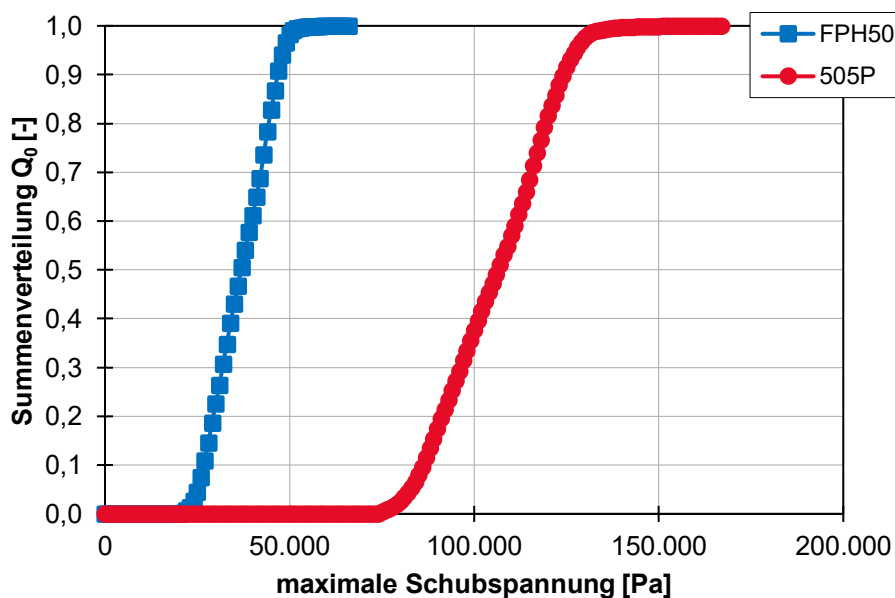


Abbildung 4-36: Summenverteilung der maximalen Schubspannungen des ZME auf der ZSK25 bei 200 U/min für die beiden Kunststoffe bei einem Durchsatz von 20 kg/h

Beim hochviskosen 505P setzt der lineare Anstieg erst bei etwa 80.000 Pa ein und reicht bis zu einem Wert von ca. 130.000 Pa. Daraus folgt, dass die Summenverteilung für das FPH50 in diesem Fall um den Faktor 1,8 schneller zunimmt als diejenige für das 505P.

In Abbildung 4-37 werden die Summenverteilungen der maximalen Schubspannungen für die beiden untersuchten Doppelschneckenextruder in Kombination mit dem SE und dem Material 505P bei 200 und 400 U/min dargestellt. Bei einer Drehzahl von 200 U/min beginnen die Verteilungen beider Extruder bei rund 50.000 Pa anzusteigen und verlaufen zunächst bis zu einem Wert von etwa 0,4 weitgehend parallel. Anschließend steigt die Kurve der ZSK25 bis ca. 0,8 nahezu linear weiter an, während die Steigung der ZE28 zunehmend abflacht. Dadurch ergeben sich unterschiedliche Maximalwerte: Die ZSK25 erreicht bei 200 U/min einen Maximalwert von rund 100.000 Pa, während bei der ZE28 etwa 20 % der Werte oberhalb dieser Grenze liegen.

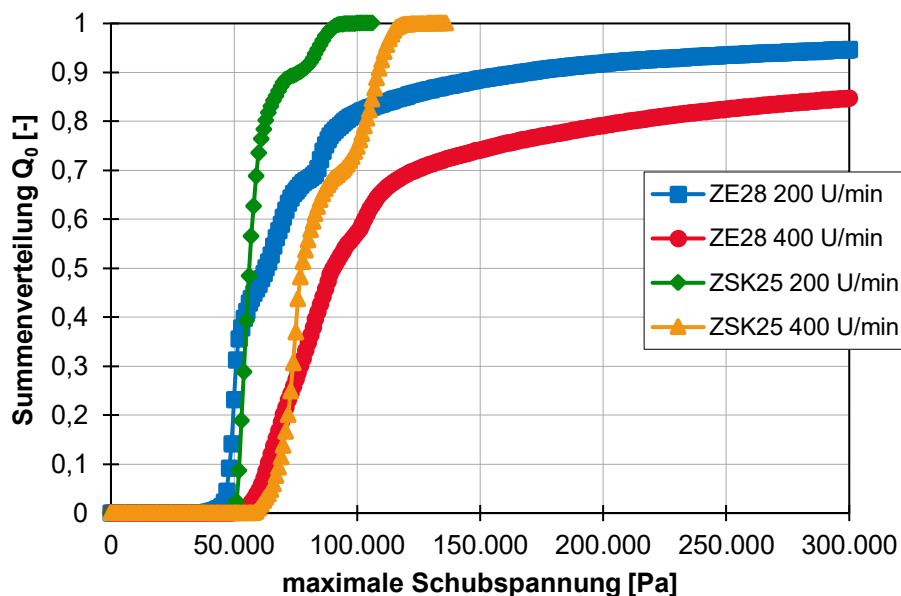


Abbildung 4-37: Summenverteilung der maximalen Schubspannung des SE mit dem 505P auf der ZSK25 und der ZE28 bei 200 und 400 U/min bei einem Durchsatz von 20 kg/h bei der ZSK25 und 22,4 kg/h auf der ZE28

Schubspannungsintegral über der Verweilzeit:

Im Folgenden werden die Ergebnisse für die Verteilungen der Schubspannungsintegrale beschrieben. Wie bereits zu Beginn von Kapitel 4.3.2 erläutert, sind die Verläufe der Schubspannungen auf eine einheitliche Schneckenelementlänge normiert. Dies ist notwendig, da die Integrationsvariable also die Verweilzeit direkt von der Elementlänge beeinflusst wird. Die Summenverteilungen der Verweilzeit für die unterschiedlichen Schneckenelemente sind in Abbildung 4-38 am Beispiel der ZSK25 bei 300 U/min und dem Material 505P dargestellt. Dabei zeigt sich, dass die Verwendung des KB12 zu einer deutlich kürzeren Verweilzeit führt: Rund 50 % der Partikel weisen eine Verweilzeit von höchstens 0,3 s auf. Für die übrigen Schneckenelemente liegt

die Verweilzeit hingegen zwischen 0,8 und 0,9 s, wenn die Summenverteilung den Wert von 0,5 erreicht.

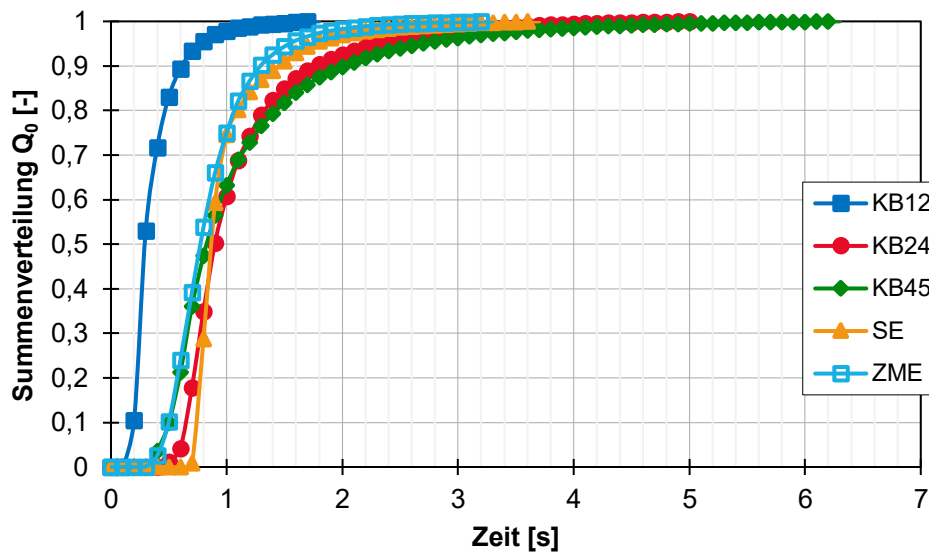


Abbildung 4-38: Summenverteilung der Verweilzeit der einzelnen Partikel in Abhängigkeit der Schneckenelemente bei 300 U/min auf der ZSK25 mit dem 505P

In Abbildung 4-39 werden die Summenverteilungen der Schubspannungsintegrale für die einzelnen Schneckenelemente am Beispiel der ZSK25 bei 200 U/min mit dem Material FPH50 visualisiert. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die Verteilungen der drei Knetblöcke bereits bei rund 600.000 Pa*s einsetzen und bis zu einem Wert von etwa 0,3 nahezu parallel verlaufen. Zwischen 0,3 und 0,4 verringert sich die Steigung der Kurven für KB24 und KB45. Das SE und das ZME unterscheiden sich hiervon deutlich, da ihre Summenverteilungen erst bei ca. 1.350.000 Pa*s ansteigen. Zudem weist das SE eine signifikant höhere Steigung auf als das ZME: Bei einem Wert von 1.800.000 Pa*s erreicht das SE bereits eine Summenverteilung von 0,8 und schneidet den Verlauf des KB12. Das ZME erreicht denselben Wert von 0,8 erst bei einem Schubspannungsintegral von rund 3.500.000 Pa*s.

Für die drei Drehzahlen 200, 300 und 400 U/min ergeben sich die in Abbildung 4-40 exemplarisch für die ZSK25 mit dem KB45 und dem FPH50 dargestellten Summenverteilungen. Bei 200 U/min setzt die Verteilung bereits bei etwa 800.000 Pa*s ein und erreicht bei 3.600.000 Pa*s einen Wert von 0,9. Bei einer Drehzahl von 300 U/min liegt der Wert an dieser Stelle lediglich bei 0,5, und bei 400 U/min nur noch bei ungefähr 0,1. Auch die Steigungen der Verteilungen unterscheiden sich deutlich voneinander. Die Spannweite des Schubspannungsintegrals zwischen den Werten 0 und 0,9 beträgt bei 200 U/min rund 2.700.000 Pa*s, vergrößert sich bei 300 U/min bereits auf etwa 6.200.000 Pa*s und erreicht bei 400 U/min schließlich rund 9.000.000 Pa*s.

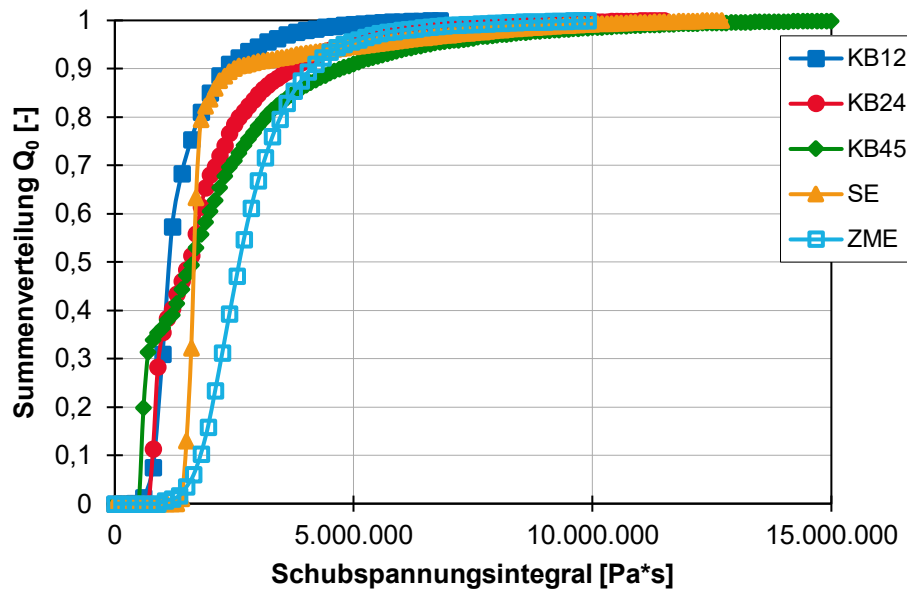


Abbildung 4-39: Summenverteilung der Schubspannungsintegrale der einzelnen Schneckenelemente auf der ZSK25 bei 200 U/min und dem FPH50 bei einem Durchsatz von 20 kg/h und einer normierten Elementlänge von 24 mm

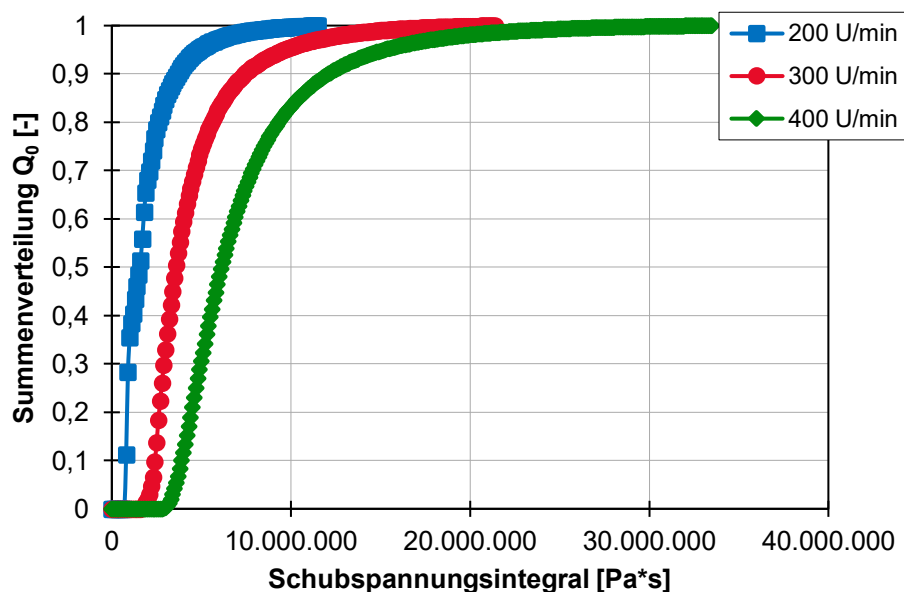


Abbildung 4-40: Summenverteilung der Schubspannungsintegrale des KB24 auf der ZSK25 mit dem FPH50 in Abhängigkeit der Drehzahl bei einem Durchsatz von 20 kg/h

Ein Materialwechsel von FPH50 zu 505P führt zu den in Abbildung 4-41 dargestellten Veränderungen der Summenverteilungen, exemplarisch gezeigt für die ZSK25 mit dem ZME bei 200 U/min. Für das niedrigviskose FPH50 beginnt der Anstieg bereits bei etwa 1.500.000 Pa*s, während er sich beim hochviskosen 505P erst ab rund 5.000.000 Pa*s beobachten lässt. Darüber hinaus ist die Steigung der Verteilung bei höherer Viskosität deutlich geringer. Der Verlauf von FPH50 steigt

im Intervall von 0 bis 0,9 innerhalb von 2.500.000 Pa*s an, wohingegen für 505P im gleichen Intervall ein Anstieg von etwa 11.000.000 Pa*s vorliegt.

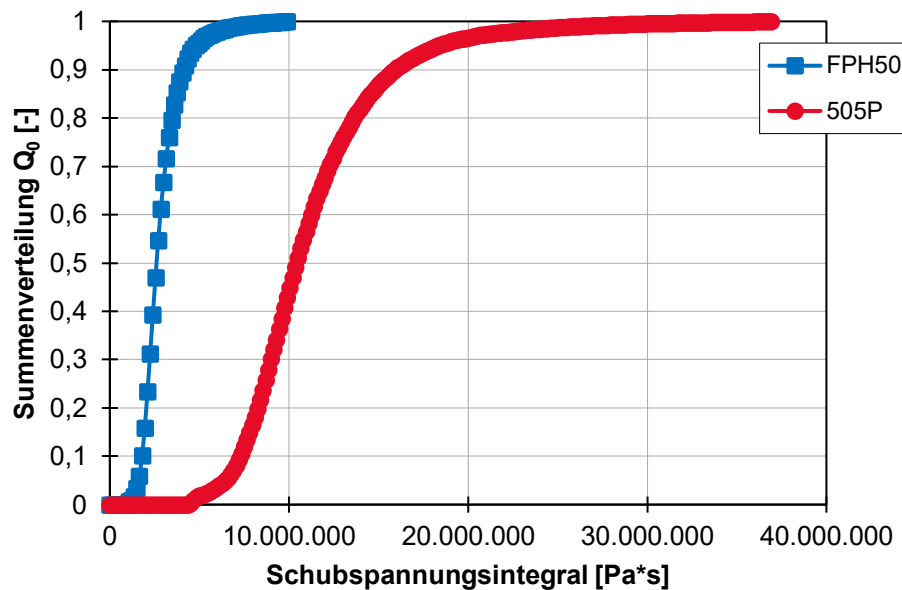


Abbildung 4-41: Summenverteilung der Schubspannungsintegrale des ZME auf der ZSK25 bei 200 U/min der beiden Kunststoffe bei einem Durchsatz von 20 kg/h und einer normierten Elementlänge von 24 mm

Die Auswirkungen des Extruderwechsels werden in Abbildung 4-42 am Beispiel des SE mit dem Material 505P bei 200 und 400 U/min dargestellt. Die Schubspannungsintegrale der ZSK25 steigen bei beiden Drehzahlen langsamer an als die der ZE28. Der Unterschied wird bereits ab einem Summenverteilungswert von etwa 0,1 bei 200 U/min und 0,2 bei 400 U/min sichtbar. Bei 200 U/min verlaufen die Kurven von der ZE28 und der ZSK25 bis zu einem Wert von 0,6 nahezu parallel, bevor die Steigung der ZE28 allmählich abnimmt. Bei 400 U/min hingegen unterscheiden sich die Steigungsbereiche der beiden Extruder über den gesamten Verlauf, sodass parallele Abschnitte vollständig fehlen. Wird das Intervall zwischen 0 und 0,9 betrachtet, ergeben sich für die ZSK25 bei 200 U/min ca. 1.600.000 Pa*s, während die ZE28 unter denselben Bedingungen mit rund 16.500.000 Pa*s deutlich höhere Werte erreicht.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass sowohl die maximalen Schubspannungen als auch die Schubspannungsintegrale von allen untersuchten Faktoren beeinflusst werden. Höhere Drehzahlen führen dabei zu einem deutlichen Anstieg beider Größen. Ein ähnlicher Effekt ergibt sich durch höhere Viskositäten, wie sie beim 505P vorliegen, sowie durch den Wechsel vom Extruder ZSK25 auf die ZE28.

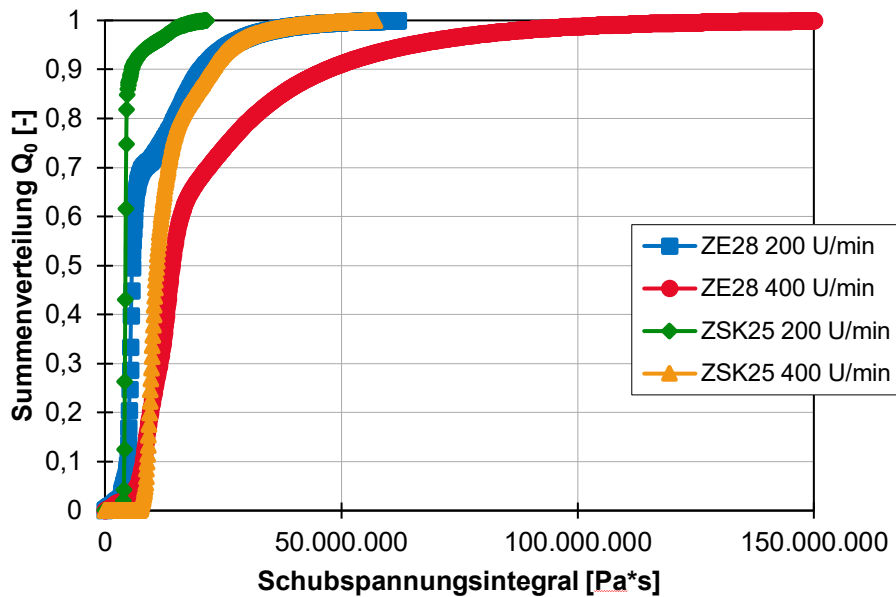


Abbildung 4-42: Summenverteilung der Schubspannungsintegrale des SE mit dem 505P auf der ZSK25 und der ZE28 bei 200 und 400 U/min bei einem Durchsatz von 20 kg/h bei der ZSK25 und 22,4 kg/h auf der ZE28

Auch die Schneckenelementgeometrie zeigt einen klaren Einfluss: Für das ZME steigt die Summenverteilung sowohl bei den maximalen Schubspannungen als auch bei den Schubspannungsintegralen erst bei deutlich höheren Werten an als bei den übrigen Elementen. Die Geometrien des KB12, KB24 und SE weisen hingegen eine nahezu identische Leistungscharakteristik auf, da ihre Summenverteilungen bereits bei geringeren Werten beginnen. Der KB45 nimmt eine Zwischenstellung ein und liegt mit seinem Verlauf zwischen dem ZME und den übrigen drei Schneckenelementen.

In Tab. 4-8 sind die gemittelten Differenzen für die drei folgenden Einflussgrößen dargestellt: die Änderung der Drehzahl von 200 auf 400 U/min, der Materialwechsel von FPH50 zu 505P sowie der Wechsel des Extruders von der ZSK25 zur ZE28. Die Drehzahlerhöhung führt beim SE im Mittel zu einer Steigerung der maximalen Schubspannung um 65.421 Pa, beim KB24 um 57.532 Pa und beim KB12 um lediglich 39.155 Pa. Ein Materialwechsel beeinflusst insbesondere das SE und den KB45, die jeweils die größten Differenzen aufweisen. Der Einfluss des Extruderwechsels ist dagegen nur marginal. Insgesamt zeigt die Analyse, dass alle Schneckenelemente mit Ausnahme des KB12 Differenzen von etwa 80.000 Pa erreichen und damit in unmittelbarer Nähe zueinander liegen.

Tab. 4-8: Darstellung der gemittelten Differenzen zwischen den maximalen Schubspannungswerten bei den Veränderungen der Drehzahl, des Materials und des Extruders für die einzelnen Schneckenelemente

Veränderung	Drehzahl	Material	Extruder
Element	200 → 400 U/min	FPH50 → 505P	ZSK25 → ZE28
KB12	39.155 Pa	19.874 Pa	61.227 Pa
KB24	57.532 Pa	36.142 Pa	78.857 Pa
KB45	51.982 Pa	41.340 Pa	81.631 Pa
SE	65.421 Pa	45.792 Pa	81.428 Pa
ZME	48.055 Pa	37.160 Pa	82.602 Pa

Die gemittelten Differenzen der Schubspannungsintegrale für Änderungen von Drehzahl, Material und Extruder sind in Tab. 4-9 zusammengefasst. Am stärksten reagiert das ZME auf eine Drehzahlerhöhung, mit einer Differenz von ca. 10.400.000 Pa*s. Der geringste Einfluss der Drehzahl zeigt sich beim KB45 mit 8.530.433 Pa*s. Auch beim Materialwechsel weist das ZME die größte Abweichung auf (6.149.423 Pa*s), während der KB12 hier den niedrigsten Wert erreicht (4.221.955 Pa*s). Wird der Extruderwechsel betrachtet, erzielt wiederum der KB12 die stärkste Differenz (6.726.400 Pa*s), während die Werte beim KB24 mit 4.756.424 Pa*s am geringsten ausfallen.

Tab. 4-9: Darstellung der gemittelten Differenzen zwischen den Werten der Schubspannungsintegralen bei den Veränderungen der Drehzahl, des Materials und des Extruders für die einzelnen Schneckenelemente

Veränderung	Drehzahl	Material	Extruder
Element	200 → 400 U/min	FPH50 → 505P	ZSK25 → ZE28
KB12	8.988.186 Pa*s	4.221.955 Pa*s	6.726.400 Pa*s
KB24	9.671.535 Pa*s	5.214.017 Pa*s	4.756.424 Pa*s
KB45	8.530.433 Pa*s	5.045.177 Pa*s	5.461.464 Pa*s
SE	9.227.599 Pa*s	5.149.849 Pa*s	5.679.486 Pa*s
ZME	10.381.482 Pa*s	6.149.423 Pa*s	5.101.616 Pa*s

Die Bewertung der Mischeigenschaften mit $M_{q_{disp. (Sim.)}}$ nach Gleichung 4-9 führt zu den in Tab. 4-10 dargestellten Ergebnissen. Dabei zeigt sich, dass für den KB12 und das ZME die höchsten Werte erreicht werden, sowohl für den Dispersionstyp Bruch als auch für die Erosion. Zudem ist erkennbar, dass die Unterschiede zwischen den beiden Dispersionstypen für alle Schneckenelemente, mit Ausnahme des KB45, gering ausfallen. Im Durchschnitt erzielt das ZME die besten, der KB45 hingegen die schwächsten Bewertungen.

Tab. 4-10: Darstellung der berechneten $Mq_{disp. (Sim.)}$ für das dispersive Mischen aus den Mittelwerten und den Standardabweichungen der Schubspannungsintegrale (Int.) und der maximalen Schubspannungen (Max.)

Element	200 U/min		300 U/min		400 U/min		$\emptyset$		$Mq_{disp. (Sim.)}$
	Max.	Int.	Max.	Int.	Max.	Int.	Max.	Int.	$\emptyset$
KB12	0,56	0,49	0,57	0,52	0,56	0,55	0,56	0,52	0,54
KB24	0,43	0,32	0,45	0,43	0,42	0,44	0,43	0,39	0,41
KB45	0,25	0,11	0,48	0,17	0,42	0,18	0,38	0,15	0,27
SE	0,40	0,25	0,36	0,27	0,33	0,31	0,37	0,27	0,32
ZME	0,62	0,60	0,60	0,63	0,58	0,65	0,60	0,63	0,62
$\emptyset$	0,45	0,35	0,49	0,40	0,46	0,43	-	-	-

5 Experimentelle Bestimmung der Mischgüte

In diesem Kapitel erfolgt die experimentelle Validierung der Bewertung der Mischwirkung der einzelnen Schneckenelemente. Als Grundlage wird zunächst der notwendige Stand der Technik im Bereich der Partikeltechnologie dargestellt.

5.1 Stand der Technik Partikeltechnologie

Die mechanische Verfahrenstechnik umfasst alle Einwirkungen auf Stoffe, die auf mechanischen Prinzipien basieren und zu einer Veränderung ihrer Eigenschaften oder ihres Verhaltens führen. Dazu zählen Kräfte wie Reibungs- und Druckkräfte durch Impulsänderungen oder Strömungswiderstände sowie Druck- und Haftkräfte aus Kontaktkräften. Partikel können durch diese mechanischen Kräfte bis zu einer Größe von etwa 1 μm direkt beeinflusst werden. Nach Rumpf [Rum75] gehören zur mechanischen Verfahrenstechnik die in Tab. 5-1 dargestellten Verfahren. [Rum75, Sti08]

Tab. 5-1: Übersicht der Einteilung der mechanischen Verfahrenstechnik [Sti08]

Zerkleinern	Agglomerieren	mit	} Änderung der Partikelgröße
Trennen	Mischen		
Lagern, Fördern und Dosieren von dispersen Stoffen			
Partikelmesstechnik (Partikelgrößen- und Partikelformanalyse, Staubmesstechnik)			

Beim Zerkleinern oder Agglomerieren werden mit äußeren Kräften die Partikelgrößen der vorliegenden Partikel gezielt beeinflusst. Bei der Zerkleinerung werden durch große Spannungen der Stoffzusammenhalt zerstört und Agglomerate in Aggregate oder Partikeln zerkleinert werden. Beim Agglomerieren hingegen werden zwei Partikel durch die Ausnutzung oder Verstärkung bereits existierender Haftkräfte miteinander verbunden. Im Gegensatz dazu bleibt die Partikelgröße beim Trennen, Mischen und Lagern von Partikeln unverändert. Hier werden gezielte oder zufällige Bewegungen einzelner Partikel oder ganzer Partikelgruppen gegeneinander ausgenutzt, um die Stoffeigenschaften und -verhaltensweisen zu beeinflussen. Dabei bestehen Stoffe aus vielen einzelnen Partikeln und werden je nach Zusammensetzung als Mischkomponenten, Schüttgüter oder Suspensionen bezeichnet, die zusammengefasst als disperse Stoffe oder disperse Stoffsysteme gelten. Die mechanische Verfahrenstechnik umfasst auch die Partikelverfahrenstechnik, die sich auf die Herstellung, Charakterisierung, Verarbeitung und Anwendung von dispersen Stoffen konzentriert. [Sti08]

5.1.1 Charakterisierung von einzelnen Partikeln

Ein disperses Stoffsystem setzt sich aus mehreren einzelnen Partikeln zusammen, die als körnige Schüttung, Pulver oder in Flüssigkeiten oder Gasen enthalten sein können. Die einzelnen Partikel werden als disperse Phase bezeichnet, während das umgebende Medium als kontinuierliche Phase bezeichnet wird. Beide Phasen können fest, flüssig oder gasförmig vorliegen. Der Anteil der dispersen Phase am gesamten Stoffsystem wird durch die Volumenkonzentration c_v oder die Massenkonzentration c_m beschrieben. [Sti08]

Die einzelnen Partikel mit ihren spezifischen Eigenschaften beeinflussen das Verhalten des dispersen Stoffsystems. So hat beispielsweise die Partikelgröße von Zucker Einfluss auf die Geschwindigkeit, mit der sich der Zucker in Medien auflöst. Zu den wichtigsten Unterscheidungsmerkmalen gehören die Partikelgröße, -form und die Partikelgrößenverteilung, da oft ein direkter Zusammenhang zwischen der Partikelgröße und den anwendungs- bzw. verarbeitungstechnischen Eigenschaften besteht. Für eine präzise Beschreibung von Partikeln ist es notwendig, mindestens eine Kenngröße oder -zahl für die Form und Größe der Partikel anzugeben. Zu den Angaben zur Partikelgröße zählen geometrische Abmessungen, statistische Längen, geometrische und physikalische Äquivalentdurchmesser sowie die spezifische Oberfläche. [Sti08]

Geometrische Abmessungen

Zu den geometrischen Abmessungen zählen direkte Maße der Partikel wie Länge, Breite und Durchmesser bei regelmäßigen Formen. Bei unregelmäßig geformten Partikeln wird deren Größe auch über das Volumen oder die Oberfläche angegeben. Bei der Auswertung der Partikelgröße mittels Bildauswertung kommen auch sogenannte statistische Längen zum Einsatz, wie der Feretdurchmesser x_{Fe} , der Martindurchmesser x_{Ma} und die längste Sehne x_{Cmax} . Der Feretdurchmesser gibt die Länge der senkrechten Projektion des Partikelbildes in der Messrichtung an, während der Martindurchmesser die Dicke des Partikels parallel zur Messrichtung in der Mitte der Höhe beschreibt. Trotz der irreführenden Namensgebung sind diese Größen keine klassischen Durchmesser. Diese statistischen Längen sind erforderlich, weil die Partikel auf den Bildern in unterschiedlichen Winkellagen oder räumlichen Orientierungen vorliegen, wodurch die Bildebene nicht immer parallel zur Partikelebene ist. In Abbildung 5-1 sind die drei genannten statistischen Längen an einem Partikel dargestellt. [Sti08]

Die Beschreibung von Partikeln mit geometrischen Abmessungen stellt insbesondere bei unregelmäßigen Partikeln eine Herausforderung dar, da deren Abmessungen nicht konstant sind. Daher werden auch Äquivalentdurchmesser zur Beschreibung verwendet. Der geometrische Äquivalentdurchmesser gibt den Durchmesser einer Kugel oder eines Kreises an, der die Eigenschaften des betrachteten unregelmäßigen Partikels widerspiegelt. Dabei werden Volumen, Oberfläche, Projektionsfläche und Projektionsumfang der Partikel genutzt, um die entsprechenden Kugel- bzw. Kreisdurchmesser zu bestimmen. Beispiele hierfür sind der Durchmesser der volumengleichen Kugel d_v oder der Durchmesser der oberflächengleichen Kugel d_s . Zusätzlich können auch physikalische Äquivalentdurchmesser gebildet werden, die auf physikalischen Eigenschaften wie Sinkgeschwindigkeit, Aerodynamik, Streulichtintensität oder elektrischer Mobilität basieren. [Sti08]

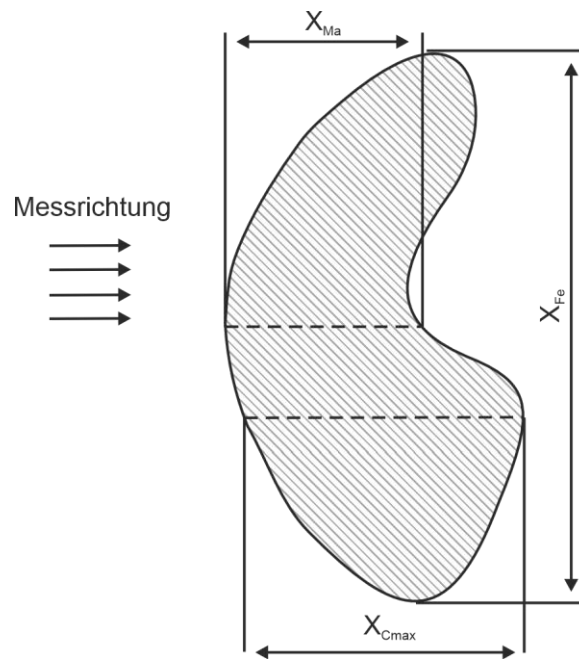


Abbildung 5-1: Schematische Darstellung der unterschiedlichen statistischen Längen wie dem Feretdurchmesser x_{Fe} , dem Martindurchmesser x_{Ma} und der längsten Sehne x_{Cmax} nach [Sti08]

Spezifische Oberfläche

Die spezifische Oberfläche wird in volumenbezogene spezifische Oberfläche S_v und massenbezogene spezifische Oberfläche S_m unterteilt und kann mithilfe der Partikeldichte ineinander umgerechnet werden. Während die massenbezogene spezifische Oberfläche stoffabhängig ist, bietet die volumenbezogene spezifische Oberfläche einen großen Vorteil, da sie nur auf der Partikelgröße und -form basiert und somit unabhängig vom Stoff ist. [Sti08]

5.1.2 Formfaktoren von Partikeln

Die Charakterisierung von Partikeln und Stoffsystemen stellt aufgrund der unterschiedlichen Partikelformen eine Herausforderung dar. In der Praxis ist jedoch eine genaue Definition der Form oft nicht erforderlich. Begriffe wie „kugelig“, „rund“, „plättchenförmig“ oder „kubisch“ reichen in vielen Fällen aus, weil die Bulk-Eigenschaften von Pulvern typischerweise durch grobe Formklassen und Formfaktoren bestimmt werden, während die konkrete Kontur einzelner Partikel in der Praxis selten signifikant abweichende Ergebnisse liefert. Viele der heute verwendeten Formfaktoren basieren auf der Definition von Pahl et al. Der Formfaktor $\Psi_{\alpha,\beta}$ wird nach Pahl et al. durch das Verhältnis von zwei unabhängig gemessenen Größen x_α und x_β eines Partikels bestimmt: $\Psi_{\alpha,\beta} = x_\alpha / x_\beta$. Die in Kapitel 2.3.2 Füllstoffe beschriebene „Aspect Ratio“ ist ein Beispiel für einen solchen Formfaktor. [Sti08, PSR73, PSR73, PSR73]

5.1.3 Partikelgrößenverteilungen

Eine gängige Darstellung der charakterisierten Partikel ist die Partikelgrößenverteilung der Gesamtmenge der Partikel, welche auch als Partikelkollektiv bezeichnet wird. Auf der x-Achse des Koordinatensystems wird die Partikelgröße x aufgetragen, wobei die Partikel in unterschiedliche Klassen i unterteilt werden. Die Intervallbreite ist dabei definiert als $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$. Auf der Ordinate können zwei verschiedene Werte dargestellt werden. Die Verteilungssumme $Q_r(x_i)$ gibt den Anteil der Partikel an der Gesamtmenge an, die eine bestimmte Partikelgröße x unterschreiten. Wird jedoch die Verteilungssumme durch die Intervallbreite geteilt, ergibt sich die Verteilungsdichte $q_{r,i}$. Der Index r bezeichnet dabei die betrachtete Menge. In Tab. 5-2 sind die verschiedenen Mengenarten aufgelistet. [Sti08, Tsu20]

Tab. 5-2: Übersicht der unterschiedlichen Mengenarten und der dazugehörigen Indexnummern nach [LAK74, Sti08]

Index r	Mengenart	Verteilungen
0	Anzahl	$Q_0(x)$, $q_0(x)$
1	Länge	$Q_1(x)$, $q_1(x)$
2	Fläche	$Q_2(x)$, $q_2(x)$
3	Volumen	$Q_3(x)$, $q_3(x)$
3*	Masse	$Q_{3^*}(x)$, $q_{3^*}(x)$

In Abbildung 5-2 sind die Summenverteilung und Verteilungsdichte am Beispiel von Talkumpartikeln dargestellt.

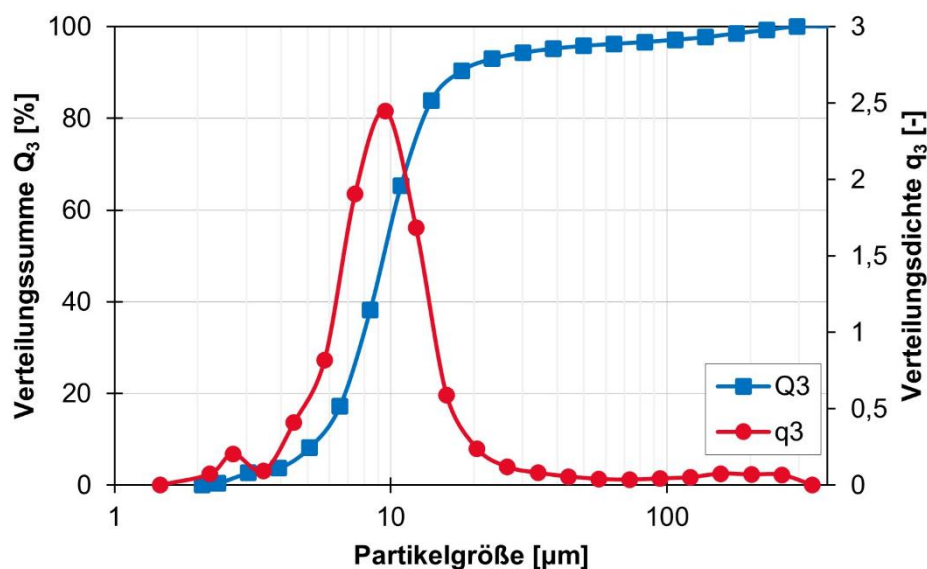


Abbildung 5-2: Grafische Darstellung der Verteilungssumme Q_3 und der Verteilungsdichte q_3 eines Talkumpulvers

In der Praxis wird die Partikelverteilung oft mit nur einem Wert angegeben. Dazu zählen beispielsweise der Medianwert $x_{50,r}$, der Modalwert $x_{h,r}$, die mittlere Partikelgröße $\bar{x}_r$, die spezifische Oberfläche S_{v1} und der Sauterdurchmesser d_{32} . Der Medianwert gibt die Partikelgröße an, bei der 50 % der Gesamtmenge in einer Summenverteilung erreicht sind. Das Maximum der Verteilungsdichte wird hingegen durch den Modalwert bestimmt. Bei zwei Maxima wird von einer bimodalen Verteilung gesprochen, bei mehreren Maxima von einer mehrmodalen Verteilung. Die mittlere Partikelgröße wird, wie in Gleichung 5-1 dargestellt, aus der Summe der gewichteten mittleren Partikelgrößen der einzelnen Intervalle berechnet.

$$\bar{x}_r = \frac{\sum_{z=1}^n \bar{x}_z * u_z}{u_{ges}} \quad \text{Gleichung 5-1}$$

$\bar{x}_z$: Mittlere Partikelgröße im Intervall z

u_z : Anzahl der Partikel im Intervall z

u_{ges} : Anzahl der Partikel in der Partikelverteilung

Die spezifische Oberfläche kann aus der Volumenverteilung oder Anzahlverteilung berechnet werden. In Gleichung 5-2 ist die Berechnung aus der Volumenverteilung unter der Annahme einer konstanten Dichte und eines einheitlichen Heywoodfaktors f für alle Fraktion dargestellt.

$$S_{v1} = 6f * \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{x_1} * q_3(x_1) dx_1 \quad \text{Gleichung 5-2}$$

f : Heywoodfaktor

x_1 : Partikeldurchmesser

Der Sauterdurchmesser (vgl. Gleichung 5-3) gibt den mittleren Durchmesser an, die eine entsprechende Kugel besitzt, die der spezifischen Oberfläche des gesamten Partikelkollektivs entspricht und wird, wie in Gleichung 5-3 dargestellt berechnet. [Sti08]

$$d_{32} = \frac{6}{S_{v1}} \quad \text{Gleichung 5-3}$$

5.1.4 Messverfahren

Die Messtechnik und Messverfahren in der Partikeltechnologie sind ebenso vielfältig wie die Form und Größe der Partikel. Dabei besteht das Ziel darin, den dispersen Zustand zu beschreiben, um Veränderungen disperser Stoffsysteme zu erfassen, zu bewerten und die weitere Verarbeitung zu planen. Grundsätzlich umfasst die Partikelmesstechnik folgende Themenbereiche [Sti08]:

- Analyse der Größe und Form einzelner Partikel.
- Bestimmung der Partikelgrößenverteilung von Partikelkollektiven.
- Messung der Oberflächen von dispersen Stoffen.
- Bestimmung der Konzentration von Partikeln in dispersen Stoffsystemen, wie z. B. Flüssigkeiten oder Gasen.
- Charakterisierung der Geschwindigkeiten der Partikel und ihrer Relativgeschwindigkeit im umgebenden Fluid.
- Bestimmung der Haftkräfte zwischen Partikeln sowie zwischen Partikeln und Wänden.

Bei der Durchführung dieser unterschiedlichen Aufgaben in der Partikelmesstechnik kann auf zahlreiche Messverfahren zurückgegriffen werden. Die Wahl des geeigneten Messverfahrens hängt dabei stets von den zu erwartenden Eigenschaften der Partikel ab. Im Bereich der Partikelgrößenbestimmung lassen sich drei grundlegende Methoden unterscheiden:

- Zählanalyse
- Fraktionsanalyse
- Analyse des Gesamtsystems oder auch Ensemble Analyse

In Tab. 5-3 sind die typischen Verfahren der einzelnen Gruppen aufgelistet. Beim Zählen von Partikeln wird die Größe, im Falle dieser Arbeit der sogenannte äquivalente Kreisdurchmesser der projizierten Fläche, jedes einzelnen Partikels gemessen, wodurch die Partikelgrößenverteilung direkt aus der ermittelten Anzahl bestimmt werden kann. Für eine aussagekräftige Analyse muss jedoch eine große Anzahl an Partikeln aus einer Probe untersucht werden. Bei der Fraktionsanalyse werden die Proben vor der Messung in nahezu monodisperse Fraktionen aufgeteilt. Dadurch ist diese Methode präziser als die Zählanalyse und bietet eine höhere Auflösung als die Analyse des Gesamtsystems. Allerdings kann die Bestimmung der Partikelgrößenverteilung durch Rückgewinnungsprobleme bei der Fraktionierung, durch die Wahl der Quantifizierungsmethode sowie durch die Messung der Partikelkonzentration der einzelnen Fraktionen beeinflusst werden. Die Partikelgrößenverteilung wird anschließend mithilfe eines mathematischen Modells aus diesem Signal berechnet. Das mathematische Modell basiert auf dem physikalischen Prinzip der jeweiligen Messmethode und kann stark von dem verwendeten Berechnungsalgorithmus abhängen. Nachfolgend werden ein paar gängige ausgewählte Verfahren näher betrachtet. [Mor20]

Tab. 5-3: Übersicht ausgewählter Messverfahren mit den dazugehörigen Größenbereichen und Zuordnung zu den unterschiedlichen Gruppen [Mor20]

Gruppe	Verfahren	Größenbereich [µm]	Äquivalenter Durchmesser	Basis der Größen- verteilung
Zähl- analyse	Bildanalyse (optisch)	3 >	geometrisch	Anzahl
	Bildanalyse	0,01-500	geometrisch	Anzahl
	Rasterelektronen- mikroskopie (REM)			
	Bildanalyse	0,001-5	geometrisch	Anzahl
	Transmissions- elektronenmikro- skopie (TEM)			
	Partikel- verfolgung	0,05-1	Diffusion	Anzahl
	Lichtstreuung	0,1-100	Lichtstreuung	Anzahl
Fraktions- analyse	Sieben	5 >	Sieb	Volumen
	Chromato- graphisch	0,01-10	Volumen	Optisch
	Klassifizierung der Elektromobilität	0,002-1	Elektromobilität	Anzahl
	Diffusionsbatterie	0,01-1	Diffusion	Anzahl
	Sedimentation (Schwerkraft)	0,5-200	Stokes	Volumen oder optisch
Ensemble Analyse	Dynamische Lichtstreuung	0,005-1	Diffusion	Optisch
	Laserbeugung -streuung	0,1-1000	Lichtstreuung	Volumen
	Akustisch	0,02-0,3	Diffusion	Volumen

Siebverfahren

Das Siebverfahren gehört zur Zählanalyse von Partikeln und kann ab einem Durchmesser von $3\text{ }\mu\text{m}$ zur geometrischen Bestimmung der Partikelgrößenverteilung eingesetzt werden. Dabei werden die Partikel anhand ihrer Abmessung mit einer Maschen- bzw. Lochweite w verglichen, die das Feinheitsmerkmal dieses Messverfahrens bestimmt. Als „Durchgang“ wird die Masse der Partikel bezeichnet, die durch eine gewisse Maschenweite hindurch gehen können. Partikel, deren Durchmesser größer als die Maschenweite ist wodurch ein Passieren des Siebes nicht möglich ist, werden als „Rückstand“ klassifiziert. Nach Abschluss der Messung wird in der Regel entweder der Durchgang oder der Rückstand gewogen, sodass die Mengengröße „Masse“ bestimmt wird. Bei einheitlicher Partikeldichte entspricht diese der Mengengröße „Volumen“. Da die Schwerkraft keine Bewegung des Partikels quer zum Siebboden hervorruft und somit nicht für ein Siebverfahren ausreicht, werden zusätzlich Impulsänderungen ("Stoßkraft") oder Strömungswiderstandskräfte ("Schleppkraft") eingebracht. Impulse werden beispielsweise durch regelmäßige oder unregelmäßige periodische Bewegungen bei der Schwingungssiebung oder Handsiebung vom Siebrahmen und Siebboden auf das Siebgut übertragen. Die eingesetzten Siebmaschinen werden anhand ihrer Bewegungsart unterschieden. Bei Plansiebmaschinen werden Kreis- oder elliptische Bewegungen appliziert, wohingegen bei Wurfsiebmaschinen zusätzlich eine Bewegung vertikal zur Siebfläche stattfindet. Basierend auf der neben der Schwerkraft wirkende zusätzlichen Kraft kann das Siebverfahren in Trockensiebung und Nasssiebung unterteilt werden. Das Ergebnis der Siebung wird maßgeblich durch das Verhältnis der Partikelgröße zur Maschenweite, der Partikelform, der Aufgabegutmenge sowie den Haftkräften von Partikel zu Partikel, Siebboden oder Siebwand beeinflusst. Trockene disperse Systeme werden am häufigsten maschinell in einem Siebturm mit vibrierenden Siebeinsätzen gesiebt. Der schematische Aufbau eines solchen Siebturms ist in Abbildung 5-3 dargestellt. Die Basis bildet dabei ein mechanisch oder elektromagnetisch arbeitendes Aggregat (1), welches die Impulsänderung durch Schwingungen erzeugt und die federnd gelagerte Grundplatte (2) in Bewegung versetzt. Auf dieser Grundplatte wird der Siebsatz (3), der sich aus einem Auffangboden (5), mehreren Sieben (6) und einem Deckel (7) zusammensetzt, durch eine Haltevorrichtung (4) befestigt. Mit einem Siebrahmen (8) wird der Siebboden (9) in den einzelnen Sieben befestigt. Der Siebboden besteht meistens aus einem Lochblech oder einem Drahtgewebe. Die einzelnen Siebe werden in dem Siebturm so angeordnet, dass die Maschenweite von oben nach unten immer geringer wird. [Sti08]

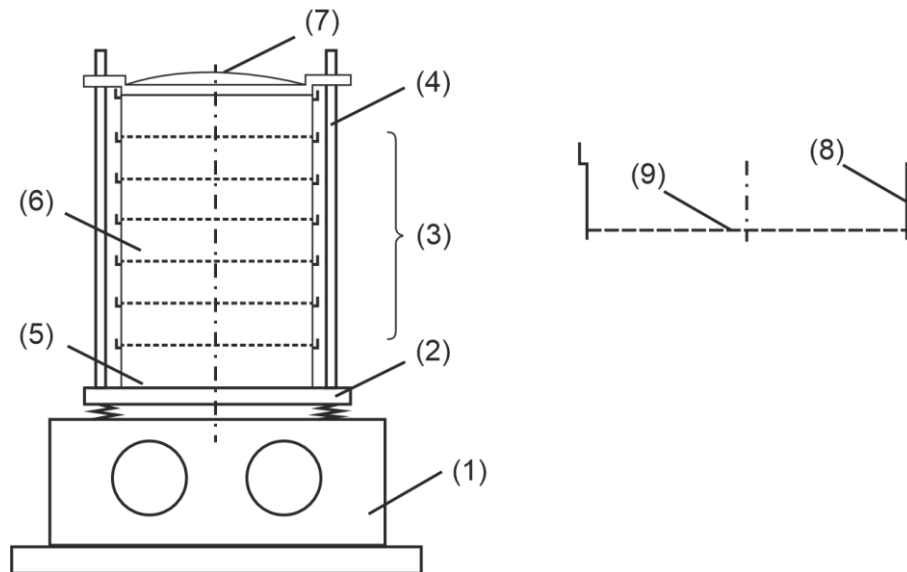


Abbildung 5-3: Schematische Darstellung eines Siebturms zur Siebung von trockenen Stoffen/Partikeln nach [Sti08]

5.1.4.1 Sedimentationsverfahren

Bei den Sedimentationsverfahren wird mit dem Feinheitsmerkmal der Sinkgeschwindigkeit für jedes unregelmäßig geformte Partikel der Sinkgeschwindigkeits-Äquivalentdurchmesser bestimmt. Da es sich meist um sehr kleine Partikel handelt, wird in Sedimentationsverfahren üblicherweise der Stokesdurchmesser als Sinkgeschwindigkeits-Äquivalentdurchmesser angegeben. Der Stokesdurchmesser kann nur mit dem in Gleichung 5-4 dargestellten mathematischen Zusammenhang berechnet werden, sofern die resultierende Partikel-Reynoldszahl (vgl. Gleichung 5-5) den Wert 0,25 nicht überschreitet. [Sti08]

$$d_{st} = \sqrt{\frac{18 * \eta}{(\rho_p - \rho_f) * g_1} * \omega_{sSt}}$$

Gleichung 5-4

- ω_{sSt} : Sinkgeschwindigkeit
- ρ_p : Partikeldichte
- ρ_f : Fluiddichte
- g_1 : Erdbeschleunigung
- η : Viskosität
- d_{st} : Stokesdurchmesser

$$Re_p = \frac{\omega_f * d_{st} * \rho_f}{\eta} \leq 0,25 \quad \text{Gleichung 5-5}$$

ω_f : Fluidgeschwindigkeit

Re_p : Partikel-Reynoldszahl

Sedimentationsverfahren werden in das Suspensions- und Überschichtungsverfahren unterteilt, und die Messung kann entweder inkremental oder kumulativ erfolgen. Bei der inkrementalen Messung wird die zeitliche Änderung der Partikelkonzentrationen unterschiedlicher Partikelgrößen in einer bestimmten Auswertungsebene analysiert. Bei der kumulativen Messung wird hingegen die Massenänderung mit einer Sedimentationswaage ermittelt. Die Verteilungssumme wird dabei durch Differentiation des Messwert-Zeit-Verlaufs entweder graphisch oder numerisch bestimmt. Für eine zuverlässige Partikelgrößenbestimmung mittels Sedimentationsverfahren muss die Volumenkonzentration des Feststoffs c_v unter 0,2 % liegen und der Feststoff muss ausreichend dispergiert sein. Agglomerate und anhaftende Feinstpartikel müssen vor Messbeginn von ihren Haftpartnern getrennt werden und während der Messung darf keine Reagglomeration stattfinden. Daher werden abhängig vom Feststoff geeignete Sedimentationsflüssigkeiten und Dispergierhilfsmittel ausgewählt. [LAK75, Sti08]

In Abbildung 5-4 sind die beiden Messverfahren gegenübergestellt. Bei der inkrementellen Erfassung wird die Konzentrationsänderung an der gestrichelten Linie gemessen, während bei der kumulativen Erfassung die bereits auf dem Boden des Probengefäßes abgelagerte Masse (schwarz) gewogen wird.

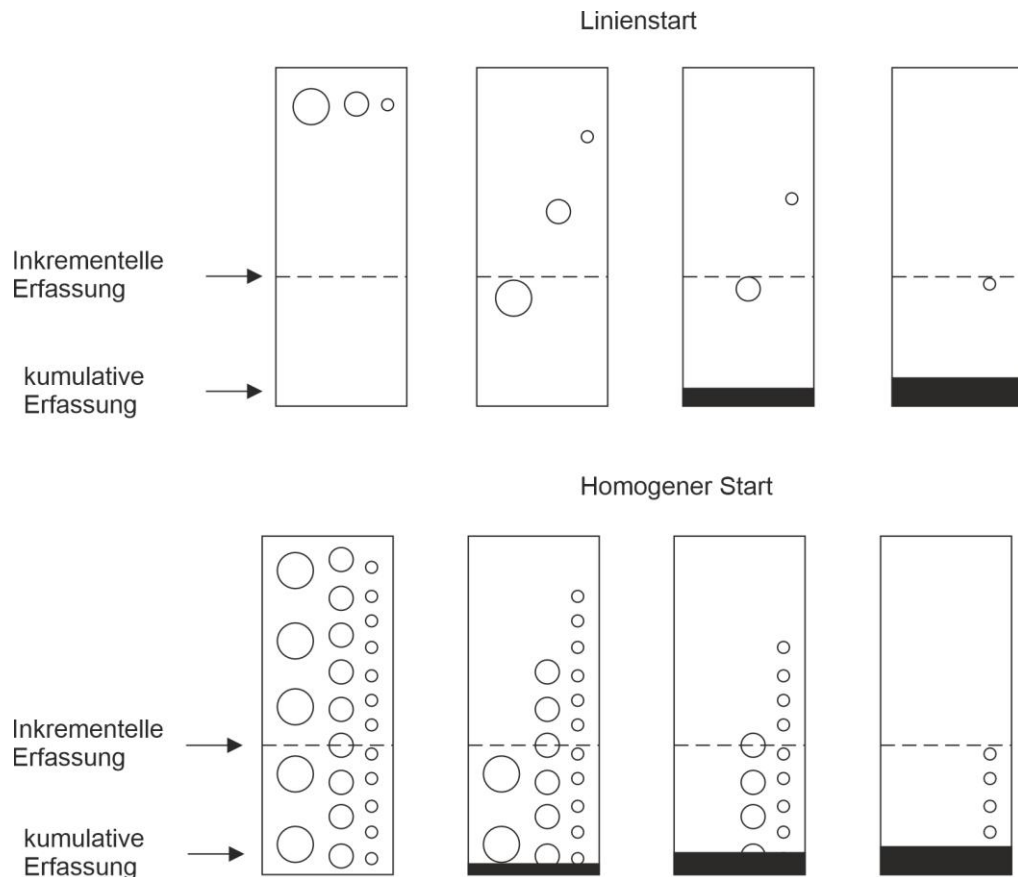


Abbildung 5-4: Vergleich der beiden Messverfahren am Beispiel des Suspensionsverfahrens nach [Mor20]

Optische Verfahren

Die optischen Verfahren zeichnen sich dadurch aus, dass entweder das Feinheitsmerkmal, die Mengenanteile oder sowohl das Feinheitsmerkmal als auch die Mengenanteile optisch erfasst werden. Sie lassen sich in abbildende Verfahren und Streulicht-Verfahren unterteilen. [Sti08]

Bei den abbildenden Verfahren werden Bilder der Partikel erstellt, analysiert und nach der Größe der projizierten Fläche (z.B. Äquivalenter Kreisdurchmesser) einer Partikelklasse zugeordnet und gezählt. Die aufgenommenen Bilder werden mithilfe einer automatischen Bildauswertung analysiert, die in statische und dynamische Bildanalysemethoden unterteilt wird. Bei der statischen Bildanalyse liegen die Partikel auf einem Probenträger und bewegen sich nicht relativ zur Kamera. Im Gegensatz dazu sind die Partikel bei der dynamischen Bildanalyse in Bewegung, und die Kamera erstellt Momentaufnahmen der sich bewegenden Partikel. Solche automatischen Bildauswertungen können aus den in Abbildung 5-5 dargestellten Schritten bestehen. Der Ausgangsschritt ist stets eine optische Bilderfassung, die ein Bild der Probe erzeugt. Dieses Bild wird anschließend in mehreren Schritten digital bearbeitet, indem z. B. Objekte mit einem speziellen Grauwert identifiziert und anschließend durch Methoden wie Erosion oder Dilatation von Pixeln weiter aufbereitet werden. Das Ergebnis ist ein „ideales“ digitales Bild, mit dem die eigentliche Messung der relevanten Parameter erfolgen kann. [HK81, Sti08]

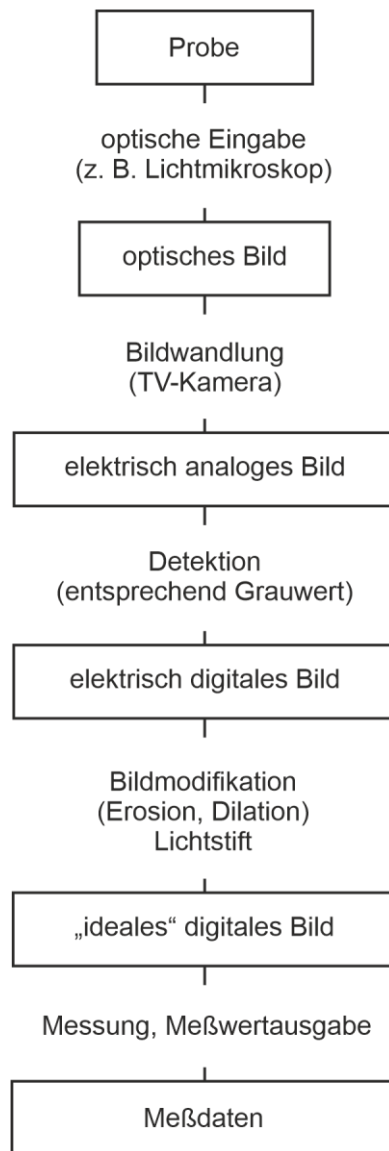


Abbildung 5-5: Bestandteile einer automatischen Bildauswertung nach [HK81]

Die digitalen Verarbeitungsmöglichkeiten sind sehr vielfältig und können je nach Anwendungsgebiet gezielt ausgewählt werden. Eine Möglichkeit ist die Grenzwertanalyse, mit der bestimmte Bereiche eines Bildes identifiziert werden können, die oberhalb eines definierten Grenzwertes liegen. Diese Bereiche können anschließend farblich hervorgehoben werden (vgl. Abbildung 5-6 (a) und (b)). Durch die Grenzwertanalyse entsteht aus dem originalen Probenbild (a) das in (b) dargestellte Bild, in dem die Bereiche oberhalb des Grenzwertes weiß hervorgehoben sind. [Bre24]

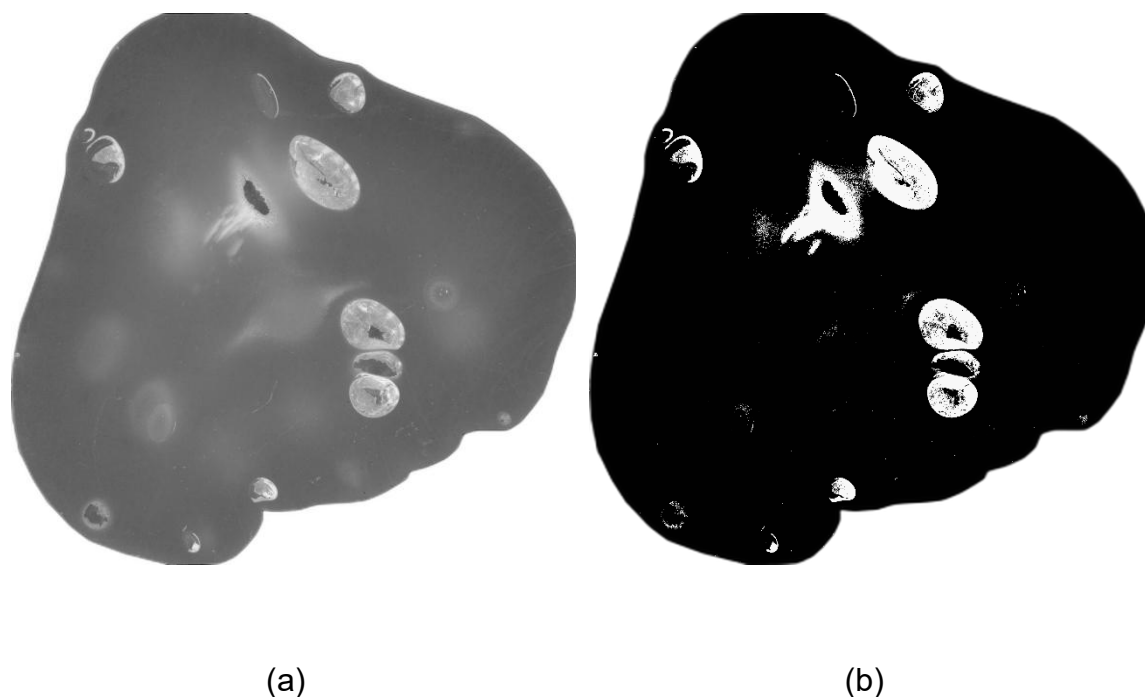


Abbildung 5-6: Ergebnis der Grenzwertanalyse (b) des originalen Bildes (a)

Die in Abbildung 5-5 als Beispiel genannten Verfahren Erosion und Dilatation werden eingesetzt, um die Struktur von Bildelementen zu verändern. Bei der Erosion werden Bildelemente verkleinert, wodurch kleine Bildelemente eliminiert und Verbindungen zwischen zwei Bildelementen unterbrochen werden. Im Gegensatz dazu werden bei der Dilatation die Bildelemente vergrößert und Verbindungen zwischen Bildelementen können entstehen. In Abbildung 5-7 sind die beiden Verfahren sowie das Ergebnis der hintereinandergeschalteten Anwendung von Erosion und Dilatation auf ein optisches Bild schematisch dargestellt. [HK81]

Die dynamischen Bildverarbeitungsverfahren eignen sich für Partikelgrößen von 0,03 bis 30 mm und können auch als On-line-Messung eingesetzt werden. Sowohl die dynamische als auch die statische Bildverarbeitung haben das Problem, dass unregelmäßig geformte Partikel je nach Lage und Winkel der Partikel zur Kamera unterschiedlich groß sind, da die Bestimmung nur auf der in die Bildebene projizierte Fläche basiert und die dreidimensionale Form nicht erfasst werden kann. [Mor20, Sti08]

Bei dem abbildenden Verfahren wird die Größe des Partikels direkt erfasst, wohingegen die Bestimmung der Partikelgröße bei den Streulichtverfahren auf der Streuung und Absorption von Licht der einzelnen Partikel basiert. Das Laserbeugungsverfahren beispielsweise nutzt ringförmige Detektoren, um das Beugungsspektrum in der Brennebene mit einer Optik zu erfassen und intern auszuwerten. So kann eine Partikelgrößenverteilung bestimmt und dem Benutzer angezeigt oder ausgegeben werden. Das Verfahren ermöglicht die Messung von Partikelgrößen von ca. 0,1 μm bis 3 mm in wenigen Sekunden, ohne dass eine Probenvorbereitung erforderlich ist. Somit ist es auch als Online-Messung einsetzbar. [Sti08]

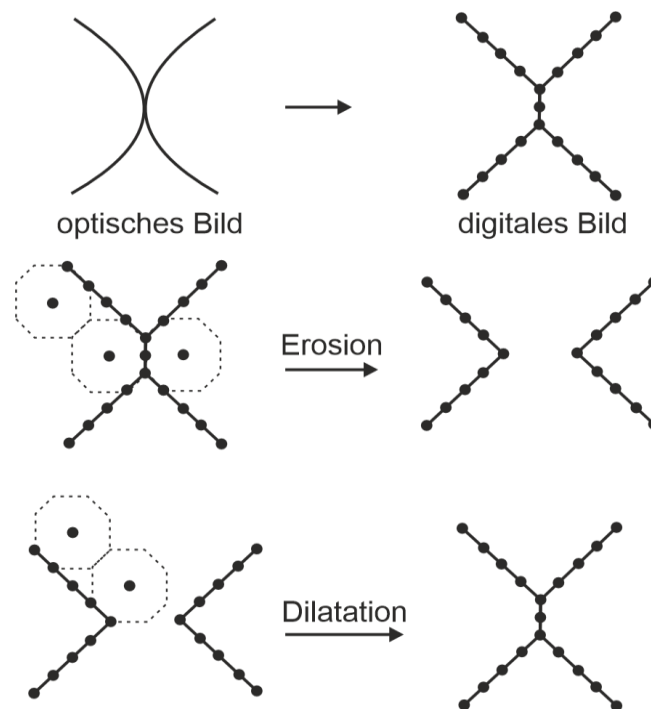


Abbildung 5-7: Schematische Darstellung der digitalen Bildbearbeitungsverfahren Erosion und Dilatation nach [HK81]

Partikelgrößenbestimmung bei Partikel im Nanometerbereich

Für Partikelgrößen in Nanometerbereich sind Verfahren wie Sieben und optische Bildanalyse ungeeignet, da die Partikelgrößen entweder gar nicht oder nur unzureichend unterschieden werden können aufgrund der zu geringen Auflösung der einzelnen Verfahren. Bis zu einer Partikelgröße von 0,1 nm werden daher Methoden der Elektronenmikroskopie angewandt. Beim Raster-Elektronen-Mikroskop (REM) wird dazu mit einem Elektronenstrahl die Oberfläche von Partikeln abgetastet und das Emissions-, Transmissions- bzw. Reflexionsvermögen der Partikel bestimmt und für den Benutzer analysiert und in einem Bild dargestellt. Nicht leitfähige Partikel müssen vor der Analyse auf einem Metallsubstrat verteilt und in einem Vakuumverdampfer mit einer dünnen Kohlenstoffschicht leitfähig gemacht werden. Analog zu einem Durchlichtmikroskop werden bei dem Transmissions-Elektronen-Mikroskop dünne Schichten von einer maximalen Dicke von 1 µm durchstrahlt. Die Proben müssen für beide Verfahren aufwendig vorbereitet werden und insgesamt sind die Messungen sehr kostenintensiv, sodass sich die Verfahren nur für Off-line-Auswertungen eignen. Ein weiterer Nachteil ist, dass mit den Elektronen-Mikroskopen immer nur ein sehr kleiner Anteil der Probe analysiert wird, was die statistische Zuverlässigkeit beeinträchtigt. [Mor20, Sti08]

5.2 Vorgehensweise (Experimentelle Untersuchung)

Zur experimentellen Bestimmung der Mischgüte wurden Materialproben aus einem Mischprozess eines Doppelschneckenextruders entnommen, gemäß der vorgesehenen Auswertungsmethode aufbereitet und anschließend analysiert. Auf der Grundlage der so gewonnenen Daten konnte die Mischgüte bestimmt werden. Der gesamte Ablauf gliedert sich in drei Schritte: Probenherstellung, Probenvorbereitung und Analyse der Proben. Die detaillierte Beschreibung dieser Schritte erfolgt in den nachfolgenden Kapiteln.

5.2.1 Versuchsaufbau

Für die Probenherstellung wurde ein Versuchsaufbau in L-Anordnung gewählt, bestehend aus einem Einschneckenextruder (Arenz GmbH, Meckenheim) und einem Doppelschneckenextruder (ZSK25 Coperion GmbH, Stuttgart). Die Prinzipskizze des Aufbaus ist in Abbildung 5-8 dargestellt. Der Einschneckenextruder dient zum Aufschmelzen des Kunststoffgranulats. Über eine Schmelzeleitung wird die Kunststoffschmelze an den Doppelschneckenextruder übergeben, in dem das Compound aus Kunststoff und Füllstoff hergestellt wird. Die Zudosierung des Füllstoffs erfolgt über eine Seitendosierung vor der Mischzone. Die Mischzone befindet sich in der sogenannten „Mischkammer“, einem Zylindergehäuse mit einer Länge von $4D$. Vor und hinter dieser Mischkammer ist jeweils eine Probenentnahmeplatte (vgl. Abbildung 5-9) positioniert. Mithilfe eines mechanisch betätigten Ventils kann dort eine Probenentnahme quer zur Extrusionsrichtung durchgeführt werden.

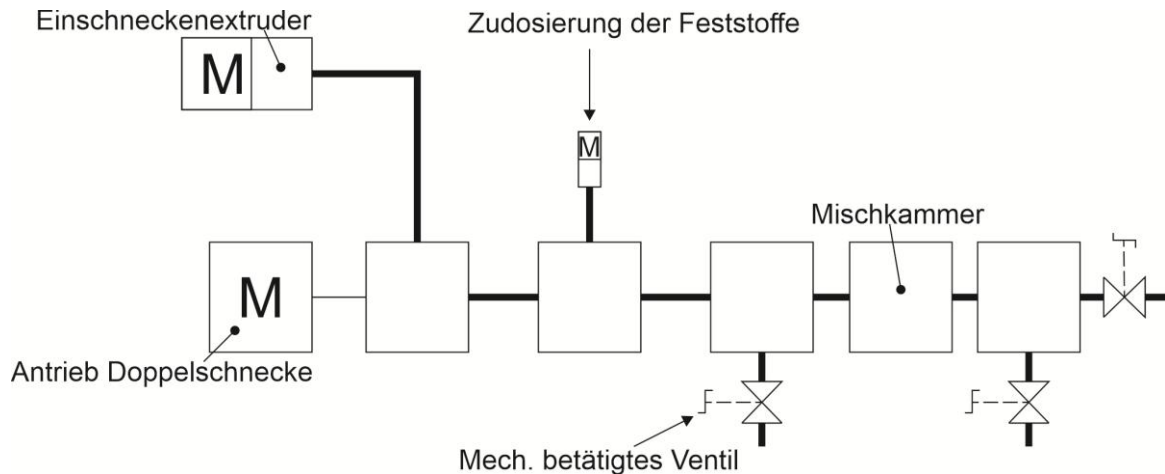


Abbildung 5-8: *Prinzipskizze des versuchsstands mit einem separaten Einschneckenextruder und zwei Probeentnahmeplatten mit mech. betätigten Ventilen*

Die Probenentnahmeplatte ist mit einer Schraube (1) zum Verschließen der Auslassöffnung des Schneckenkanals sowie mit einem Ausstoßkolben (2) parallel zum Ausstoßkanal ausgestattet. Ist die Schraube vollständig eingedreht, bleibt die Auslassöffnung geschlossen und eine Probenentnahme ist nicht möglich.

Für die Probenentnahme wird die Schraube soweit herausgedreht, dass die Kunststoffschmelze durch die Öffnung austreten kann. Bei Bedarf lässt sie sich anschließend mit dem Ausstoßkolben durch den Ausstoßkanal gezielt ausstoßen.

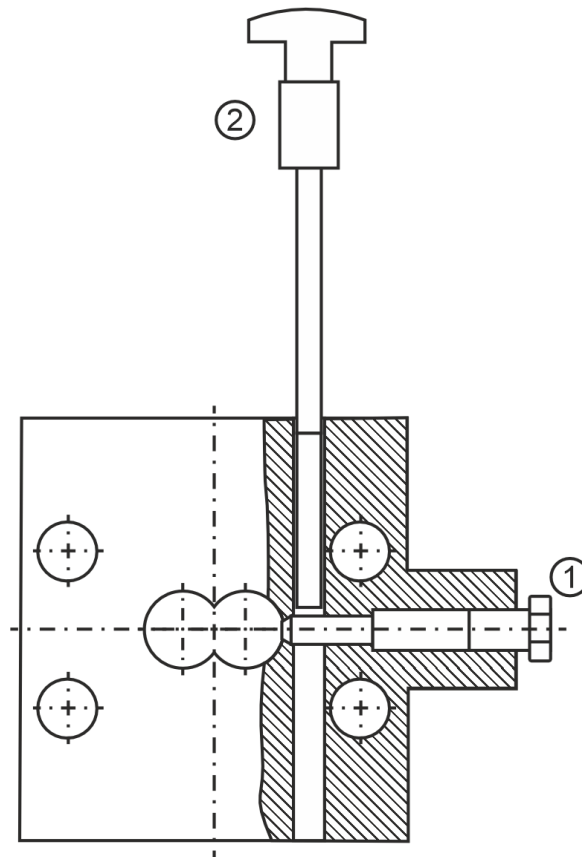


Abbildung 5-9: Zeichnung der Probeentnahmeplatte der ZSK25 nach [Cop-ol]

Für den Versuchsstand wurden folgende zwei Extrudermaschinen in einer L-Anordnung verwendet:

- Einschneckenextruder: PP-Einschneckenextruder der Firma Arenz GmbH, mit einem Schneckendurchmesser von 45 mm und einem L/D Verhältnis von 22 (Arenz GmbH, Meckenheim)
- Doppelschneckenextruder: ZSK25 der Firma Coperion, mit einem Schneckendurchmesser von 25 mm und einem L/D Verhältnis von 41 (ZSK25 Coperion GmbH, Stuttgart)

Die realisierte L-Anordnung des Versuchsaufbaus ist in Abbildung 5-10 dargestellt. Der Kunststoffstrom im Einschneckenextruder ist durch einen roten Pfeil markiert. Der gelbe Pfeil kennzeichnet den Verlauf der Schmelzeleitung vom Einschnecken- zum Doppelschneckenextruder, während der blaue Pfeil den Strömungsweg der Kunststoffschmelze im Doppelschneckenextruder anzeigt.

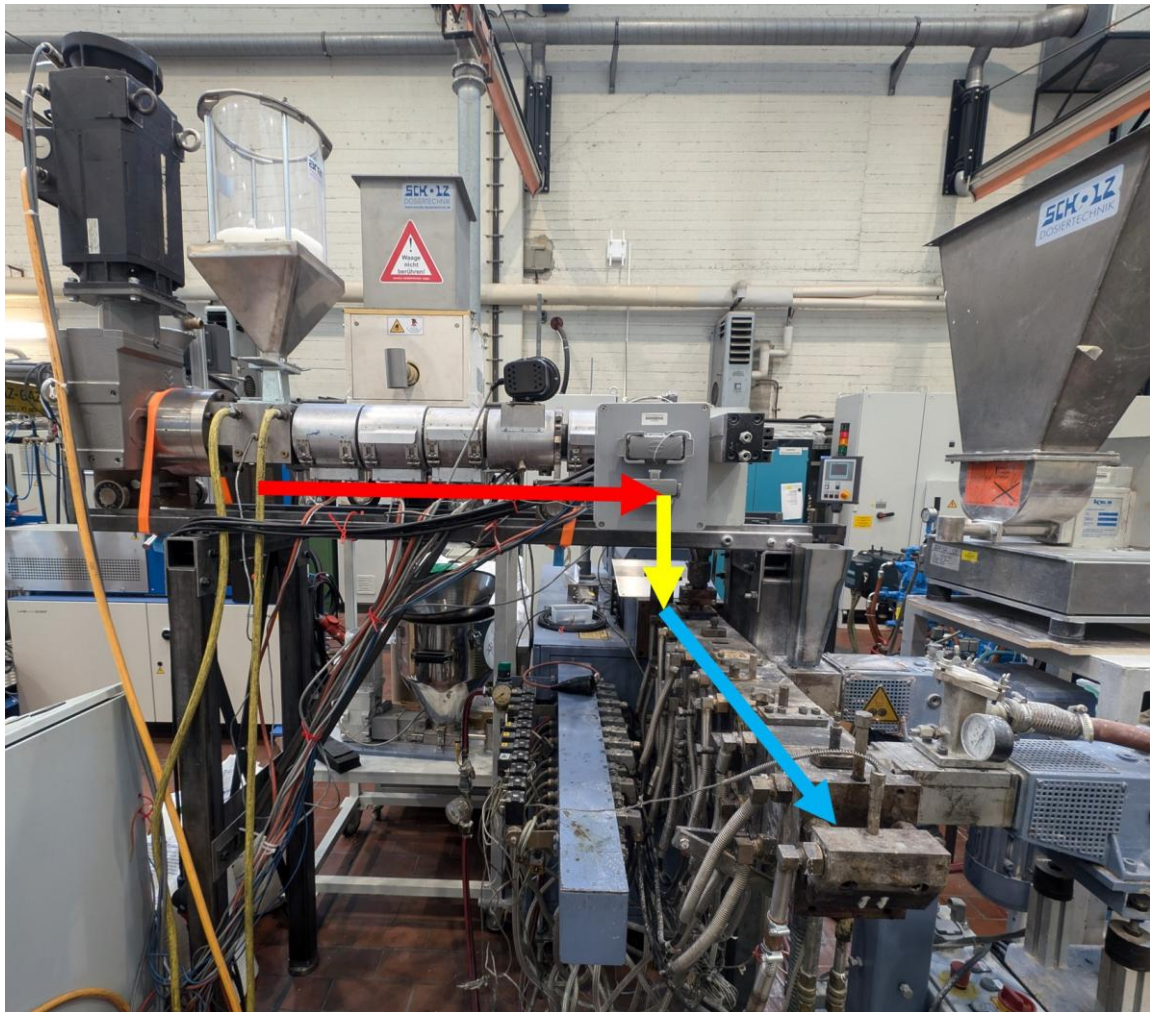


Abbildung 5-10: Verwendeter Versuchsaufbau mit dem Einschneckenextruder (rot), der Schmelzeleitung (gelb) und dem Doppelschneckenextruder (blau) in L Anordnung.

Die Zylinderkonfiguration der ZSK25 wurde entsprechend den Anforderungen an einen schmelzegefüllten Extruder und die Probenentnahme vor und hinter der Mischkammer angepasst (Abbildung 5-11). Die Kunststoffschmelze (gelber Pfeil) wird über das zweite Zylindergehäuse in die Maschine eingeleitet, da das erste Zylindergehäuse nur wassergekühlt und nicht mit Heizpatronen temperierbar ist. Die Seitendosierung (weißer Pfeil) befindet sich am fünften Zylindergehäuse, das stromaufwärts bereits eine kleine Entgasungszone enthält. Die Hauptentgasung liegt unmittelbar dahinter im sechsten Zylindergehäuse. Danach ist die erste Probeentnahmeplatte positioniert (linker grüner Pfeil). Es folgt ein Standardzylindergehäuse, das als Mischkammer dient. Die dortigen Kanalbohrungen haben einen Durchmesser von 25,2 mm und einen Achsabstand von 21,1 mm. Direkt im Anschluss ist die zweite Probeentnahmeplatte angeordnet (rechter grüner Pfeil). Nach der zweiten Probeentnahmeplatte folgen zwei weitere Zylindergehäuse sowie eine kurze Distanzplatte, die der Aufnahme des Strangwerkzeugs für die Granulatherstellung dient.



Abbildung 5-11: Zylindergehäuseanordnung der ZSK25 mit der Schmelzeleitung (gelb), Seitendosierung (weiß) und den Probeentnahmeplatten (grün).

Der vollfaktorielle Versuchsplan für die experimentellen Untersuchungen umfasst die in Tab. 5-4 aufgeführten Parameter und besteht aus insgesamt 180 Versuchspunkten (VP). Durch die vollfaktorielle Struktur wird sichergestellt, dass alle Kombinationen der betrachteten Parameter einbezogen werden, wodurch eine detaillierte Analyse der Versuchsergebnisse möglich ist. Im Unterschied zum Simulationsversuchsplan (vgl. Kapitel 5.2.1) wird hier ausschließlich die ZSK25 eingesetzt, da der Versuchsaufbau aus Platzgründen keine Variation des Doppelschneckenextruders zulässt. Dafür werden in den experimentellen Untersuchungen zusätzlich der Füllstofftyp und der Füllstoffanteil berücksichtigt, die in den Simulationen aus technischer Sicht nicht einbezogen werden konnten. Das liegt vor allem daran, dass die Partikel masselos sind und keine Interaktion mit der Schmelze oder anderen Partikeln stattfinden. Auf die Eigenschaften der beiden verwendeten Füllstoffe wird im folgenden Kapitel näher eingegangen. Der Gesamtmassenstrom der Versuche beträgt 10 kg/h, wobei der Füllstoffanteil jeweils 20, 25 oder 30 Gew.-% beträgt.

Tab. 5-4: Parameter des vollfaktoriellen Versuchsplans für die Untersuchungen

Schneckenelemente	Drehzahl [U/min]	Kunststoff	Füllstoff	Füllstoffanteil [Gew.-%]
KB 90/5/12	200	FPH50	M05N	20
KB 90/5/24	300	505P	M30	25
KB 45/5/24	400			30
SE 24/24				
ZME 8-16				

5.2.2 Verwendete Materialien

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Wil24].

Für die experimentellen Untersuchungen wurde Talkum in zwei Varianten ausgewählt, da dieser Füllstoff zu den am häufigsten in Kombination mit PP eingesetzten Materialien zählt [Hoh09]. Die Bezeichnungen und mittleren Partikelgrößen der Talkumvarianten sind in Tab. 5-5 aufgeführt. Die verwendeten Kunststofftypen entsprechen den in Kapitel 4.2.4 beschriebenen Materialien und wurden zum direkten Vergleich übernommen.

Tab. 5-5: Übersicht der für die Untersuchungen verwendeten Kunststoffe und Füllstoffe

Material	Name	Bemerkung
Talkum	Finntalc M05N	Mittlere Partikelgröße (median) D50 = 2,2 µm
Talkum	Finntalc M30	Mittlere Partikelgröße (median) D50 = 10 µm
Polypropylen	Sabic PP FPH50	MFR-Wert: 50 g/10 min bei 230°C und 2,16 kg
Polypropylen	Sabic PP 505P	MFR-Wert: 2,0 g/10 min bei 230°C und 2,16 kg

Die Partikelgrößenverteilung des unverarbeiteten Talkums wurde im Vorfeld mit dem QICPIC (nähere Infos in Kapitel 5.3.2) analysiert. Die Ergebnisse für die Summenverteilungen des äquivalenten Kreisdurchmessers der Talkumvarianten M30 und M05N sind in Abbildung 5-12 dargestellt. Ab einer Partikelgröße von etwa 2,4 µm steigen die Summenverteilungen beider Varianten steil an. Die Messwerte der Variante M05N liegen dabei über den gesamten Messbereich hinweg oberhalb derjenigen von M30 (z. B. bei 6,5 µm: 78 % gegenüber 66 %). Oberhalb von rund 11 µm nähern sich die Verteilungen einander an und erreichen ab etwa 14 µm beim M05N und 30 µm beim M30 das Maximum der Summenverteilung.

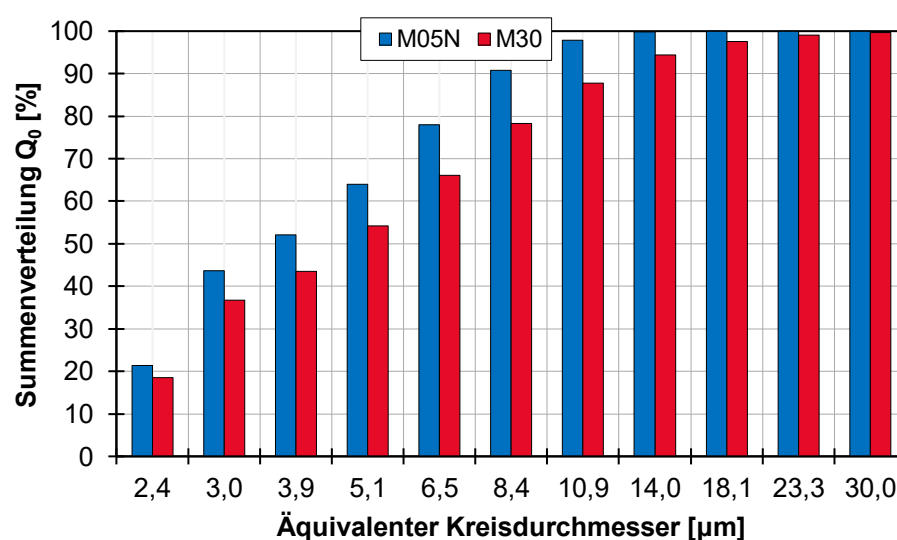
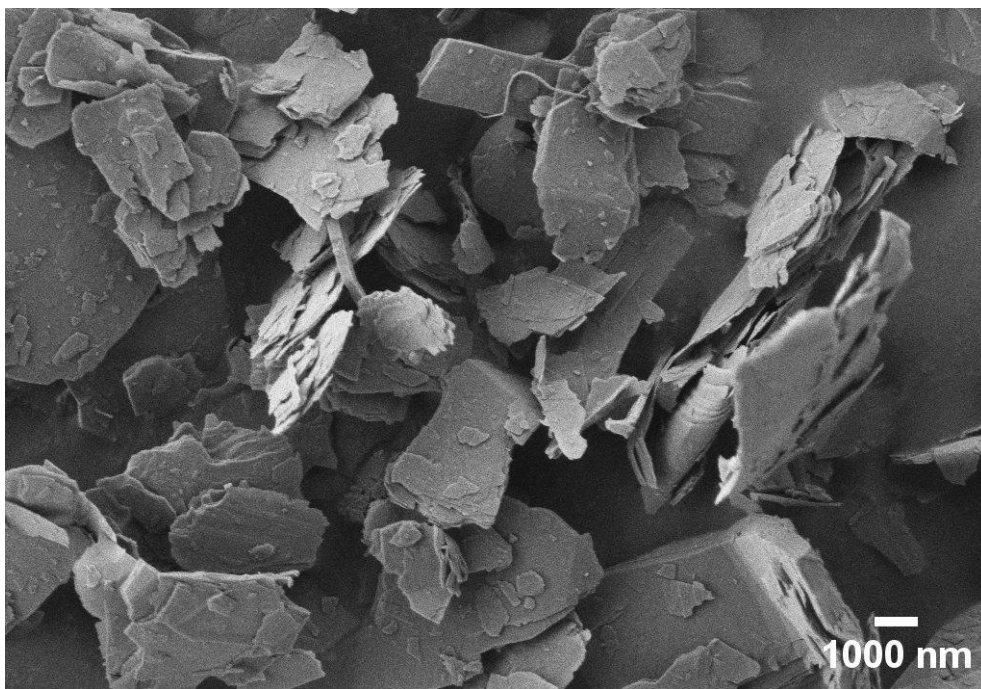
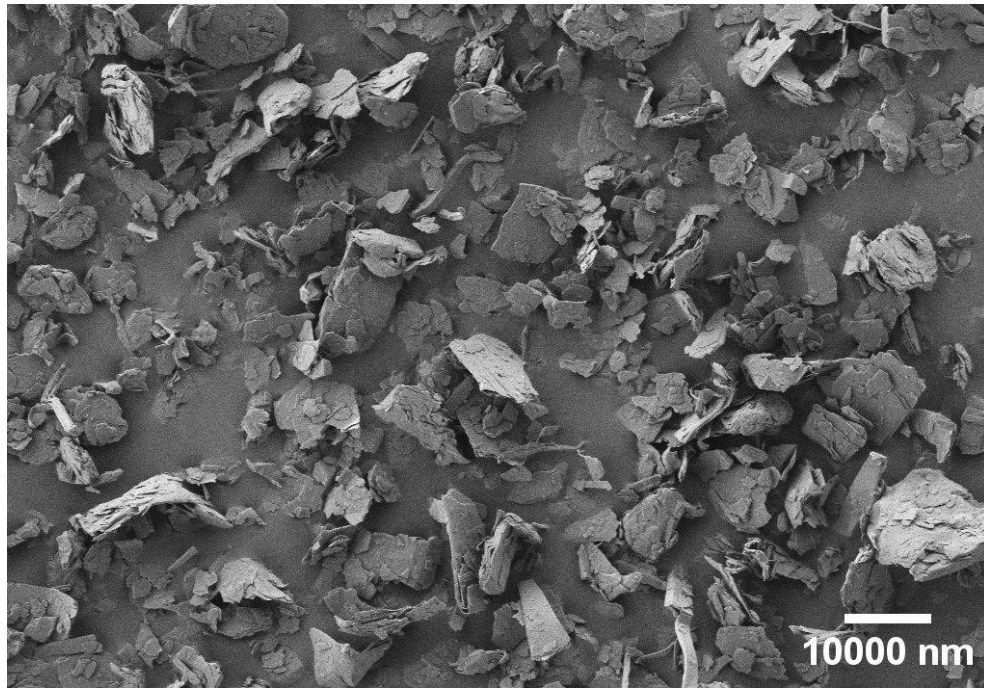


Abbildung 5-12: Ausgangspartikelverteilungen der verwendeten Talkumpulver

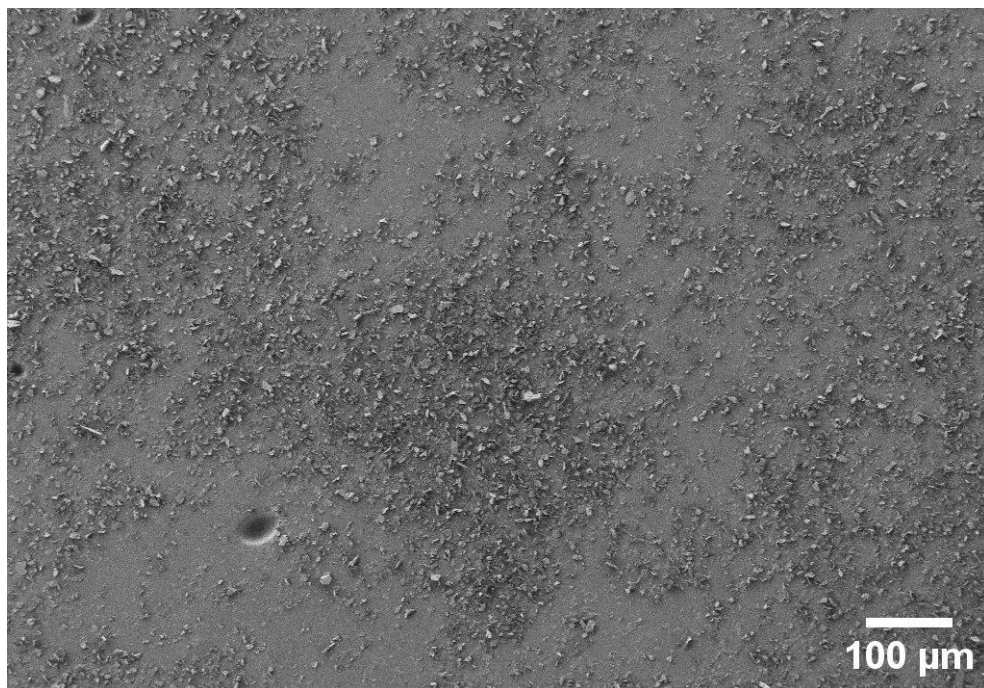
Zusätzlich wurden mehrere Rasterelektronenmikroskop Aufnahmen des unverarbeiteten Talkumpulvers erstellt und ausgewertet. Die Abbildung 5-13 (a) bis (c) veranschaulichen beispielhaft das Material M05N bei unterschiedlichen Vergrößerungen: (a) 5000-fach, (b) 1000-fach und (c) 100-fach. In Abbildung 5-13 (a) sind die Form und Zusammensetzung der einzelnen Talkumpartikel deutlich erkennbar. Es wird deutlich, dass die plättchenförmigen Partikel an- oder aufeinander liegen, wobei größere Plättchen häufig als Träger fungieren, auf denen mehrere kleinere aufliegen. Hierdurch entstehen großflächige Strukturen, die als Talkumaggregate bezeichnet werden und deren Trennung eine hohe mechanische Beanspruchung erfordert. Die kleineren Plättchen besitzen eine Länge von etwa 0,5 bis 2 μm und sind damit rund fünf- bis zehnmal kürzer als die größeren Plättchen. Sind die Plättchen nicht parallel orientiert, reduziert sich die Kontaktfläche, sodass in der Regel Talkumagglomerate entstehen. Aufgrund der kleineren Kontaktflächen weisen diese schwächere Bindungskräfte auf als die innerhalb der flächig verbundenen Aggregate. Die Abbildung 5-13 (b) und (c) verdeutlichen darüber hinaus, dass die Talkumpartikel überwiegend rechteckige bis längliche Formen besitzen, während runde Partikel nicht auftreten. Insgesamt zeigt sich eine ausgeprägte Heterogenität mit einer großen Bandbreite unterschiedlich großer Plättchen.



(a)



(b)

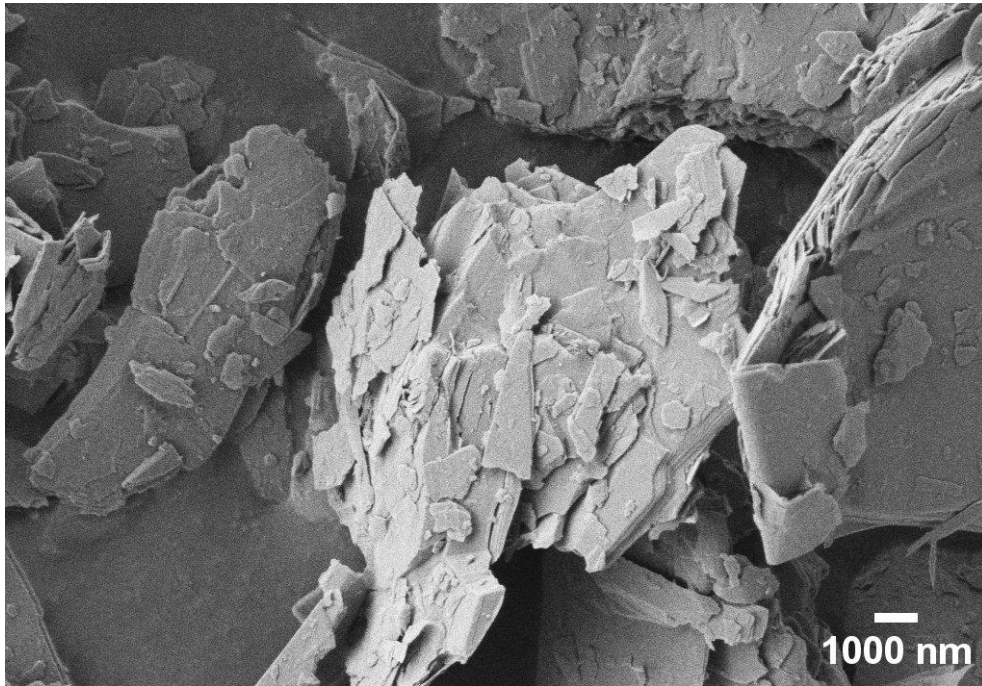


(c)

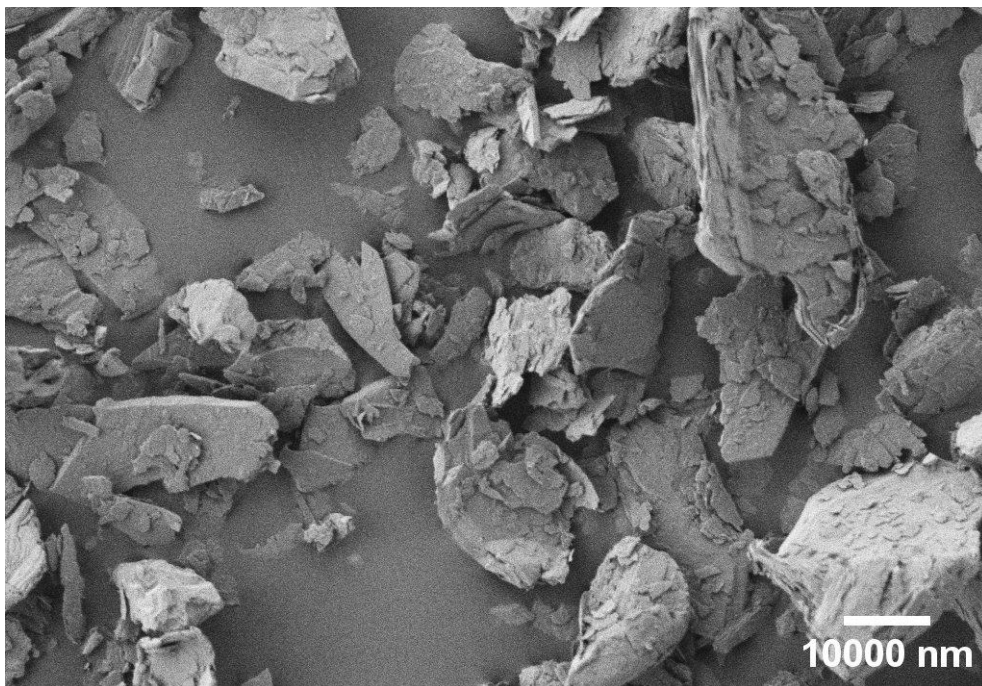
Abbildung 5-13: M05N als Referenz in unterschiedlichen Vergrößerungen: 5000-fache Vergrößerung (a), 1000-fache Vergrößerung (b) und 100-fache Vergrößerung (c)

Das unverarbeitete Talkum M30 ist in Abbildung 5-14 (a) bis (c) in unterschiedlichen Vergrößerungen dargestellt. Das M30 besteht überwiegend aus plättchenförmigen Aggregaten und Agglomeraten. Die Aggregate setzen sich ebenfalls aus einzelnen großen Talkumplättchen zusammen, auf deren Oberfläche kleinere Plättchen aufliegen. Diese kleineren Strukturen weisen Größen zwischen

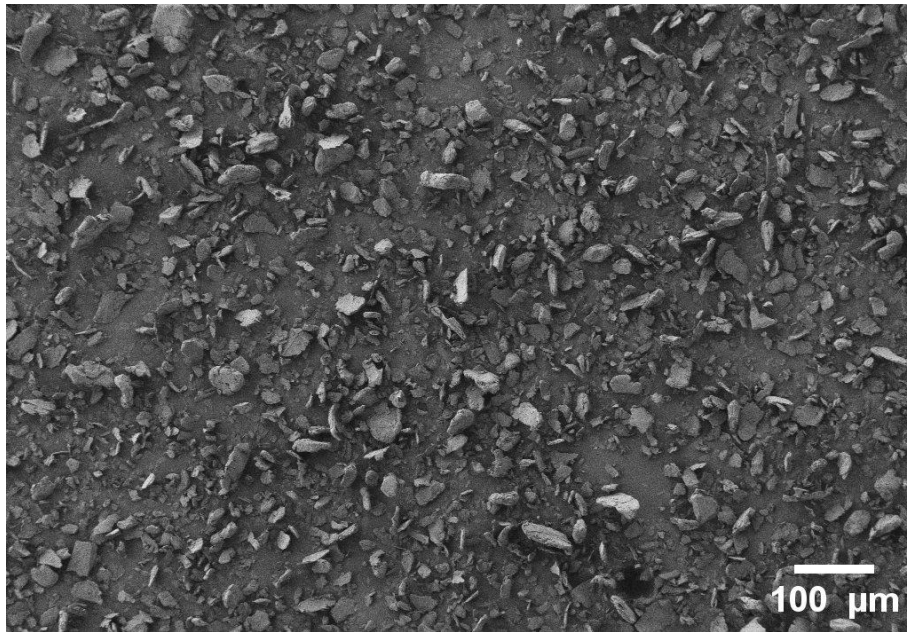
0,5 und 2 μm auf und sind damit etwa fünf- bis fünfzehnmal kleiner als die großen Plättchen innerhalb des Aggregats.



(a)



(b)



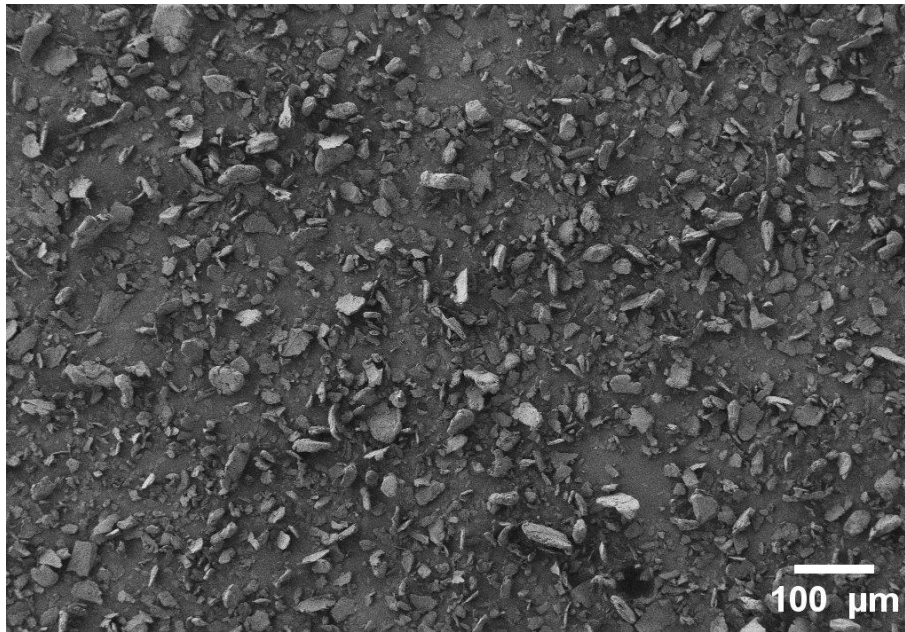
(c)

Abbildung 5-14: M30 Referenz in unterschiedlichen Vergrößerungen: 5000-fache Vergrößerung (a), 1000-fache Vergrößerung (b) und 100-fache Vergrößerung (c)

Der direkte Vergleich der beiden Talkum Varianten bei einer 5000-fachen Vergrößerung in Abbildung 5-15 verdeutlicht, dass sich M30 und M05N hinsichtlich ihres D50 unterscheiden, da die Partikel des M30 deutlich größer sind.



(a)



(b)

Abbildung 5-15: Vergleich der Talkumpulver des M05N (a) und M30 (b) bei einer 5000-fachen Vergrößerung

Berechnung der Haftkräfte zwischen den Talkumpartikeln:

Für das dispersive Mischen sind neben den auftretenden Schubspannungen auch die materialspezifischen Haftkräfte zwischen den Partikeln relevant für eine verlässliche Aussage über die Möglichkeit die Partikel dispersiv zu mischen. Mit den nachfolgenden Gleichungen lässt sich Haftkräfte zwischen den Talkumpartikeln nach Wilhelm [Wil18] berechnen. Die Zugfestigkeit σ_z des Talkums ergibt sich aus dem Verhältnis der maximalen Normalkraft $F_{N,max}$ zu der Partikeloberfläche A_p (vgl. Gleichung 5-6). [Wil18]

$$\sigma_z = \frac{F_{N,max}}{A_p} \quad \text{Gleichung 5-6}$$

σ_z : Zugfestigkeit

$F_{N,max}$: Maximale Normalkraft

A_p : Partikeloberfläche

Die maximale Normalkraft setzt sich dabei aus den in Gleichung 5-7 aufgeführten Bestandteilen zusammen. Die Kapillaren Kräfte können in diesem Betrachtungsfall jedoch gleich null gesetzt werden. [Wil18]

$$F_{N,max} = F_{Kap} + F_{el} + F_{vdW} \quad \text{Gleichung 5-7}$$

F_{Kap} : Kapillarkräfte

F_{el} : Elektrostatische Kräfte

F_{vdW} : Van-der-Waals Kräfte

Mit der Hamaker- oder Lifshitz-Konstante kann die Van-der-Waals Kraft entweder nach der mikroskopischen oder makroskopischen Theorie berechnet werden. Da Talkum ein plättchenförmiger Füllstoff ist werden die Gleichung 5-8 und Gleichung 5-9 für das Platte-Platte Modell verwendet. [Isr10, Mer07, Wil18]

$$F_{vdW} = \frac{A_H \cdot A_p}{6 \cdot \pi \cdot a^3} \quad \text{Gleichung 5-8}$$

A_H : Hamaker-Konstante

a : Abstand der Platten zueinander

$$F_{vdW} = \frac{h\varpi \cdot A_p}{8 \cdot \pi^2 \cdot a^3} \quad \text{Gleichung 5-9}$$

$h\varpi$: Lifshitz-Konstante

Die Berechnung der elektrostatischen Kraft erfolgt für das Platte-Platte Modell eines elektrischen Leiters nach Gleichung 5-10 und für einen elektrischen Isolator nach Gleichung 5-11. [Sch84, Wil18]

$$F_{el} = \frac{\pi \cdot \varepsilon_r \cdot \varepsilon_0 \cdot U_1^2 \cdot A_p}{2 \cdot a^2} \quad \text{Gleichung 5-10}$$

ε_r : Dielektrizitätszahl

ε_0 : Elektrische Feldkonstante

U_1 : Kontakt Potenzial

$$F_{el} = \frac{\sigma_{F1} \cdot \sigma_{F2} \cdot A_p}{2 \cdot \varepsilon_r \cdot \varepsilon_0} \quad \text{Gleichung 5-11}$$

σ_F : Flächenladungsdichte [C/m²]

Werden die Gleichung 5-7 bis Gleichung 5-11 in die Gleichung 5-6 eingesetzt ergibt sich der in Gleichung 5-12 dargestellt mathematische Zusammenhang für die Zugfestigkeit unter der Berücksichtigung der Porosität aus Gleichung 5-13. [Wil18]

$$\sigma_Z = (1 - \epsilon) \cdot k \cdot \frac{F_{N,max}}{A_p} = \frac{(1 - \epsilon)}{\pi} \cdot k \cdot \frac{F_{N,max}}{d_p^2} \quad \text{Gleichung 5-12}$$

ϵ : Porosität des Agglomerats

k : Anzahl der Kontaktstellen

d_p : Mittlerer idealisierter Partikeldurchmesser

Die notwendige Porosität ϵ kann mit der Gleichung 5-13 aus den Materialdatenblättern bestimmt werden. [Wil18]

$$\epsilon = 1 - \frac{\rho_S}{\rho} \quad \text{Gleichung 5-13}$$

ρ_S : Schüttdichte

ρ : Dichte

Die Hamaker-Konstante wurde anhand der gemessenen Oberflächenenergie des Talkumpulvers mithilfe des folgenden mathematischen Zusammenhangs berechnet (vgl. Gleichung 5-14). [Mer07]

$$W_{12} = 2 \cdot \sigma_{11} = \frac{A_H}{12 \cdot \pi \cdot r_k^2} \quad \text{Gleichung 5-14}$$

W_{12} : Adhäsionsarbeit pro Fläche

σ_{11} : Oberflächenenergie Material 1

r_k : Charakteristischer Abstand

Mit der Gleichung 5-15 kann der charakteristische Abstand r_k mit dem Kontaktabstand abgeschätzt werden. [Mer07]

$$r_k \approx \frac{a_0}{2,5} \quad \text{Gleichung 5-15}$$

a_0 : Kontaktabstand

Aus der Hamaker-Konstante kann die Lifshitz-Konstante berechnet werden. Der mathematische Zusammenhang ist in Gleichung 5-16 dargestellt. [Mer07]

$$h_{\omega} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot A_H \quad \text{Gleichung 5-16}$$

Für die Berechnungen der Zugfestigkeit wurden die Werte in Tab. 5-6 recherchiert bzw. experimentell bestimmt. [Wil24]

Die Ergebnisse der Zugfestigkeitsberechnung der Talkumpulver sind in der Tab. 5-7 für die mikroskopische Theorie nach Hamaker und die makroskopische Theorie nach Lifshitz für unterschiedliche Kontaktabstände aufgelistet. Die Zugfestigkeiten liegen für beide Theorien im Bereich von etwa 18,5 bis 6,8 MPa für das M05N und zwischen 16,6 und 6,1 MPa für das M30. Die Zugfestigkeit des M05N ist in allen Theorien ca. 2,0 MPa bei dem geringsten und 1,0 MPa bei dem größten Kontaktabstand größer als die des M30.

Tab. 5-6: Materialparameter für die Berechnung der Zugfestigkeit der Talkumpulver nach [Wil24]

Variabel	Zahlenwert
Elektrische Feldkonstante $[\frac{As}{Vm}]$	$\epsilon_0 = 8,54 \cdot 10^{-12}$
Dielektrizitätszahl [-]	$\epsilon_r = 1,5$
Ladungsdichte $[\frac{e}{\mu m^2}]$	$\varphi_{max} = 100$
Elementarladung [As]	$e = 1,60 \cdot 10^{-19}$
Flächenladungsdichte $[C/m^2]$	$\sigma_F = e \cdot \frac{\varphi_{max}}{10^{-12}} = 1,60 \cdot 10^{-5}$
Kontaktspannung [V] in abh. des Kontaktabstands:	
Minimum	0,1
Mittelwert	0,3
Größte Anziehungskraft	0,5
Maximum	0,7
Kontaktstellen [-]	k=1
Partikeldurchmesser d [μm]	
M05N	2,2
M30	10
Schüttgutdichte $\rho_s [\frac{g}{cm^3}]$	
M05N	0,9
M30	0,8
Feststoffdichte $\rho [\frac{g}{cm^3}]$	
M05N	2,7
M30	2,7

Die Ergebnisse dieser Analyse werden anschließend in Kapitel 6 verwendet, um zu überprüfen, ob dispersives Mischen stattfindet.

Tab. 5-7: *Ergebnisse der Berechnung der Zugfestigkeit von Talkum [Wil24]*

Mikroskopische Theorie nach Hamaker	Zugfestigkeit σ_z [MPa]	
Kontaktabstand	M05N	M30
Minimum/0,1 V	18,56	16,64
Mittelwert/0,3 V	18,05	16,17
Gr. Anziehungskraft/0,5 V	18,88	16,89
Maximum/0,7 V	9,39	8,40
Makroskopische Theorie nach Lifshitz	Zugfestigkeit σ_z [MPa]	
Kontaktabstand	M05N	M30
Minimum/0,1 V	18,18	16,31
Mittelwert/0,3 V	15,59	13,98
Gr. Anziehungskraft/0,5 V	13,64	12,23
Maximum/0,7 V	6,82	6,11

5.2.3 Verwendete Schneckenkonfigurationen

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Can24].

In Voruntersuchungen wurden auf Grundlage des festgelegten Versuchsplans Prozesssimulationen mit der Software „Simulation gleichläufiger Doppelschneckenmaschinen“ (SIGMA) (SIGMA 14.1, Kunststofftechnik Paderborn gGmbH, Paderborn) durchgeführt. Dabei kamen die gemessenen Materialdaten der Kunststoffe und Füllstoffe aus Kapitel 5.2.2 zum Einsatz, um geeignete Schneckenelemente für die Probenentnahme zu identifizieren. Die Elemente sollten einerseits einen ausreichenden Druckaufbau gewährleisten, andererseits aber nur eine geringe Mischwirkung besitzen. Die Simulationen zeigten, dass rückfördernde Schneckenelemente und Distanzscheiben grundsätzlich in der Lage sind, den erforderlichen Druck aufzubauen. Gleichzeitig übten sie eine geringere Mischwirkung auf das Material aus als klassische Mischelemente. Experimentelle Untersuchungen mit unterschiedlichen Schneckendesigns ergaben jedoch, dass einfache Distanzscheiben nicht ausreichten, um den für die Probenentnahme nötigen Druck zu erzeugen. Als geeignete Lösung konnten daher ausschließlich rückfördernde Schneckenelemente identifiziert werden. Für den notwendigen Druckaufbau war zudem eine Elementlänge von 24 mm erforderlich. Für die Probenentnahmezone wurden daher zwei rückfördernde Schneckenelemente mit einer Steigung von

24 mm und einer Länge von jeweils 12 mm ausgewählt. Diese Kombination konnte in der Simulation bei Verwendung des Materials 505P, einer Drehzahl von 400 U/min und einem Massendurchsatz von 10 kg/h einen Druck von 28 bar erzeugen. Das entsprechende Schneckendesign für die Probenentnahmezone ist in Abbildung 5-16 dargestellt.

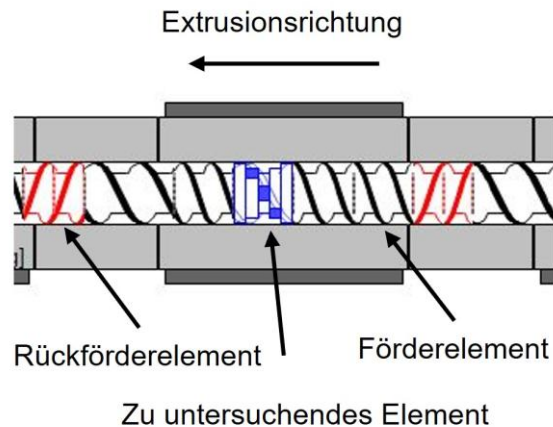


Abbildung 5-16: Darstellung der Mischkammer inklusive der Probeentnahmeplatten vor und hinter der Mischkammer sowie der in Rot dargestellten Rückförderelemente und des in Blau dargestellten KB 45/5/24 in Anlehnung an [Can24]

Aus den im Versuchsplan festgelegten Schneckenelementen ergibt sich die in Abbildung 5-17 am Beispiel des KB45 dargestellte Schneckenkonfiguration für die Mischuntersuchungen. Die weiteren verwendeten Konfigurationen sind im Anhang A1.1 aufgeführt. Dabei wurde jeweils das zu untersuchende Schneckenelement ausgetauscht und Längenunterschiede mit einem zusätzlichen Element ausgeglichen.

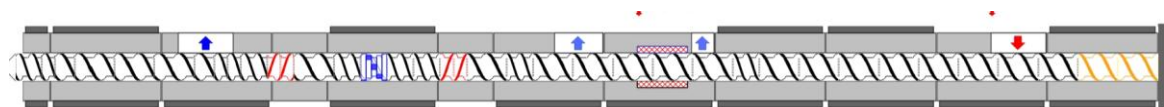


Abbildung 5-17: Schneckendesign am Beispiel des KB45 in Anlehnung an [Can24]

5.3 Methoden zur Analyse der Mischgüte (experimentell)

Für die 180 Versuchspunkte des experimentellen Versuchsplans wurden Materialproben sowohl vor als auch hinter der Mischkammer entnommen. Bei der Probenherstellung mit dem hochviskosen 505P ergab sich die in Abbildung 5-18 dargestellte Stranggeometrie.



Abbildung 5-18: Probengeometrie bei dem Material 505P

Diese Stranggeometrie bildete die Grundlage für die anschließende Probenvorbereitung zur Analyse der Mischgüte. Die einzelnen Schritte der Vorbereitung unterscheiden sich je nach Mischart und werden in den folgenden beiden Kapiteln im Detail erläutert.

5.3.1 Distributives Mischen

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Vin24].

Die Bewertung des distributiven Mischens erfolgte anhand der Grauwertverteilung geschliffener Probenquerschnitte und wurde nach Gleichung 5-17 berechnet.

$$Mq_{dist. (Exp.)} = 1 - \frac{s}{255 - \bar{x}} \quad \text{Gleichung 5-17}$$

$Mq_{dist. (Exp.)}$: Mischkennzahl distributives Mischen (experimentell)

s : Standardabweichung der Grauwertverteilung

$\bar{x}$: Mittelwert der Grauwertverteilung

Zunächst wurden die in Abbildung 5-18 gezeigten Proben in der Länge gekürzt und anschließend in einer Probenaufnahme mit Epoxidharz (EpoFix, Struers GmbH, Hannover) eingebettet. Danach erfolgte das Schleifen auf dem Probenschleifer Tegrapol-35 (Struers GmbH, Hannover), wobei als feinste Körnung ein Schleifpapier mit 2000er Körnung eingesetzt wurde, um eine möglichst glatte Oberfläche für die mikroskopische Analyse zu erhalten. Die Aufnahmen der geschliffenen Proben wurden mit einem Auflichtmikroskop (VHX-7000, Keyence Deutschland GmbH, Neu-Isenburg) hergestellt. Um konsistente Messergebnisse zu gewährleisten, wurden Beleuchtung und Weißabgleich an einer Referenzprobe eingestellt und für alle weiteren Aufnahmen übernommen. Dadurch konnte ausgeschlossen werden, dass die automatische Helligkeitsregelung die digitale Bildauswertung beeinflusst. Die Auswertung der Grauwertverteilungen erfolgte mit einem Python 3.10 Skript, das die Graustufenbilder (8-Bit) innerhalb definierter Grenzwerte analysierte. Für das 505P

wurde ein Grauwertbereich zwischen 10 und 126, für das FPH50 zwischen 10 und 195 berücksichtigt. Auf diese Weise wurden Fehlstellen, Lufteinschlüsse (vgl. Abbildung 5-19 (a)) sowie Effekte aus der digitalen Bildvorbereitung von der Bewertung der Mischgüte ausgeschlossen. Die einzelnen Verarbeitungsschritte werden in Abbildung 5-19 (a) bis (c) veranschaulicht. Ausgehend vom Originalbild (a) wird der Probenquerschnitt extrahiert und in ein Grauwertbild umgewandelt. Für die nachfolgende Analyse werden die in (c) blau markierten Bereiche (Grauwert < 10) sowie die hellgrün markierten Bereiche (Grauwert > 126 bzw. > 195) nicht berücksichtigt.

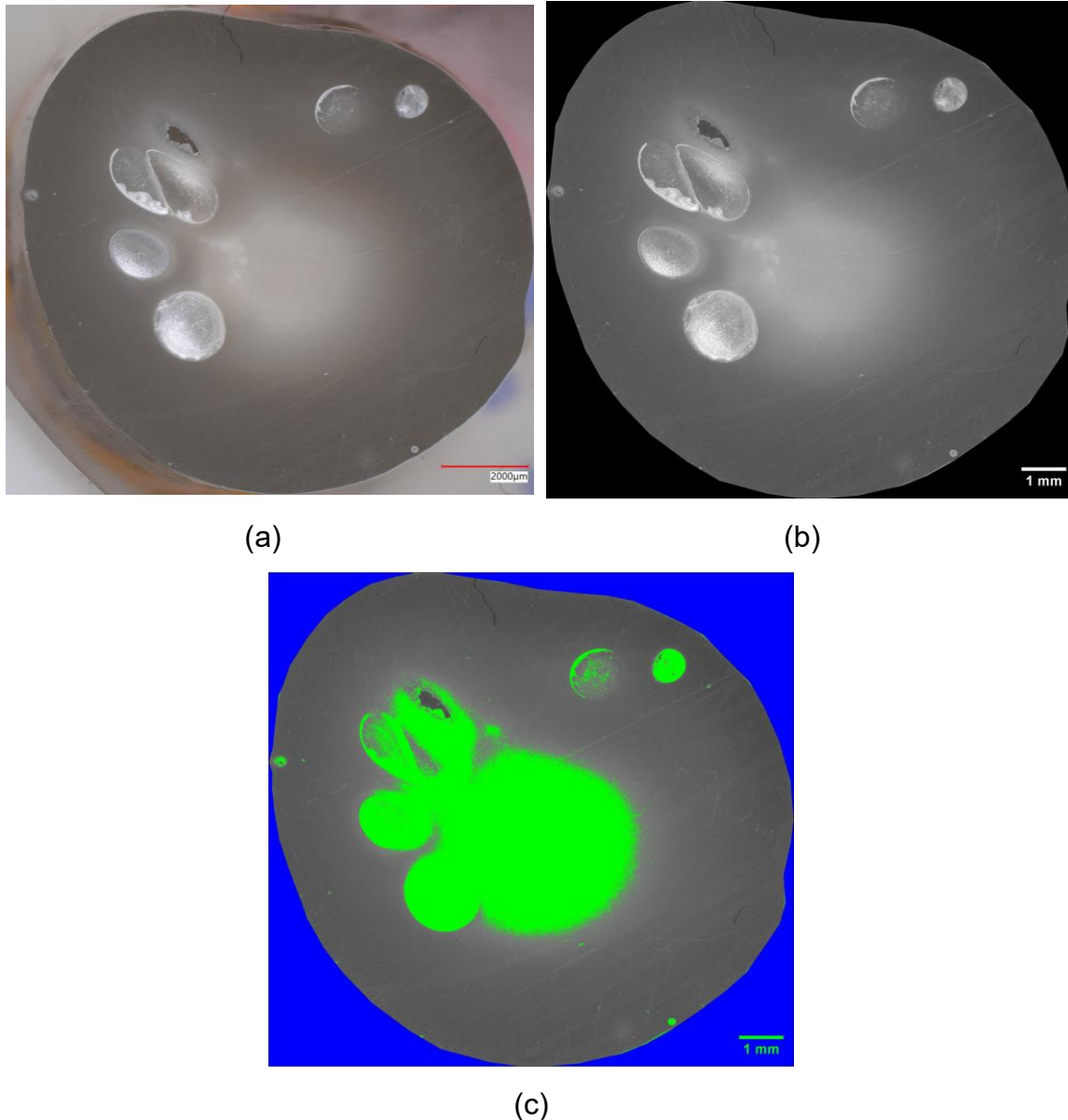


Abbildung 5-19: *Originales Farbbild des Probenquerschnitts (a), Grauwertbild des Probenquerschnitts (b) und farblich markierte Bereiche in blau und hellgrün der Grauwertbereiche, die nicht berücksichtigt wurden bei der Auswertung (c) nach [Vin24]*

5.3.2 Dispersives Mischen

Für die Auswertung des dispersiven Mischens wurde ein optisches Verfahren mit dynamischer Bildanalyse eingesetzt. Hierfür kam das QICPIC-System (QICPIC, Sympatec GmbH, Clausthal-Zellerfeld) in Kombination mit den Erweiterungen RODOS/L und VIBRI/L zum Einsatz (vgl. Abbildung 5-20). Das System erlaubt die Analyse der Partikelgrößenverteilung von Pulvern und Granulaten in einem Messbereich von 1,8 μm bis 4000 μm .



Abbildung 5-20: Verwendetes QICPIC in der Konfiguration mit dem RODOS/L und der Dosiereinheit VIBRI/L

Zur Bestimmung der Partikelgrößenverteilung musste das im Kunststoff eingebettete Talkum zunächst extrahiert werden. Hierzu wurden die Proben auf eine Masse von 15 g mit einer Toleranz von ± 1 g reduziert, indem sie mit einer Säge gekürzt wurde. Anschließend wurde die gekürzte Probe in einem Ofen der Firma Nabertherm (N 30/85HA, Nabertherm GmbH, Lilienthal) bei 450 °C zwei Stunden lang in einem Tiegel verascht. Das entstandene Pulver wurde anschließend mit einem Holzstab aus dem Tiegel entnommen und mit dem QICPIC-System analysiert. Die Gesamtsummenverteilung wurde auf Basis der gemessenen Partikelanzahl mit dem EQPC-Äquivalenzdurchmesser ausgewertet. Dieser Kennwert beschreibt den Durchmesser eines Kreises, dessen Projektionsfläche der Projektionsfläche des realen Partikels entspricht. Damit ergibt sich für ein Partikel, aus dessen Projektion die drei unterschiedlichen Durchmesser D_1 bis D_3 (vgl. Abbildung 5-21) bestimmt werden können, stets derselbe Äquivalenzdurchmesser D .

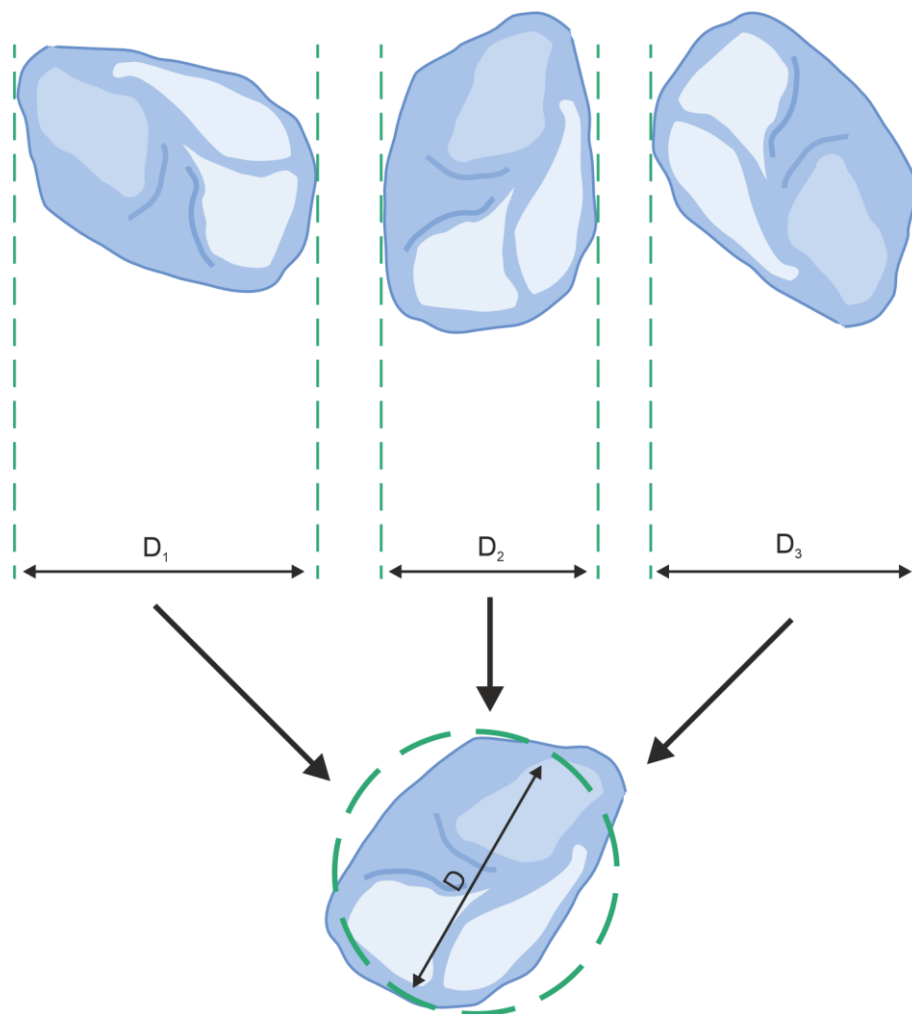


Abbildung 5-21: Schematische Darstellung der Bestimmung des Äquivalenzdurchmessers eines unregelmäßig geformten Partikels nach [Bet23-ol]

5.4 Auswertung

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Untersuchungen zur Mischgüte der experimentellen Proben präsentiert und diskutiert.

5.4.1 Distributives Mischen

Für die Bewertung des distributiven Mischens wurde die Mischkennzahl $M_{q\text{dist. (Exp.)}}$ anhand der Grauwertbilder sowohl vor als auch hinter der Mischkammer bestimmt und analysiert. Zunächst wird die distributive Mischgüte vor der Mischkammer betrachtet, da diese den Eingangszustand repräsentiert. Die Mittelwerte und Standardabweichungen für die unterschiedlichen Kombinationen aus Füllstoff und Polymer sind in Tab. 5-8 zusammengefasst. Mit dem 505P ergeben sich für alle Füllstoffe und Füllstoffgehalte nahezu konstante Werte mit einer mittleren Mischkennzahl von etwa 0,92 bei einer Standardabweichung von 0,005. Mit dem FPH50 liegen die Werte deutlich niedriger. Der Mittelwert beträgt 0,77 bei einer Standardabweichung von 0,06. Zudem unterscheiden sich bei

diesem Polymer die beiden Füllstoffvarianten. Für das M30 ergibt sich ein Mittelwert von 0,73 bei einer Standardabweichung von 0,05, während für das M05N mit demselben Streuungsmaß einen höheren Mittelwert von 0,80 erreicht.

Tab. 5-8: *Übersicht der Mittelwerte und Standardabweichungen der Mischgüte $M_{q_{dist. (Exp.)}}$ vor der Mischkammer*

Kombination		Mittelwert bei 20 / 25 / 30 Gew.-%	Standardabweichung bei 20 / 25 / 30 Gew.-%
505P	M30	0,93 / 0,92 / 0,93	0,005 / 0,003 / 0,002
	M05N	0,93 / 0,92 / 0,92	0,004 / 0,003 / 0,005
FPH50	M30	0,73 / 0,71 / 0,75	0,040 / 0,020 / 0,030
	M05N	0,78 / 0,81 / 0,82	0,040 / 0,070 / 0,050
Kombination		Mittelwert	Standardabweichung
505P		0,924	0,005
FPH50		0,770	0,060
505P & FPH50		0,840	0,090

Der Eingangszustand ist damit für alle Kombinationen aus Polymer, Füllstoff und Füllstoffgehalt weitgehend konstant. Insbesondere beim 505P treten nur sehr geringe Standardabweichungen auf. Der Eingangszustand vor der Mischkammer kann daher insgesamt als konstant betrachtet werden. In der weiteren Betrachtung stehen somit nicht die Differenzen zwischen den Werten vor und hinter der Mischkammer im Fokus, sondern ausschließlich die Mischgüte hinter der Mischkammer, da die Ausgangsmischgüte für alle Versuche identisch ist.

Im Folgenden wird die distributive Mischgüte hinter der Mischkammer betrachtet. Die Ergebnisse für die Mischkennzahl der einzelnen Schneckenelemente sind in Abbildung 5-22 dargestellt. Insgesamt liegen die Wertebereiche nahezu auf demselben Niveau, Unterschiede ergeben sich lediglich in den Mittelwerten. Das ZME erreicht mit 0,87 den höchsten, das KB12 mit 0,83 den niedrigsten Mittelwert.

Wie Abbildung 5-23 (a) zeigt, hat eine Variation der Drehzahl keinen messbaren Einfluss auf die resultierende Mischgüte. Deutlicher wirkt sich hingegen die Wahl des Talkums aus. Mit dem M05N wird im Mittel ein höherer Wert für $M_{q_{dist. (Exp.)}}$ erzielt als mit dem M30 (vgl. Abbildung 5-23 (b)).

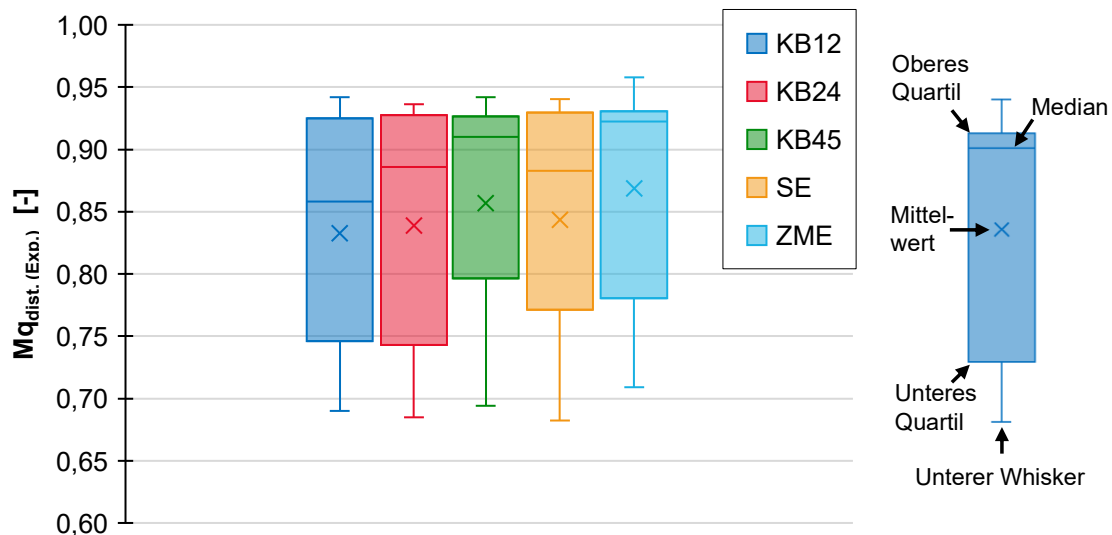


Abbildung 5-22: Visualisierung der Werte von $Mq_{dist. (Exp.)}$ für die untersuchten Schneckenelemente

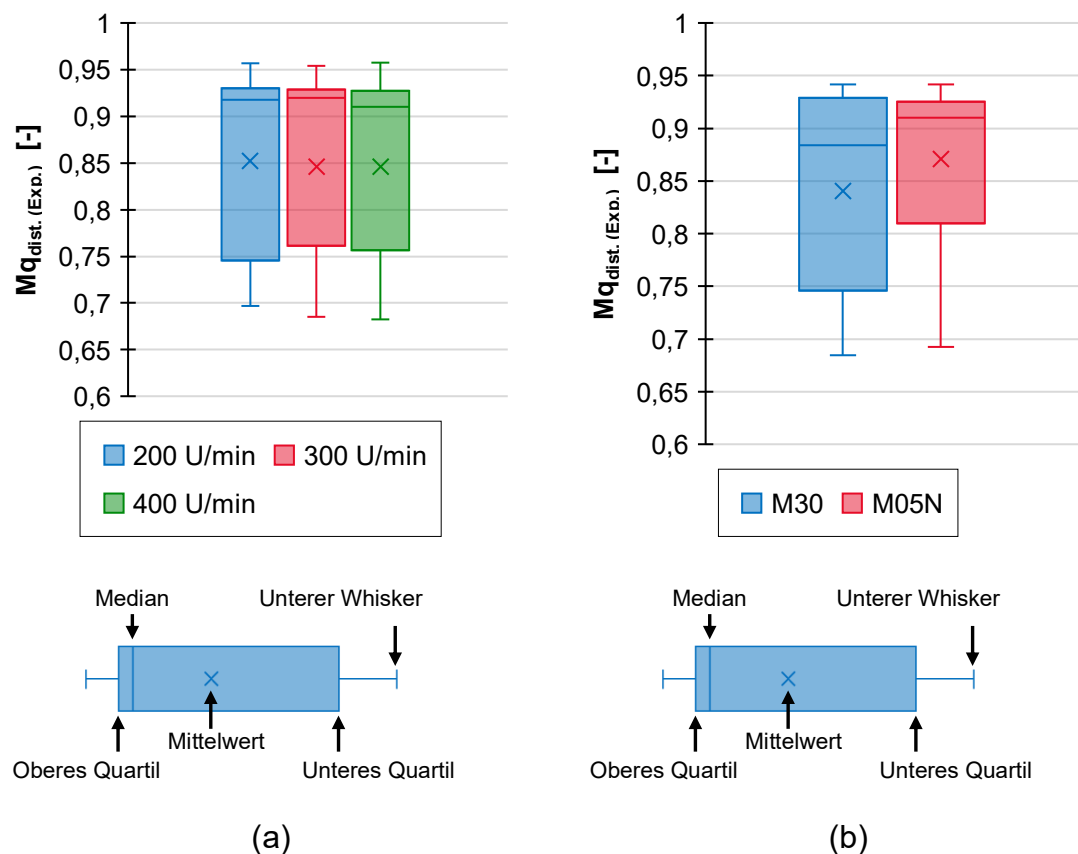


Abbildung 5-23: Abhängigkeit der Mischkennzahl $Mq_{dist. (Exp.)}$ von der Drehzahl (a) und des Füllstoffs (b)

Der Einfluss des Füllgrades auf die Mischkennzahl ist in Abbildung 5-24 dargestellt. Für den KB12 nehmen die Werte von $Mq_{dist. (Exp.)}$ mit zunehmendem Füllgrad ab, während sie beim ZME ansteigen. Ein einheitlicher Trend über alle Schneckenelemente lässt sich somit nicht erkennen.

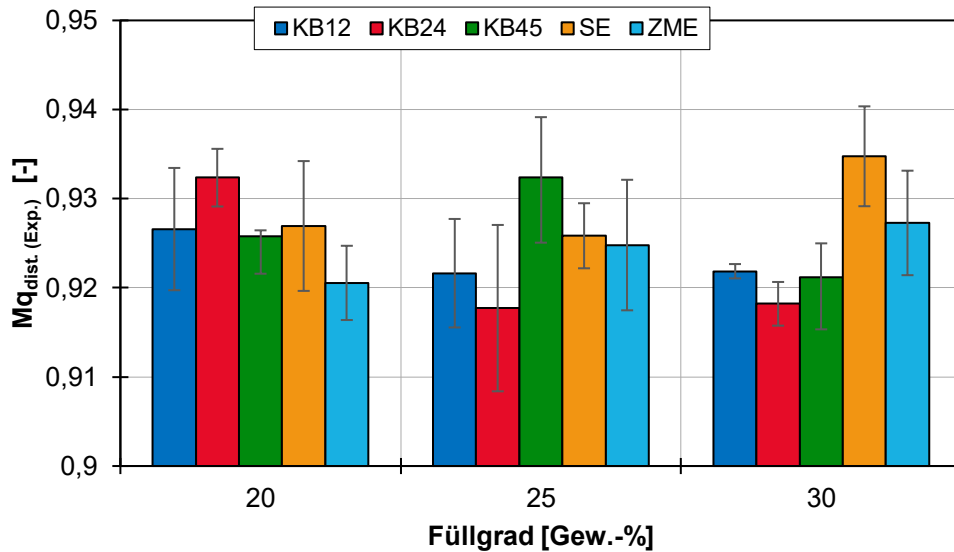


Abbildung 5-24: Abhängigkeit der Mischkennzahl $Mq_{dist. (Exp.)}$ vom Füllgrad bei dem 505P mit dem M05N

Der Wechsel des Kunststoffes führt zu den in Abbildung 5-25 visualisierten Unterschieden in den Mittelpunkten von $Mq_{dist. (Exp.)}$. Mit dem 505P wird im Durchschnitt ein Wert von 0,93 für $Mq_{dist. (Exp.)}$ erzielt wohingegen mit dem FPH50 nur ein Mittelwert von 0,78 erreicht wird. Ebenfalls ist die Standardabweichung mit dem FPH50 mehr als doppelt so groß wie mit dem 505P.

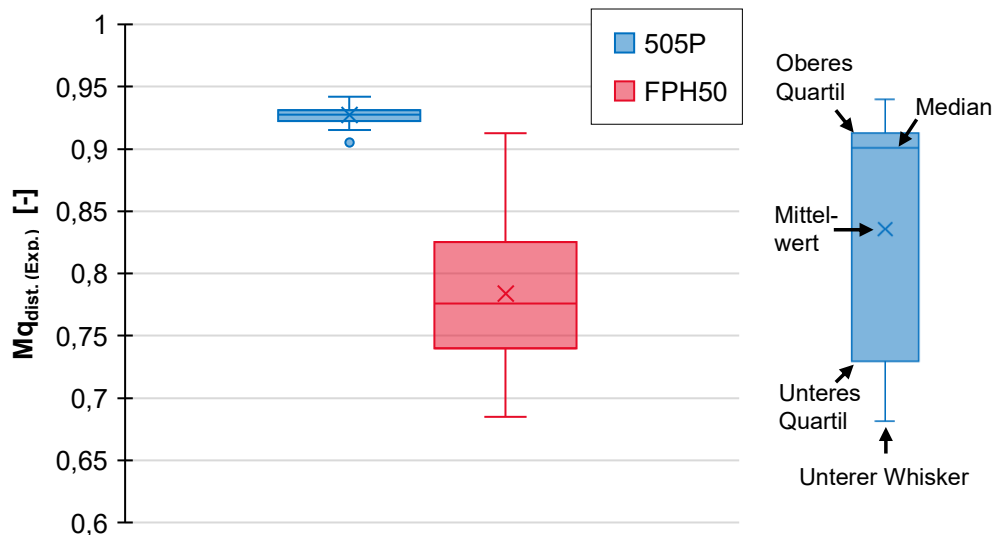


Abbildung 5-25: Abhängigkeit der Mischkennzahl $Mq_{dist. (Exp.)}$ vom verwendeten Kunststoff

Zusammenfassend zeigt sich bei der Bewertung der distributiven Mischgüte der untersuchten Schneckenelemente nur eine geringe Tendenz. Mit dem ZME und dem fördernden Knetblock KB45 werden höhere Werte für die Mischkennzahl erzielt als mit dem Fördererelement SE, während der kurze, förderneutrale Knetblock KB12 die niedrigsten Werte aufweist. Im direkten Vergleich mit dem Eingangszustand steigt die Mischkennzahl beim ZME und KB45 im Mittel um

0,025. Dieser Anstieg liegt jedoch innerhalb der Standardabweichung und ist daher nicht aussagekräftig. Ein systematischer Effekt kann nicht nachgewiesen werden; vielmehr ist von zufälligen Schwankungen auszugehen. Gleiches gilt für den Einfluss des Füllstoffs: Die Differenz zwischen M30 und M05N beträgt im Durchschnitt 0,03 und liegt damit ebenfalls innerhalb der Standardabweichung. Ein belastbarer Effekt ist somit nicht nachweisbar. Deutlicher fällt hingegen der Einfluss des Kunststoffes aus. Mit dem hochviskosen 505P wird eine durchschnittliche Mischkennzahl von etwa 0,93 erreicht, während beim niedrigviskosen FPH50 lediglich rund 0,78 resultieren. Dieser Unterschied liegt klar außerhalb der Messstreuung und weist damit auf einen tatsächlichen Materialeinfluss hin. Für die Drehzahl konnte hingegen kein signifikanter Einfluss festgestellt werden. Die beobachteten Abweichungen bleiben innerhalb der Standardabweichung und lassen keine systematische Abhängigkeit erkennen. Diese Erkenntnis lässt vermuten, dass die divergierenden Werte für die Mischkennzahl des 505P und FPH50 nicht auf den Unterschied in der Viskosität zurückzuführen sind. Denn mit zunehmender Drehzahl nimmt die Viskosität ab, was bedeutet, dass das 505P bei 400 U/min eine vergleichbare Viskosität wie das FPH50 bei 200 U/min aufweist.

5.4.2 Dispersives Mischen

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Kab25].

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Auswertung der experimentellen Proben im Hinblick auf das dispersive Mischen vorgestellt. Zunächst wird der Einfluss der Probenvorbereitung auf die Messgröße, den Äquivalenten Kreisdurchmesser, untersucht. Dieser Einfluss ist in Abbildung 5-26 exemplarisch für das Talkum M30 dargestellt.

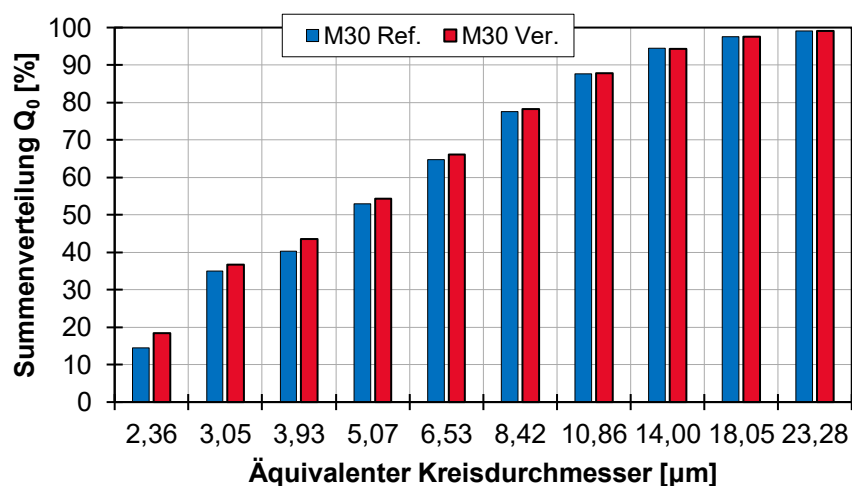


Abbildung 5-26: Einfluss des Veraschens auf die Partikelgrößenverteilung nach [Kab25]

Beim Vergleich des unverarbeiteten Referenzmaterials (M30 Ref.) mit dem veraschten Material (M30 Ver.) zeigen die kumulativen Verläufe ein nahezu identisches Verhalten. Lediglich im unteren Größenbereich bis etwa 4 µm liegt das veraschte Material geringfügig oberhalb des Referenzverlaufs. Ab etwa 5 µm verlaufen beide Kurven nahezu parallel und stimmen ab etwa 10 µm vollständig überein. Der Veraschungsprozess hat somit keinen systematischen Einfluss auf die Partikelgrößenverteilung.

Wie bereits beim distributiven Mischen wurde auch für das dispersive Mischen zunächst der Ausgangszustand der Partikelgrößenverteilung vor der Mischkammer untersucht. Hierfür wurden die Mittelwerte und Standardabweichungen des D50 der äquivalenten Kreisdurchmesser ermittelt und in Tab. 5-9 aufgeführt. Die D50-Werte beider Füllstoffe liegen bei allen drei untersuchten Füllgraden eng beieinander und zeigen lediglich geringe Abweichungen innerhalb der jeweiligen Standardabweichungen. Für das M30 wurde ein Mittelwert von 4,54 µm bei einer Standardabweichung von 0,06 ermittelt, für das M05N ein Mittelwert von 3,70 µm mit einer Standardabweichung von 0,09. Damit ergeben sich keine wesentlichen Unterschiede zwischen den Ausgangswerten, sodass von einem einheitlichen Ausgangszustand vor Eintritt in die Mischkammer ausgegangen werden kann.

Tab. 5-9: Mittelwerte und Standardabweichung des D50 vor der Mischkammer nach [Kab25]

Füllstoff	Füllgrad [%]	Mittelwert [µm]	Standardabweichung [µm]
M30	20	4,57	0,06
	25	4,53	0,05
	30	4,53	0,06
M05N	20	3,71	0,06
	25	3,73	0,10
	30	3,68	0,11
M30		4,54	0,06
M05N		3,70	0,09

Die Partikelgrößenverteilungen des dem Füllstoffs M05N mit dem Material FPH50 bei einer Drehzahl von 400 U/min und einem Füllstoffanteil von 30 Gew.-% sind in Abbildung 5-27 dargestellt. Für die unterschiedlichen Schneckenelemente zeigen sich nahezu identische Verläufe. Ab einer Partikelgröße von etwa 2,3 µm steigen alle Verteilungen bis rund 6 µm steil an. In diesem Bereich treten lediglich geringe Abweichungen von maximal einem Prozentpunkt auf, wobei die ZME-Konfiguration tendenziell geringfügig höhere Werte erreicht. Oberhalb von 8 µm verlaufen die Kurven praktisch deckungsgleich und ab etwa 14 µm erreichen alle Verteilungen das Maximum der Summenverteilung. Die dargestellten Ergebnisse verdeutlichen, dass unabhängig vom eingesetzten Schneckenelement keine signifikanten Unterschiede in der Partikelgrößenverteilung bestehen. Dieses

Ergebnis konnte ebenso für die weiteren untersuchten Messpunkte bestätigt werden. Darüber hinaus zeigt sich, dass auch die Variation der eingesetzten Kunststoffe, der Drehzahlen sowie der Füllstoffanteile keinen systematischen Einfluss auf die Partikelgrößenverteilung hat. Die entsprechenden Abbildungen dieser Parameterstudien sind der Vollständigkeit halber im Anhang A1.2 aufgeführt.

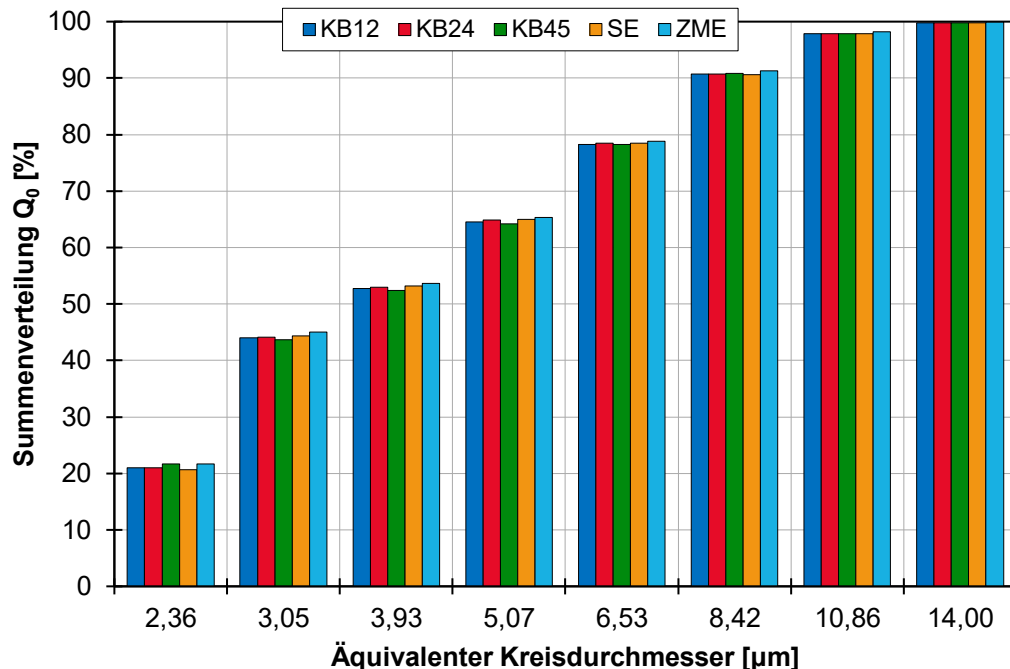
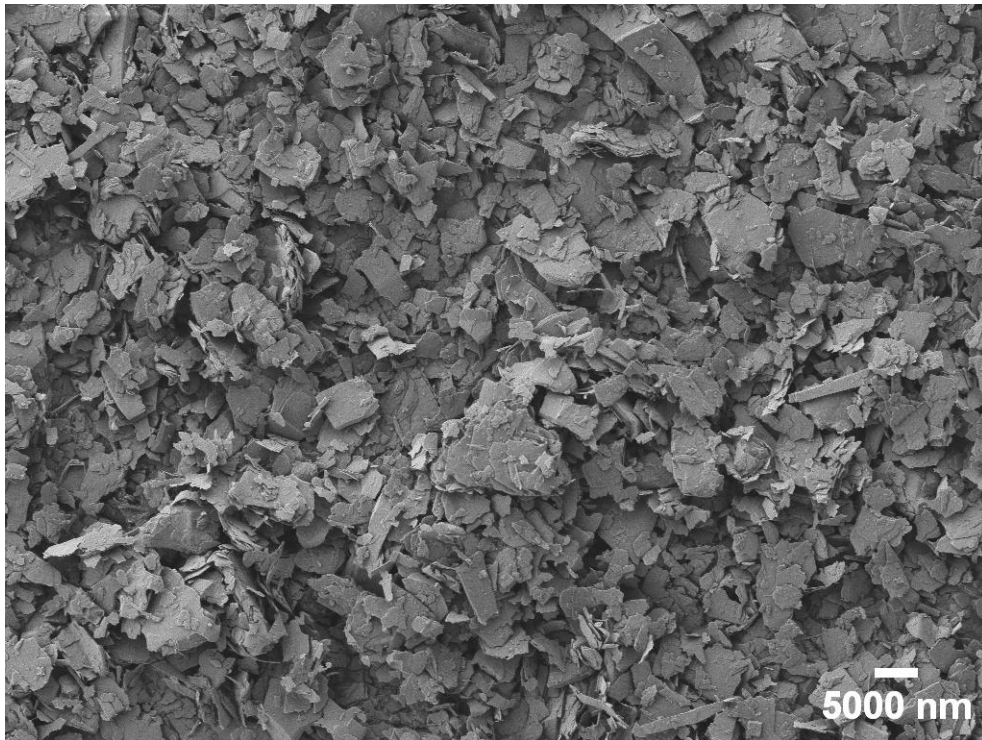
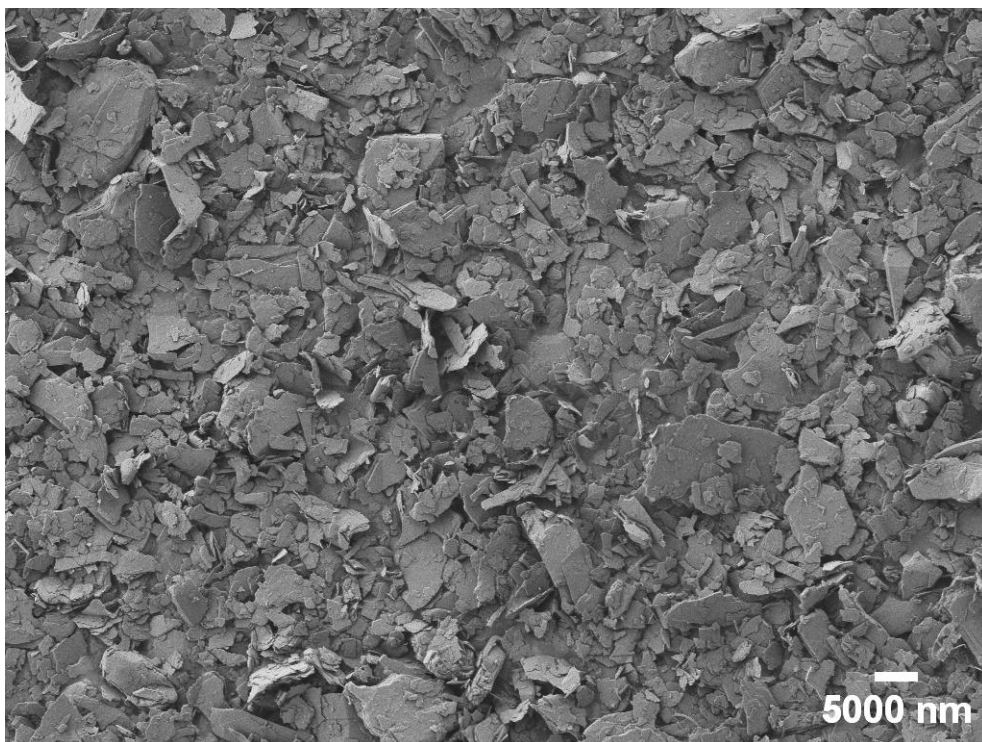


Abbildung 5-27: Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit der Schneckenelemente für das Talkum M05N mit dem Material FPH50 bei 400 U/min und einem Füllstoffanteil von 30 Gew.-% nach [Kab25]

Zur Überprüfung dieser Annahme wurden Rasterelektronenmikroskop Aufnahmen der verarbeiteten Talkumpulver erstellt und ausgewertet. In Abbildung 5-28 (a) und (b) werden die Talkumpartikel des M05N bei einer 1000-fachen Vergrößerung dargestellt. Die Proben wurden jeweils bei einer Drehzahl von 400 U/min mit dem Kunststoff FPH50 und einem Füllstoffanteil von 30 Gew.-% verarbeitet. In Abbildung 5-28 (a) sind die Partikel bei der Konfiguration mit dem KB45 dargestellt, in Abbildung 5-28 (b) die mit dem ZME. Ein direkter Vergleich der beiden Aufnahmen zeigt keine erkennbaren Unterschiede hinsichtlich Gestalt oder Verteilung der Partikel.



(a)

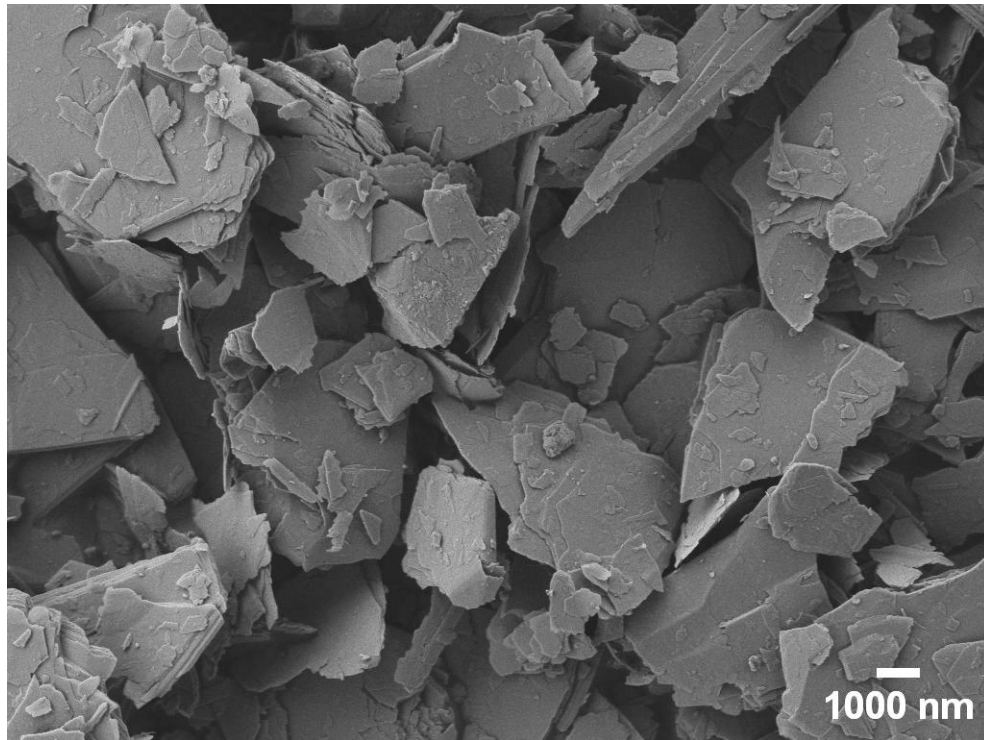


(b)

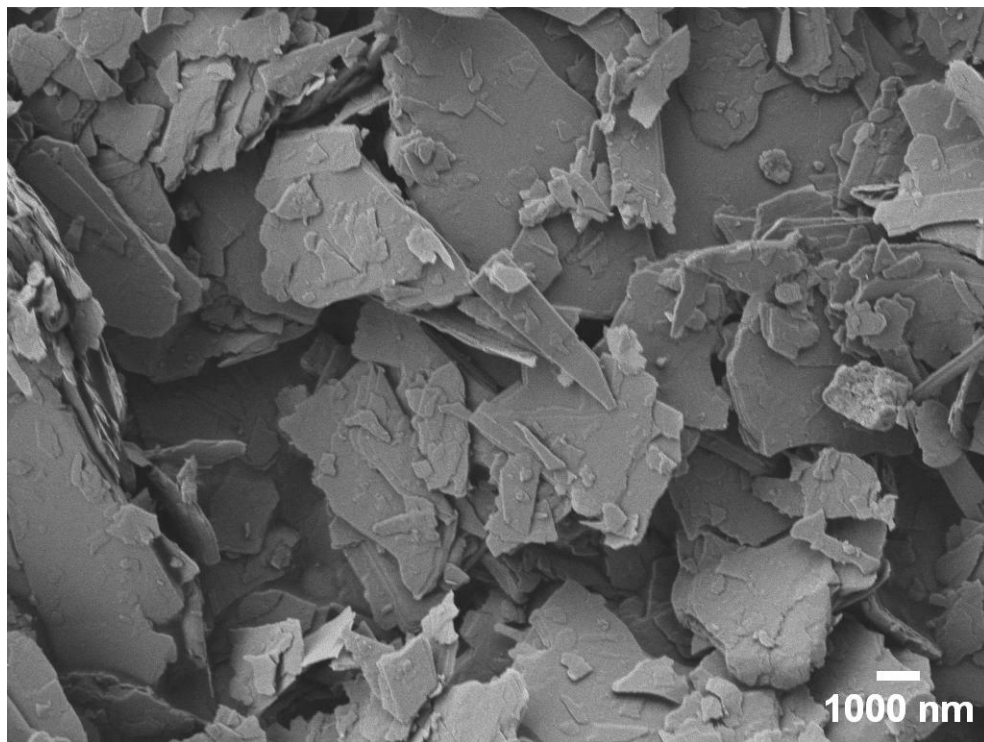
Abbildung 5-28: 1000-Fache Vergrößerung des Talkums nach der Verarbeitung mit dem KB45 (a) und ZME (b)

Auch bei einer 5000-fachen Vergrößerung, wie in Abbildung 5-29 (a) bis (e) dargestellt, zeigen sich keine signifikanten Unterschiede in Partikelform oder -größe. Unabhängig davon, ob das SE (a), der KB12 (b), der KB24 (c), der KB45 (d)

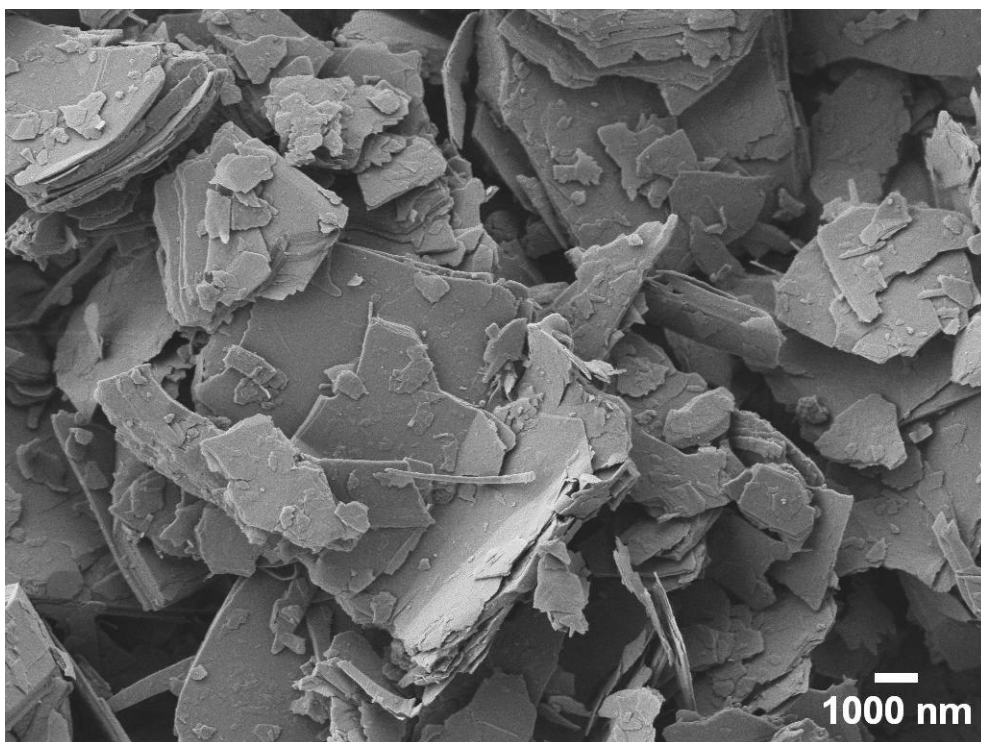
oder das ZME (e) verwendet wurde, bleibt die Partikelgrößenverteilung unverändert. Damit bestätigt sich auch auf mikroskopischer Ebene, dass die Wahl des Schneckenelements keinen relevanten Einfluss auf die Morphologie des Füllstoffs ausübt.



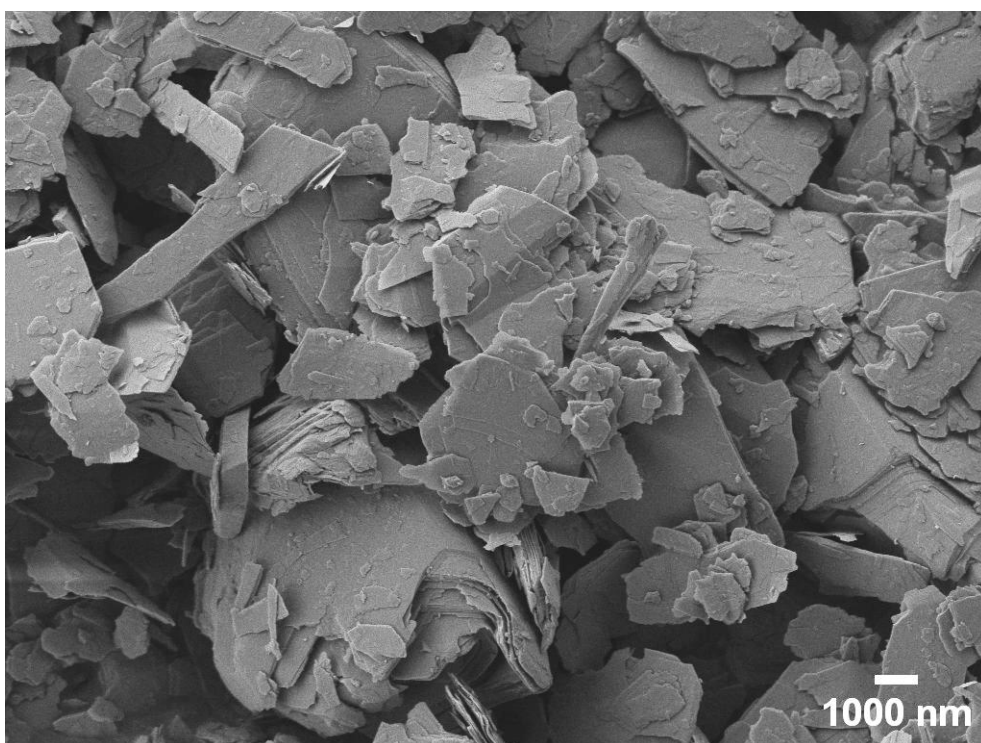
(a)



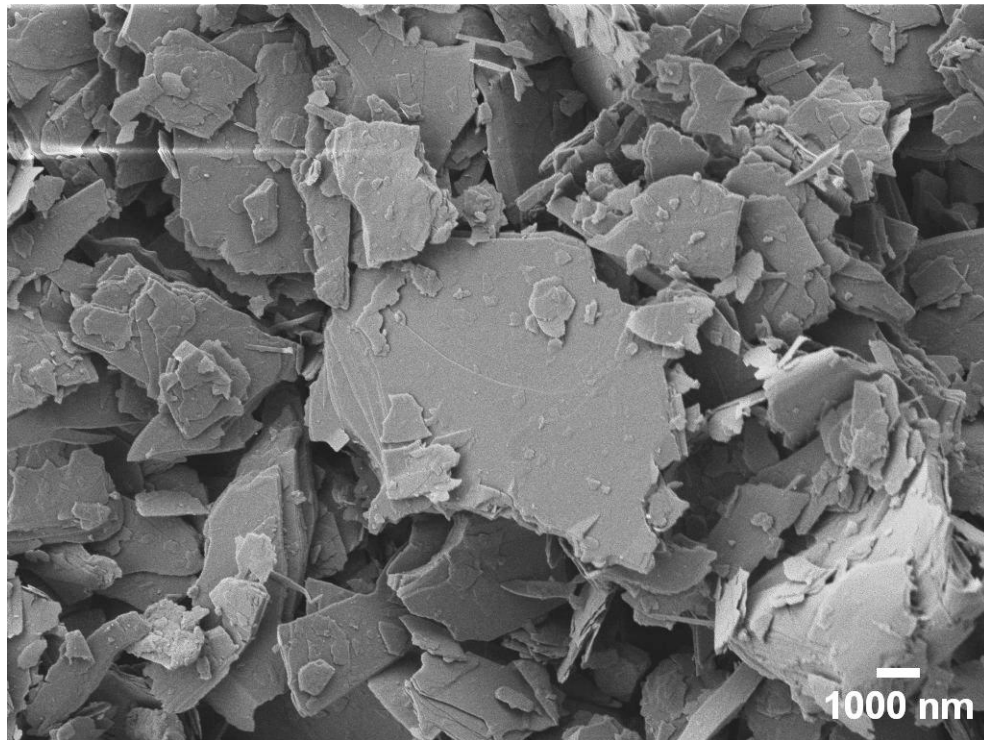
(b)



(c)



(d)



(e)

Abbildung 5-29: 5000-Fache Vergrößerung des Talkums nach der Verarbeitung mit dem SE (a), KB12 (b), KB24 (c), KB45 (d) und ZME (e)

Die Untersuchungen zur Partikelgrößenverteilung im Rahmen des dispersiven Mischens zeigen insgesamt einen einheitlichen Ausgangszustand. Weder die Probenvorbereitung (Veraschung) noch die Variation von Füllstoffen, Füllstoffanteilen, Drehzahlen oder eingesetzten Schneckenelementen führte zu erkennbaren Unterschieden. Die Verteilungen verlaufen in allen Fällen nahezu deckungsgleich und die geringen Abweichungen liegen innerhalb der Messstreuung. Die ergänzend angefertigten REM-Aufnahmen bestätigen dieses Ergebnis auch auf mikroskopischer Ebene. Unterschiede in Form oder Größe der Talkumpartikel in Abhängigkeit von den eingesetzten Schneckenelementen sind nicht erkennbar.

6 Korrelation der simulativen und experimentell bestimmten Mischgütembewertung

Die in diesem Kapitel enthaltenen Ausführungen beruhen zum Teil auf Ergebnissen aus studentischen Arbeiten [Wil24].

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der simulativ und experimentell bestimmten Mischgüte der ZSK25 gegenübergestellt, um die Korrelation zwischen beiden Ansätzen zu ermitteln und zu interpretieren.

In Abbildung 6-1 werden die experimentell ermittelten Werte von $Mq_{\text{dist. (Exp.)}}$ für das distributive Mischen in Abhängigkeit von den simulierten Werten $Mq_{\text{dist. (Sim.)}}$ visualisiert. Die experimentellen Ergebnisse aller Schneckenelemente liegen überwiegend im Bereich von 0,70 bis 0,95, während die simulierten Werte auf der x-Achse zwischen etwa 0,30 und 0,80 variieren, mit einer Häufung im Bereich 0,60 bis 0,80. Die Messwerte der verschiedenen Schneckenelemente (KB12, KB24, KB45, SE, ZME) überlappen weitgehend, sodass keine klar voneinander trennbaren Gruppen erkennbar sind. Eine deutliche Korrelation zwischen Simulation und Experiment kann nicht festgestellt werden.

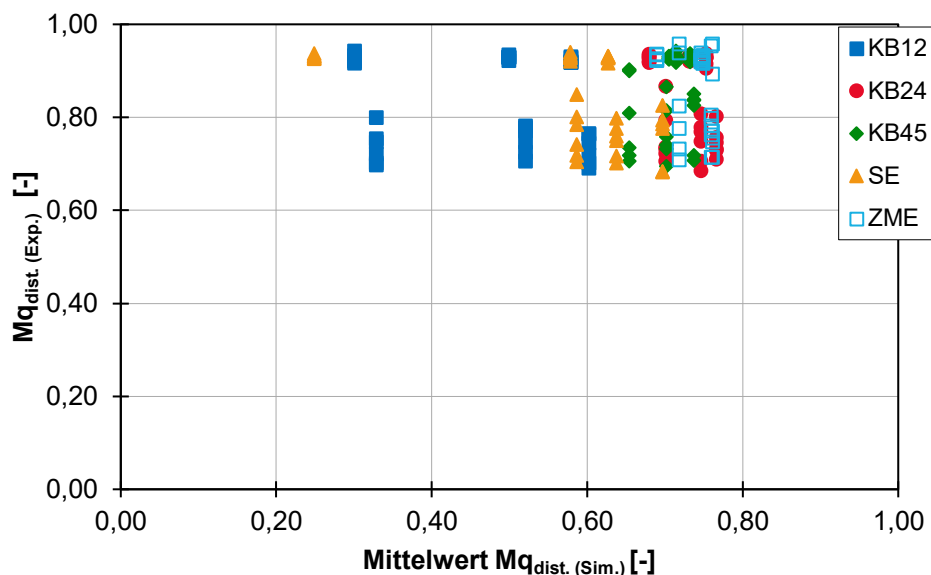


Abbildung 6-1: Diagramm für das distributive Mischen auf der ZSK25 mit den experimentell bestimmten Werten von $Mq_{\text{dist. (Exp.)}}$ in Abhängigkeit der Mittelwerte von $Mq_{\text{dist. (Sim.)}}$ aus der Simulation

In Abbildung 6-2 ist der Zusammenhang zwischen den simulierten Mischkennzahlen $Mq_{\text{disp. (Sim. max)}}$ für den Fall „Bruch“ und den experimentell bestimmten mittleren Partikelgrößen D_{50} der äquivalenten Kreisdurchmesser dargestellt. Zwei Bereiche von Datenpunkten sind erkennbar. Der erste im Bereich von $D_{50} \approx 3,6 \mu\text{m}$ (M05N) und ein weiterer bei $D_{50} \approx 4,5 \mu\text{m}$ (M30). Die simulierten Mischkennzahlen $Mq_{\text{disp. (Sim. max)}}$ variieren dabei vorwiegend zwischen 0,6 und 0,9. Innerhalb beider Bereiche sind Datenpunkte aller untersuchten Schneckenelemente enthalten, wobei eine starke Überlappung zwischen den einzelnen Konfigurationen auftritt. Die Ergebnisse zeigen, dass kein eindeutiger

Zusammenhang zwischen den simulierten Mischkennzahlen und den experimentellen D_{50} -Werten besteht.

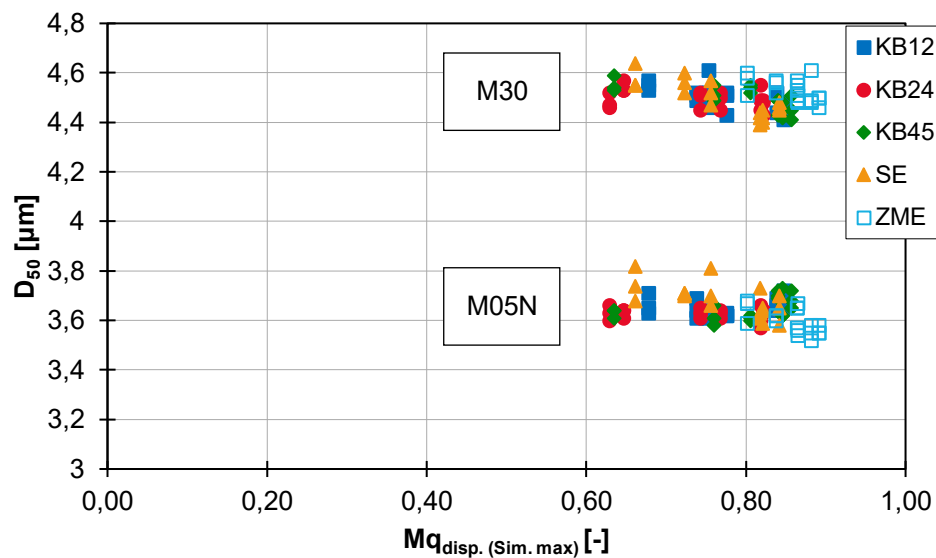


Abbildung 6-2: Diagramm für das dispersive Mischen für den Fall „Bruch“ mit den experimentell bestimmten Werten für D_{50} von beiden Talkum Varianten in Abhängigkeit der Mittelwerte von $Mq_{disp. (Sim. max)}$ aus der Simulation

Die Werte der Mischkennzahl $Mq_{disp. (Sim. Int)}$ sind in Abbildung 6-3 den experimentell bestimmten mittleren Partikelgrößen D_{50} für den Fall der Erosion gegenübergestellt. Die Datenpunkte ordnen sich auch hier wieder in die zwei Bereiche aus Abbildung 6-2 ein. Die Werte der Mischkennzahlen aus der Simulation reichen dabei von 0,05 bis 0,65. Unterschiede zwischen den verschiedenen Schneckenelementen sind nicht klar erkennbar, da sich die Datenpunkte stark überlagern. Somit zeigen die Ergebnisse, dass auch bei dem Fall der „Erosion“ kein eindeutiger Zusammenhang zwischen den Mischkennzahlen der Simulation und den experimentellen D_{50} -Werten besteht.

Sowohl für das distributive Mischen als auch für das dispersive Mischen konnte keine Korrelation für die Bewertung der experimentell und simulativ ermittelten Mischgüte erzielt werden.

Ein direkter Vergleich der Randbedingungen zwischen Simulation und experimentellen Untersuchungen liefert eine Erklärung für die ausbleibende Korrelation beim distributiven Mischen. In der Simulation wird von einer schlechten Anfangsverteilung ausgegangen, die idealisiert über zwei Punktquellen eingebracht wird. In der Realität erfolgt die Zudosierung über eine Seitendosierung, die aufgrund der Entgasungszone mit einem gewissen Abstand vor der Mischkammer platziert wurde, sodass das Material bereits auf dem Weg von 6D zur Mischkammer teilweise homogenisiert wird.

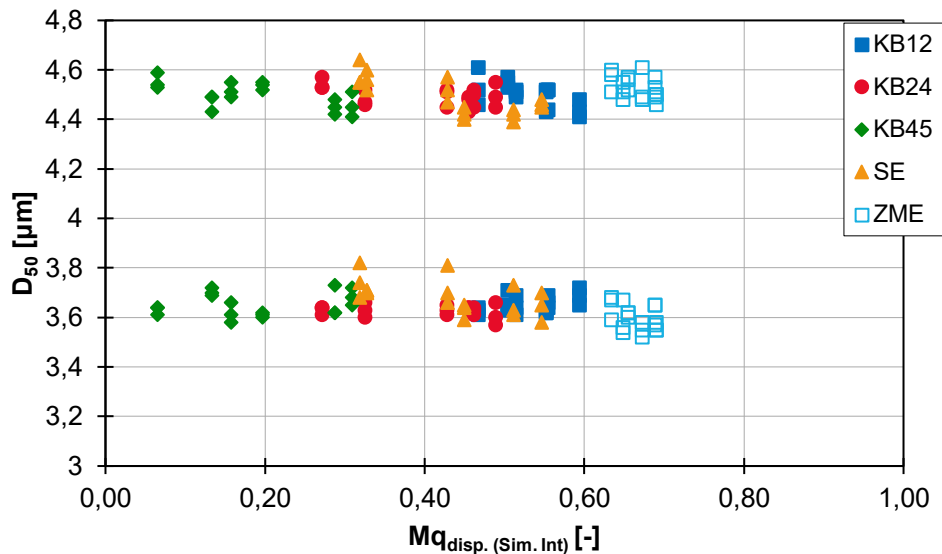


Abbildung 6-3: Diagramm für das dispersive Mischen für den Fall „Erosion“ mit den experimentell bestimmten Werten des D_{50} von beiden Talkum Varianten in Abhängigkeit der Mittelwerte von $Mq_{disp.}$ (Sim. Int) aus der Simulation

Dieser Effekt wird zusätzlich durch den Einsatz eines vorgeschalteten Rückförderelements vor der Mischkammer verstärkt. Folglich können die experimentellen Ergebnisse keine so ausgeprägten Tendenzen aufweisen, wie sie in den Simulationen sichtbar werden. Dennoch zeigt sich, dass in beiden Fällen das ZME die beste Mischgüte erzielt. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die Simulation nicht die tatsächlichen Versuchsbedingungen abbildet, sondern vielmehr das theoretische Potenzial für eine Verbesserung widerspiegelt. Ist der Eingangszustand sehr inhomogen, lassen sich große Verbesserungen erreichen; ist dieser dagegen bereits homogener, verringert sich zwangsläufig die Differenz zwischen Eingangs- und resultierender Mischgüte.

Der direkte Vergleich von notwendiger und tatsächlich auftretender Schubspannung liefert eine Erklärung für die fehlende Korrelation beim dispersiven Mischen. Die Analyse zeigt, dass die in den Simulationen ermittelten mittleren Schubspannungen mit Werten zwischen $5,6 \times 10^4$ Pa und $1,27 \times 10^5$ Pa (vgl. Tab. 6-2) deutlich unter den für eine Agglomeratzerteilung erforderlichen Zugfestigkeiten der Talkumpartikel liegen, die im Bereich von 10^7 Pa angesiedelt sind (vgl. Tab. 6-1). Auch wenn es sich hierbei um eine grobe Abschätzung handelt, verdeutlicht sie die erhebliche Differenz zwischen den auftretenden und den notwendigen Werten. Unter den gegebenen Prozessbedingungen kann daher kein dispersives Mischen stattfinden. Die Simulation bildet in diesem Fall lediglich ein potenzielles Verbesserungsszenario ab, ohne den materialabhängigen Schwellenwert für eine tatsächliche Zerteilung zu berücksichtigen.

Tab. 6-1: *Ergebnisse der Berechnung der Zugfestigkeit von Talkum [Wil24]*

Mikroskopische Theorie nach Hamaker		Zugfestigkeit σ_z [MPa]	
Kontaktabstand		M05N	M30
Minimum/0,1 V		18,56	16,64
Mittelwert/0,3 V		18,05	16,17
Gr. Anziehungskraft/0,5 V		18,88	16,89
Maximum/0,7 V		9,39	8,40
Makroskopische Theorie nach Lifshitz		Zugfestigkeit σ_z [MPa]	
Kontaktabstand		M05N	M30
Minimum/0,1 V		18,18	16,31
Mittelwert/0,3 V		15,59	13,98
Gr. Anziehungskraft/0,5 V		13,64	12,23
Maximum/0,7 V		6,82	6,11

Tab. 6-2: *Mittelwerte der auftretenden Schubspannung aus den 3D CFD-Strömungssimulationen bei 400 U/min*

Schneckenelemente	Mittelwert der Schubspannung [MPa]
KB12	0,06
KB24	0,11
KB45	0,11
SE	0,13
ZME	0,08

7 Zusammenfassung

Der Doppelschneckenextruder zeichnet sich durch seine hohe Flexibilität in der Zylinder- und Schneckenkonfiguration aus und wird daher in der Compoundierung für zahlreiche Anwendungen eingesetzt. Bei der Zugabe von Zuschlagstoffen ist eine möglichst homogene Einmischung in die Schmelze anzustreben. In Abhängigkeit des spezifischen Anwendungsfalls können sowohl distributive als auch dispersive Mischmechanismen eine signifikante Rolle spielen. Die Mischwirkung wird maßgeblich durch die implementierten Schneckenelemente beeinflusst, die in einer Vielzahl unterschiedlicher Geometrien zur Verfügung stehen. Da es an einheitlichen Bewertungsmethoden für die Mischeigenschaften mangelt, erfolgt die Selektion dieser Elemente bislang überwiegend auf Grundlage von Erfahrungswerten. Dies kann jedoch dazu führen, dass die Mischung der Compounds nicht optimal ist oder das neue Schneckenelementgeometrien nicht genutzt werden, da ihr Nutzen nicht ausreichend charakterisiert ist.

Ziel dieser Arbeit ist es, die distributive und dispersive Mischwirkung ausgewählter Schneckenelemente zu bewerten. Zu diesem Zweck wurden zunächst geeignete Auswertungsmethodiken entwickelt. Im Anschluss erfolgte die Bewertung der Mischwirkung auf Basis von 3D CFD-Strömungssimulationen mit Partikelverfolgung. Die Auswertung dieser Strömungssimulationen wurde automatisiert mithilfe eigens entwickelter Python-Skripte durchgeführt. Zur Validierung dieser Simulationsergebnisse wurden ergänzende experimentelle Untersuchungen durchgeführt.

In Kapitel 4 wird die Bewertung der Mischwirkung anhand von 3D CFD-Simulationen mit nachgeschalteter Partikelverfolgung vorgenommen. Die Vorgehensweise wird zunächst in Unterkapitel 4.2 erläutert, wobei insbesondere der Aufbau der Simulationen sowie die verwendeten Geometrien der Doppelschneckenextruder (ZSK25 und ZE28), Schneckenelemente (KB12, KB24, KB45, SE und ZME) und Materialien (Sabic PP FPH50 und Sabic PP 505P) thematisiert werden. Die Auswertungsmethoden werden in Unterkapitel 4.3 detailliert dargestellt. Für das distributive Mischen wurde eine in Anlehnung an Frank entwickelte Mischkennzahl eingeführt. In der vorliegenden Untersuchung wird die Standardabweichung und der Mittelwert der Dreiecksflächeninhalte, die aus der Delaunay-Triangulation der Partikelverteilungen resultieren, in einer Auswertungsebene hinter den Schneckenelementen miteinander in Beziehung gesetzt. Für das dispersive Mischen wurden zwei Szenarien berücksichtigt:

- Für Bruchmechanismen wurde die maximale Schubspannung der Partikel entlang der Partikelpfade ermittelt und die Verteilung dieser maximalen Schubspannungen analysiert.
- Für Erosionsmechanismen erfolgte die Bewertung auf Grundlage der Verteilung der Integrale der Schubspannung über die jeweilige Verweilzeit der Partikel auf den Partikelpfaden.

Die Ergebnisse der Untersuchung legen nahe, dass die Mischwirkung in hohem Maße von der Elementgeometrie abhängt. Für das distributive Mischen wurden durch den Knetblock KB24 (förderneutral, lang), den Knetblock KB45 (fördernd, lang) sowie das Mischelement ZME (rückförderndes Mischelement, lang) tendenziell bessere Partikelverteilungen erzielt als durch das Förderelement SE (fördernd, lang) und den kurzen Knetblock KB12 (förderneutral, kurz). Darüber

hinaus konnte in den Simulationen eine signifikante Korrelation zwischen der Drehzahl und der Mischwirkung nachgewiesen werden, wobei eine höhere Drehzahl zu einer verbesserten Mischwirkung führt. Die resultierende Bewertung der Schneckenelemente für das distributive Mischen gemäß dem Kennwert $M_{q\text{dist. (Sim.)}}$ lautete:

- ZME: 0,76
- KB24: 0,75
- KB45: 0,72
- SE: 0,59
- KB12: 0,58

Ein vergleichbares Ergebnis wurde bei der Bewertung des dispersiven Mischens erzielt. Es konnte erneut eine signifikante Abhängigkeit von der Schneckenelementgeometrie festgestellt werden. Zwar führten eine höhere Drehzahl sowie eine erhöhte Materialviskosität zu größeren Schubspannungen bzw. höheren Integralen, jedoch nicht zwangsläufig zu einer höheren Mischkennzahl für das disperse Mischen. Die Auswertung der Schneckenelemente hinsichtlich der durchschnittlichen dispersiven Mischwirkung in den Simulationen mit $M_{q\text{disp. (Sim.)}}$ ergab folgende Reihenfolge:

- ZME: 0,62 (Max. 0,60; Int. 0,63)
- KB12: 0,54 (Max. 0,56; Int. 0,52)
- KB24: 0,41 (Max. 0,43; Int. 0,39)
- SE: 0,32 (Max. 0,37; Int. 0,27)
- KB45: 0,27 (Max. 0,38; Int. 0,15)

Dabei beschreibt „Max.“ die Bewertung des dispersiven Mischens auf Basis der maximalen Schubspannungen entlang der Partikelbahnen (Bruchmechanismus). „Int.“ hingegen beschreibt die Bewertung des dispersiven Mischens auf Grundlage des Integrals der Schubspannungen über die jeweilige Verweilzeit der Partikel (Erosionsmechanismus).

Im Kapitel 5 werden die experimentellen Validierungen der Simulationsergebnisse dargestellt. Zu diesem Zweck wurde ein spezifischer Versuchsaufbau konzipiert. Im Rahmen des Experiments wurde zunächst in einem Einschneckenextruder Polypropylen (PP) aufgeschmolzen, während im nachgeschalteten Doppelschneckenextruder ausschließlich das Zudosieren und Mischen des Füllstoffs (Talkum) stattfand. Im Rahmen der Analyse wurden Materialproben sowohl vor als auch hinter der Mischzone entnommen und untersucht. Die Bewertung des distributiven Mischens erfolgte anhand von Grauwertverteilungen, die von geschliffenen Probenquerschnitten ermittelt wurden. Dabei konnte der Einfluss der Schneckengeometrie nur in geringem Maße bestätigt werden, was auf den besonderen Versuchsaufbau zurückzuführen ist, der bereits vor der eigentlichen Mischzone distributive Vorgänge zulässt. Zur Bewertung des dispersiven Mischens wurde die Partikelgrößenverteilung des verarbeiteten Talkumpulvers mithilfe der dynamischen Bildanalyse mit einem QICPIC untersucht. Es konnte festgestellt werden, dass die verwendeten Füllstoffe nicht dispersiv gemischt werden konnten. Diese Hypothese wurde durch

Referenzaufnahmen mit einem REM bestätigt. Zudem ergaben Vergleiche zwischen den notwendigen und den tatsächlich auftretenden Schubspannungen, dass letztere deutlich unterhalb der für eine Zerkleinerung der Partikelagglomerate erforderlichen Werte lagen.

In Kapitel 6 wurde schließlich die Korrelation der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Befunden analysiert. Dabei zeigte sich, dass mit den Simulationen zwar das Mischpotenzial der Schneckenelemente zuverlässig charakterisiert werden kann, die tatsächliche Mischwirkung in der Praxis jedoch von zahlreichen weiteren Faktoren abhängt. Hierzu zählen insbesondere Art, Größe und Form der Füllstoffpartikel sowie der Mischungszustand vor dem betrachteten Schneckenelement.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die vorliegenden Simulationen eine charakteristische Bewertung des Mischpotenzials einzelner Schneckenelemente unter konstanten Randbedingungen ermöglichen. Dies stellt eine wertvolle Grundlage zur Auswahl geeigneter Schneckenelemente dar. Gerade beim dispersiven Mischen ist jedoch zu berücksichtigen, ob die eingesetzten Materialien überhaupt die Möglichkeit zur Zerlegung bieten, da die Mischwirkung hier stark vom Materialsystem abhängig ist.

8 Literaturverzeichnis

- [ALA04] ALSTEENS, B.; LEGAT, V.; AVALOSSE, T.: Parametric Study of the Mixing Efficiency in a Kneading Block Section of a Twin-screw Extruder. *International Polymer Processing*, (19)3, 2004, S. 207–217, 10.3139/217.1836
- [All03] ALLEN, T.: Powder sampling and particle size determination. Elsevier, Amsterdam, 2003
- [AMK04] ALEMASKIN, K.; MANAS-ZLOCZOWER, I.; KAUFMAN, M.: Index for Simultaneous Dispersive and Distributive Mixing Characterization in Processing Equipment. *International Polymer Processing*, (19)4, 2004, S. 327–334, 10.3139/217.1843
- [Ans-ol] ANSYS: Ansys Rocky Simulationssoftware für Teilchendynamik. Unter: <https://www.ansys.com/de-de/products/fluids/ansys-rocky#tab1-2>, zuletzt aufgerufen am 3. Juni 2025
- [BBO+13] BAUR, E.; BRINKMANN, S.; OSSWALD, A.; RUDOLPH, N.; SCHMACHTENBERG, E.: Saechtling Kunststoff Taschenbuch. 31. Auflage, Hanser, München, 2013
- [BCC22] BERNARDO, F.; COVAS, J. A.; CANEVAROLO, S. V.: On-Line Optical Monitoring of the Mixing Performance in Co-Rotating Twin-Screw Extruders. *Polymers*, (14)6, 2022, 10.3390/polym14061152
- [Bet23-ol] BETTERSIZING INSTRUMENTS: Warum verwenden wir den äquivalenten sphärischen Durchmesser? Unter: <https://www.bettersizinginstruments.com/de/learn/bettersizing-wiki/why-do-we-use-equivalent-spherical-diameter/>, zuletzt aufgerufen am 16. Juni 2025
- [BH00] BAILEY, E.; HOLLOWAY, J. R.: Experimental determination of elastic properties of talc to 800°C, 0.5 GPa; calculations of the effect on hydrated peridotite, and implications for cold subduction zones. *Earth and Planetary Science Letters*, (183)3-4, 2000, S. 487–498, 10.1016/S0012-821X(00)00288-0
- [BH18] BASTIAN, M.; HOCHREIN, T.: Grundlagen zum Mischen. In: Bastian, M.; Hochrein, T. (Hrsg.): Einfärben von Kunststoffen. Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, München, 2018, S. 231–271, 10.3139/9783446453999.007
- [BPH19] BURNS, S. J.; PIIRONEN, P. T.; HANLEY, K. J.: Critical time step for DEM simulations of dynamic systems using a Hertzian contact model. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, (119)5, 2019, S. 432–451, 10.1002/nme.6056

- [Bre24] BREGER, A.: Basiswissen der mathematischen Bildbearbeitung – Zwischen Theorie und Anwendung. essentials, Springer Spektrum, Berlin, 2024
- [BSC18] BERNARDO, F. O.; SILVA, J. M.; CANEVAROLO, S. V.: Dispersed particle size characterization by in-line turbidimetry during polymer extrusion. *Polymer Testing*, (70), 2018, S. 449–457, 10.1016/j.polymertesting.2018.08.005
- [Can24] CANOLLI, S.: Entwicklung und Validierung von Schneckendesigns einer gleichläufigen Doppelschnecke zur gezielten Probenentnahme. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [CK07] CONNELLY, R.; KOKINI, J.: Examination of the mixing ability of single and twin screw mixers using 2D finite element method simulation with particle tracking. *Journal of Food Engineering*, (79), 2007, S. 956–969, 10.1016/J.JFOODENG.2006.03.017
- [CLZ+17] CHEN, T.; LIN, H.; ZHAO, H.; CHEN, X.; WU, T.; LI, G.; JI, H.; SHA, J.; MA, Y.; XIE, L.: Agglomerate size evolution in modular twin-screw extruder: Modeling and validation with CaCO₃/LLDPE compounding experiments. *Journal of Applied Polymer Science*, (134)47, 2017, 10.1002/app.45535
- [CM97] CHENG, H.; MANAS-ZLOCZOWER, I.: Study of mixing efficiency in kneading discs of co-rotating twin-screw extruders. *Polymer Engineering and Science*, (37)6, 1997, S. 1082–1090, 10.1002/PEN.11753
- [CM98] CHENG, H.; MANAS-ZLOCZOWER, I.: Distributive mixing in conveying elements of a ZSK-53 co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering and Science*, (38), 1998, S. 926–935, 10.1002/PEN.10260
- [Cop-ol] COPERION GMBH: Probeentnahmeplatte mit 2 x ASA 1/2" und Rheometeranschluss
- [Die19] DIEM, H.: Zusatzstoffe für Polymere – vom Polymer zum Kunststoff. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): *Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik*. Hanser, München, 2019, S. 157–167
- [DPS+20] DANDA, C.; PANDEY, V.; SCHNEIDER, T.; NORMAN, R.; MAIA, J. M.: Enhanced Dispersion and Mechanical Behavior of Polypropylene Composites Compounded Using Extension-Dominated Extrusion. *International Polymer Processing*, (35)3, 2020, S. 281–301, 10.3139/217.3899

- [Ele-ol] ELEMENTIS: FINNTALC M30. Unter:
https://www.elementis.com/typo3temp/drive_products/308_TDS_FINNTALC_M30_.pdf, zuletzt aufgerufen am 3. Juni 2025
- [FP02] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.: Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002, 10.1007/978-3-642-56026-2
- [Fra24] FRANK, M.: Simulationsgestützte Bestimmung und Optimierung der Mischgüte in der Einschneckenextrusion. Schriftenreihe Kunststofftechnik Paderborn Band 2024,5, Shaker, Düren, 2024
- [GWB+00] GAO, J.; WALSH, G. C.; BIGIO, D.; BRIBER, R. M.; WETZEL, M. D.: Mean residence time analysis for twin screw extruders. Polymer Engineering & Science, (40)1, 2000, S. 227–237, 10.1002/pen.11155
- [HK81] HERMES, K.; KESTEN, U.: Die Bildanalyse als modernes Verfahren der Partikelmeßtechnik. Chemie Ingenieur Technik, (53)10, 1981, S. 780–786, 10.1002/cite.330531004
- [Hoh09] HOHENBERGER, W.: Fillers and Reinforcements/Coupling Agents. In: Zweifel, H.; Schiller, M.; Maier, R. D. (Eds.): Plastics additives handbook. 6 Edition, Hanser, München, 2009, pp. 919–966
- [Isr10] ISRAELACHVILI, J. N.: Intermolecular and Surface Forces. Elsevier Science, Burlington, 2010
- [JPC13] JAMALI, S.; PAIVA, M. C.; COVAS, J. A.: Dispersion and re-agglomeration phenomena during melt mixing of polypropylene with multi-wall carbon nanotubes. Polymer Testing, Volume 32, Issue 4, 2013, S. 701–707
- [Kab25] KABALAN, H.: Charakterisierung der dispersiven Mischwirkung von Schneckenelementen auf einem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, 2025
- [KB16] KIRCHHOFF, J.; BIERDEL, M.: Mischen und Dispergieren. In: Kohlgrüber, K. (Hrsg.): Der gleichläufige Doppelschneckenextruder – Grundlagen, Technologie, Anwendungen. 2. Auflage, Hanser eLibrary, Hanser, München, 2016, S. 461–484
- [KB19] KOHLGRÜBER, K.; BIERDEL, M.: Einführung. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019, S. 3–8
- [KB19] KIRCHHOFF, J.; BIERDEL, M.: Grundlagen: homogenes & disperses Mischen. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen,

- Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019, S. 586–610
- [KBR19] KOHLGRÜBER, K.; BIERDEL, M.; RUST, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019
- [KH16] KNER, M.; HERSCHE, E.: Füllstoffe und Verstärkungsmittel. In: Maier, R.-D.; Schiller, M. (Hrsg.): Handbuch Kunststoff-Additive. 4. Auflage, Hanser, München, 2016, S. 1069–1137
- [Kle05] KLEIN, R.: Algorithmische Geometrie – Grundlagen, Methoden, Anwendungen. 2. Auflage, eXamen.press, Springer, Berlin, 2005
- [KNNF96] KAJIWARA, T.; NAGASHIMA, Y.; NAKANO, Y.; FUNATSU, K.: Numerical study of twin-screw extruders by three-dimensional flow analysis—development of analysis technique and evaluation of mixing performance for full flight screws. Polymer Engineering and Science, (36), 1996, S. 2142–2152, 10.1002/PEN.10611
- [Koh16] KOHLGRÜBER, K. (Hrsg.): Der gleichläufige Doppelschneckenextruder – Grundlagen, Technologie, Anwendungen. 2. Auflage, Hanser eLibrary, Hanser, München, 2016
- [Koh19] KOHLGRÜBER, K.: Compoundieren mit gleichläufigen Doppelschneckenextrudern – Einleitung. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019, 183-200
- [Koh19] KOHLGRÜBER, K.: Aufbereitung - Verfahrenstechnik der Polymerherstellung. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019, S. 9–62
- [Kra20] KRAUME, M.: Transportvorgänge in der Verfahrenstechnik – Grundlagen und apparative Umsetzungen. 3. Auflage, Springer Lehrbuch, Springer Vieweg, Berlin, 2020
- [Küh16] KÜHN, R.: Schneckenelemente und deren Einsatz. In: Kohlgrüber, K. (Hrsg.): Der gleichläufige Doppelschneckenextruder – Grundlagen, Technologie, Anwendungen. 2. Auflage, Hanser eLibrary, Hanser, München, 2016, S. 127–159
- [LAK74] LESCHONSKI, K.; ALEX, W.; KOGLIN, B.: Teilchengrößenanalyse. 1. Darstellung und Auswertung von Teilchengrößenverteilungen. Chemie Ingenieur Technik, (46)1, 1974, S. 23–26, 10.1002/cite.330460105

- [LAK75] LESCHONSKI, K.; ALEX, W.; KOGLIN, B.: Teilchengrößenanalyse. Chemie Ingenieur Technik, (47)3, 1975, S. 97–100, 10.1002/cite.330470306
- [Lec14] LECHERER, S.: Numerische Strömungsberechnung. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2014, 10.1007/978-3-658-05201-0
- [LK95] LAWAL, A.; KALYON, D.: Mechanisms of mixing in single and co-rotating twin screw extruders. Polymer Engineering and Science, (35), 1995, S. 1325–1338, 10.1002/PEN.760351702
- [LM94] LI, T.; MANAS-ZLOCZOWER, I.: Flow field analysis of an intermeshing counterrotating twin screw extruder. Polymer Engineering & Science, (34)7, 1994, S. 551–558, 10.1002/pen.760340703
- [LO11] LAURIEN, E.; OERTEL, H.: Numerische Strömungsmechanik – Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit mit über 530 Wiederholungs- und Verständnisfragen. 4. Auflage, Studium Strömungsmechanik, Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 2011
- [LU96] LUCIANI, A.; UTRACKI, L. A.: The Extensional Flow Mixer, EFM. International Polymer Processing, (11)4, 1996, S. 299–309, 10.3139/217.960299
- [Mer07] MERTLER, M.: Herstellung und Charakterisierung hoch poröser nanostrukturierter Filtermembranen. Dissertation, Universität Stuttgart, 2007, 10.18419/opus-1752
- [Mor20] MORI, Y.: Size Measurement. In: Higashitani, K.; Makino, H.; Matsusaka, S. (Eds.): Powder technology handbook. CRC Press, Boca Raton, 2020, pp. 9–18
- [NCP12] NOVAIS, R. M.; COVAS, J. A.; PAIVA, M. C.: The effect of flow type and chemical functionalization on the dispersion of carbon nanofiber agglomerates in polypropylene. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, (43)6, 2012, S. 833–841, 10.1016/j.compositesa.2012.01.017
- [NTS+10] NAKAYAMA, Y.; TAKEDA, E.; SHIGEISHI, T.; TOMIYAMA, H.; KAJIWARA, T.: Melt-mixing by novel pitched-tip kneading disks in a co-rotating twin-screw extruder. Chemical Engineering Science, (66), 2010, S. 103–110, 10.1016/j.ces.2010.10.022
- [Oss03] OSSWALD, T. A.: Verarbeitungsprozesse mit Modellen beschreiben. Kunststoffe, 20, 2003, S. 130–134
- [Pad08] PADMANABHAN, B.: Understanding the Extruder Processing Zone: the heart of a twin screw extruder. Plastics, Additives and Compounding, (10)2, 2008, S. 30–35, 10.1016/S1464-391X(08)70058-8

- [PBA00] PUAUX, J.; BOZGA, G.; AINSER, A.: Residence time distribution in a corotating twin-screw extruder. *Chemical Engineering Science*, (55)9, 2000, S. 1641–1651, 10.1016/S0009-2509(99)00430-3
- [PCGM20] PANDEY, V.; CHEN, T.; GUO, M.; MAIA, J. M.: Simple and immediate quantitative evaluation of dispersive mixing. *Polymer Testing*, (88), 2020, S. 106587, 10.1016/j.polymertesting.2020.106587
- [PS89] POTENTE, H.; SCHULTHEIS, S. M.: Investigations of the Residence Time and the Longitudinal Mixing Behavior in Counter-rotating Twin Screw Extruders. *International Polymer Processing*, (4)4, 1989, S. 255–261, 10.3139/217.890255
- [PSR73] PAHL, M.; SCHÄDEL, G.; RUMPF, H.: Zusammenstellung von Teilchenformbeschreibungsmethoden -1. Teil-. *Aufbereitungstechnik: AT*, (14)5, 1973, S. 257–264
- [PSR73] PAHL, M.; SCHÄDEL, G.; RUMPF, H.: Zusammenstellung von Teilchenformbeschreibungsmethoden -3. Teil-. *Aufbereitungstechnik: AT*, (14)11, 1973, S. 759–764
- [PSR73] PAHL, M.; SCHÄDEL, G.; RUMPF, H.: Zusammenstellung von Teilchenformbeschreibungsmethoden -2. Teil-. *Aufbereitungstechnik: AT*, (14)10, 1973, S. 672–683
- [RB19] RUDOLF, R.; BIERDEL, M.: Aufgaben und Auslegung der Verfahrenszonen eines Compoundierextruders. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): *Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik*. Hanser, München, 2019, S. 200–236
- [RBM+14] RONDIN, J.; BOUQUEY, M.; MULLER, R.; SERRA, C. A.; MARTIN, G.; SONNTAG, P.: Dispersive mixing efficiency of an elongational flow mixer on PP/EPDM blends: Morphological analysis and correlation with viscoelastic properties. *Polymer Engineering & Science*, (54)6, 2014, S. 1444–1457, 10.1002/pen.23667
- [RMF90] RWEI, S. P.; MANAS-ZLOCZOWER, I.; FEKE, D. L.: Observation of carbon black agglomerate dispersion in simple shear flows. *Polymer Engineering & Science*, (30)12, 1990, S. 701–706, 10.1002/pen.760301202
- [RMF91] RWEI, S. P.; MANAS-ZLOCZOWER, I.; FEKE, D. L.: Characterization of agglomerate dispersion by erosion in simple shear flows. *Polymer Engineering & Science*, (31)8, 1991, S. 558–562, 10.1002/pen.760310804
- [RS16] RICHTER, E.; SCHACKER, O.: Oberflächenaktive Zusatzstoffe. In: Maier, R.-D.; Schiller, M. (Hrsg.): *Handbuch Kunststoff-Additive*. 4. Auflage, Hanser, München, 2016, 583-678

- [Rud16] RUDOLF, R.: Compoundieren Gesamtübersicht: Aufgaben und Anwendungsbeispiele, Verfahrenszonen. In: Kohlgrüber, K. (Hrsg.): Der gleichläufige Doppelschneckenextruder – Grundlagen, Technologie, Anwendungen. 2. Auflage, Hanser eLibrary, Hanser, München, 2016, S. 47–82
- [Rum75] RUMPF, H.: Mechanische Verfahrenstechnik. 3. Auflage, Chemische Technologie Band 7, Hanser, 1975
- [SA13] SARHANGI FARD, A.; ANDERSON, P. D.: Simulation of distributive mixing inside mixing elements of co-rotating twin-screw extruders. *Computers & Fluids*, (87), 2013, S. 79–91, 10.1016/j.compfluid.2013.01.030
- [Sch12] SCHWARZE, R.: CFD-Modellierung – Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012, 10.1007/978-3-642-24378-3
- [Sch16] SCHOLZ, D.: Numerik interaktiv – Grundlagen verstehen, Modelle erforschen und Verfahren anwenden mit taramath. Lehrbuch, Springer Spektrum, Berlin, 2016
- [Sch19] SCHULDT, T.: Produktentwicklung. In: Kohlgrüber, K.; Bierdel, M.; Rust, H. (Hrsg.): Polymer-Aufbereitung und Kunststoff-Compoundierung – Grundlagen, Apparate, Maschinen, Anwendungstechnik. Hanser, München, 2019, S. 145–156
- [Sch84] SCHUBERT, H.: Agglomerieren. In: Harnisch, H.; Winnacker, K.; Küchler, L. (Hrsg.): Allgemeines. 4. Auflage, Chemische Technologie / Winnacker. Hrsg. von Heinz Harnisch, Bd. 1, Hanser, München, 1984, S. 94–105
- [SE20] SCHÜLE, H.; EYERER, P.: Verarbeitung von Kunststoffen und Bauteilen. In: Schüle, H.; Eyerer, P. (Hrsg.): Polymer Engineering 2. Auflage, Springer Vieweg, Berlin, 2020, 1-414
- [Som00] SOMMER, K.: 40 Jahre Darstellung von Partikelgrößenverteilungen — und immer noch falsch? *Chemie Ingenieur Technik*, (72)8, 2000, S. 809–812, 10.1002/1522-2640(200008)72:8%3C809::AID-CITE809%3E3.0.CO;2-K
- [Sti08] STIESS, M.: Mechanische Verfahrenstechnik - Partikeltechnologie 1. 3. Auflage, Springer-Lehrbuch, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008
- [Tsu20] TSUBAKI, J.: Particle Size. In: Higashitani, K.; Makino, H.; Matsusaka, S. (Eds.): Powder technology handbook. CRC Press, Boca Raton, 2020, pp. 3–7
- [Vin24] VINAYAGAMOORTHY, K.: Untersuchung des Mischverhaltens einzelner Schneckenelemente auf dem gleichläufigen

- Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [VSPC15] VILAVERDE, C.; SANTOS, R. M.; PAIVA, M. C.; COVAS, J. A.: Dispersion and re-agglomeration of graphite nanoplates in polypropylene melts under controlled flow conditions. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, (78), 2015, S. 143–151, 10.1016/j.compositesa.2015.08.010
- [WHW86] WOLF, D.; HOLIN, N.; WHITE, D. H.: Residence time distribution in a commercial twin-screw extruder. *Polymer Engineering & Science*, (26)9, 1986, S. 640–646, 10.1002/pen.760260910
- [Wil18] WILHELM, M.: Verfahrensentwicklung zur Einarbeitung nanoskaliger Suspensionen in Polyethylenterephthalat. Dissertation, Universität Paderborn, 2018
- [Wil24] WILLECKE, D.: Untersuchungen zur Deagglomeration von mineralischen Füllstoffen auf dem Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [YKM+00] YOSHINAGA, M.; KATSUKI, S.; MIYAZAKI, M.; LIU, L.; KIHARA, S.; FUNATSU, K.: Mixing mechanism of three-tip kneading block in twin screw extruders. *Polymer Engineering and Science*, (40), 2000, S. 168–178, 10.1002/PEN.11150
- [YM92] YANG, H.-H.; MANAS-ZLOCZOWER, I.: Flow field analysis of the kneading disc region in a co-rotating twin screw extruder. *Polymer Engineering and Science*, (32), 1992, S. 1411–1417, 10.1002/PEN.760321903
- [ZFCH09] ZHANG, X.; FENG, L.; CHEN, W.; HU, G.: Numerical simulation and experimental validation of mixing performance of kneading discs in a twin screw extruder. *Polymer Engineering and Science*, (49), 2009, S. 1772–1783, 10.1002/PEN.21404
- [Zho24] ZHOU, Y.: Charakterisierung des Mischverhaltens von Schneckenelementen für den gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, 2024

Studentische Arbeiten

Die nachstehend aufgeführten studentischen Arbeiten wurden im Kontext der vorliegenden Dissertation in der Arbeitsgruppe Kunststoffverarbeitung (Kunststofftechnik Paderborn, KTP) der Universität Paderborn angefertigt. Die Definition der Zielsetzung, die Bearbeitung sowie die Auswertung, Interpretation und Visualisierung von Ergebnissen erfolgten unter wissenschaftlicher Anleitung des Betreuers Jan Philipp Oldemeier. Die erzielten Ergebnisse sind zum Teil in die Dissertation eingeflossen.

- [Ayv25] AYVAZ, C. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung des distributiven Mischverhaltens einzelner Schneckenelemente auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Studienarbeit, Universität Paderborn, 2025
- [Can24] CANOLLI, S. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Entwicklung und Validierung von Schneckendesigns einer gleichläufigen Doppelschnecke zur gezielten Probenentnahme. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [Fas24] FAST, T. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung der Auswirkung von Schneckenelementenverschleiß auf die Mischwirkung der Schneckenelemente. unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [Kab25] KABALAN, H. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung der dispersiven Mischwirkung von Schneckenelementen auf einem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, 2025
- [Özt25] ÖZTÜRK, M. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung der Auswirkung der durch unterschiedliche Schneckenelemente entstehenden Mischgüte von Kunststoffcompounds auf die mechanischen Bauteileigenschaften. unveröffentlichte Studienarbeit, Universität Paderborn, 2025
- [Sim25] SIMZOV, D. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung des Mischverhaltens unterschiedlicher Schneckenkonfigurationen auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Studienarbeit, Universität Paderborn, 2025
- [Ten24] TENTE, P. S. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Studien zur Mischleistung einzelner Schneckenelemente eines Doppelschneckenextruders. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024
- [Vin24] VINAYAGAMOORTHY, K. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Untersuchung des Mischverhaltens einzelner Schneckenelemente

auf dem gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024

[Wil24] WILLECKE, D. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Untersuchungen zur Deagglomeration von mineralischen Füllstoffen auf dem Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Bachelorarbeit, Universität Paderborn, 2024

[Zho24] ZHOU, Y. (Betreuer: Oldemeier, Jan Philipp): Charakterisierung des Mischverhaltens von Schneckenelementen für den gleichläufigen Doppelschneckenextruder. unveröffentlichte Masterarbeit, Universität Paderborn, 2024

Erklärung zur Zitation von Inhalten aus studentischen Arbeiten

In Ergänzung zu meinem Antrag auf Zulassung zur Promotion in der Fakultät für Maschinenbau der Universität Paderborn erkläre ich gemäß §11 der Promotionsordnung und unter Beachtung der Regelung zur Zitation studentischer Arbeiten:

Die von mir vorgelegte Dissertation habe ich selbstständig verfasst, **und ich habe keine anderen** als die dort angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt. Für die Rechtschreib- und Grammatikprüfung wurde ChatGPT sowie DeepL Write verwendet. Aufgrund der umfangreichen Datenmenge, auf dessen Basis die vorliegende Dissertation entstanden ist, sind im Anhang dieser Dissertation nur ausgewählte Daten aufgeführt. Die vollständige Datenbasis dieser Dissertation ist bei der Kunststofftechnik Paderborn archiviert. Es sind **Inhalte** studentischen Ursprungs (studentische Arbeiten) in dieser Dissertation enthalten.

Ich habe die verwendeten Arbeiten entsprechend der Regelung „Zitation aus studentischen Arbeiten in Dissertationen“ zitiert.

Paderborn, den 08.07.2026

Jan Philipp Oldemeier

Anhang

Inhaltsverzeichnis

A1	Ergänzende Abbildungen	147
A1.1	Schneckendesigns	147
A1.2	Partikelgrößenverteilungen	148
A2	Python Skripte	150
A2.1	Auswertung distributives Mischen (Simulation)	150
A2.2	Auswertung dispersives Mischen (Simulation)	158
A2.3	Auswertung Grauwertverteilung	162
A3	Datenblätter	164
A3.1	PP 505P	164
A3.2	PP FPH50	174
A3.3	Finntalc M30	184
A3.4	Finntalc M05N	186

A1 Ergänzende Abbildungen

A1.1 Schneckendesigns

KB12:

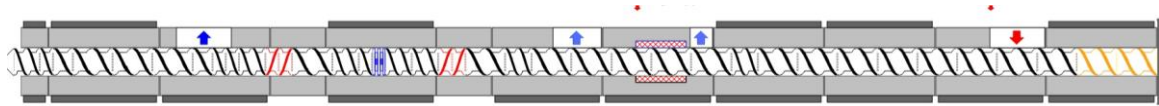


Abbildung A-1: Schneckendesign für den KB12

KB24:

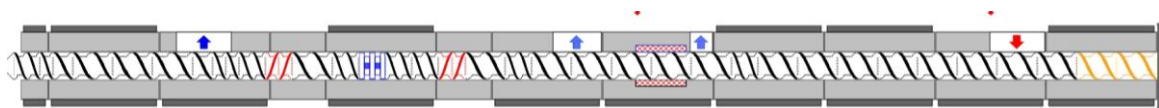


Abbildung A-2: Schneckendesign für den KB24

KB45:

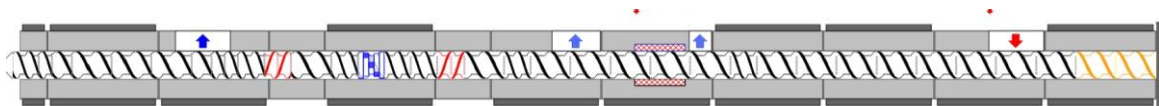


Abbildung A-3: Schneckendesign für den KB45

SE:

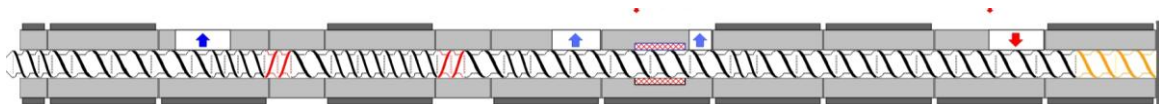


Abbildung A-4: Schneckendesign für das SE

ZME:

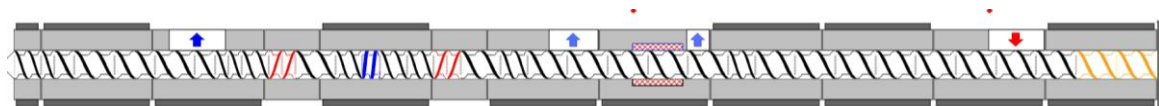


Abbildung A-5: *Schneckendesign für das ZME*

A1.2 Partikelgrößenverteilungen

Drehzahl:

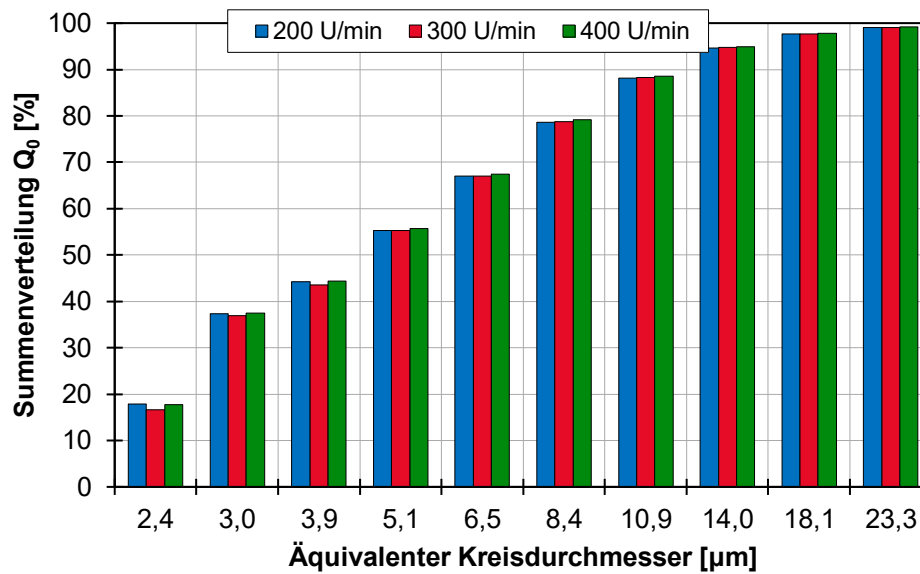


Abbildung A-6: *Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit der Drehzahl für den KB24 mit dem Material 505P und 20 Gew.-% des Talkum M30 nach [Kab25]*

Füllstoffanteil:

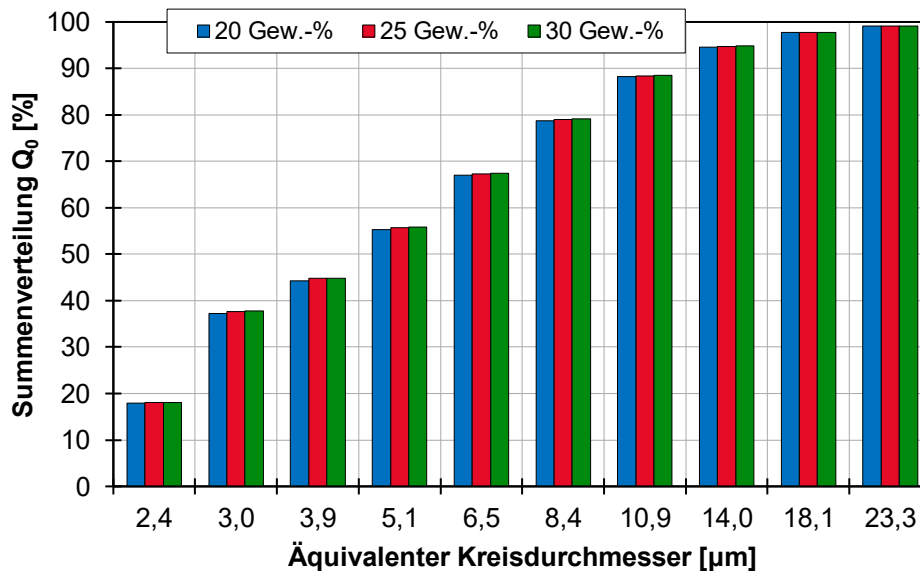


Abbildung A-7: *Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit der Füllstoffanteile von dem Talkum M30 für das Material 505P bei 200 U/min mit dem KB24 nach [Kab25]*

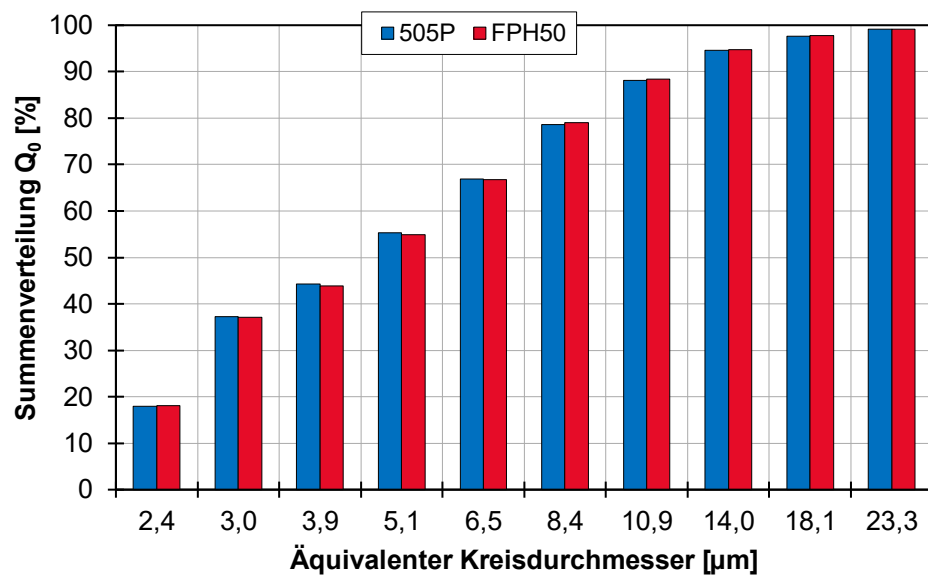
Kunststoff:

Abbildung A-8: *Partikelgrößenverteilung in Abhängigkeit des Kunststoffs für den KB24 mit 20 Gew.-% des Talkums M30 bei 200 U/min nach [Kab25]*

A2 Python Skripte

A2.1 Auswertung distributives Mischen (Simulation)

```
import tkinter as tk
from tkinter import filedialog
import os
import glob
import sys
import re
import shutil
import openpyxl
import csv
from collections import defaultdict
from openpyxl import load_workbook
import numpy as np
from scipy.spatial import Delaunay
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
from shapely.geometry import Polygon, Point, LineString

def create_folders():
    # Öffne das Dateiauswahlfenster
    #root = tk.Tk()
    #root.withdraw() # Verstecke das Hauptfenster
    #target_folder = filedialog.askdirectory(title="Wähle den Zielordner aus")
    target_folder = zielordner

    if target_folder:
        # Überprüfe, ob die Ordner bereits vorhanden sind
        folder_names = ["CSV", "Delauney Triangulation", "Excel",
                        "Excelzusammen", "Schubspannung"]
        existing_folders = [folder for folder in folder_names if
                            os.path.exists(os.path.join(target_folder,
                                                            folder))]

        if existing_folders:
            print("Folgende Ordner sind bereits vorhanden:")
            for folder in existing_folders:
                print(folder)
            print("Das Programm wird beendet.")
            sys.exit()
            # Beende das Programm hier, wenn Ordner vorhanden sind

        # Erstelle die Ordner im Zielordner
        for folder_name in folder_names:
            folder_path = os.path.join(target_folder, folder_name)
            os.makedirs(folder_path)
            print("Die Ordner wurden erfolgreich erstellt.")
        else:
            print("Kein Zielordner ausgewählt.")
        return zielordner

def count_csv_files_to_rename(folder_path):
    csv_files = glob.glob(os.path.join(folder_path, '*.csv'))
    count = 0
```

```

for csv_file in csv_files:
    base_name = os.path.basename(csv_file)
    prefix, extension = os.path.splitext(base_name)

    parts = prefix.split('.')
    if len(parts) == 2:
        try:
            number = int(parts[1])
            if number < 1000:
                count += 1
        except ValueError:
            pass

return count

def rename_csv_files(folder_path):
    total_files = count_csv_files_to_rename(folder_path)
    processed_files = 0

    csv_files = glob.glob(os.path.join(folder_path, '*.csv'))

    for csv_file in csv_files:
        base_name = os.path.basename(csv_file)
        prefix, extension = os.path.splitext(base_name)

        parts = prefix.split('.')
        if len(parts) == 2:
            try:
                number = int(parts[1])
                if number < 1000:
                    processed_files += 1

                    new_name = f"{parts[0]}.{'%04d' % number}.csv"

                    new_path = os.path.join(folder_path, new_name)
                    os.rename(csv_file, new_path)
                    print(f"Umbenennen: {base_name} -> {new_name}
                        [{processed_files}/{total_files}]")
            except ValueError:
                print(f"Fehler beim Konvertieren: {base_name}")
        else:
            print(f"Fehlerhafter Dateiname: {base_name}")

def copy_rows_with_threshold(input_filename, output_folder,
                             lower_threshold, upper_threshold):
    # Öffne die Eingabe-CSV-Datei
    with open(input_filename, 'r', newline='') as csv_file:
        csv_reader = csv.reader(csv_file)
        header = next(csv_reader) # Lesen Sie den Header
        print(input_filename)

        # Finden Sie den Index der Spalte "Points:2" im Header
        column_index = header.index("Points:2")

        # Erstelle eine neue Arbeitsmappe für die kopierten Zeilen
        output_workbook = openpyxl.Workbook()
        output_sheet = output_workbook.active

        # Schreibe den Header in die Excel-Datei
        output_sheet.append(header)

```

```

# Durchsuche die Zeilen der CSV-Datei
for row in csv_reader:
    # Ersetze Punkte durch Kommata in den Zellen und konvertiere
    # sie in Float
    row = [float(cell.replace('.', ',')) if isinstance(cell, str)
            and cell != '' else cell for cell in row]
    value_in_column = row[column_index]
    if lower_threshold <= value_in_column <= upper_threshold:
        output_sheet.append(row)

# Erstelle den Ausgabepfad und -dateinamen
input_filename_without_extension =
os.path.splitext(os.path.basename(input_filename))[0]
output_filename = os.path.join(output_folder,
f"{input_filename_without_extension}_mit_Grenzen.xlsx")

# Speichere die Ausgabe-Excel-Datei
output_workbook.save(output_filename)

print(f"Kopierte Zeilen wurden in '{output_filename}'
gespeichert.")

def process_csv_files_in_folder(folder_path, output_folder,
lower_threshold, upper_threshold):
    # Liste alle CSV-Dateien im Ordner auf
    csv_files = [f for f in os.listdir(folder_path) if f.endswith('.csv')]

    for csv_file in csv_files:
        input_filename = os.path.join(folder_path, csv_file)
        copy_rows_with_threshold(input_filename, output_folder,
lower_threshold, upper_threshold)

def copy_rows_with_threshold(input_filename, output_folder,
lower_threshold, upper_threshold):
    # Öffne die Eingabe-CSV-Datei
    with open(input_filename, 'r', newline='') as csv_file:
        csv_reader = csv.reader(csv_file)
        header = next(csv_reader) # Lesen Sie den Header
        print(input_filename)

    # Finden Sie den Index der Spalte "Points:2" im Header
    column_index = header.index("Points:2")

    # Erstelle eine neue Arbeitsmappe für die kopierten Zeilen
    output_workbook = openpyxl.Workbook()
    output_sheet = output_workbook.active

    # Schreibe den Header in die Excel-Datei
    output_sheet.append(header)

    # Durchsuche die Zeilen der CSV-Datei
    for row in csv_reader:
        # Ersetze Punkte durch Kommata in den Zellen und konvertiere
        # sie in Float
        row = [float(cell.replace('.', ',')) if isinstance(cell, str)
                and cell != '' else cell for cell in row]
        value_in_column = row[column_index]
        if lower_threshold <= value_in_column <= upper_threshold:
            output_sheet.append(row)

    # Erstelle den Ausgabepfad und -dateinamen

```

```

input_filename_without_extension =
os.path.splitext(os.path.basename(input_filename))[0]
output_filename = os.path.join(output_folder,
f"{input_filename_without_extension}_mit_Grenzen.xlsx")

# Speichere die Ausgabe-Excel-Datei
output_workbook.save(output_filename)

print(f"Kopierte Zeilen wurden in '{output_filename}'
gespeichert.")

def process_csv_files_in_folder(folder_path, output_folder,
lower_threshold, upper_threshold):
# Liste alle CSV-Dateien im Ordner auf
csv_files = [f for f in os.listdir(folder_path) if f.endswith('.csv')]

for csv_file in csv_files:
input_filename = os.path.join(folder_path, csv_file)
copy_rows_with_threshold(input_filename, output_folder,
lower_threshold, upper_threshold)

def merge_excel_files(input_folder, output_folder):
# Erstellen eines leeren Dictionaries, um Dateinamen ohne
Erweiterungen zu verfolgen
file_mapping = defaultdict(list)

# Schleife durch den Eingabeordner
for filename in os.listdir(input_folder):
if filename.endswith("_mit_Grenzen.xlsx"):
# Verwende regulären Ausdruck, um die Zahlenfolge vor
"_mit_Grenzen" zu extrahieren
match = re.search(r'(\d+)_mit_Grenzen\.xlsx', filename)
if match:
number = match.group(1) # Extrahierte Zahlenfolge
file_mapping[number].append(os.path.join(input_folder,
filename))

for number, file_paths in file_mapping.items():
if len(file_paths) > 1:
# Die Dateien haben die gleiche Zahlenfolge, füge sie zusammen
merged_workbook = None

for file_path in file_paths:
workbook = load_workbook(file_path)
worksheet = workbook.active
data_rows = list(worksheet.iter_rows(min_row=2,
values_only=True))

if merged_workbook is None:
# Erstelle eine Kopie der ersten Datei
merged_workbook = workbook
else:
# Füge den Inhalt zur bereits vorhandenen Datei hinzu
existing_worksheet = merged_workbook.active

for row in data_rows:
existing_worksheet.append(row)

# Neuen Dateinamen erstellen
parent_folder_name = os.path.dirname(input_folder) # Name des

```

```

        übergeordneten Ordners
        output_filename =
        f"{parent_folder_name}_{number}_zusammen.xlsx"

        output_file_path = os.path.join(output_folder,
        output_filename)

        if merged_workbook is not None:
            # Speichere die zusammengeführte Datei
            merged_workbook.save(output_file_path)

if __name__ == "__main__":
    root = tk.Tk()
    root.withdraw()
    root.wm_attributes('-topmost', 1)
    zielordner = filedialog.askdirectory(title="Wähle den Zielordner für
    die Ergebnisse aus")
    selected_folders = []
    for index in range(1, 3): # Iteriere über die Zahlen 1 und 2
        selected_folder = filedialog.askdirectory(title=f"Quelle {index}
        auswählen")
        if selected_folder:
            selected_folders.append(selected_folder)
    print(selected_folders)

    print("Ausgewählte Ordner:")
    for index, folder in enumerate(selected_folders, start=1):
        print(f"{index}: {folder}")

    # Bereichsmarkierung auswählen
    boundary_path = filedialog.askopenfilename(title='Bereichsmarkierung
    auswählen')
    #boundary_path =
    r"U:\.....\Grenzen_außen.xlsx"

    # Erstes Loch auswählen
    hole1_path = filedialog.askopenfilename(title='Erstes Loch
    auswählen')
    #hole1_path = r"U:\.....\Loch_1.xlsx"

    # Zweites Loch auswählen
    hole2_path = filedialog.askopenfilename(title='Zweites Loch
    auswählen')
    #hole2_path = r"U:\.....\Loch_2.xlsx"

    lower_threshold = float(input("Geben Sie den unteren Grenzwert ein:
    "))
    upper_threshold = float(input("Geben Sie den oberen Grenzwert ein:
    "))
    create_folders()

    if selected_folders:
        for folder_path in selected_folders:
            rename_csv_files(folder_path)
            print(f"Umbenennen in Ordner '{folder_path}' abgeschlossen.")
            # Pfad des erstellten "CSV" Ordners
            output_folder_path = os.path.join(str(zielordner), "CSV")

            # Die gewünschten Zahlen am Ende der Dateinamen

```

```

allowed_numbers = ['0500', '1000', '1500', '2000', '2500',
                   '3000', '3500', '3600' ]

# Durchsuche den ausgewählten Ordner nach passenden Dateien
# und kopiere sie
for root, dirs, files in os.walk(folder_path):
    for file in files:
        for number in allowed_numbers:
            if re.search(f'.*{number}\.csv$', file):
                source_file = os.path.join(root, file)
                destination_file =
                os.path.join(output_folder_path, file)
                shutil.copy(source_file, destination_file)

        print("Kopieren abgeschlossen. Die ausgewählten CSV-Dateien
              wurden in den Ordner 'CSV' kopiert.")
    else:
        print("Keine Ordner ausgewählt.")

if lower_threshold >= upper_threshold:
    print("Der untere Grenzwert muss kleiner als der obere Grenzwert
          sein.")
else:
    output_folder = os.path.join(str(zielordner), "Excel")
    input_folder = os.path.join(str(zielordner), "CSV")
    process_csv_files_in_folder(input_folder, output_folder,
                                lower_threshold, upper_threshold)

input_folder = os.path.join(str(zielordner), "Excel")
output_folder = os.path.join(str(zielordner), "Excelzusammen")
print(f"Übergeordneter Ordner:
      {os.path.basename(os.path.dirname(input_folder))}")

# Zusammenführen der Excel-Dateien
merge_excel_files(input_folder, output_folder)

print("Excel-Dateien wurden erfolgreich zusammengeführt.")

df_boundary = pd.read_excel(boundary_path)
boundary_points = df_boundary[['x', 'y']].values

df_hole1_points = pd.read_excel(hole1_path)
hole1_points = df_hole1_points[['x', 'y']].values

df_hole2_points = pd.read_excel(hole2_path)
hole2_points = df_hole2_points[['x', 'y']].values

def triangle_area(p1, p2, p3):
    return abs((p1[0] * (p2[1] - p3[1]) +
                p2[0] * (p3[1] - p1[1]) +
                p3[0] * (p1[1] - p2[1])) / 2)

def triangle_in_allowed_area(p1, p2, p3, allowed_polygon):
    tri_poly = Polygon([p1, p2, p3])
    return allowed_polygon.contains(tri_poly)

# --- Polygon-Setup (mit Löchern) ---
outer_polygon = Polygon(boundary_points)
hole1_polygon = Polygon(hole1_points)
hole2_polygon = Polygon(hole2_points)

```

```

holes_union = hole1_polygon.union(hole2_polygon)
allowed_polygon = outer_polygon.difference(holes_union)
available_area = allowed_polygon.area
print(f"Verfügbare Fläche: {available_area:.4f}")

triangulation_folder = os.path.join(str(zielordner),
"Excelzusammen")
output_folder = os.path.join(str(zielordner), "Delauney
Triangulation")
os.makedirs(output_folder, exist_ok=True)

for filename in os.listdir(triangulation_folder):
    if filename.endswith(".xlsx"):
        points_path = os.path.join(triangulation_folder, filename)
        df_points = pd.read_excel(points_path)

        try:
            triangulation_points = df_points[['Points:0',
            'Points:1']].values
        except KeyError:
            print(f"{filename} übersprungen (Spalten fehlen).")
            continue

        # Punkte filtern
        valid_points = np.array([pt for pt in triangulation_points if
        allowed_polygon.contains(Point(pt))])
        if valid_points.size == 0:
            print(f"Keine gültigen Punkte in {filename}.")
            continue

        all_points = valid_points
        tri = Delaunay(all_points)

        # Dreiecke im erlaubten Bereich
        triangles = []
        for triangle in tri.simplices:
            p1, p2, p3 = all_points[triangle]
            if triangle_in_allowed_area(p1, p2, p3, allowed_polygon):
                triangles.append(triangle)

        # Flächen
        volumes = [triangle_area(all_points[t[0]], all_points[t[1]],
        all_points[t[2]]) for t in triangles]
        volumes = np.array(volumes)

        mean_volume = np.mean(volumes) if volumes.size > 0 else np.nan
        std_dev = np.std(volumes) if volumes.size > 0 else np.nan
        MQ = std_dev / mean_volume if mean_volume else np.nan

        Ausgangswert = 4.21
        Mq_neu_normiert = 1 - (MQ / Ausgangswert) if MQ else np.nan

        # Ergebnisse speichern
        results_file_name = os.path.splitext(filename)[0] +
        "_Ergebnisse.xlsx"
        df_results = pd.DataFrame({
            'Mean Volume': [mean_volume],
            'Standard Deviation': [std_dev],
            'MQ': [MQ],
            'Available Area': [available_area],
            'Mq_neu_normiert': [Mq_neu_normiert]
        })

```



```

    })
    df_results.to_excel(os.path.join(output_folder,
    results_file_name), index=False)

    print(f"Ergebnisse gespeichert: {results_file_name}")

    # Plot
    plt.triplot(
        all_points[:, 0], all_points[:, 1], triangles,
        linewidth=0.2, color='tab:blue'
    )
    # Innenpunkte (orange)
    plt.plot(
        valid_points[:, 0], valid_points[:, 1],
        'o', markersize=0.5, color='tab:red', alpha=0.8
    )

    # Bereichsmarkierung - nur Linie (schwarz)
    plt.plot(
        boundary_points[:, 0], boundary_points[:, 1],
        'k-', linewidth=0.6
    )

    # Loch 1 - nur Linie (schwarz)
    hole1_x, hole1_y = hole1_points.T
    plt.plot(
        np.append(hole1_x, hole1_x[0]),
        np.append(hole1_y, hole1_y[0]),
        'k-', linewidth=0.5
    )

    # Loch 2 - nur Linie (schwarz)
    hole2_x, hole2_y = hole2_points.T
    plt.plot(
        np.append(hole2_x, hole2_x[0]),
        np.append(hole2_y, hole2_y[0]),
        'k-', linewidth=0.5
    )

    plt.gca().set_aspect('equal', adjustable='box')

    image_name = "Bild" + os.path.splitext(filename)[0]
    plt.axis('on')
    plt.savefig(os.path.join(output_folder, image_name +
    ".png"),
        dpi=300, bbox_inches='tight')
    plt.axis('off')
    plt.savefig(os.path.join(output_folder, image_name +
    ".svg"),
        bbox_inches='tight')
    plt.close()

    print("\nTriangulation abgeschlossen.")

```

A2.2 Auswertung dispersives Mischen (Simulation)

Skript 1 bestimmt für die ausgewählte Punktquelle die Parameter für die Verteilungen.

Skript 1:

```
import tkinter as tk
from tkinter import filedialog
import pandas as pd
import os
import csv
import time

# Dieses Skript erstellt die Tabelle für die maximale Schubspannung, die
# ParticleAge, die Summe der Schubspannung und die maximale Z Koordinate.
# Für die Auswertung des dispersiven Mischens
# Berücksichtigt einen Grenzwert der Z-Koordinate
def get_input_folder():
    root = tk.Tk()
    root.withdraw()
    input_folder = filedialog.askdirectory(title="Wähle einen Ordner mit
    CSV-Dateien")
    return input_folder

def get_output_folder():
    root = tk.Tk()
    root.withdraw()
    output_folder = filedialog.askdirectory(title="Wähle einen
    Speicherordner für die Ausgabedatei")
    return output_folder

def process_csv_files(input_folder, output_folder):
    max_schubspannung = {}
    max_particle_age = {}
    schubspannung_sum = {}
    max_points_2 = {}

    # Grenzwert für Points:2
    grenzwert_points_2 = float(input("Gib den Grenzwert für Points:2
    ein: "))

    start_time = time.time()

    for filename in os.listdir(input_folder):
        if filename.endswith(".csv"):
            print(f"Verarbeite {filename}...")
            file_path = os.path.join(input_folder, filename)
            df = pd.read_csv(file_path)

            for _, row in df.iterrows():
                particle_id = row["ParticleId"]
                schubspannung = row["Schubspannung (Pa)"]
                particle_age = row["ParticleAge"]
                points_2 = row["Points:2"]

                # Bedingungen für die Aktualisierung anpassen
                if particle_id not in max_schubspannung or (points_2 <=
                grenzwert_points_2 and schubspannung >
                max_schubspannung[particle_id]):
                    max_schubspannung[particle_id] = schubspannung
```

```

        if particle_id not in max_particle_age or (points_2 <=
        grenzwert_points_2 and particle_age >
        max_particle_age[particle_id]):
            max_particle_age[particle_id] = particle_age

        # Schubspannung zur Summe hinzufügen, nur wenn Points:2
        # kleiner oder gleich dem Grenzwert ist
        if points_2 <= grenzwert_points_2:
            schubspannung_sum[particle_id] =
            schubspannung_sum.get(particle_id, 0) +
            schubspannung

        # Maximalen Wert von Points:2 aktualisieren, unabhängig
        # vom Grenzwert
        if particle_id not in max_points_2 or points_2 >
        max_points_2[particle_id]:
            max_points_2[particle_id] = points_2

    print(f"{filename} wurde verarbeitet.")

end_time = time.time()

output_file = os.path.join(output_folder, "maxSchub.csv")
with open(output_file, 'w', newline='') as csvfile:
    writer = csv.writer(csvfile)
    writer.writerow(["ParticleId", "Maximale Schubspannung (Pa)",
    "Maximale ParticleAge (s)", "Schubspannungssumme (Pa)", "Max
    Points:2"])

    sorted_max_schubspannung = sorted(max_schubspannung.items(),
    key=lambda x: x[0])

    for particle_id, max_schub in sorted_max_schubspannung:
        max_age = max_particle_age.get(particle_id, "N/A")
        sum_schubspannung = schubspannung_sum.get(particle_id, 0)
        max_points = max_points_2.get(particle_id, "N/A")
        writer.writerow([particle_id, max_schub, max_age,
        sum_schubspannung, max_points])

    print(f"Die maximale Schubspannung, ParticleAge, Schubspannungssumme
    und der maximale Points:2-Wert für jede ParticleId wurden in
    {output_file} gespeichert.")

elapsed_time = end_time - start_time
print(f"Laufzeit: {elapsed_time:.2f} Sekunden")

def main():
    input_folder = get_input_folder()
    output_folder = get_output_folder()

    process_csv_files(input_folder, output_folder)
    print("Verarbeitung abgeschlossen.")

if __name__ == "__main__":
    main()

```

Skript 2 erstellt die Verteilungen aus den Dateien aus Skript 1 für beide Punktquellen.

Skript 2:

```

import os
import pandas as pd
import numpy as np
from tkinter import Tk, filedialog
from math import ceil

def read_csv_file(prompt):
    """Open a file dialog to select a CSV file and return the file
    path."""
    root = Tk()
    root.withdraw()
    root.wm_attributes('-topmost', 1)
    csv_file_path = filedialog.askopenfilename(title=prompt,
        filetypes=[("CSV Dateien", "*.csv")])
    root.destroy()
    return csv_file_path

def process_data(data, column_name, interval_width, file_suffix,
    output_folder):
    """Process the data, identify outliers, and create distribution
    table."""
    # Konvertiere die Spalte in numerische Werte (falls sie als
    Zeichenketten vorliegt)
    data[column_name] = pd.to_numeric(data[column_name],
        errors='coerce')

    # Berechne das IQR
    Q1 = data[column_name].quantile(0.05)
    Q3 = data[column_name].quantile(0.95)
    IQR = Q3 - Q1

    # Identifiziere Ausreißer mithilfe des IQR-Kriteriums nur nach oben
    upper_bound = Q3 + 1.5 * IQR
    outliers = data[data[column_name] > upper_bound]

    # Filtere die Daten, indem Ausreißer entfernt werden
    filtered_data = data[data[column_name] <= upper_bound]

    # Berechne Intervallgrenzen für die gefilterten Daten
    max_value = filtered_data[column_name].max()
    num_intervals = ceil(max_value / interval_width)
    interval_boundaries = [i * interval_width for i in
        range(num_intervals + 1)]

    # Berechne die Anzahl der Werte in jedem Intervall
    hist, _ = np.histogram(filtered_data[column_name],
        bins=interval_boundaries)

    # Teile die Anzahl der Partikel in einem Intervall durch die
    maximale Anzahl der Partikel insgesamt
    max_particles = len(filtered_data) - 1
    hist1 = hist / max_particles

    # Berechne Mittelwert, Median und Standardabweichung für gefilterte
    Daten
    mean_value = filtered_data[column_name].mean()
    median_value = filtered_data[column_name].median()
    std_deviation = filtered_data[column_name].std()

```

```
# Erstelle eine neue DataFrame für die Verteilungstabelle
distribution_table = pd.DataFrame({
    'Intervallgrenzen': interval_boundaries[:-1],
    'Partikelanteil im Intervall': hist1,
    'Anzahl der Partikel': hist
})

# Füge Mittelwert, Median und Standardabweichung in neuen Zeilen
hinzu
new_rows = pd.DataFrame({
    'Intervallgrenzen': ['Mittelwert', 'Median',
    'Standardabweichung'],
    'Anzahl der Partikel': [mean_value, median_value,
    std_deviation],
    'Partikelanteil im Intervall': [mean_value, median_value,
    std_deviation]
})

distribution_table = pd.concat([distribution_table, new_rows],
ignore_index=True)

# Bestimme den Pfad für die Ausgabedatei
output_file_path = os.path.join(output_folder,
f'Verteilung_{file_suffix}.xlsx')
outliers_file_path = os.path.join(output_folder,
f'Ausreißer_{file_suffix}.xlsx')

# Schreibe die Verteilungstabelle in die Excel-Datei
with pd.ExcelWriter(output_file_path, engine='openpyxl', mode='w')
as writer:
    distribution_table.to_excel(writer,
sheet_name='Verteilungstabelle', index=False)

# Speichere Ausreißer in separater Excel-Datei
outliers.to_excel(outliers_file_path, index=False)
print(f"Die Verteilungstabelle wurde in der Excel-Datei
'{output_file_path}' gespeichert.")
print(f"Ausreißer wurden in der Excel-Datei '{outliers_file_path}'
gespeichert.")

# Lese die beiden CSV-Dateien ein
csv_file_path_1 = read_csv_file("CSV-Datei 1 auswählen")
csv_file_path_2 = read_csv_file("CSV-Datei 2 auswählen")

# Lese die CSV-Dateien
data_1 = pd.read_csv(csv_file_path_1)
data_2 = pd.read_csv(csv_file_path_2)

# Füge die beiden Datenrahmen zusammen
combined_data = pd.concat([data_1, data_2], ignore_index=True)

# Bestimme den Ordner für die Ausgabedateien
output_folder = os.path.dirname(csv_file_path_1)

# Setze die Intervallbreiten
interval_width_1 = 1000
interval_width_2 = 100000
interval_width_3 = 0.1

# Verarbeite die Daten und erstelle die Verteilungstabellen
```

```

process_data(combined_data, 'Maximale Schubspannung (Pa)',
interval_width_1, 'Schubspannung', output_folder)
process_data(combined_data, 'Schubspannungssumme (Pa)',
interval_width_2, 'Schubspannungssumme', output_folder)
process_data(combined_data, 'Maximale ParticleAge (s)',
interval_width_3, 'Verweilzeit', output_folder)

```

A2.3 Auswertung Grauwertverteilung

```

import os
import re
import tkinter as tk
from tkinter import filedialog
from PIL import Image
import numpy as np
import pandas as pd

def get_image_folder():
    root = tk.Tk()
    root.withdraw()
    folder_selected = filedialog.askdirectory()
    return folder_selected

def calculate_grayscale_distribution(image_path):
    image = Image.open(image_path).convert('L')
    grayscale_values1 = np.array(image).flatten()

    # Filter grayscale values greater than 10
    grayscale_values = grayscale_values1[grayscale_values1 > 10]

    total_pixels = grayscale_values.size
    if total_pixels == 0: # Avoid division by zero
        distribution = {}
    else:
        unique, counts = np.unique(grayscale_values, return_counts=True)
        normalized_counts = counts / total_pixels
        distribution = dict(zip(unique, normalized_counts))

    return distribution, grayscale_values

def natural_sort_key(s):
    return [int(text) if text.isdigit() else text.lower() for text in
re.split(r'(\d+)', s)]

def save_distribution_to_excel(folder_path, distributions):
    df = pd.DataFrame()
    summary_data = {}

    for image_name, (distribution, grayscale_values) in
distributions.items():
        image_name = os.path.splitext(image_name)[0]
        temp_df = pd.DataFrame(list(distribution.items()),
columns=['Gray Value', image_name])

```

```

    # Calculate mean and standard deviation for the range 10-255
    mask = (grayscale_values >= 10) & (grayscale_values <= 126)
    mean_value = np.mean(grayscale_values[mask])
    std_dev = np.std(grayscale_values[mask])

    summary_data[image_name] = {'Mean': mean_value, 'Std Dev':
                                std_dev}

    if df.empty:
        df = temp_df
    else:
        df = pd.merge(df, temp_df, on='Gray Value', how='outer')

df = df.fillna(0).sort_values(by='Gray
Value').reset_index(drop=True)

# Adding an empty row
empty_row = pd.Series([np.nan] * len(df.columns), index=df.columns)
df = pd.concat([df, pd.DataFrame([empty_row])], ignore_index=True)

# Adding summary data (mean and std deviation)
summary_df = pd.DataFrame(summary_data).T.reset_index()
summary_df.columns = ['Image Name', 'Mean', 'Std Dev']

excel_path = os.path.join(folder_path,
'grayscale_distribution_finall.xlsx')
with pd.ExcelWriter(excel_path) as writer:
    df.to_excel(writer, sheet_name='Distributions', index=False)
    summary_df.to_excel(writer, sheet_name='Summary', index=False)

print(f'Excel file saved to {excel_path}')

def main():
    folder_path = get_image_folder()
    if not folder_path:
        print("No folder selected. Exiting...")
        return

    distributions = {}
    filenames = sorted(os.listdir(folder_path), key=natural_sort_key)
    for filename in filenames:
        if filename.lower().endswith(('.png', '.jpg', '.jpeg', '.bmp',
'.tif')):
            image_path = os.path.join(folder_path, filename)
            distribution, grayscale_values =
            calculate_grayscale_distribution(image_path)
            distributions[filename] = (distribution, grayscale_values)

    save_distribution_to_excel(folder_path, distributions)

if __name__ == '__main__':
    main()

```

A3 Datenblätter

A3.1 PP 505P



SABIC® PP 505P

PP homopolymer for Fibre, filament and tape extrusion

Description:

SABIC® PP 505P is a multi purpose grade for extrusion and injection moulding applications.

Application:

SABIC® PP 505P provides an excellent stretch ability and is suitable for extrusion of tapes, strapping, high tenacity yarns but also for thermoformed articles. For injection moulded parts SABIC® PP 505P shows a moderate stiffness, good impact resistance and very good surface hardness. SABIC PP505P is suitable for production of caps and closures and house ware articles.

Health, Safety and Food Contact regulations:

Material Safety Data Sheets (MSDS) and Product Safety declarations are available on our Internet site <http://www.SABIC-europe.com>

This grade material is UL registered under File E111275 (www.ul.com)

IMDS ID: 7172624

Typical values

Revision 20110418

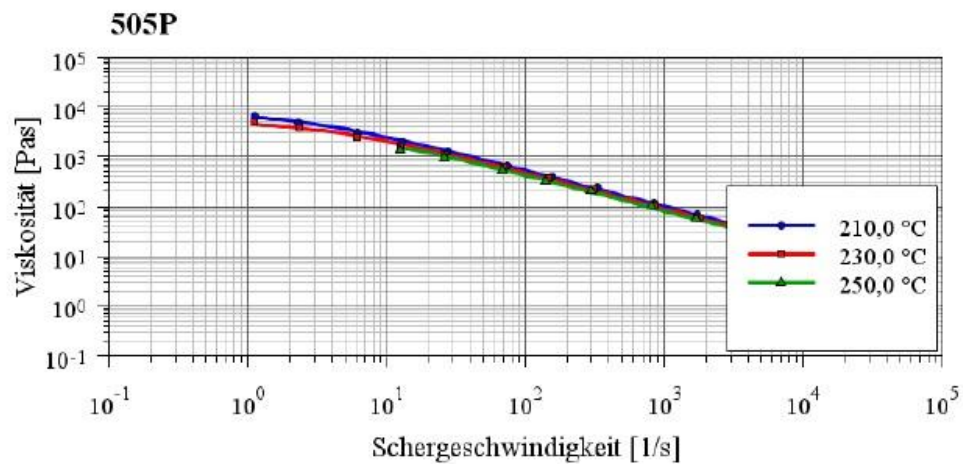
Properties	Unit (SI)	Values	Test methods
Polymer properties			
Melt flowrate (MFR) at 230 °C and 2.16 kg	g/10 min	2.0	ISO 1133
Density	kg/m ³	905	ISO 1183
Molecular Weight Distribution	-	Broad	SABIC method
Isotacticity	-	Medium	SABIC method
Formulation			
Anti block agent	-	No	SABIC method
Slip agent	-	No	SABIC method
Anti static agent	-	No	SABIC method
Nucleating agent	-	No	SABIC method
Gas fading stabilized	-	No	SABIC method
Mechanical properties			
Tensile test			ISO 527
stress at yield	MPa	41	
stress at break	MPa	36	
strain at break	%	600	
Flexural test			ASTM D 790
Flexural modulus	MPa	1450	
Thermal properties			
Vicat softening temperature			
at 10 N (VST/A)	°C	152	ISO 306/A
at 50 N (VST/B)	°C	87	ISO 306/B

Auswertung der Materialdaten

Materialname	505P		
Materialtyp	PP		
Materialbearbeiter	Oldemeier		
Datum	01.08.2023		
Kommentar	Schmelzedichte und WLF aus Messung von 2004/2016		
Rheologische Materialdaten:			
Berechnungsart	Carreau	WLF(Tb,Ts)	
Nullviskosität	A	5430,78909	Pa*s
Reziproke Übergangsschergeschwindigkeit	B	0,27825	s
Steigung	C	0,72881	
Bezugstemperatur	Tb	230,0	°C
Standardtemperatur	Ts	4,22911	°C
WLF-Konstante 1	C1	8,86	
WLF-Konstante 2	C2	101,6	°C
Thermodynamische Daten (Dichten):			
Feststoffdichte	rho f	0,903	g/cm³
Schüttdichte	rho s	0,54	g/cm³
Schmelzdichte extrapoliert auf 0°C und einem Bezugsdruck von 100,0 bar	rho 0	0,874083	g/cm³
Steigung der Dichte	rho m	0,000525	(g/cm³)/°C
Kompressibilitätsfaktor	kappa	0,978814	1/Pa
Thermodynamische Daten:			
Schmelztemperatur	Tk/Tg	169,33	°C
Wärmekapazität der Schmelze extrapoliert auf 0°C	cp0	2,071	kJ/(kg*K)
Steigung der spezifischen Wärmekapazität	cpm	0,002524	J/(g*K*°C)
Wärmeleitfähigkeit der Schmelze extrapoliert auf 0°C	lambda 0	0,15825	W/(m*K)
Steigung der Wärmeleitfähigkeitsfunktion	lambda m	0,0	W/(m*K*°C)
Wärmeleitfähigkeit des Feststoffs	lambda f	0,143	W/(m*K)
Molekülstruktur des Materials		Teilkristallin	
Aufschmelzenthalpie	hA	186,8	J/g
Feststoffenthalpie	hF	255,1	J/g
Technologische Daten:			
Minimaler Granulatdurchmesser	Dg,min	3,55	mm
Maximaler Granulatdurchmesser	Dg,max	4,17	mm
Granulatdurchmesser	d	3,79	mm
Tribologische Daten:			

Molekulargewicht:			
Polydispersität	PD	0,0	
Melt Flow Rate [—°C; —kg]	MFI	0,0	g/10min
Melt Volume Rate [—°C; —kg]	MVR	0,0	cm³/10min
Parameter Materialabbau ::			
Temperaturempfindlichkeit	T 0	49747,645	°C
Schergeschwindigkeitsempfindlichkeit	T 0	62208,988	°C
Verweilzeitempfindlichkeit	tv 0	1,5494	s
Faserabbau:			

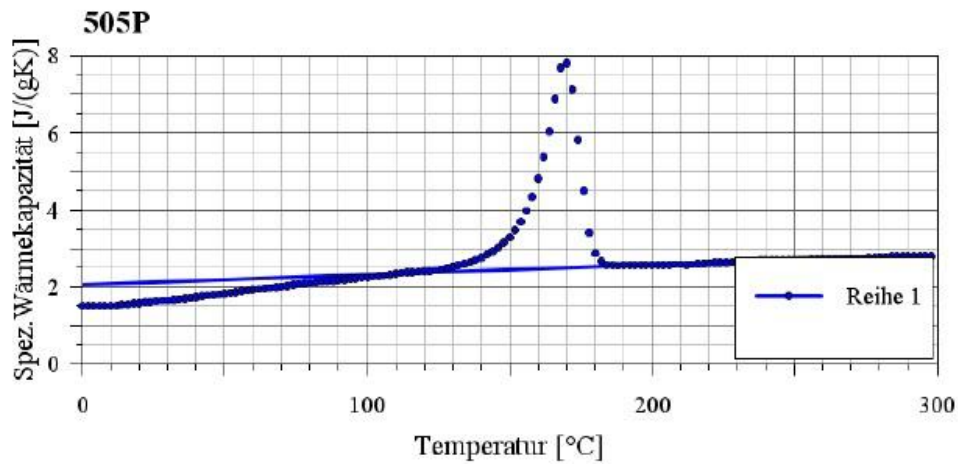
Rheologische Messungen



Temperatur [°C]	Schergeschwindigkeit [1/s]	Viskosität [Pas]
210,0	1,12	6452,45
210,0	2,32	4844,23
210,0	6,14	3026,91
210,0	12,9	1988,26
210,0	27,39	1264,51
210,0	73,76	660,46
210,0	156,29	397,87
210,0	331,89	238,9
210,0	853,26	117,02
210,0	1724,99	68,05
210,0	3461,79	39,55
210,0	8807,32	19,61
230,0	1,12	4954,83
230,0	2,32	3819,17
230,0	6,07	2493,62
230,0	12,55	1705,04
230,0	26,17	1124,48
230,0	69,49	611,29
230,0	146,96	373,55
230,0	313,29	222,87
230,0	854,21	108,54
230,0	1796,51	61,0
230,0	3756,25	33,81
230,0	9890,31	15,31

Temperatur [°C]	Schergeschwindigkeit [1/s]	Viskosität [Pas]
250,0	12,48	1414,9
250,0	25,89	960,33
250,0	67,79	542,0
250,0	139,58	335,16
250,0	297,32	207,9
250,0	806,68	104,4
250,0	1710,19	59,52
250,0	3614,6	32,9
250,0	9915,59	14,64
250,0	21397,08	7,75

Spezifische Wärmekapazität



Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
0,0	1,5
2,01	1,5
4,01	1,5
6,01	1,5
8,01	1,5
10,01	1,5
12,01	1,52
14,01	1,54
16,01	1,55
18,01	1,57
20,01	1,58
22,01	1,6
24,01	1,61
26,01	1,63
28,01	1,65
30,01	1,66
32,01	1,67
34,01	1,69
36,01	1,7
38,01	1,72
40,01	1,74
42,01	1,76
44,01	1,78
46,01	1,79

Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
48,01	1,81
50,01	1,83
52,01	1,85
54,01	1,87
56,01	1,89
58,01	1,91
60,01	1,93
62,01	1,94
64,01	1,96
66,01	1,98
68,01	1,99
70,01	2,01
72,01	2,03
74,01	2,05
76,01	2,07
78,01	2,09
80,01	2,1
82,01	2,12
84,01	2,14
86,01	2,15
88,01	2,16
90,01	2,18
92,01	2,19
94,01	2,21

Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
96,01	2,22
98,01	2,24
100,01	2,25
102,01	2,27
104,01	2,29
106,01	2,3
108,01	2,32
110,01	2,34
112,01	2,36
114,01	2,37
116,01	2,38
118,01	2,39
120,01	2,4
122,01	2,41
124,01	2,43
126,01	2,46
128,01	2,49
130,01	2,52
132,01	2,56
134,01	2,6
136,01	2,65
138,01	2,7
140,01	2,77
142,01	2,84

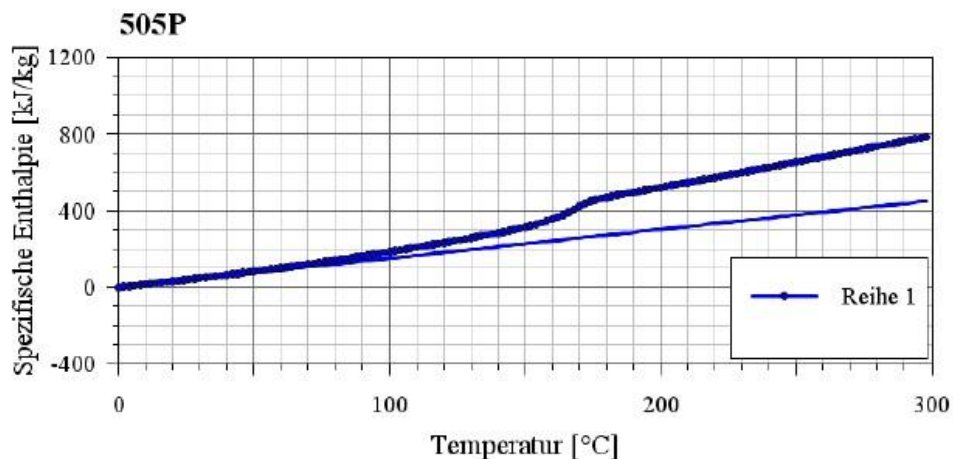


Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
144,01	2,93
146,01	3,03
148,01	3,15
150,01	3,29
152,01	3,47
154,01	3,69
156,01	3,97
158,01	4,34
160,01	4,81
162,01	5,37
164,01	6,05
166,01	6,88
168,01	7,68
170,01	7,81
172,01	7,13
174,01	5,81
176,01	4,49
178,01	3,41
180,01	2,87
182,01	2,66
184,01	2,58
186,01	2,56
188,01	2,55
190,01	2,56
192,01	2,56
194,01	2,56
196,01	2,57
198,01	2,57
200,01	2,57
202,01	2,58
204,01	2,58
206,01	2,58
208,01	2,59
210,01	2,59
212,01	2,58
214,01	2,59
216,01	2,6
218,01	2,61
220,01	2,62
222,01	2,63
224,01	2,64
226,01	2,64
228,01	2,65
230,01	2,66



Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
232,01	2,67
234,01	2,68
236,01	2,68
238,01	2,69
240,01	2,69
242,01	2,7
244,01	2,7
246,01	2,7
248,01	2,71
250,01	2,71
252,01	2,72
254,01	2,72
256,01	2,73
258,01	2,73
260,01	2,73
262,01	2,74
264,01	2,74
266,01	2,74
268,01	2,75
270,01	2,75
272,01	2,75
274,01	2,75
276,01	2,76
278,01	2,77
280,01	2,78
282,01	2,78
284,01	2,79
286,01	2,8
288,01	2,8
290,01	2,8
292,01	2,8
294,01	2,8
296,01	2,8
298,01	2,8

Enthalpie



Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
0,0	0,0
2,01	3,02
4,01	6,02
6,01	9,02
8,01	12,02
10,01	15,02
12,01	18,06
14,01	21,14
16,01	24,24
18,01	27,38
20,01	30,54
22,01	33,74
24,01	36,96
26,01	40,22
28,01	43,52
30,01	46,84
32,01	50,18
34,01	53,56
36,01	56,96
38,01	60,4
40,01	63,88
42,01	67,4
44,01	70,96
46,01	74,54

Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
48,01	78,16
50,01	81,82
52,01	85,52
54,01	89,26
56,01	93,04
58,01	96,86
60,01	100,72
62,01	104,6
64,01	108,52
66,01	112,48
68,01	116,46
70,01	120,48
72,01	124,54
74,01	128,64
76,01	132,78
78,01	136,96
80,01	141,16
82,01	145,4
84,01	149,68
86,01	153,98
88,01	158,3
90,01	162,66
92,01	167,04
94,01	171,46

Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
96,01	175,9
98,01	180,38
100,01	184,88
102,01	189,42
104,01	194,0
106,01	198,6
108,01	203,24
110,01	207,92
112,01	212,64
114,01	217,38
116,01	222,14
118,01	226,92
120,01	231,72
122,01	236,54
124,01	241,4
126,01	246,32
128,01	251,3
130,01	256,34
132,01	261,46
134,01	266,66
136,01	271,96
138,01	277,36
140,01	282,9
142,01	288,58

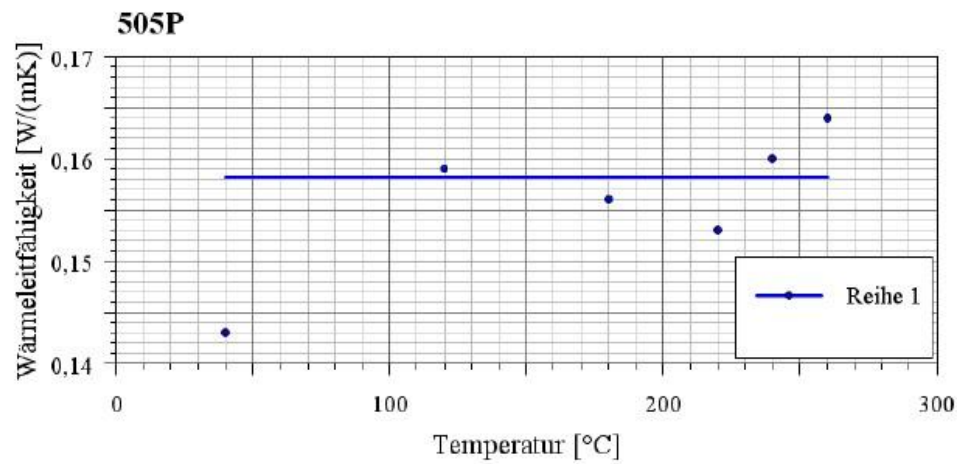


Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
144,01	294,44
146,01	300,5
148,01	306,8
150,01	313,38
152,01	320,32
154,01	327,7
156,01	335,64
158,01	344,32
160,01	353,94
162,01	364,68
164,01	376,78
166,01	390,54
168,01	405,9
170,01	421,52
172,01	435,78
174,01	447,4
176,01	456,38
178,01	463,2
180,01	468,94
182,01	474,26
184,01	479,42
186,01	484,54
188,01	489,64
190,01	494,76
192,01	499,88
194,01	505,0
196,01	510,14
198,01	515,28
200,01	520,42
202,01	525,58
204,01	530,74
206,01	535,9
208,01	541,08
210,01	546,26
212,01	551,42
214,01	556,6
216,01	561,8
218,01	567,02
220,01	572,26
222,01	577,52
224,01	582,8
226,01	588,08
228,01	593,38
230,01	598,7



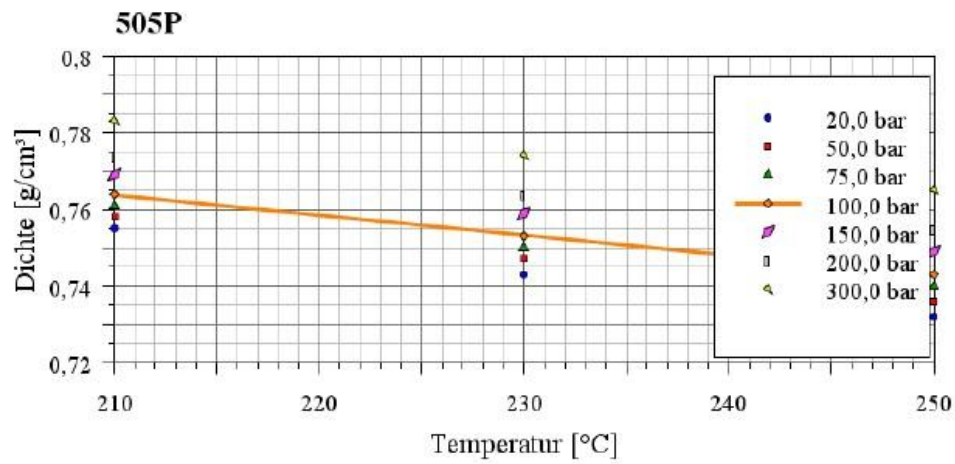
Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
232,01	604,04
234,01	609,4
236,01	614,76
238,01	620,14
240,01	625,52
242,01	630,92
244,01	636,32
246,01	641,72
248,01	647,14
250,01	652,56
252,01	658,0
254,01	663,44
256,01	668,9
258,01	674,36
260,01	679,82
262,01	685,3
264,01	690,78
266,01	696,26
268,01	701,76
270,01	707,26
272,01	712,76
274,01	718,26
276,01	723,78
278,01	729,32
280,01	734,88
282,01	740,44
284,01	746,02
286,01	751,62
288,01	757,22
290,01	762,82
292,01	768,42
294,01	774,02
296,01	779,62
298,01	785,22

Wärmeleitfähigkeit



Temperatur [°C]	Wärmeleitfähigkeit [W/(mK)]
40,0	0,143
120,0	0,159
180,0	0,156
220,0	0,153
240,0	0,16
260,0	0,164

Dichte



Temperatur [°C]	Druck [bar]	Dichte [g/cm³]
210,0	20,0	0,755
230,0	20,0	0,743
250,0	20,0	0,732
210,0	50,0	0,758
230,0	50,0	0,747
250,0	50,0	0,736
210,0	75,0	0,761
230,0	75,0	0,75
250,0	75,0	0,74
210,0	100,0	0,764
230,0	100,0	0,753
250,0	100,0	0,743
210,0	150,0	0,769
230,0	150,0	0,759
250,0	150,0	0,749
210,0	200,0	0,774
230,0	200,0	0,764
250,0	200,0	0,755
210,0	300,0	0,783
230,0	300,0	0,774
250,0	300,0	0,765
210,0	400,0	0,791
230,0	400,0	0,782
250,0	400,0	0,774

A3.2 PP FPH50



SABIC® PP FPH50

PP Homopolymer FLOWPACT for Injection moulding

Description:

SABIC® PP FPH50 is a grade developed for thin wall packaging as well as the caps & closures market. The grade is nucleated and is characterised by a high crystallisation temperature, excellent flow behaviour in combination with a high stiffness. SABIC® PP FPH50 allows for very cost efficient processing on the basis of easy mould filling, very short cycle times and robust processing behaviour in combination with pigments. It has a very good antistatic performance and shows easy demoulding.

Application:

SABIC® PP FPH50 is typically used in thin wall packing applications both for food and non-food segments. In caps and closure, the grade could be used for wide mouth caps, amongst others. In media packaging, the grade offers opportunities for cycle time optimisation. The grade has excellent heat deflection temperature making it particularly suitable for hot fill applications.

Health, Safety and Food Contact regulations:

Material Safety Data Sheets (MSDS) and Product Safety declarations are available on our Internet site

<http://www.SABIC-europe.com>

The product mentioned herein is in particular not tested and therefore not validated for use in pharmaceutical/ medical applications.

This grade material is UL registered under File E111275 (www.ul.com) / IMDS 7172624

Typical values

		Revision	
Properties	Unit (SI)	Values	Test methods
Polymer properties			
Melt flowrate (MFR) at 230 °C and 2.16 kg	dg/min	50	ISO 1133
Density	kg/m ³	905	ISO 1183
Formulation			
Anti static agent	-	Yes	-
Nucleating agent	-	Yes	-
Mechanical properties			
Tensile test			ISO 527-2 1A
stress at yield ¹⁾	MPa	39	
strain at yield ¹⁾	%	7	
tensile modulus ²⁾	MPa	2050	
Izod impact notched at 23 °C	kJ/m ²	2.5	ISO 180/1A
Charpy impact notched at 23 °C	kJ/m ²	3.0	ISO 179/1eA
Hardness Shore D	-	71	ISO 868
Thermal properties			
Heat deflection temperature ³⁾ at 1.80 MPa (HDT/A)	°C	60	ISO 75
at 0.45 MPa (HDT/B)	°C	105	
Vicat softening temperature ⁴⁾ at 10 N (VST/A)	°C	154	ISO 306
at 50 N (VST/B)	°C	103	

¹⁾ Speed of testing: 50 mm/min

²⁾ Speed of testing: 1 mm/min

³⁾ Flat beam (180°) 10°/min

⁴⁾ Temperature rate: 120 °C/h

Internet www.sabic-europe.com
Email pp.info@sabic-europe.com

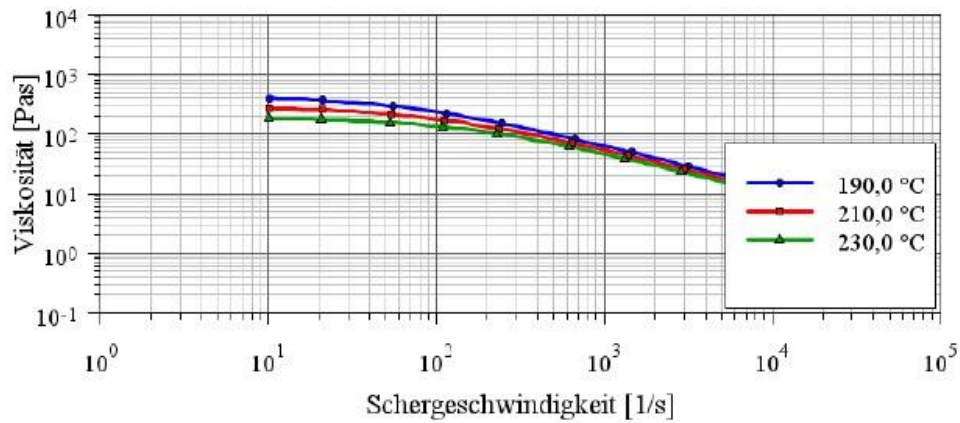
Auswertung der Materialdaten

Materialname	PP Homo FPH50		
Materialtyp	PP		
Materialbearbeiter	Hanselle		
Datum	12.10.2023		
Kommentar	Interen Messung Oldemeier Keine Vortrocknung		
Rheologische Materialdaten:			
Berechnungsart	Carreau	WLF(Tb,Ts)	
Nullviskosität	A	284,20951	Pa*s
Reziproke Übergangsschergeschwindigkeit	B	0,00942	s
Steigung	C	0,71087	
Bezugstemperatur	Tb	210,0	°C
Standardtemperatur	Ts	-3,56282	°C
WLF-Konstante 1	C1	8,86	
WLF-Konstante 2	C2	101,6	°C
Thermodynamische Daten (Dichten):			
Feststoffdichte	rho f	0,875	g/cm³
Schüttdichte	rho s	0,56	g/cm³
Schmelzdichte extrapoliert auf 0°C und einem Bezugsdruck von 100,0 bar	rho 0	0,894083	g/cm³
Steigung der Dichte	rho m	0,000575	(g/cm³)/°C
Thermodynamische Daten:			
Schmelztemperatur	Tk/Tg	166,69	°C
Wärmekapazität der Schmelze extrapoliert auf 0°C	cp0	2,181	kJ/(kg*K)
Steigung der spezifischen Wärmekapazität	cpm	0,002815	J/(g*K*°C)
Wärmeleitfähigkeit der Schmelze extrapoliert auf 0°C	lambda 0	0,1573	W/(m*K)
Steigung der Wärmeleitfähigkeitsfunktion	lambda m	0,0001	W/(m*K*°C)
Wärmeleitfähigkeit des Feststoffs	lambda f	0,112	W/(m*K)
Molekülstruktur des Materials		Teilkristallin	
Aufschmelzenthalpie	hA	151,2	J/g
Feststoffenthalpie	hF	277,8	J/g
Technologische Daten:			
Minimaler Granulatdurchmesser	Dg,min	3,56	mm
Maximaler Granulatdurchmesser	Dg,max	4,04	mm
Granulatdurchmesser	d	3,89	mm
Tribologische Daten:			

Molekulargewicht:			
Polydispersität	PD	0,0	
Melt Flow Rate [—°C; —kg]	MFI	0,0	g/10min
Melt Volume Rate [—°C; —kg]	MVR	0,0	cm³/10min
Parameter Materialabbau ::			
Temperaturempfindlichkeit	T 0	49747,645	°C
Schergeschwindigkeitsempfindlichkeit	T 0	62208,988	°C
Verweilzeitsempfindlichkeit	tv 0	1,5494	s
Faserabbau:			

Rheologische Messungen

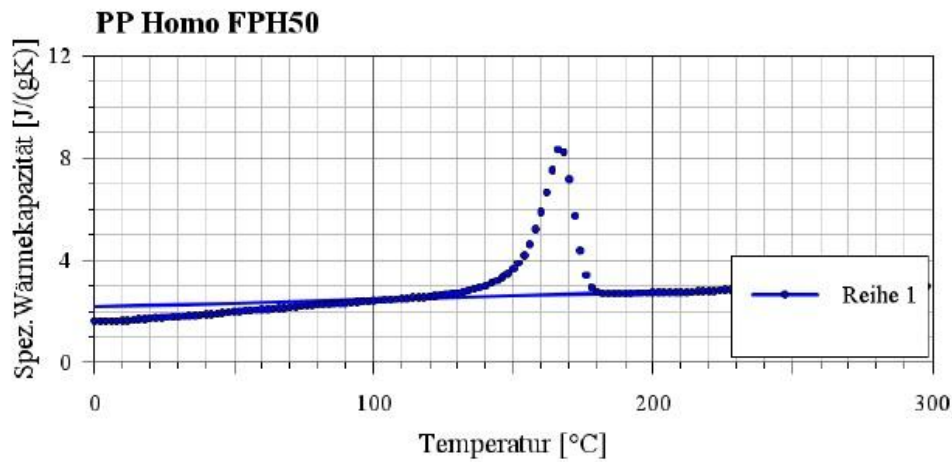
PP Homo FPH50



Temperatur [°C]	Schergeschwindigkeit [1/s]	Viskosität [Pas]
190,0	10,19	391,76
190,0	21,22	369,55
190,0	55,1	287,35
190,0	115,33	218,06
190,0	245,21	152,13
190,0	673,98	83,31
190,0	1462,79	49,74
190,0	3165,12	28,79
190,0	8643,13	13,74
190,0	18198,1	7,85
210,0	10,11	266,86
210,0	21,0	259,46
210,0	53,94	210,07
210,0	112,12	167,16
210,0	235,66	121,89
210,0	644,38	71,3
210,0	1390,44	43,93
210,0	3007,15	26,04
210,0	8236,85	12,67
210,0	17409,12	7,31
230,0	10,07	187,04
230,0	20,69	181,86
230,0	53,3	156,77
230,0	109,35	128,09

Temperatur [°C]	Schergeschwindigkeit [1/s]	Viskosität [Pas]
230,0	229,1	98,73
230,0	618,88	60,98
230,0	1327,58	38,81
230,0	2869,48	23,54
230,0	7914,37	11,66
230,0	16906,07	6,79

Spezifische Wärmekapazität



Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
0,0	1,62
2,0	1,62
4,0	1,62
6,0	1,62
8,0	1,62
10,0	1,63
12,0	1,64
14,0	1,66
16,0	1,68
18,0	1,69
20,0	1,71
22,0	1,73
24,0	1,74
26,0	1,76
28,0	1,77
30,0	1,79
32,0	1,81
34,0	1,82
36,0	1,84
38,0	1,86
40,0	1,87
42,0	1,89
44,0	1,9
46,0	1,93

Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
48,0	1,95
50,0	1,97
52,0	1,99
54,0	2,01
56,0	2,03
58,0	2,05
60,0	2,06
62,0	2,08
64,0	2,1
66,0	2,11
68,0	2,13
70,0	2,15
72,0	2,17
74,0	2,19
76,0	2,21
78,0	2,23
80,0	2,25
82,0	2,27
84,0	2,28
86,0	2,29
88,0	2,31
90,0	2,32
92,0	2,34
94,0	2,36

Temperatur [°C]	Spez. Wärmekapazität [J/(gK)]
96,0	2,38
98,0	2,39
100,0	2,41
102,0	2,43
104,0	2,45
106,0	2,46
108,0	2,48
110,0	2,5
112,0	2,52
114,0	2,54
116,0	2,55
118,0	2,56
120,0	2,58
122,0	2,6
124,0	2,63
126,0	2,66
128,0	2,7
130,0	2,73
132,0	2,77
134,0	2,82
136,0	2,87
138,0	2,94
140,0	3,01
142,0	3,1



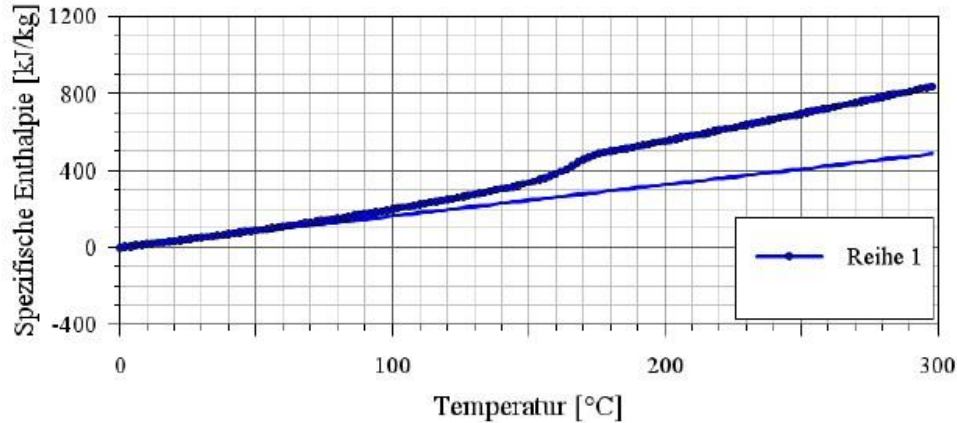
Temperatur [°C]	Spez. Wärme- kapazität [J/(gK)]
144,0	3,2
146,0	3,32
148,0	3,46
150,0	3,65
152,0	3,88
154,0	4,19
156,0	4,62
158,0	5,19
160,0	5,88
162,0	6,63
164,0	7,52
166,0	8,32
168,0	8,22
170,0	7,17
172,0	5,74
174,0	4,38
176,0	3,4
178,0	2,93
180,0	2,77
182,0	2,71
184,0	2,7
186,0	2,7
188,0	2,7
190,0	2,71
192,0	2,71
194,0	2,72
196,0	2,73
198,0	2,73
200,0	2,74
202,0	2,75
204,0	2,75
206,0	2,76
208,0	2,76
210,0	2,76
212,0	2,76
214,0	2,77
216,0	2,78
218,0	2,79
220,0	2,8
222,0	2,81
224,0	2,82
226,0	2,83
228,0	2,83
230,0	2,84



Temperatur [°C]	Spez. Wärme- kapazität [J/(gK)]
232,0	2,85
234,0	2,85
236,0	2,86
238,0	2,86
240,0	2,87
242,0	2,88
244,0	2,88
246,0	2,88
248,0	2,89
250,0	2,89
252,0	2,9
254,0	2,91
256,0	2,92
258,0	2,92
260,0	2,93
262,0	2,93
264,0	2,93
266,0	2,94
268,0	2,94
270,0	2,95
272,0	2,95
274,0	2,95
276,0	2,95
278,0	2,96
280,0	2,97
282,0	2,97
284,0	2,98
286,0	2,98
288,0	2,99
290,0	2,99
292,0	2,99
294,0	2,99
296,0	2,99
298,0	2,99

Enthalpie

PP Homo FPH50



Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
0,0	0,0
2,0	3,24
4,0	6,48
6,0	9,72
8,0	12,96
10,0	16,21
12,0	19,48
14,0	22,78
16,0	26,12
18,0	29,49
20,0	32,89
22,0	36,33
24,0	39,8
26,0	43,3
28,0	46,83
30,0	50,39
32,0	53,99
34,0	57,62
36,0	61,28
38,0	64,98
40,0	68,71
42,0	72,47
44,0	76,26
46,0	80,09

Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
48,0	83,97
50,0	87,89
52,0	91,85
54,0	95,85
56,0	99,89
58,0	103,97
60,0	108,08
62,0	112,22
64,0	116,4
66,0	120,61
68,0	124,85
70,0	129,13
72,0	133,45
74,0	137,81
76,0	142,21
78,0	146,65
80,0	151,13
82,0	155,65
84,0	160,2
86,0	164,77
88,0	169,37
90,0	174,0
92,0	178,66
94,0	183,36

Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
96,0	188,1
98,0	192,87
100,0	197,67
102,0	202,51
104,0	207,39
106,0	212,3
108,0	217,24
110,0	222,22
112,0	227,24
114,0	232,3
116,0	237,39
118,0	242,5
120,0	247,64
122,0	252,82
124,0	258,05
126,0	263,34
128,0	268,7
130,0	274,13
132,0	279,63
134,0	285,22
136,0	290,91
138,0	296,72
140,0	302,67
142,0	308,78

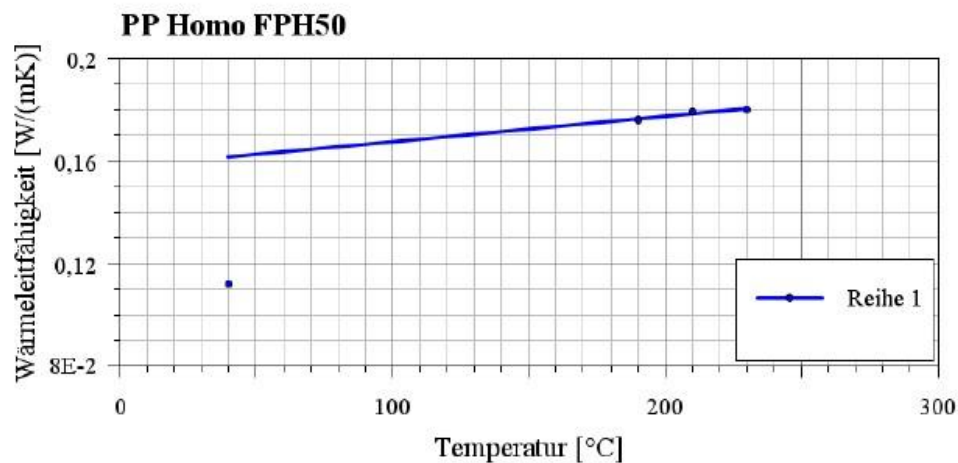


Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
144,0	315,08
146,0	321,6
148,0	328,38
150,0	335,49
152,0	343,02
154,0	351,09
156,0	359,9
158,0	369,71
160,0	380,78
162,0	393,29
164,0	407,44
166,0	423,28
168,0	439,82
170,0	455,21
172,0	468,12
174,0	478,24
176,0	486,02
178,0	492,35
180,0	498,05
182,0	503,53
184,0	508,94
186,0	514,34
188,0	519,74
190,0	525,15
192,0	530,57
194,0	536,0
196,0	541,45
198,0	546,91
200,0	552,38
202,0	557,87
204,0	563,37
206,0	568,88
208,0	574,4
210,0	579,92
212,0	585,44
214,0	590,97
216,0	596,52
218,0	602,09
220,0	607,68
222,0	613,29
224,0	618,92
226,0	624,57
228,0	630,23
230,0	635,9



Temperatur [°C]	Enthalpie [J/g]
232,0	641,59
234,0	647,29
236,0	653,0
238,0	658,72
240,0	664,45
242,0	670,2
244,0	675,96
246,0	681,72
248,0	687,49
250,0	693,27
252,0	699,06
254,0	704,87
256,0	710,7
258,0	716,54
260,0	722,39
262,0	728,25
264,0	734,11
266,0	739,98
268,0	745,86
270,0	751,75
272,0	757,65
274,0	763,55
276,0	769,45
278,0	775,36
280,0	781,29
282,0	787,23
284,0	793,18
286,0	799,14
288,0	805,11
290,0	811,09
292,0	817,07
294,0	823,05
296,0	829,03
298,0	835,01

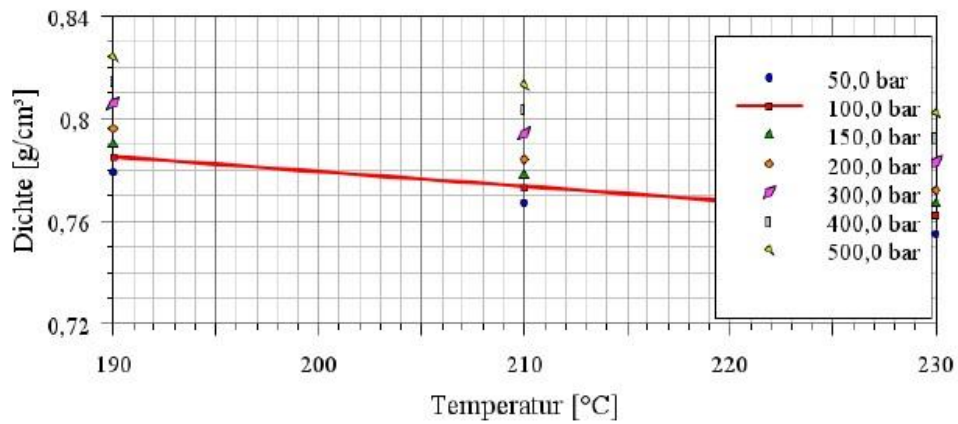
Wärmeleitfähigkeit



Temperatur [°C]	Wärmeleitfähigkeit [W/(mK)]
40,0	0,112
190,0	0,176
210,0	0,179
230,0	0,18

Dichte

PP Homo FPH50



Temperatur [°C]	Druck [bar]	Dichte [g/cm³]
190,0	50,0	0,779
210,0	50,0	0,767
230,0	50,0	0,755
190,0	100,0	0,785
210,0	100,0	0,773
230,0	100,0	0,762
190,0	150,0	0,79
210,0	150,0	0,778
230,0	150,0	0,767
190,0	200,0	0,796
210,0	200,0	0,784
230,0	200,0	0,772
190,0	300,0	0,806
210,0	300,0	0,794
230,0	300,0	0,783
190,0	400,0	0,815
210,0	400,0	0,804
230,0	400,0	0,793
190,0	500,0	0,824
210,0	500,0	0,813
230,0	500,0	0,802

A3.3 Finntalc M30

ELEMENTIS

A global specialty chemicals company

FINNTALC M30

Functional Extender

GENERAL INFORMATION

FINNTALC M30 is a hydrated magnesium silicate with chemical formula of $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$.

Finntalc grades are purified in a cascade of multiple flotation cells. This process results in a tight definition of the talc composition, making this natural product similar to a synthetic chemical. In combination with a precisely controlled particle size distribution, this ensures exact reproducibility in formulations.

APPLICATIONS

- Paints & Coatings: Matt architectural coatings with dark colours, general purpose industrial coatings with dry film thickness of 80 - 100 μm
- Adhesives
- Sealants
- Plastics: For automotive cabin and under the hood, appliances, pipes, powdering, profiles and furniture.
- Fertilizers

KEY PROPERTIES

- Pure, lamellar, coarse particle size talc, stable colour, very hydrophobic, inert and soft.

INCORPORATION

FINNTALC M30 can be used as a functional extender to achieve following results:

Paints & Coatings: Good barrier properties, good anti-corrosion properties, good reinforcement of paint film, good adhesion and sandability, matting of high PVC paint.

Plastics: Consistent colour, low abrasion and longer tool life.

LEVELS OF USE

Typical use levels for paints and coatings applications are 10 - 30 % depending upon the application and the desired properties.

Typical use levels for talc in plastics depending upon the application. Please contact your local sales representative for advice.

HEALTH AND SAFETY

Before using this product please consult our Safety Data Sheet (SDS) for information on safe handling and storage. The SDS can be found on the company website.

STORAGE RECOMMENDATIONS

Store dry.

SHELF LIFE

FINNTALC M30 has a shelf life of 5 (five) years from the date of manufacture.

QUALITY ASSURANCE

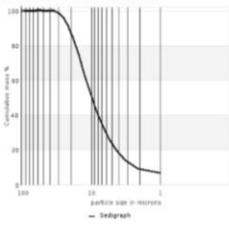
Since 1992 the company is a holder of the ISO 9001 certificate, which guarantees that all operations are conducted according to the stipulated standards.

continued...

ELEMENTIS

A global specialty chemicals company

FINNTALC M30

MINERALOGY	Talc (Mg-Silicate)		97	%
	Traces of magnesite, dolomite and chlorite			
CHEMICAL PROPERTIES	CAS-No. 14807-96-6	EINECS-No. 238-877-9		
	MgO	XRF	31	%
	SiO ₂	XRF	60	%
	Al ₂ O ₃	XRF	0.5	%
	Fe ₂ O ₃	XRF	2.2	%
	Fe acid soluble	1mol/L HCl, 100°C	0.2	%
	Loss on ignition	DIN 51081/1000°C	6	%
OPTICAL PROPERTIES	pH value	ISO 787/9	9.1	
	Whiteness Ry	DIN 53163	81	%
	ISO brightness R457	ISO 2470	80	%
	CIE L*, a*, b*	DIN 6174	92/-0.4/1.0	
	Yellowness index	DIN 6167	1.7	
PHYSICAL PROPERTIES	Top cut D98	Sedigraph, ISO 13317	35	µm
	Median particle size D50	Sedigraph, ISO 13317	10	µm
	Fineness of grind	ISO 1524	110	µm
	Specific surface area	BET, ISO 4652	3	m ² /g
	Oil absorption	ISO 787/5	30	g/100g
	Abrasion	Einlehner AT 1000	5	mg
	Hardness	Mohs	1	
	Tapped density	ISO 787/11	0.7	g/cm ³
	Bulk density	DIN 53468	0.5	g/cm ³
	Moisture	ISO 787/2	0.05	%
				

NOTE: The information herein is currently believed to be accurate. We do not guarantee its accuracy. Purchasers shall not rely on statements herein when purchasing any products. Purchasers should make their own investigations to determine if such products are suitable for a particular use. The products discussed are sold without warranty, express or implied, including a warranty of merchantability and fitness for use. Purchasers will be subject to a separate agreement which will not incorporate this document.

© Copyright 2019, Elementis Specialties, Inc. All rights reserved. Copying and/or downloading of this document or information therein for republication is not allowed unless prior written agreement is obtained from Elementis Specialties, Inc.

® Trademark of Elementis Minerals B.V.

V03 Dec. 2019

North America
Elementis
469 Old Trenton Road
East Windsor
NJ 08512, USA
Tel.: +1 609 443 2500
Fax: +1 609 443 2422

Europe
Elementis UK Ltd.
c/o Elementis GmbH
Stolberger Strasse 370
50933 Cologne, Germany
Tel.: +49 221 2923 2066
Fax: +49 221 2923 2011

Elementis Minerals B.V.
Kajuitweg 8
NL-1041 AR Amsterdam
The Netherlands
Tel.: +31 20 4487 448

Asia
Deuchem (Shanghai) Chemical Co., Ltd.
99, Lianyang Road
Songjiang Industrial Zone
Shanghai, China 201613
Tel.: +86 21 5774 0348
Fax: +86 21 5774 3563

www.elementis.com

A3.4 Finntalc M05N

ELEMENTIS

A global specialty chemicals company

FINNTALC M05N

Functional Extender

GENERAL INFORMATION

FINNTALC M05N is a hydrated magnesium silicate with chemical formula of $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$.

Finntalc grades are purified in a cascade of multiple flotation cells. This process results in a tight definition of the talc composition, making this natural product similar to a synthetic chemical. In combination with a precisely controlled particle size distribution, this ensures exact reproducibility in formulations.

APPLICATIONS

- **Paints & Coatings:** thin layer (dry film thickness of 15 - 30 μm) architectural and industrial coatings, wood primers and stains, varnish, tinting pastes.
- **Plastics:** For antiblock, automotive bumpers, foam, film, nucleation.

KEY PROPERTIES

- Pure, lamellar fine talc with narrow particle size distribution and stable colour, very hydrophobic, inert and soft.

INCORPORATION

FINNTALC M05N can be used as a functional extender to achieve following results:

Paints & Coatings: Good barrier properties, good outdoor durability, good sandability, matting of low PVC paints, finetuning of rheological properties and efficient pigment spacer.

Plastics: High performance grade in plastics. Good impact properties. Compacted grades are available for low dust generation and easy handling resulting in higher compounding throughput.

LEVELS OF USE

Typical use levels for paints and coatings applications are 5 - 15 % depending upon the application and the desired properties.

Typical use levels for talc in plastics depending upon the application. Please contact your local sales representative for advice.

HEALTH AND SAFETY

Before using this product please consult our Safety Data Sheet (SDS) for information on safe handling and storage. The SDS can be found on the company website.

STORAGE RECOMMENDATIONS

Store dry.

SHELF LIFE

FINNTALC M05N has a shelf life of 5 (five) years from the date of manufacture.

QUALITY ASSURANCE

Since 1992 the company is a holder of the ISO 9001 certificate, which guarantees that all operations are conducted according to the stipulated standards.

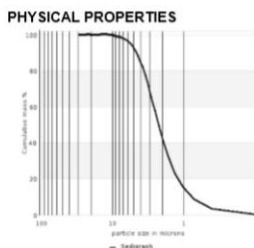
continued...

ELEMENTIS

A global specialty chemicals company

FINNTALC M05N

MINERALOGY	Talc (Mg-Silicate)		97	%
	Traces of magnesite, dolomite and chlorite			
	CAS-No. 14807-96-6	EINECS-No. 238-877-9		
CHEMICAL PROPERTIES	MgO	XRF	31	%
	SiO2	XRF	60	%
	CaO	XRF	0.1	%
	Al2O3	XRF	0.5	%
	Fe2O3	XRF	2.2	%
	Fe acid soluble	1mol/L HCl, 100°C	0.2	%
	Loss on ignition	DIN 51081/1000°C	6	%
	pH value	ISO 787/9	9.1	
OPTICAL PROPERTIES	Whiteness Ry	DIN 53163	86	%
	ISO brightness R457	ISO 2470	84.9	%
	Refractive index	Mallard	1.57	
	CIE L*, a*, b*	DIN 6174	94/-0.3/0.7	
	Yellowness index	DIN 6167	1.1	
PHYSICAL PROPERTIES	Top cut D98	Sedigraph, ISO 13317	10	µm
	Median particle size D50	Sedigraph, ISO 13317	2.2	µm
	Fineness of grind	ISO 1524	25	µm
	Specific surface area	BET , ISO 4652	9.5	m²/g
	Oil absorption	ISO 787/5	48	g/100g
	Abrasion	Einlehner AT 1000	5	mg
	Hardness	Mohs	1	



NOTE: The information herein is currently believed to be accurate. We do not guarantee its accuracy. Purchasers shall not rely on statements herein when purchasing any products. Purchasers should make their own investigations to determine if such products are suitable for a particular use. The products discussed are sold without warranty, express or implied, including a warranty of merchantability and fitness for use. Purchasers will be subject to a separate agreement which will not incorporate this document.

© Copyright 2019, Elementis Specialties, Inc. All rights reserved. Copying and/or downloading of this document or information therein for republication is not allowed unless prior written agreement is obtained from Elementis Specialties, Inc.

® Trademark of Elementis Minerals B.V.

V02 Dec. 2019

North America
Elementis
469 Old Trenton Road
East Windsor
NJ 08512, USA
Tel.: +1 609 443 2500
Fax: +1 609 443 2422

Europe
Elementis UK Ltd.
c/o Elementis GmbH
Stolberger Strasse 370
50933 Cologne, Germany
Tel.: +49 221 2923 2066
Fax: +49 221 2923 2011

Elementis Minerals B.V.
Kajuitweg 8
NL-1041 AR Amsterdam
The Netherlands
Tel.: +31 20 4487 448

Asia
Deuchem (Shanghai) Chemical Co., Ltd.
99, Lianyang Road
Songjiang Industrial Zone
Shanghai, China 201613
Tel.: +86 21 5774 0348
Fax: +86 21 5774 3563

www.elementis.com