

Onderzoek naar vloeisimulaties voor raamprofielen in PVC

Louise CHYS

Promotor(en): Prof. Dr. Ir. F. Desplentere
Drs. Ing. W. Six

Co-promotor(en): Ing. K. Ryckebosch

Masterproef ingediend tot het behalen van de
graad van master of Science in de industriële
wetenschappen: *kunststofverwerking*

Academiejaar 2018-2019

© Copyright KU Leuven

Zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van zowel de promotor(en) als de auteur(s) is overnemen, kopiëren, gebruiken of realiseren van deze uitgave of gedeelten ervan verboden. Voor aanvragen i.v.m. het overnemen en/of gebruik en/of realisatie van gedeelten uit deze publicatie, kan u zich richten tot KU Leuven Campus Brugge, Spoorwegstraat 12, B-8200 Brugge, +32 50 66 48 00 of via e-mail iiw.brugge@kuleuven.be.

Voorafgaande schriftelijke toestemming van de promotor(en) is eveneens vereist voor het aanwenden van de in deze masterproef beschreven (originele) methoden, producten, schakelingen en programma's voor industrieel of commercieel nut en voor de inzending van deze publicatie ter deelname aan wetenschappelijke prijzen of wedstrijden.

Voorwoord

Als laatstejaarsstudente aan de opleiding industrieel ingenieur kunststofverwerking koos ik ervoor om voor mijn eindwerk een studie uit te voeren naar vloeisimulaties voor raamprofielen in PVC. Dit onderzoek is gekaderd binnen een project dat loopt binnen het bedrijf Deceuninck te Hooglede-Gits en werd in samenwerking met KU Leuven Campus Brugge uitgevoerd.

Tijdens het onderzoek deden zich wel eens wat moeilijkheden voor. Gelukkig werd ik hierbij omringd door een team vol enthousiaste en behulpzame mensen.

Graag wil ik van deze gelegenheid gebruik maken om mijn promotoren, Drs. Ing. W. Six en Prof. Dr. Ir. F. Desplentere en copromotor K. Ryckebosch te bedanken. Als er problemen waren of als ik ergens meer informatie over nodig had, hebben jullie me steeds met veel enthousiasme begeleid en ondersteund.

Ook Dr. Ing. B. Buffel zou ik graag bedanken voor de spontane hulp, de interesse en de tips.

Tenslotte wil ik graag mijn ouders, mijn vriend en mijn vrienden, vriendinnen, medestudenten bedanken voor de steun en de vele toffe momenten samen.

Abstract

Industrial processes are often preceded by simulations in order to predict the processing behaviour of a material. The company Deceuninck produces window profiles and performs flow simulations with their software, PolyXtrue. When simulating the flow of a polymer melt through a mould, a laminar velocity profile is supposed with a wall velocity equal to zero. Window profiles are typically made of polyvinylchloride (PVC), in which wall slip occurs besides the laminar flow. Therefore, the velocity at the wall is different from zero. This causes a remarkable deviation between simulations and the actual processes. PolyXtrue includes the possibility to take this phenomenon into account but for now, it's not being used optimally.

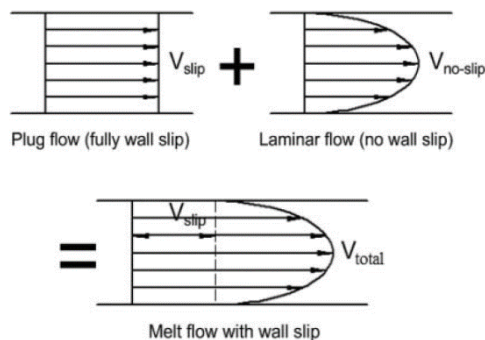


Figure 1-1 Slip phenomenon [7]

In this research, the ability to take slip into account correctly is investigated. To check this, different types of software are compared. This includes Virtual Extrusion Laboratory (VEL), PolyXtrue, NX and STAR CCM+. The first software to be investigated is VEL because this package contains a known slip model and a typical rigid PVC with known slip parameters. When comparing this slip model with those available in PolyXtrue, NX, and STAR CCM+, it appears that only VEL, PolyXtrue and STAR CCM+ contain a valid model. To verify if slip can be taken into account correctly, the flow of the known PVC is

simulated through a rectangular geometry with dimensions 2 x 50 x 100 mm. All three software packages show acceptable deviations from theoretical calculations. Differences between the results can be due to unlike mesh types.

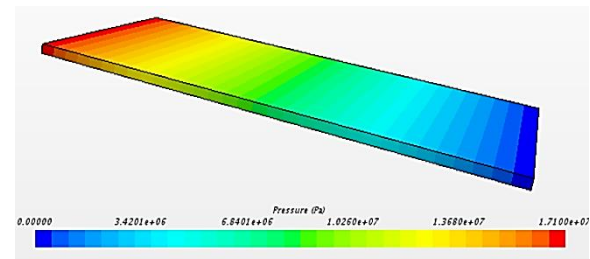


Figure 1-2 Pressure drop STAR CCM+

The window profiles at Deceuninck are made from a PVC, other than the typical rigid PVC, available in the database of VEL. The rheological data from this material needs to be known in order to set up correct simulations. The rheological data was initially determined by using a dynamic capillary rheometer, the RhéoArt. This rheometer is suitable for thermal sensitive materials as PVC. After performing multiple experiments, it appeared that the obtained data was not consistent due to several difficulties. Another option to acquire the rheological data from this material is to make use of reverse engineering. The PVC, used to manufacture the window profiles is extruded through a slit die at different temperatures and mass flowrates. The rheological data is then calculated from the data, obtained by the actual extrusion processes.

The next step is to validate the obtained rheological data by setting up simulations, equal to the actual extrusion processes with the slit die. These simulations are performed in PolyXtrue and STAR CCM+ since they are a priority for the company.

Both simulation software show excellent resemblance with the actual tests with deviations of respectively 2% and 6%.

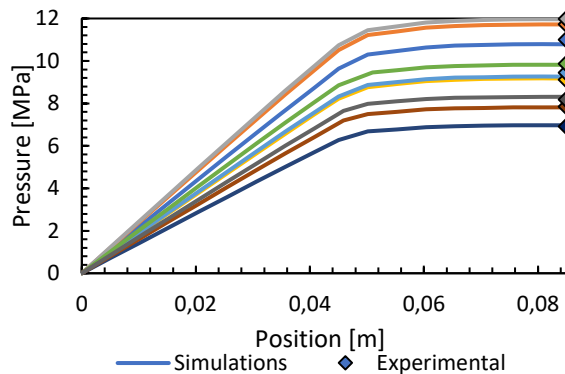


Figure 1-3 Pressure drop slit die PolyXtrue

If the rheological data of the material is known, correct results are obtained when simulating the flow through a rectangular geometry or a simple mould. The main goal of this research is to get correct simulation results with the characterised PVC used in combination with a window profile.

Since the transition from the slit die to the window profile die is large, a rectangular profile die is simulated as intermediate step. After performing the simulation, the pressure drop was too low. Possible reasons for this outcome are on the one hand the finishing of the mould surface. Slip is highly dependent on the structure of the wall. On the other hand, the degree of gelation has a significant influence on the pressure drop.

To consider the influence of the finishing of the mold surface, the simulation was also performed without slip. When slip was not taken into account, the pressure drop increased but was still too low. It turned out that these incorrect results were due to

a deviation of about 20% between the first order viscosity model and the Cross WLF model, used in PolyXtrue.

It can be assumed that if the viscosity is underestimated the pressure will be underestimated equally. Therefore, the simulated pressure drop is about 20% higher, which makes the simulated pressure drop without taking slip into account bigger than the actual pressure drop. Which means the deviation is a result of a different finishing of the mould surface.

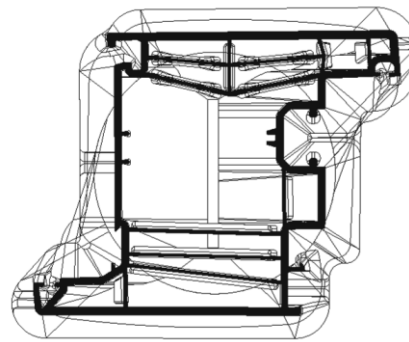


Figure 1-4 Window profile die

Eventually, a window profile die was simulated with the characterised PVC. This simulation showed similar results as the rectangular profile die. The simulated pressures were too low but with the underestimation corrected, acceptable results, depending on the finishing of the mold surface were found.

This research shows that wall slip can be taken into account correctly by different software packages. The biggest challenge is to determine the rheological data of the material correct and to consider the influence of the finishing of the mould surface.

Keywords: extrusion, rheology, simulation, polyvinylchloride, slip

INHOUD

Voorwoord	i
Samenvatting.....	Fout! Bladwijzer niet gedefinieerd.
Abstract	ii
Symbolenlijst.....	vii
1 Inleiding	2
1.1 <i>Probleemstelling</i>	2
1.2 <i>Doel</i>	2
2 Literatuurstudie	3
2.1 <i>Profielextrusie</i>	3
2.1.1 Principe	3
2.1.2 De extrusiematrijs	4
2.2 <i>Polyvinylchloride (PVC)</i>	4
2.2.1 Synthese	4
2.2.2 Eigenschappen	5
2.2.3 Verwerking en toepassing	5
2.3 <i>Slip</i>	6
2.3.1 Principe	6
2.3.2 Invloedsfactoren.....	6
2.3.3 Invloed van additieven op slip	7
2.3.4 Geling van PVC	8
2.4 <i>Slipmodellen</i>	10
2.4.1 Virtual Extrusion Laboratory	10
2.4.2 PolyXtrue	10
2.4.3 NX.....	10
2.4.4 STAR CCM+	11
2.4.5 Overzicht slipmodellen	12
2.5 <i>Materiaalkarakterisatie</i>	13
2.5.1 Standaard viscositeitsmeting.....	13
2.5.2 RhéoArt - principe	13
2.5.3 Bagley-correctie	14
2.5.4 Mooney-analyse.....	15

3	Simulaties: rechthoekige geometrie	17
3.1	<i>Materiaal</i>	17
3.2	<i>Geometrie</i>	17
3.3	<i>Theoretische berekening.....</i>	18
3.4	<i>Virtual Extrusion Laboratory</i>	19
3.4.1	Instellingen.....	19
3.4.2	Resultaten.....	20
3.5	<i>PolyXtrue</i>	24
3.5.1	Instellingen.....	24
3.5.2	Resultaten.....	28
3.6	<i>STAR CCM+</i>	32
3.6.1	Instellingen.....	32
3.6.2	Resultaten.....	37
3.7	<i>Algemeen besluit.....</i>	40
3.7.1	Samenvatting van de resultaten	40
4	Materiaalkarakterisatie.....	41
4.1	<i>Materialen</i>	41
4.2	<i>Metingen met RhéoArt</i>	41
4.2.1	Bagley-correctie	43
4.2.2	Mooney analyse	45
4.2.3	Slip.....	48
4.2.4	Besluit	50
4.3	<i>Reverse engineering.....</i>	51
4.3.1	Principe.....	51
4.3.2	Matrijs	51
4.3.3	Instellingen.....	52
4.3.4	Gemeten en berekende resultaten	53
4.3.5	Verwerking van de resultaten	54
5	Simulaties: eenvoudige matrijs.....	55
5.1	<i>Materiaal</i>	55
5.2	<i>Matrijsgeometrie.....</i>	55
5.3	<i>PolyXtrue</i>	56
5.3.1	Instelling.....	56
5.3.2	Resultaten.....	57

5.4	<i>STAR CCM+</i>	62
5.4.1	Instelling.....	62
5.4.2	Resultaten.....	65
5.5	<i>Besluit</i>	68
6	Simulaties: complexe matrijs	69
6.1	<i>Kokerprofiel</i>	69
6.1.1	Materiaal	69
6.1.2	Matrijsgeometrie: kokerprofiel	69
6.1.3	Instelling.....	70
6.1.4	Resultaten.....	70
6.2	<i>Profielmatrijs</i>	73
6.2.1	Materiaal	73
6.2.2	Werkelijke resultaten.....	73
6.2.3	Matrijsgeometrie: raamprofiel	74
6.2.4	Resultaten.....	75
7	Besluit	78
8	Vooruitzichten	79
	Referenties	80

Symbolenlijst

$\dot{\gamma}$	Snelheidsgradiënt	[s ⁻¹]
m, n	Machtscoëfficiënten	[/]
n _s	Slipcoëfficiënt	[/]
P	Druk	[Pa]
R	Straal	[m]
τ	Schuifspanning	[Pa]
v _{slip}	Slipsnelheid	[m/s]
$\dot{V}$	Massadebiet	[m ³ /s]

1 INLEIDING

1.1 Probleemstelling

Bij het bedrijf Deceuninck te Hooghelede-Gits worden allerlei profielen, waaronder raamprofielen en gevelbekleding, geproduceerd d.m.v. extrusie. Vooral de productie van zo'n profiel in werkelijkheid wordt uitgevoerd probeert men a.d.h.v. simulaties een indruk te krijgen van de parameters zoals drukken, temperaturen, materiaalverdeling, enz... die zullen optreden tijdens het proces. Wanneer een complex profiel geëxtrudeerd wordt, is het belangrijk dat de gemiddelde snelheid in elk deel van de dwarsdoorsnede constant is na uittrede uit de matrijs, in combinatie met de gewenste lokale dikte. Wanneer dit niet zo is, dan heeft het profiel de neiging om krom te trekken wat aanleiding geeft tot interne spanningen, minder goede kwaliteit... Hiervoor wordt ook 'profile balancing' toegepast. Binnen Deceuninck wordt het 3D-ontwerp van de matrijs en de vloeisimulatie respectievelijk uitgevoerd met Solidworks en PolyXtrue.

Bij de vloeisimulaties wordt ervan uitgegaan dat de kunststofsmelt met een laminair snelheidsprofiel doorheen de matrijs stroomt. Nu wordt er een snelheid nul langs de wand verondersteld. Voor raamprofielen wordt typisch het materiaal Poly Vinyl Chloride (PVC) gebruikt. De stroming van PVC kan beschreven worden door een laminaire stroming waarbij slip optreedt langs de wand. Op dit moment wordt het laatstgenoemde niet correct in rekening gebracht, bijgevolg komen de gesimuleerde drukken, temperaturen en daarmee samenhangend het snelheidsprofiel niet overeen met de werkelijkheid. De mogelijkheid om in PolyXtrue slip in rekening te brengen is aanwezig maar wordt momenteel nog niet optimaal gebruikt.

Aangezien bij Deceuninck overgeschakeld wordt naar NX als CAD-CAE pakket voor het matrijsontwerp en bijhorende berekeningen moet onderzocht worden of het mogelijk is om de vloeisimulaties uit te voeren in een pakket dat hiermee compatibel is. Hierbij wordt nagegaan of vloeien en bijhorend, slip correct in rekening kan gebracht worden en of de bekomen resultaten overeenkomen met de werkelijkheid.

1.2 Doel

Het doel van deze masterproef is om na te gaan welke softwarepakketten in staat zijn om vloeisimulaties snel en accuraat uit te voeren. Het is belangrijk dat 'wall slip' hierbij correct in rekening gebracht wordt. Om hiertoe te komen wordt een vergelijkende studie uitgevoerd tussen de vloeisimulatiemodules van verschillende softwarepakketten. Daarnaast worden ook materiaalkarakterisaties uitgevoerd om het slipgedrag van een bepaald materiaal te kunnen beschrijven.

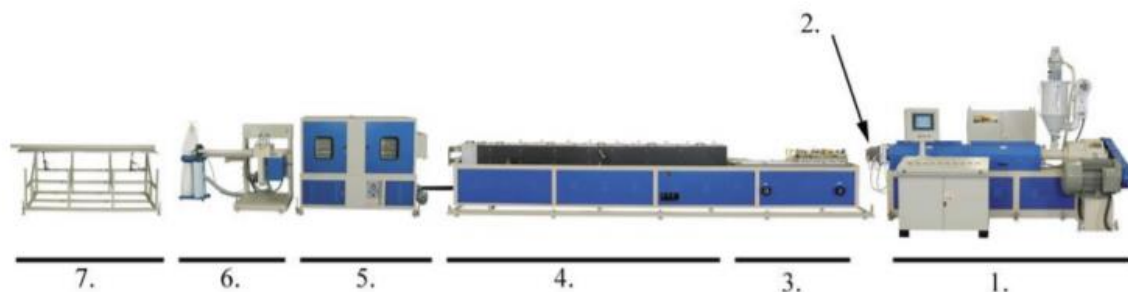
2 LITERATUURSTUDIE

2.1 Profielextrusie

Bij profielextrusie wordt een continue smeltstroom doorheen een matrijs gestuurd tot deze de gewenste vorm heeft aangenomen en vervolgens gekoeld. Op deze manier kunnen allerlei profielen gefabriceerd worden met zeer uiteenlopende, complexe vormen.

2.1.1 Principe

Een extruder die aan het begin van de extrusielijn staat, plastificeert en homogeniseert de kunststofgranulaten. Een roterende schroef zorgt voor inwendige wrijving tussen de granulaten en de barrel wat aanleiding geeft tot het opsmelten van het materiaal. Door de rotatie van de schroef wordt het gesmolten materiaal ook naar voor getransporteerd tot het uiteindelijk door de extrusiematrijs wordt geduwd. De matrijs zorgt ervoor dat het gesmolten materiaal de gewenste vorm aanneemt. Eens het materiaal de matrijs heeft verlaten, wordt het nog weke profiel in de koelstraat gebracht, waar een kalibreereenheid de juiste vorm van het profiel garandeert. Eens het extrudaat voldoende gestold en vormvast is, gebeurt de verdere koeling in een waterbad. Via een trekeenheid wordt het profiel met een constante snelheid doorheen de kalibratie-eenheid getrokken. De gewenste lengte kan worden afgezaagd m.b.v. een zaageenheid [1] De voorstelling van een extrusielijn is terug te vinden in Figuur 2-1.



Figuur 2-1 Opbouw van een extrusielijn voor profielextrusie [1]

Volgende onderdelen worden teruggevonden in de extrusielijn:

1. Extruder
2. Extrusiematrijs
3. Kalibreereenheid
4. Koelstraat
5. Trekeenheid
6. Zaageenheid
7. Verzamelbak

2.1.2 De extrusiematrijs

Een matrijs voor profielextrusie is meestal opgebouwd uit verschillende platen. Dit zorgt voor een eenvoudige (de)montage en reiniging. Bij slijtage kan een onderdeel gemakkelijker vervangen worden en als er aanpassingen moeten gebeuren dan hoeft niet de volledige matrijs vervangen te worden maar kan enkel het betreffende onderdeel bijgewerkt worden [1].

Als de smelt doorheen de matrijs geduwd wordt, dan doorloopt deze verschillende delen. Ze wordt geleidelijk omgevormd van een cilindervormige smeltstroom tot het uiteindelijke profiel. Als de smeltstroom de extruder verlaat dan wordt deze d.m.v. een aansluitstuk vanaf de schroef naar de matrijs getransporteerd. De smelt ondergaat hier al een lichte vervorming. De smelt beweegt vervolgens door een tussenplaat, waar relaxatie optreedt. Daarna wordt de smeltstroom m.b.v. een vormplaat met verdeeldoorns voorgevormd en verdeeld tot de uiteindelijke profielvorm ongeveer bereikt is. Tenslotte zorgt een mondstukplaat ervoor dat de smeltstroom de vorm van het uiteindelijke profiel aanneemt. Via een parallelgeleiding kan de volledig gevormde smeltstroom nu opnieuw relaxeren [1].

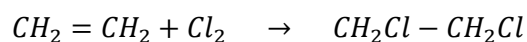
Bij het ontwerp van een extrusiematrijs moet rekening gehouden worden met de materiaalsoort, de aard van het product, de temperatuur en de extrusiesnelheid. Elke matrijs wordt specifiek ontworpen voor één bepaalde combinatie van parameters [2]. Bij het simuleren van het extrusieproces zal vooral de matrijs van belang zijn. De manier waarop de smeltstroom zich door de matrijs beweegt zal gesimuleerd worden met als bedoeling een voorspelling te kunnen maken van de drukval en het snelheidsverloop. Hierbij hebben fenomenen zoals slip een belangrijke invloed.

2.2 Polyvinylchloride (PVC)

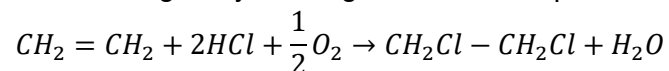
2.2.1 Synthese

PVC wordt geproduceerd door de polymerisatie van vinylchloride dat op zijn beurt gevormd wordt uit de reactie van etheen met dichloor.

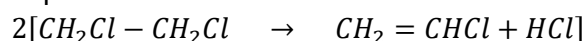
1. Dichloor wordt in contact gebracht met etheen en reageert tot etheendichloride:



Deze reactie kan ook gebeuren door oxychlorering. Hierbij reageert etheen met waterstofchloride en zuurstofgas bij verhoogde druk en temperatuur.



2. Vervolgens vindt de pyrolyse van ethyleendichloride in vinylchloride en HCl plaats bij verhoogde druk en temperatuur.



Het nevenproduct, waterstofchloride, wordt volledig hergebruikt tijdens het proces [3].

Er zijn verschillende polymerisatiemechanismen voor PVC. De meest gebruikte zijn radicalaire polymerisatie en/of coördinatiepolymerisatie [4].

2.2.2 Eigenschappen

Polyvinylchloride is een thermoplastische kunststof die vaak gebruikt wordt voor buitentoepassingen omwille van de chemische bestendigheid en de slijtvastheid. Het is een licht en duurzaam materiaal dat goed isoleert en vlamvertragend is. Daarnaast is het een relatief goedkope grondstof die goed bewerkbaar is. PVC-halffabricaten kunnen na productie gemakkelijk gelast en/of verlijmd worden en bovendien is er weinig onderhoud vereist. Deze eigenschappen zijn vooral te danken aan de aanwezigheid van chlooratomen [3] in de chemische structuur. Chloor bezit een elektronegativiteit van 3.16 waardoor elektronen niet gemakkelijk afgestaan worden.

Een nadeel van PVC is dat het een thermisch gevoelig materiaal is. Bij te lange blootstelling aan hogere temperaturen, typisch boven de 200°C, worden geconjugeerde dubbele bindingen gevormd in de hoofdketen die een gele tot bruine verkleuring met zich meebrengen [5].

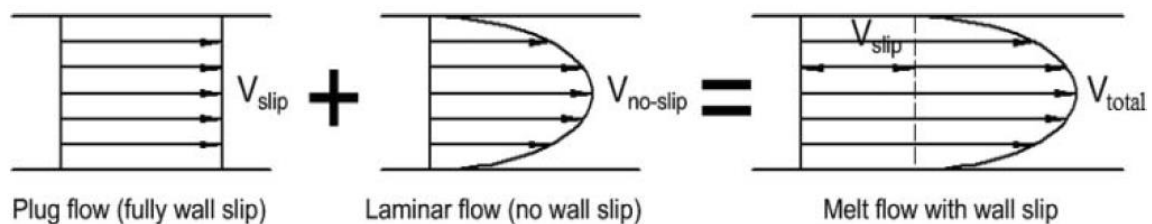
2.2.3 Verwerking en toepassing

PVC wordt meestal in poedervorm verwerkt. Door toevoeging van additieven (stabilisatoren, weekmakers, kleurstoffen, vulstoffen, vlamvertragers...) kunnen de eigenschappen aangepast worden naargelang de toepassing. Door toevoeging van weekmaker kan bijvoorbeeld onderscheid gemaakt worden tussen hard en flexibel PVC. Hard PVC kent zijn toepassing in raamprofielen, afvoerbuizen... terwijl flexibel PVC wordt toegepast bij kabelisolatie, schoenzolen, enz. Stabilisatoren beletten degradatie door blootstelling aan hogere temperaturen, Uv-licht of oxiderende chemicaliën. Het toevoegen van vulstoffen zoals krijt en talk gebeurt om de kostprijs te verlagen. Bij flexibel PVC dalen de vlamdovende eigenschappen door de toevoeging van weekmakers. Naast de weekmakers kan dan ook extra vlamvertrager toegevoegd worden om de brandbaarheid voldoende laag te houden [6].

2.3 Slip

2.3.1 Principe

In de klassieke stromingsleer wordt bij het stromen van een vloeistof doorheen een geometrie een laminaire stroming verondersteld. Dit is een laagsgewijze stroming waarbij de materiaalverdeling in de doorsnede van een profiel te voorspellen is [7]. Deze randvoorwaarde geldt echter niet voor complexe vloeistoffen zoals polymeersmelten. Bij het overschrijden van een bepaalde, kritische schuifspanning treedt er slip op langs de wand [8]. Hierdoor zal de materiaalverdeling in een profiel onzeker zijn.



Figuur 2-2 Wall slip [7]

Het totale, volumetrische massadebiet is samengesteld uit een gedeelte slipstroming en een gedeelte laminaire stroming. Dit is ook te zien in Figuur 2-2. Bij slipstroming treedt er geen snelheidsverschil op in de smelt. De snelheid is uniform [9].

Bij het bepalen van de reologische eigenschappen van polymeren dient het optreden van slip in rekening gebracht te worden om correcte data te verkrijgen [10].

Wanneer een polymeersmelt doorheen een geometrie stroomt, dan worden de polymeerketens op verschillende plaatsen door de wand geadsorbeerd. Diezelfde ketens zijn ook verstrengeld in de polymeersmelt. Onder invloed van de stroming kunnen de ketens loskomen van de wand. Dit wordt ook wel 'adhesive slip' genoemd. De polymeerketens kunnen ook van elkaar loskomen, wat overeenkomt met 'cohesive slip'. Zowel 'adhesive' als 'cohesive slip' zijn lichte vormen van slip en treden op bij relatief kleine schuifspanningen [10]. Bij hogere schuifspanningen treedt een overgang op van een lichte naar een sterke vorm van slip. Ten gevolge van het plotse loskomen van de polymeerketens in de smelt van de ketens, geadsorbeerd door de wand, benadert het snelheidsprofiel van de smelt dat van een volledige slipstroming [8].

2.3.2 Invloedsfactoren

Het slipfenomeen is afhankelijk van verschillende factoren. Bij de overgang naar een sterke slip heeft de moleculaire structuur van het polymeer een belangrijke invloed [8]. Slip is in principe onafhankelijk van temperatuur en druk. Deze parameters kunnen wel een invloed hebben op de compatibiliteit van de additieven in het PVC [5] en zo onrechtstreeks ook op het slipgedrag.

Bij een lager moleculair gewicht zijn de ketens minder met elkaar verstrengeld. Ze kunnen dus gemakkelijker van elkaar loskomen, wat zorgt voor een stijging van de slipsnelheid [10].

De moleculaire opbouw van de ketens heeft een belangrijke invloed omdat lange zijtakken de overgang van lichte naar sterke slip tegenhouden. Ook bij lineaire polymeren met een brede gewichtsverdeling is de overgang van lichte naar sterke slip weinig zichtbaar [10].

De overgang van een lichte naar een sterkere vorm van slip komt dus het vaakst voor bij lineaire polymeren met een relatief nauwe gewichtsverdeling [8].

Slip kan bevorderd worden door breuk of diffusie van polymeerketens. Dit komt het vaakst voor bij brede gewichtsverdelingen in druk gedreven stromingen. Polymeerketens breken of diffunderen weg van de wand ten gevolge van de entropie. Een thermodynamisch systeem streeft steeds naar een minimale Gibbs-vrije energie als het niet in evenwicht verkeert [4].

Een grotere ruwheid van de wand vermindert slip en stelt de overgang van een lichte slip naar een sterkere slip uit. De polymeerketens komen vast te zitten in de oneffenheden van de wand waardoor het contact tussen de wand en het polymeer vervangen wordt door een polymeer-polymeer contact [10]. Dit zorgt voor meer wrijving.

Door het aanbrengen van 'coatings' met een lage oppervlakte-energie kan slip in de hand gewerkt worden. Vooral fluorhoudende polymeren worden hiervoor toegepast [8] [10].

2.3.3 Invloed van additieven op slip

Over de invloed van additieven op het slippen van PVC tijdens het verwerkingsproces is weinig informatie beschikbaar. Het soort additieven en de hoeveelheid waarin ze gebruikt worden zijn uiteraard van belang. Over het algemeen worden twee situaties beschouwd:

Enerzijds kunnen de additieven uit het PVC migreren en zich hechten aan de wand van de matrijs waardoor de oppervlaktestructuur wijzigt. De additieven zorgen ervoor dat het oppervlak van de matrijs gladder wordt en het PVC niet meer aan de wand kan hechten. Anderzijds is het mogelijk dat de additieven naar de buitenste laag van de kunststof migreren waardoor er een laag-viskeuze laag tussen de kunststof en het metaal ontstaat [5].

Beide fenomenen werken slip in de hand. De hoeveelheid waarin de additieven gebruikt worden heeft een invloed op de dikte en de continuïteit van de laag die het contact tussen kunststof en matrijs wijzigt [11].

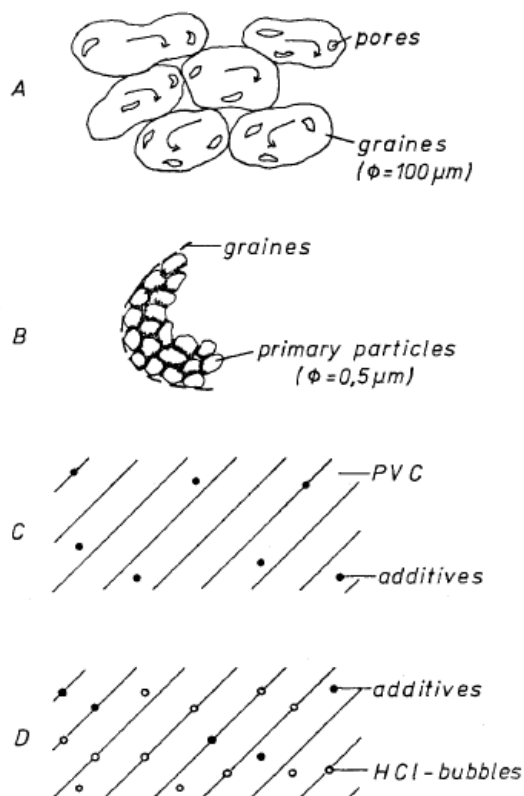
Omdat PVC een thermisch gevoelig materiaal is worden er smeermiddelen aan toegevoegd. De smeermiddelen verbeteren de verwerkbaarheid van PVC. Er kan een onderscheid gemaakt worden tussen enerzijds interne en anderzijds externe smeermiddelen. Interne smeermiddelen zorgen voor een reductie van de smeltviscositeit en verminderen interne wrijving. Daarnaast zorgen ze voor betere vloeieigenschappen en een betere flexibiliteit. Externe smeermiddelen verminderen de hechting tussen de gesmolten kunststof en de matrijswand en beïnvloeden daarmee vooral het slipgedrag. Daarnaast zorgen ze voor een glad en glanzend oppervlak bij het extrudaat [12].

2.3.4 Gelinging van PVC

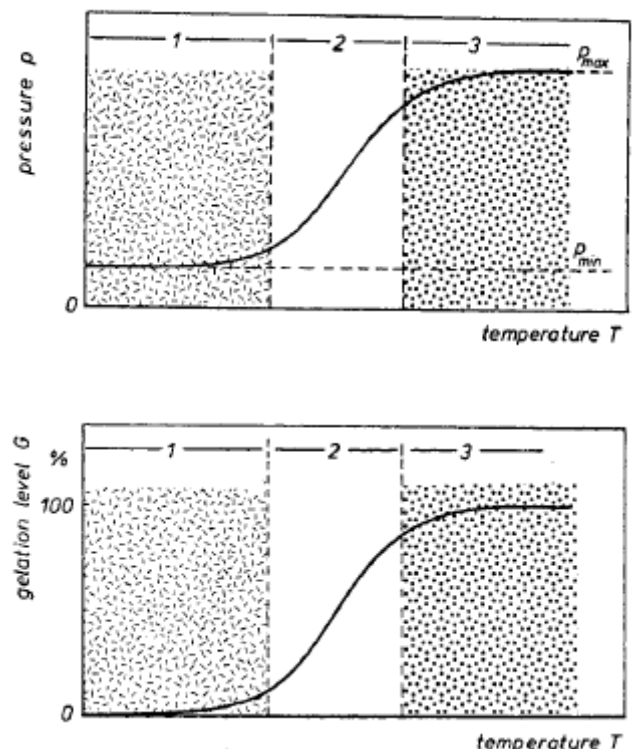
Gelinging is een proces dat typisch optreedt bij het plastificeren van polyvinylchloride. Wanneer het PVC-poeder in de extruder terecht komt, dan vindt er een temperatuurstijging plaats ten gevolge van wrijving en externe verwarmingselementen. Bij temperaturen tot ongeveer 160°C wrijven de poederdeeltjes tegen elkaar en beginnen ze te vloeien [13]. Stijgt de temperatuur verder tot boven 160°C, dan breken deze poederdeeltjes af tot kleinere primaire deeltjes. Dit is te zien als de overgang van A naar B in Figuur 2-3. In deze toestand verspreiden additieven zoals stabilisatoren, weekmakers, etc... zich tussen de primaire deeltjes [13]. Er is meer kracht nodig om de primaire deeltjes te smelten omdat de wanden van de primaire deeltjes fysisch aan elkaar hechten. Er wordt een driedimensionaal netwerk gevormd dat de structuur fysisch verbindt [13]. In dit deel van het plastificeren is de druk laag [14] (gebied 1 in Figuur 2-4).

Vanaf 190°C smelten ook de primaire deeltjes. In deze fase worden de additieven, afhankelijk van hun compatibiliteit, ontbonden of ze slaan neer (situatie C in Figuur 2-3). De verspreiding van weekmakers in de smelt resulteert in een stijging van de viscositeit [15]. Aan het einde van deze fase zijn de primaire deeltjes volledig gesmolten en vormen ze een homogene smelt [14]. (gebied 2 in Figuur 2-4). Bij verdere stijging van de temperatuur is de smelt continu en komt het geleringsproces tot een einde (gebied 3 op Figuur 2-4) [14].

Indien de temperatuur nog verder stijgt of bij langere verblijftijden, dan start de ontbinding en wordt er waterstofchloride gevormd [14] (situatie D in Figuur 2-3).



Figuur 2-3 Verschillende fasen bij het plastificeren [14]



Figuur 2-4 Drukopbouw en gelering bij oplopende temperatuur [14]

De geleringsgraad van PVC kan bepaald worden met behulp van Differential Scanning Calorimetry (DSC). Bij deze meetmethode worden een proefmonster en een referentiestaal onderworpen aan een bepaald temperatuurprogramma en wordt de warmtestroom tussen monsters en omgeving gemeten [16]. Thermische gebeurtenissen zijn zichtbaar op het thermogram door pieken of dalen in de curve. Bij een endotherme reactie, m.a.w. bij het toevoegen van energie, verschijnt er een piek in de curve. Als de reactie exotherm is dan verschijnt er een dal.

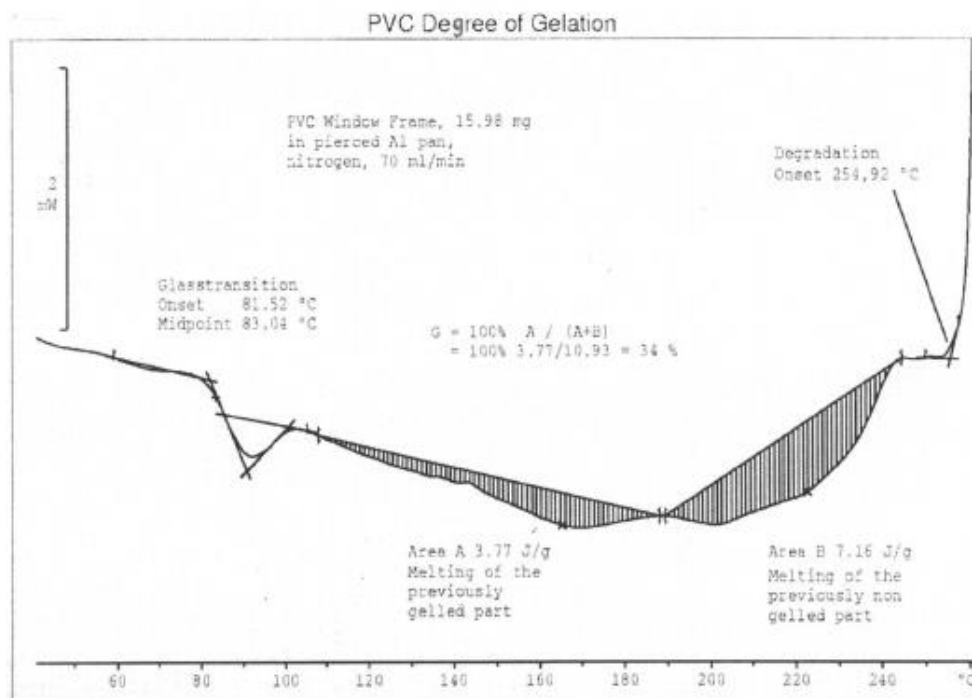
Figuur 2-5 toont een DSC-curve van PVC. Hierin zijn er vier duidelijke stappen te onderscheiden. De eerste discontinuïteit in de curve is te zien rond 80°C. Dit is de glasovergangstemperatuur van het PVC. Vanaf deze temperatuur krijgen de polymeerketens meer bewegingsvrijheid waardoor er relaxatie optreedt. Dit proces is afhankelijk is van de procesgeschiedenis. De overgang naar rubbertoestand zorgt voor een verandering van de warmtecapaciteit die overeenkomt met een endotherme piek [16].

Dit wordt gevolgd door een breed dal met oppervlakte A, tussen de 80°C en 190°C. Dit is het deel waar de eerder besproken poederdeeltjes smelten. Tussen 190°C en 240°C volgt er een tweede dal met oppervlakte B waarin de primaire deeltjes smelten.

Boven 250°C degradeert het PVC. De combinatie van het vrijkomende waterstofchloride en de aluminium schaaltes zorgt voor een exotherme piek [16].

De geleringsgraad van PVC kan berekend worden met vergelijking 2-1.

$$\text{Geleringsgraad } G = \frac{A}{A+B} \quad 2-1$$



Figuur 2-5 DSC-curve PVC [16]

2.4 Slipmodellen

Om de vloeisimulatiemodules van Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue, Siemens NX en Siemens STAR CCM+ met elkaar te kunnen vergelijken worden eerst de gebruikte slipmodellen met elkaar vergeleken. Omdat PVC dat typisch slipgedrag vertoont, kan er enkel verder gewerkt worden met softwarepakketten die dit fenomeen in rekening kunnen brengen.

2.4.1 Virtual Extrusion Laboratory

Machtsmodel:

$$v_{slip} = v_0 * \left(\frac{\tau}{\tau_{ref}} \right)^{n_s} \quad 2-2$$

Met: v_0 : referentie slipsnelheid [m/s]
 τ : schuifspanning langs de wand [Pa]
 τ_{ref} : referentieschuifspanning [Pa]
 n_s : slipexponent [/]

Hierbij zijn v_0 en n_s materiaalafhankelijke parameters. De referentieschuifspanning is hierbij 100000 Pa [17].

2.4.2 PolyXtrue

Machtsmodel [18]:

$$v_{slip} = a * \tau^c \quad 2-3$$

Met: a, c : materiaalafhankelijke constanten [/]
 τ : schuifspanning langs de wand [Pa]

2.4.3 NX

Maxwell model [19]:

$$v_{slip} - v_{wand} = C_1 * \lambda * \left(\frac{\partial v}{\partial n} \right) - C_2 * \lambda^2 * \left(\frac{\partial^2 v}{\partial n^2} \right) \quad 2-4$$

Met: v_{slip} : slipsnelheid [m/s]
 v_{wand} : snelheid van de wand [m/s]
 C_1, C_2 : eerste- en tweede-orde slipcoëfficiënten [/]
 n : lokale normaalrichting van de wand
 λ : gemiddelde vrije traject

Het gemiddeld vrije traject wordt berekend in elk element dat aan de wand grenst.

$$\lambda = \lambda_0 * \left(\frac{T}{T_0} \right) * \left(\frac{P_0}{P} \right) * \left(\frac{1 + \frac{S}{T_0}}{1 + \frac{S}{T}} \right) \quad 2-5$$

Met: T_0 : referentietemperatuur [°C]
 P_0 : referentiedruk [Pa]
 S : Sutherland constante [/]
 λ_0 : gemiddelde vrije traject bij referentietemperatuur en referentiedruk [/]

Het gemiddelde vrije traject bij de referentie- temperatuur en druk wordt gegeven door:

$$\lambda_0 = \frac{\mu_0}{0.491 \cdot \rho_0} * \sqrt{\frac{\pi * R}{8 * k_B * T_0 * \eta * R_g}} \quad 2-6$$

Met: μ_0 : nulviscositeit [Pa*s]
 ρ_0 : dichtheid [kg/m³]
 k_B : constante van Boltzmann [J*K-1]
 R : universele gasconstante [J*mol-1]
 R_g : specifieke gasconstante [/]

Het slipmodel in NX is enkel geldig voor gassen of ijle stromen [20]. De in te vullen constanten gelden **niet** voor niet-newtoniaanse vloeistoffen zoals smeltstromen. Naast het Maxwell-model is het ook mogelijk om in de 'solution', 'slip walls' aan te duiden. Dit heeft enkel betrekking tot de wanden en staat niet in verband met het gebruikte medium. Verdere specificatie is niet mogelijk. Bijgevolg is het model binnen Simcenter NX onbruikbaar voor polymeerstromen. Binnen het productportfolio van Siemens wordt er overgeschakeld naar STAR CCM+. Dit pakket, toegewijd op alle types stroming, bezit meer mogelijkheden omtrent vloeisimulaties.

2.4.4 STAR CCM+

Het aanwezige slipmodel binnen STAR CCM+ is ook een machtsmodel [21] maar heeft een andere vorm dan de voorgaande slipmodellen. Het is te zien in formule 2-7:

$$f_s = -k_s * |v_s|^{n_s-1} * v_s \quad 2-7$$

Met: k_s : slip coëfficiënt
 n_s : slip exponent

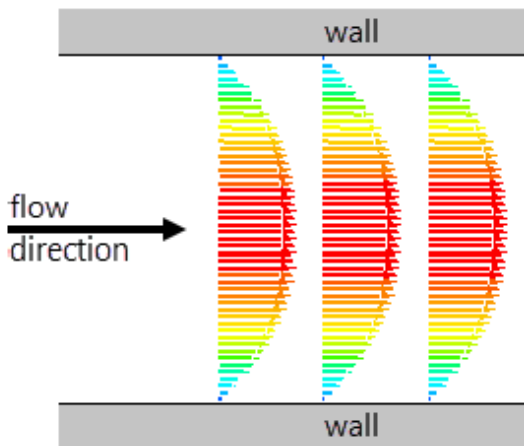
$$f_s = T * n_w - [(T * n_w) * n_w] * n_w \quad 2-8$$

$$v_s = (v - v_w) - [(v - v_w) * n_w] * n_w \quad 2-9$$

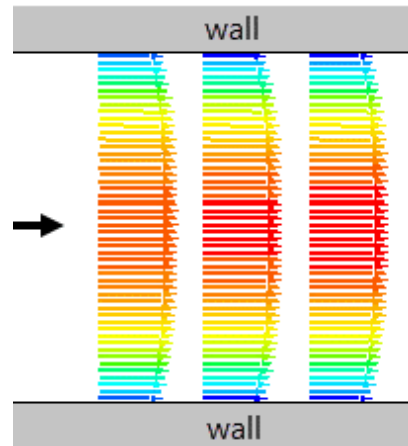
f_s : schuifspanning [Pa]
 v_s : slipsnelheid [m/s]
 n_w : normale, loodrecht op de wand
 v_w : wandsnelheid [m/s]
 T : hydrodynamische spanningstensor

In STAR CCM+ zijn er twee slipmodellen beschikbaar: 'no slip' en 'slip'. Indien als 'boundary', 'wall' gekozen wordt, dan kan bij 'Shear Stress Specification' de keuze gemaakt worden tussen deze twee opties.

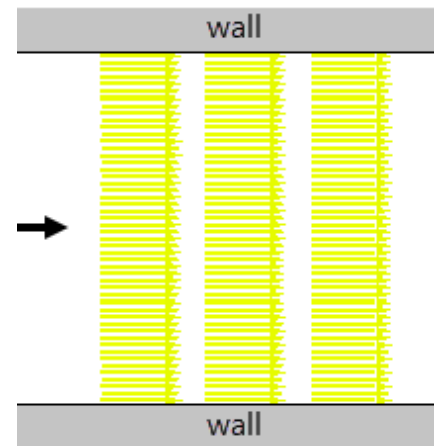
Bij het 'no-slip' model wordt de snelheid aan de wand gelijk gesteld aan nul [21], dit is te zien in Figuur 2-7. Wanneer voor 'slip' gekozen wordt dan bestaat de mogelijkheid om de slip coëfficiënt k_s en de slip exponent n_s te specificeren. Op deze manier kan een gedeeltelijke slip in rekening gebracht worden, zie Figuur 2-8. Bij volledige slip is de snelheid langs de wand verschillend van nul en de smelt beweegt overal met dezelfde snelheid, zie Figuur 2-9.



Figuur 2-7 Vloei zonder slip [21]



Figuur 2-8 Gedeeltelijke slip [21]



Figuur 2-6 Volledige slip [21]

2.4.5 Overzicht slipmodellen

Uit de vergelijking van bovenstaande slipmodellen volgt dat 'wall slip' in rekening brengen mogelijk is met Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue en STAR CCM+. Deze softwarepakketten bevatten een model dat geschikt is voor het simuleren van niet-Newtoniaanse vloeistoffen zoals smeltstromen. Het slipmodel in PolyXtrue is gelijkaardig als het slipmodel in Virtual Extrusion Laboratory. Het model in STAR CCM+ heeft een andere vorm en bevat andere parameters. Er zal moeten nagegaan worden hoe deze parameters ingevuld moeten worden.

2.5 Materiaalkarakterisatie

Door industriële processen m.b.t. kunststoffen te simuleren kunnen voorspellingen gemaakt worden van de procesparameters die zullen optreden tijdens de productie. Om correcte resultaten te verkrijgen is het belangrijk dat de reologische eigenschappen van het gebruikte materiaal gekend zijn. De materiaaldata hebben een belangrijke invloed op de simulatieresultaten. Met behulp van deze informatie kunnen fenomenen zoals slip of overbelasting van thermisch gevoelige materialen, zoals PVC, vermeden worden [7].

2.5.1 Standaard viscositeitsmeting

Voor de meeste materialen kunnen de reologische eigenschappen bepaald worden met behulp van een capillaire rheometer. Dit toestel bestaat uit twee cilindrische holtes waarin koude granulaten dienen toegevoegd te worden. Het materiaal wordt vervolgens opgewarmd door conductie tot een homogene temperatuur in de smelt bereikt is. Via een plunjer wordt er een uitwendige kracht aangelegd die de kunststofsmelt met oplopende snelheidsgradiënt doorheen de capillairen met een welbepaalde lengte en diameter doet vloeien. De bijhorende parameters zoals druk, snelheid, reële snelheidsgradiënt, viscositeit enz... worden geregistreerd.

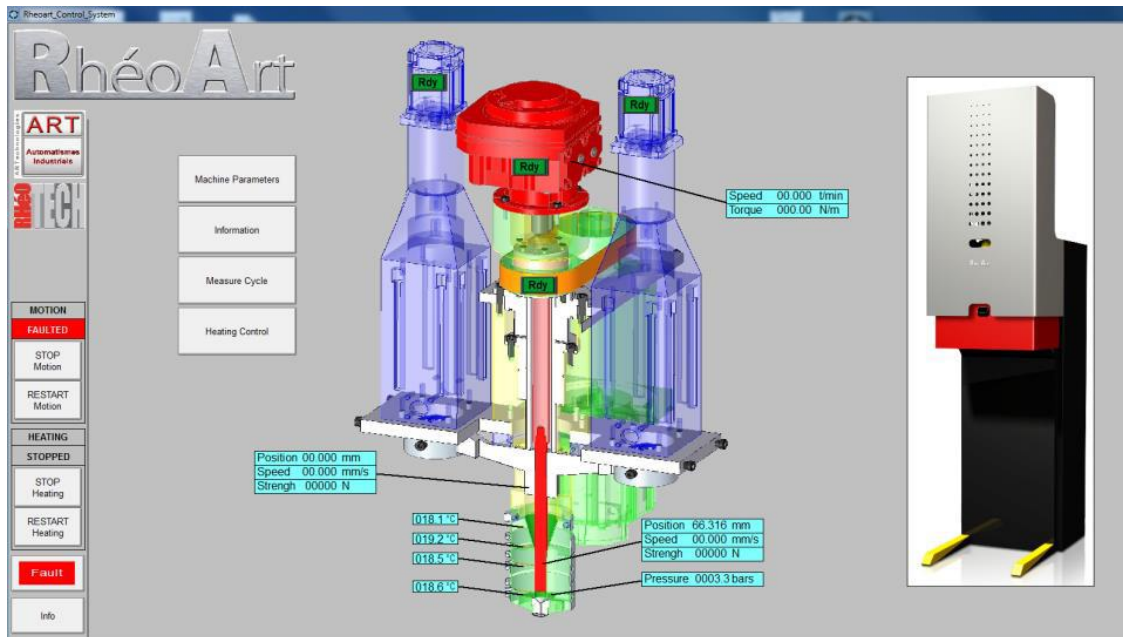
Wanneer gemeten wordt met capillairen met dezelfde diameter en verschillende lengtes, dan kan de afschuifviscositeit afgeleid worden na toepassing van Bagley- en Rabinowitsch correcties. Dit wordt verder besproken in paragraaf 2.5.4.

Poedermaterialen kunnen moeilijk verwerkt worden met deze methode omdat de homogene thermisch conductiviteit van poeder lager is t.g.v. een lagere bulkdichtheid. Omdat de uitwendige kracht pas toegepast wordt als de cilinders volledig gevuld zijn, bevindt het poeder zich te lang op hoge temperatuur. De lage bulkdensiteit zorgt ook voor meer ingesloten luchtbelletjes, die op hun beurt voor meetproblemen zorgen [7]. Voor materialen die in poedervorm geleverd worden en die thermisch gevoelig zijn, zoals PVC, wordt overgeschakeld naar een andere reometer: de RhéoArt.

2.5.2 RhéoArt - principe

Een proefmonster van de te testen kunststof wordt opgewarmd door enerzijds conductie en anderzijds door wrijving t.g.v. een roterende plunjer. Vervolgens stopt de plunjer met roteren en beweegt neerwaarts waardoor de kunststof door een capillair gedrukt wordt. Door de snelheid van de rotatie te variëren kunnen verschillende snelheidsgradiënten opgelegd worden. De combinatie van conductie en opwarming door wrijving zorgt ervoor dat de opwarming snel gebeurt en deze methode dus ook geschikt is voor thermisch gevoelige materialen. De exacte temperatuur is niet gekend door 'shear heating' [7].

Ook hier kan bij gebruik van capillairen met dezelfde diameter en verschillende lengtes, de afschuifviscositeit afgeleid worden na toepassing van Bagley- en Rabinowitsch correcties. Als de capillairen tevens dezelfde lengte/diameter verhouding hebben, dan kan slip bepaald worden na het toepassen van een Mooney-analyse. De optredende drukken worden gemeten m.b.v. een druksensor ter hoogte van de intrede van het capillair [7]. Een voorstelling van dit toestel is te zien in Figuur 2-9.



Figuur 2-9 De RhéoArt [7]

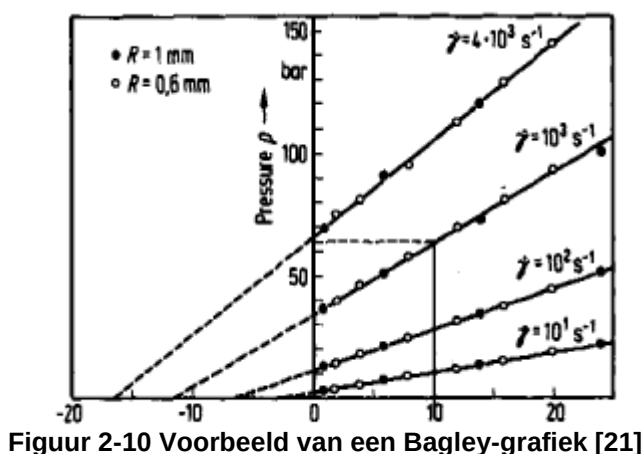
2.5.3 Bagley-correctie

Bij het binnenstromen van een kunststof in een dun kanaal treedt een energieverlies, of met andere woorden, een intredeverlies op. Dit verlies kan empirisch bepaald worden met formule

$$p_i = c * \tau^m \quad 2-10$$

Met: p_i : intredeverlies [Pa]
 c, m : empirische constanten
 τ : schuifspanning [Pa]

De empirische constanten c en m kunnen bepaald worden uit de Bagley-curven. Deze kunnen opgesteld worden door bij één bepaalde temperatuur en snelheidsgradiënt de druk te bepalen voor twee capillairen, met dezelfde diameter en een verschillende lengte. Na het uitzetten van deze punten in een grafiek met de druk in functie van de verhouding L/D , kan het intredeverlies afgelezen worden als het snijpunt van de curve met de ordinaat-as [22]. Dit is te zien in Figuur 2-10.



Figuur 2-10 Voorbeeld van een Bagley-grafiek [21]

2.5.4 Mooney-analyse

De drukken die optreden tijdens het meten met de RhéoArt worden gemeten m.b.v. een druksensor ter hoogte van de ingang van het capillair. Na het toepassen van de Bagley-correctie kunnen de optredende schuifspanningen berekend worden met vergelijking 2-11.

$$\tau = \frac{\Delta P}{2 \cdot \frac{L}{R}} \quad 2-11$$

Met: ΔP : Druk na Bagley-correctie [Pa]

L: Lengte van het capillair [m]

R: Straal van het capillair [m]

τ : schuifspanning [Pa]

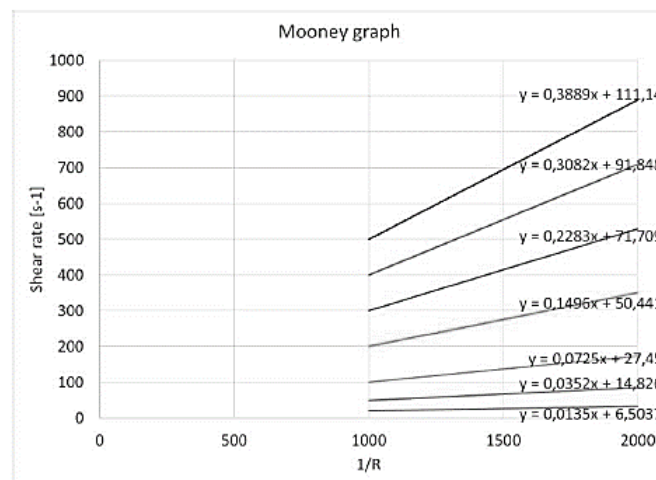
Vervolgens wordt de schuifspanning uitgezet als functie van de opgelegde snelheidsgradiënt in een dubbel logaritmisch diagram. In de vergelijking van de uitgezette punten wordt de opgelegde snelheidsgradiënt opnieuw ingevuld om een nauwkeurigere bepaling te hebben van de schuifspanning, horend bij de vergelijking.

Er wordt gemeten met zes capillairen met 2 verschillende diameters en 3 verschillende lengtes per diameter. Deze zijn te zien in tabel 2-1. De resultaten van 1 bepaalde diameter worden als referentie gekozen. Nu moet bepaald worden welke snelheidsgradiënt nodig is bij de 'niet-referentie', om dezelfde schuifspanningen te verkrijgen als de referentie. Hiervoor worden de schuifspanningen van de 'niet-referentie' geïnterpoleerd tussen de schuifspanningen van de referentie.

Tabel 2-1 Afmetingen van de capillairen

Capillair	Lengte [mm]	Diameter [mm]
1	1	0
2	1	10
3	1	20
4	2	0
5	2	20
6	2	40

Vervolgens worden de snelheidsgradiënten uitgezet in functie van de bijhorende, reciproke straal. Dit is de Mooney-grafiek, zichtbaar in figuur 2-11. De curves verbinden alle punten met gelijke schuifspanning en de helling is gelijk aan het viervoud van de optredende slip.



Figuur 2-11 Mooney grafiek [7]

3 SIMULATIES: RECHTHOEKIGE GEOMETRIE

Uit de vergelijking van de slipmodellen volgt dat het simuleren van slip bij niet-newtoniaanse vloeistoffen mogelijk zou moeten zijn bij Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue en STAR CCM+. Om dit te controleren wordt er eerst onderzocht of voor een rechthoekige geometrie met afmetingen 2 x 50 x 100 mm correcte resultaten kunnen bekomen worden.

De rechthoekige geometrie wordt eerst gesimuleerd in Virtual Extrusion Laboratory, omdat dit pakket over een gekend slipmodel en een materiaal met gekende slipparameters beschikt. Diezelfde geometrie wordt vervolgens ook gesimuleerd in PolyXtrue en STAR CCM+, met het materiaal uit de database van VEL. De resultaten worden ook vergeleken met theoretische berekeningen.

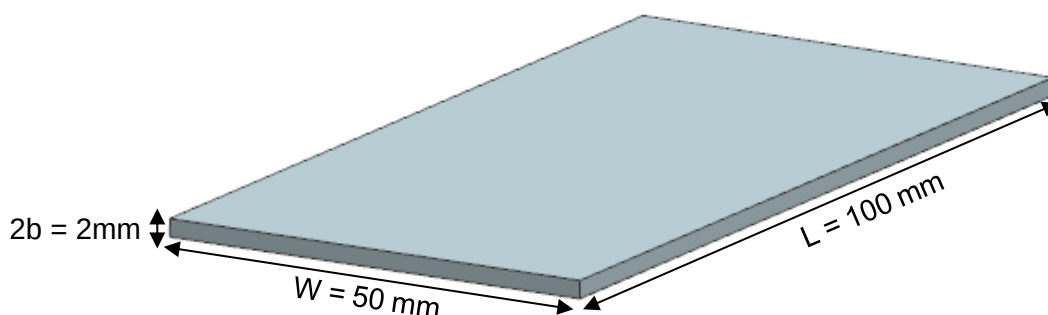
3.1 Materiaal

Het materiaal dat gebruikt wordt is een typisch star PVC. De gegevens zijn terug te vinden in Tabel 4-1.

Tabel 3-1 Materiaalparameters

Parameter	Waarde	Eenheid
Consistentie index A	46120	$\text{Pa}\cdot\text{s}^n$
Temperatuur gevoeligheid b	0.02	$1/^\circ\text{C}$
Referentietemperatuur T_{ref}	182	$^\circ\text{C}$
Machtswetexponent n	0.34	/
Constante slip v_0	$9.5\cdot 10^{-3}$	m/s
Slipcoëfficiënt n_s	2.28	/
Dichtheid ρ	1000	kg/m^3

3.2 Geometrie



Figuur 3-1 Geometrie met afmetingen 2 x 50x 100 mm

3.3 Theoretische berekening

Drukval ΔP over de geometrie:

$$\Delta P = m * L * b^{-(2n+1)} * \left[\left(1 + \frac{1}{2n} \right) * \frac{\dot{V}}{W} \right]^n \quad 3-1$$

$$m = A * e^{-b*(T-T_{ref})} \quad 3-2$$

Optredende snelheidsgradiënt $\dot{\gamma}$ met Rabinowitsch correctie:

$$\dot{\gamma} = \frac{6*\dot{V}}{4*W*b^2} * \frac{2n+1}{3n} \quad 3-3$$

De schuifspanning τ :

$$\tau = m * \dot{\gamma}^n \quad 3-4$$

Met: ΔP : drukval [MPa]

m, n : machtswetcoëfficiënt en -exponent [/]

L : lengte van de gleufvormige geometrie [m]

b : halve dikte van de geometrie [m]

$\dot{V}$: volumedebiet [m³/s]

W : breedte van de gleufvormige geometrie [m]

De slipsnelheid v_{slip} :

$$v_{slip} = v_0 * \left(\frac{\tau}{\tau_{ref}} \right)^{n_s} \quad 3-5$$

Met: v_0 : referentie slipsnelheid [m/s]

τ : schuifspanning langs de wand [Pa]

τ_{ref} : referentieschuifspanning [Pa]

n_s : slipexponent [/]

Hierbij zijn v_0 en n_s materiaalafhankelijke parameters. De referentieschuifspanning is hierbij 100000 Pa.

Na meerdere iteraties van voorgaande formules worden de volgende waarden bekomen bij een temperatuur van 190°C:

Tabel 3-2 Berekende waarden

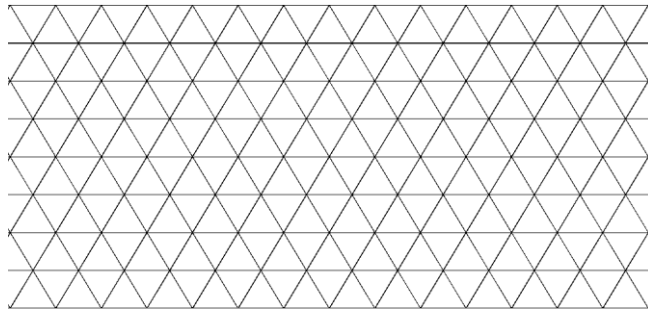
ΔP [MPa]	$\dot{\gamma}$ [s ⁻¹]	v_{slip} [mm/s]	ΔP_{slip} [MPa]	$\dot{\gamma}_{slip}$ [s ⁻¹]
26.52	274.5	37.2	18.2	90.7

3.4 Virtual Extrusion Laboratory

3.4.1 Instellingen

3.4.1.1 Mesh

De gleufvormige geometrie wordt getekend en 'gemesh't in NX. Er wordt een '3D tetrahedral mesh' toegepast met SOLID185 elementen. Na exporteren als een ansys.inp bestand wordt dit geheel in Virtual Extrusion Laboratory geïmporteerd.



Figuur 3-2 3D mesh doorheen de dikte op de lange zijde

Tabel 3-3 Mesh instellingen Virtual Extrusion Laboratory

Mesh type	Tetrahedral
Element type	Solid 185
Aantal lagen doorheen de dikte	8

3.4.1.2 Materiaal

De eigenschappen van het PVC uit de VEL-database worden weergegeven (in Tabel 3-1) en zijn gelijk aan het gebruikte materiaal in sectie 3.3.

3.4.1.3 Randvoorwaarden



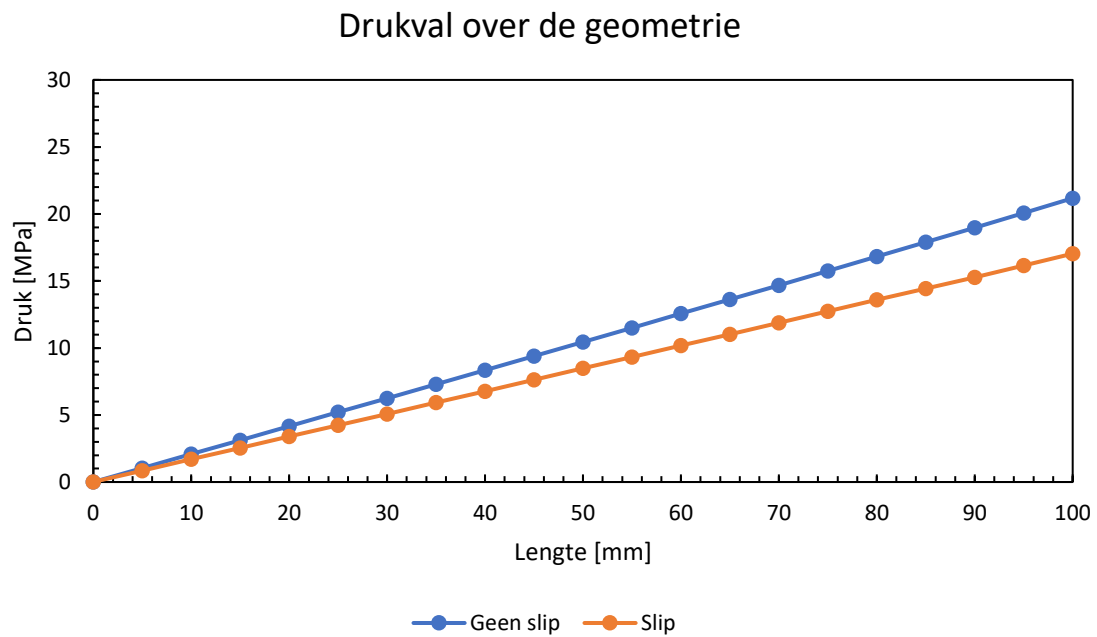
Figuur 3-3 Vloei door een gleufvormige geometrie

Tabel 3-4 Randvoorwaarden in VEL

Vlak	Randvoorwaarde
Boven- en ondervlak	'Stationary wall'
Zijvlakken	'Stationary wall'
In	Input: 20 kg/h
Uit	Free
Initiële temperatuur	190°C

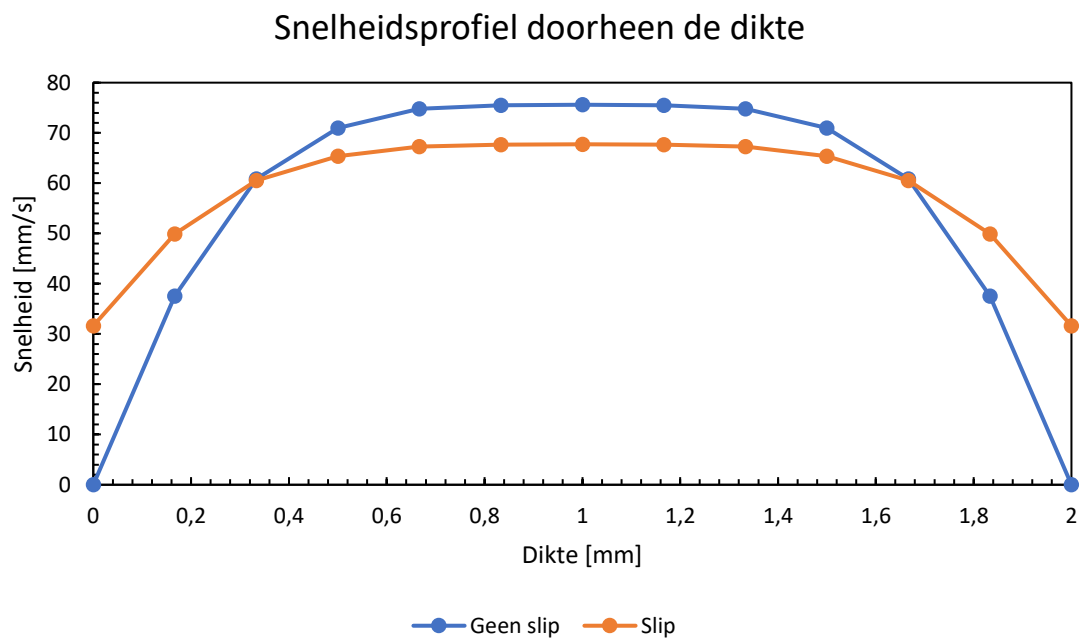
3.4.2 Resultaten

3.4.2.1 Drukval over de geometrie

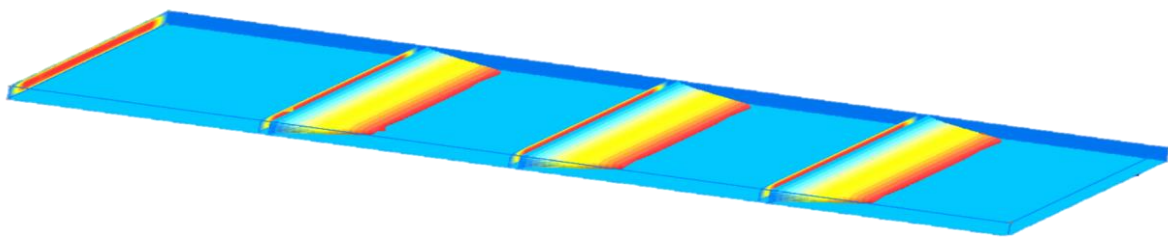


Figuur 3-4 Drukval over de geometrie met slip en zonder slip

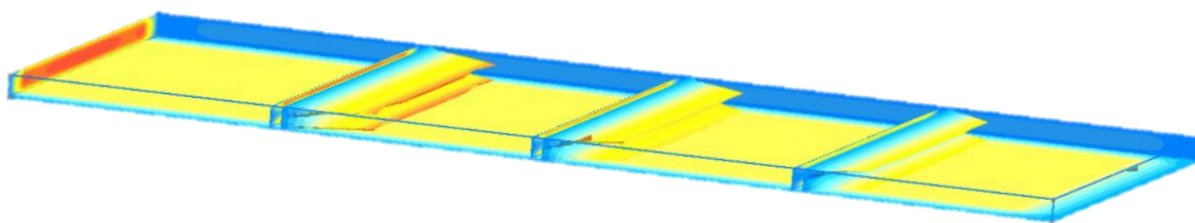
3.4.2.2 Snelheid doorheen de dikte



Figuur 3-5 Snelheid doorheen de dikte bij slip en zonder slip

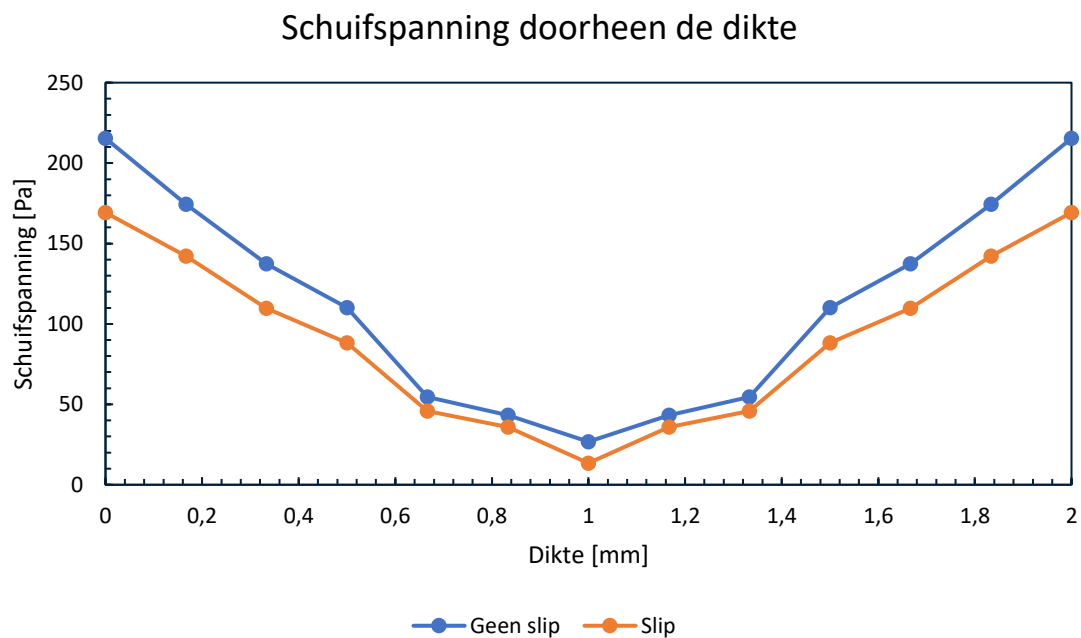


Figuur 3-6 Snelheidsprofiel doorheen de dikte zonder slip



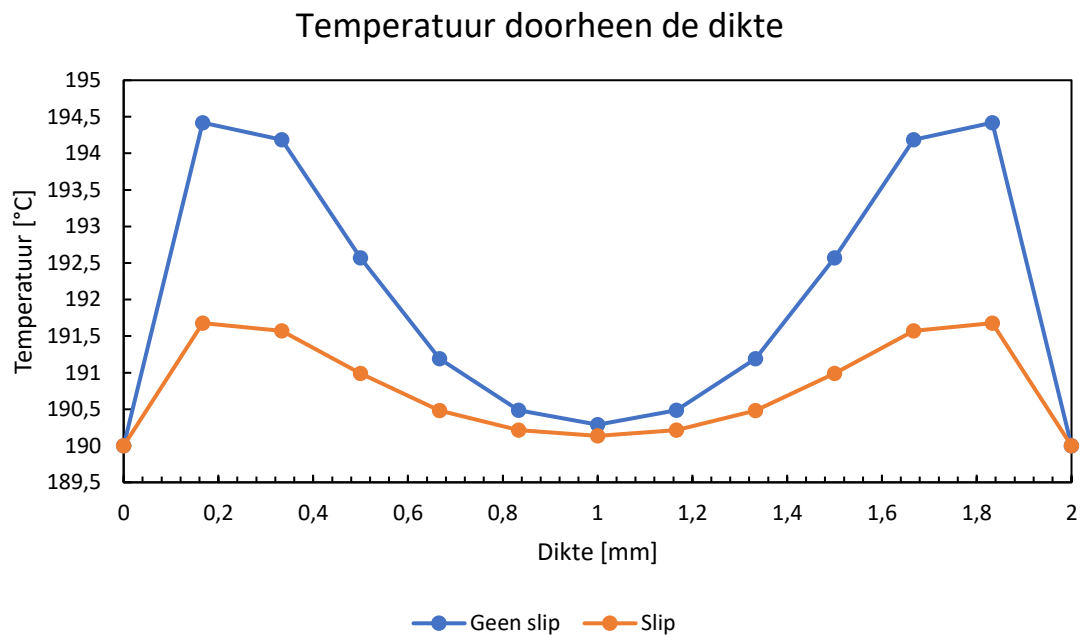
Figuur 3-7 Snelheidsprofiel doorheen de dikte met slip

3.4.2.3 Schuifspanning doorheen de dikte



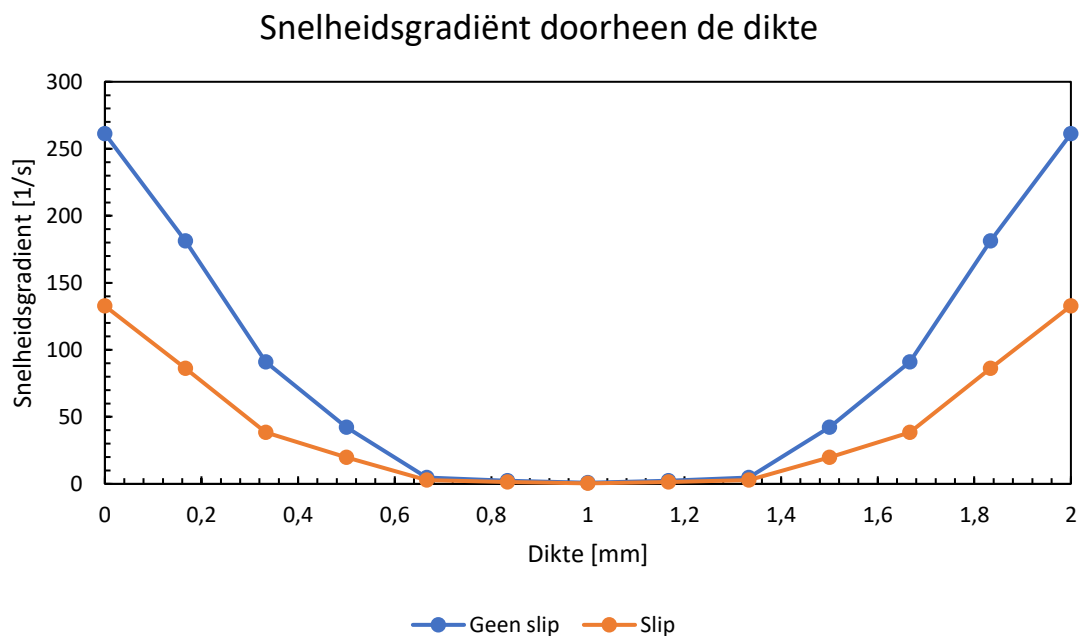
Figuur 3-8 Schuifspanning doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.4.2.4 *Temperatuur doorheen de dikte*



Figuur 3-9 Temperatuur doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.4.2.5 *Snelheidsgradiënt doorheen de dikte*



Figuur 3-10 Snelheidsgradiënt doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.4.2.6 Samenvatting van de resultaten

Tabel 3-5 Vergelijking tussen berekende en gesimuleerde waarden in VEL

Parameter	Berekend	VEL	PA (%)
Drukval ΔP [MPa]	26.5	21.18	- 20
Snelheidsgradiënt $\dot{\gamma}$ [s ⁻¹]	274.5	261.2	- 5
Slipsnelheid v_{slip} [m/s]	0.0372	0.0316	- 15
Drukval bij slip ΔP_{slip} [MPa]	18.2	17.0	- 7
Snelheidsgradiënt bij slip $\dot{\gamma}_{slip}$ [s ⁻¹]	90.7	132.8	+ 47

De resultaten bekomen met Virtual Extrusion Laboratory vertonen een procentuele afwijking van maximum 20% met de berekende resultaten.

De drukval over de geometrie bij slip en zonder slip ligt iets lager dan de berekende waarden. Dit komt doordat Virtual Extrusion Laboratory viskeuze opwarming in rekening brengt en de theoretische berekeningen niet. Bij een initiële temperatuur van 190°C stijgt de temperatuur in het midden van de plaat met ongeveer 5°C wanneer geen slip in rekening wordt gebracht. Als er wel slip in rekening wordt gebracht dan blijft deze temperatuurstijging beperkt tot 1 à 2 °C. Dit is zoals verwacht want wanneer de smeltstroom slipt, dan kan de smelt gemakkelijker door de gleufvormige geometrie bewegen. Dit heeft ook lagere snelheidsgradiënten en schuifspanningen tot gevolg. Hierbij moet opgemerkt worden dat het verloop van de schuifspanning in principe volgens rechte lijnen moet zijn.

Viskeuze opwarming is het grootst net naast de wand omdat hier het meeste wrijving optreedt. De snelheid aan de wand is gelijk aan nul, terwijl deze maximaal is in het midden. Hierbij moet wel opgemerkt worden dat de curves in Figuur 3-9 bij het midden van de plaat horen. Hoe dichter bij de inlaat, hoe groter de drukval over de geometrie en hoe hoger de temperatuurstijging. De maximale temperatuur is 200 °C, dit is 10°C hoger dan de ingestelde temperatuur. Figuur 3-5 toont het snelheidsprofiel doorheen de dikte bij slip en zonder slip. De slipstroom kan hierbij afgelezen worden als de start van de oranje curve. Er wordt een procentuele afwijking van 15% gevonden tussen de berekende en de gesimuleerde waarde.

3.5 PolyXtrue

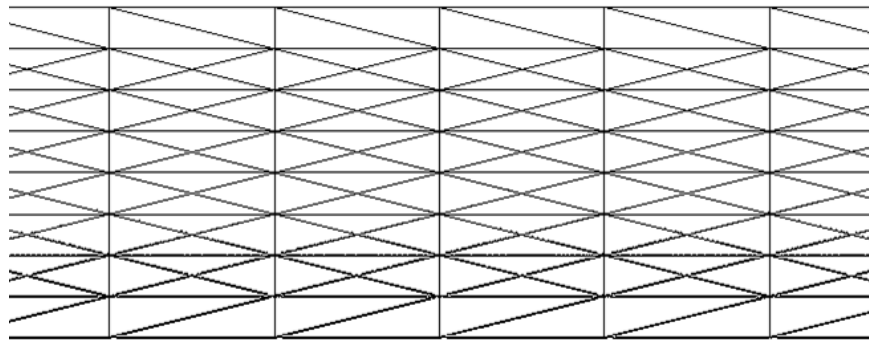
3.5.1 Instellingen

3.5.1.1 Mesh

In PolyXtrue worden voor de mesh tetraëdrische elementen gekozen met een 'mesh-size' van 0.5 mm en een minimum van zes elementen doorheen de dikte.

Tabel 3-6 Mesh instellingen PolyXtrue

Mesh type	Tetrahedral
Mesh size	$2.5 \cdot 10^{-4}$ m
Aantal lagen doorheen de dikte	8
Minimum # elements between die walls	$8 > 4$



Figuur 3-11 Mesh doorheen de dikte op de lange zijde

3.5.1.2 Materiaal

Het gebruikte materiaal is opnieuw 'typical rigid PVC' uit Virtual Extrusion Laboratory. In VEL wordt de viscositeit van het materiaal gegeven door een machtswet-model. In PolyXtrue dienen de materiaalparameters ingegeven te worden via een Carreau- of Cross-model, aangevuld met een Arrhenius- of WLF-model. Dit wordt bekomen d.m.v. 'fitting'.

Het machtswet-model is gegeven in vergelijking 3-6.

$$\eta = A * e^{-b*(T-T_{ref})} * \dot{\gamma}^{n-1} \quad 3-6$$

Tabel 3-7 Materiaalparameters

Parameter	Waarde	Eenheid
Consistentie index A	46120	$\text{Pa} \cdot \text{s}^n$
Temperatuur gevoeligheid b	0.02	$1/^\circ\text{C}$
Referentietemperatuur T_{ref}	190	$^\circ\text{C}$
Machtswetexponent n	0.34	/

De viscositeit in het WLF-model wordt gegeven door [23]:

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + (\eta_0 \frac{\dot{\gamma}}{\tau^*})^{1-n}} \quad 3-7$$

Hierbij is de nulviscositeit η_0 gelijk aan:

$$\eta_0 = D_1 * e^{\left[\frac{C_1 * (T - T_a)}{C_2 * (T - T_a)} \right]} \quad 3-8$$

$$\text{Met} \quad C_2 = C_3 + D_3 * p \quad \text{en} \quad T_a = D_2 + D_3 * p \quad 3-9$$

Met: η : viscositeit van de smelt [Pa*s] T : temperatuur [K]
 η_0 : nulviscositeit [Pa*s] p : druk [Pa]
 $\dot{\gamma}$: snelheidsgradiënt [s⁻¹] T_a : glasovergangstemperatuur [K]
 τ^* : kritische schuifspanning [Pa] n : machtswetexponent [/]
 D_1, D_2, D_3, C_1, C_3 : Data-gefitte coëfficiënten [/]

Na non-lineair least square fitting wordt bekomen dat:

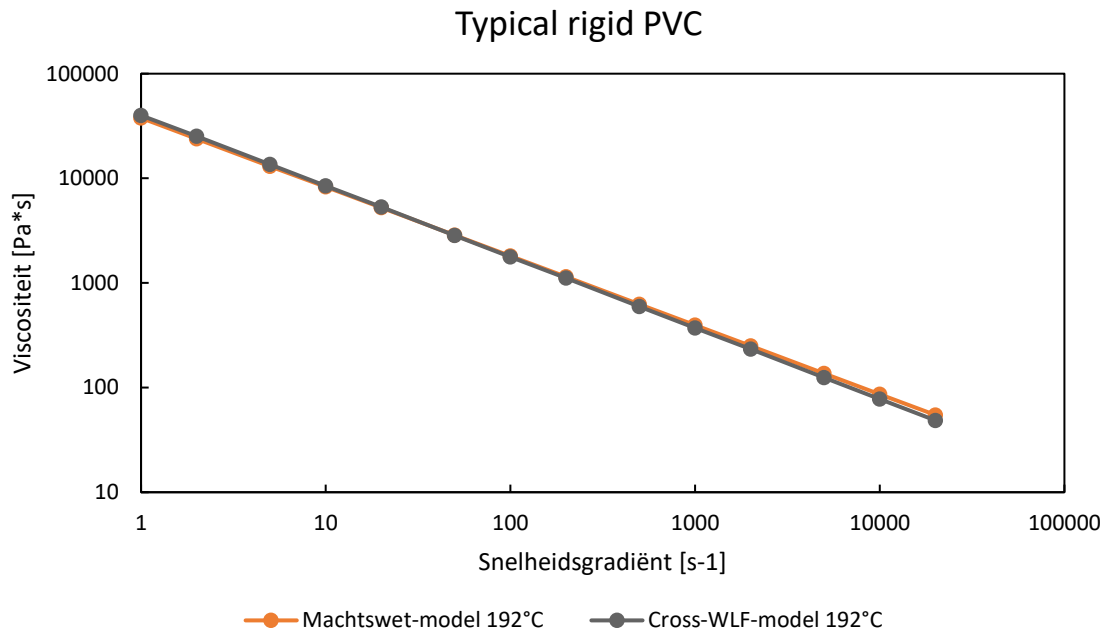
Tabel 3-8 Gefitte parameters in het WLF-model

D_1	3.41*10 ⁹ Pa*s
C_1	18.19
C_2	92.13 K
T_a	377.4 K
η_0	8.33*10 ⁵

Tabel 3-9 Gefitte parameters in het Cross-model

τ^*	1.27*10 ⁴
n	0.32

In Figuur 3-12 is de fitting van het Cross-WLF-model op het machtswetmodel te zien. Het viscositeitsverloop bij 192°C is hier nagenoeg hetzelfde bij snelheidsgradiënten tussen 10 en 1000 s⁻¹. Bij hogere of lagere snelheidsgradiënten wijken de viscositeiten lichtjes af.



Figuur 3-12 Fitting van het Cross-WLF-model op het machtswetmodel

Aangezien het slipmodel in PolyXtrue gelijkaardig is aan dat van Virtual Extrusion Laboratory kunnen de slipparameters bepaald worden door deze slipmodellen aan elkaar gelijk te stellen.

$$v_{slip} = v_0 * \left(\frac{\tau}{\tau_{ref}} \right)^{n_s} = a * \tau^c$$

$$\frac{v_0}{\tau_{ref}^{n_s}} * \tau^{n_s} = a * \tau^c$$

$$a = \frac{v_0}{\tau_{ref}^{n_s}} = \frac{9.5 * 10^{-3}}{100000^{2.28}} = 3.78 * 10^{-14} \quad \text{en} \quad c = n_s = 2.28$$

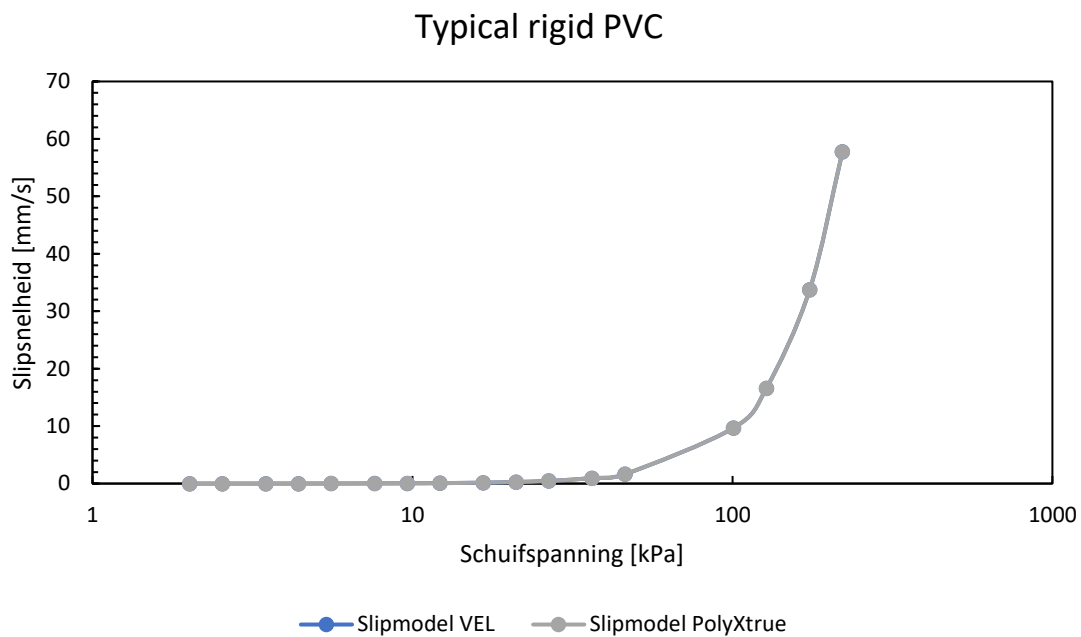
$$-b_{VEL} * (T - T_{ref}) = b_{PX} * T \leftrightarrow b_{PX} = -b_{VEL} * \frac{T - T_{ref}}{T} = -0.02 * \frac{190 - 182}{190} = 8.42 * 10^{-4}$$

De schuifspanning τ_{ref} , de referentietemperatuur T_{ref} , en de constante slip v_0 zijn materiaalconstanten en zijn respectievelijk gelijk aan 100000 Pa, 182°C en 9.5 mm/s.

Tabel 3-10 Slipparameters in PolyXtrue

a	$3.78 * 10^{-14}$
b_{PX}	$8.42 * 10^{-4}$
c	2.28

Het verloop van de slipsnelheid als functie van de schuifspanning is te zien in Figuur 3-13 Slipsnelheid in functie van de schuifspanning. De curves van beide slipmodellen zijn identiek. Bijgevolg is er maar één curve zichtbaar.



Figuur 3-13 Slipsnelheid in functie van de schuifspanning

View .MAT File

Commercial Name: PVC_VEL_berekend

Polymer Family: PVC Producer:

Material Description: PVC_VEL_berekend

Material File Name: Y:\01_ONTWERP\07_SIMULATIONS\FLOW_SIM\11_Louise_Chys\01340\PVC_VEL_berekend_:

Viscosity Graph Test Data

Shear Viscosity

☐ Arrhenius Model

☒ WLF Model

A: 3.400000E+09 Pa.s

T_a: 3.773550E+02 K

C₁: 1.818980E+01

C₂: 9.213000E+01 K

☐ Carreau Model

☒ Cross Model

Tau: 1.266680E+04 Pa

n: 3.205600E-01

Elongational Viscosity

Planar Axisymmetric

☒ Planar

☐ Carreau Model

☒ Cross Model

☐ Sarkar - Gupta Model

Tau: 5.066720E+04 Pa

n: 3.205600E-01

Thermal Properties

Thermal Conductivity: 1.800000E-01 W/(m.K)

Melt Density: 1.000000E+03 kg/m³

Specific Heat: 2.500000E+03 J/(kg.K)

☐ Shrinkage Parameters

☒ Slip Velocity Parameters

☒ Power-law Model

a: 3.782020E-14 m/(Pa^{0.5}.s)

b: 8.420000E-04 1/K

c: 2.280000E+00

Edit Close

Figuur 3-14 Materiaal file PolyXtrue

3.5.1.3 Randvoorwaarden

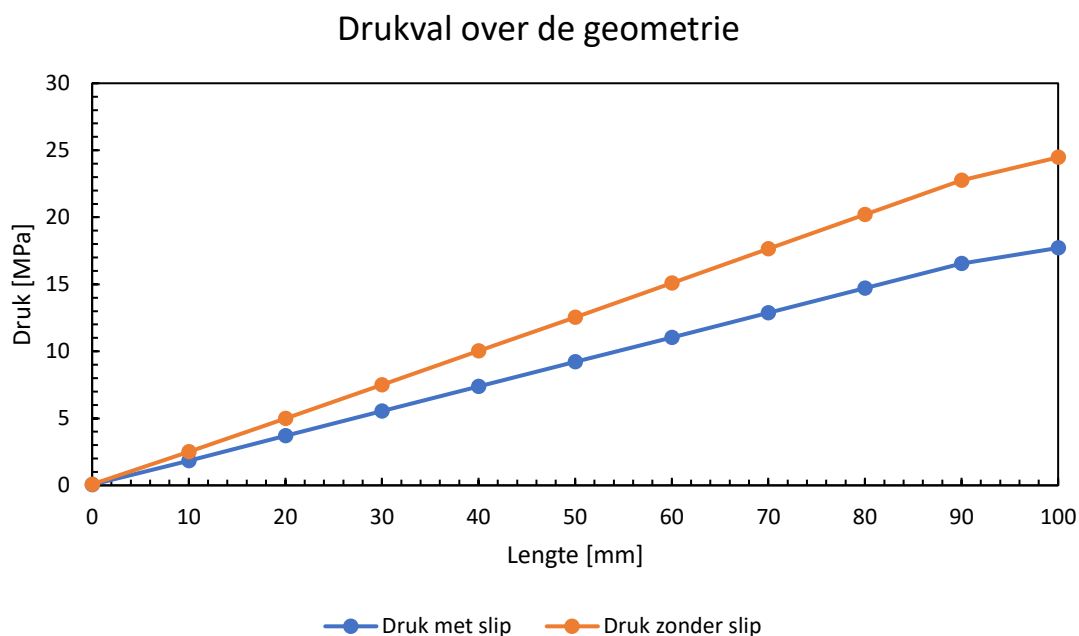
Bij het laden van de gleufvormige geometrie wordt in het tabblad 'geometry groups' de in- en uittrede van de plaat aangeduid. Onderstaande randvoorwaarden worden toegepast:

Tabel 3-11 Randvoorwaarden in PolyXtrue

Massadebiet	20 kg/h
Temperatuur van de smelt	190°C
Matrijstemperatuur	190°C
Slip	No slip / slip

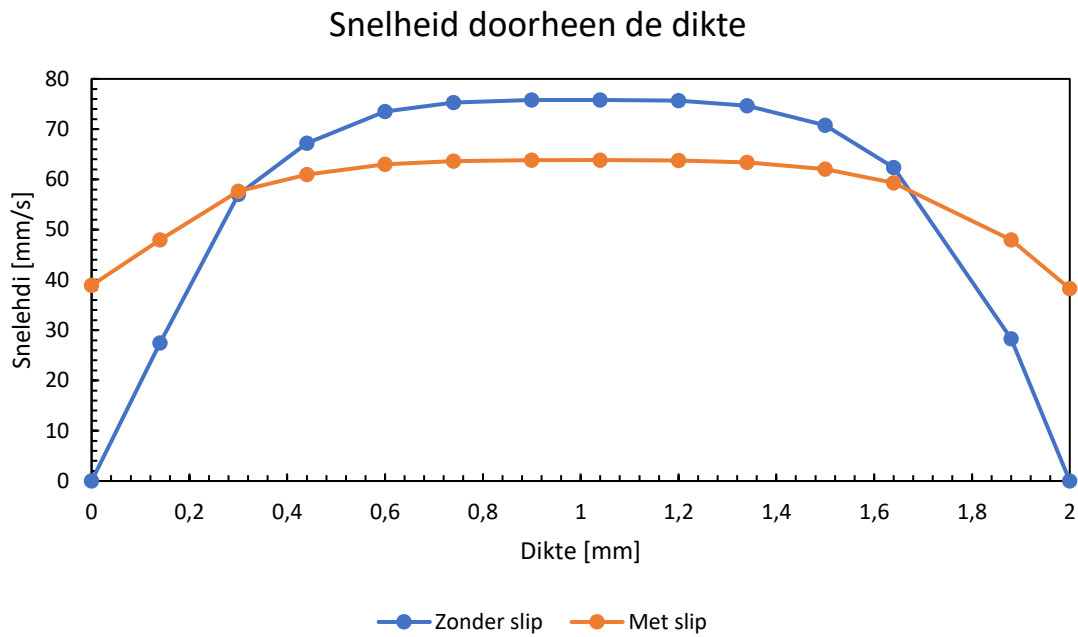
3.5.2 Resultaten

3.5.2.1 Drukval over de geometrie



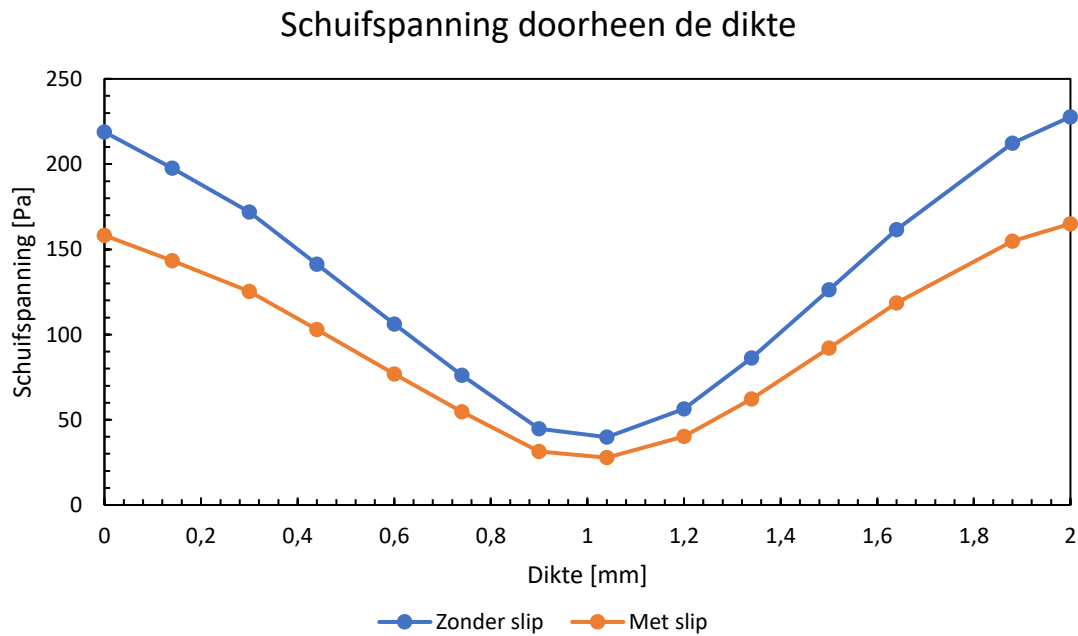
Figuur 3-15 Drukval over de gleufvormige geometrie bij slip en zonder slip

3.5.2.2 Snelheid doorheen de dikte



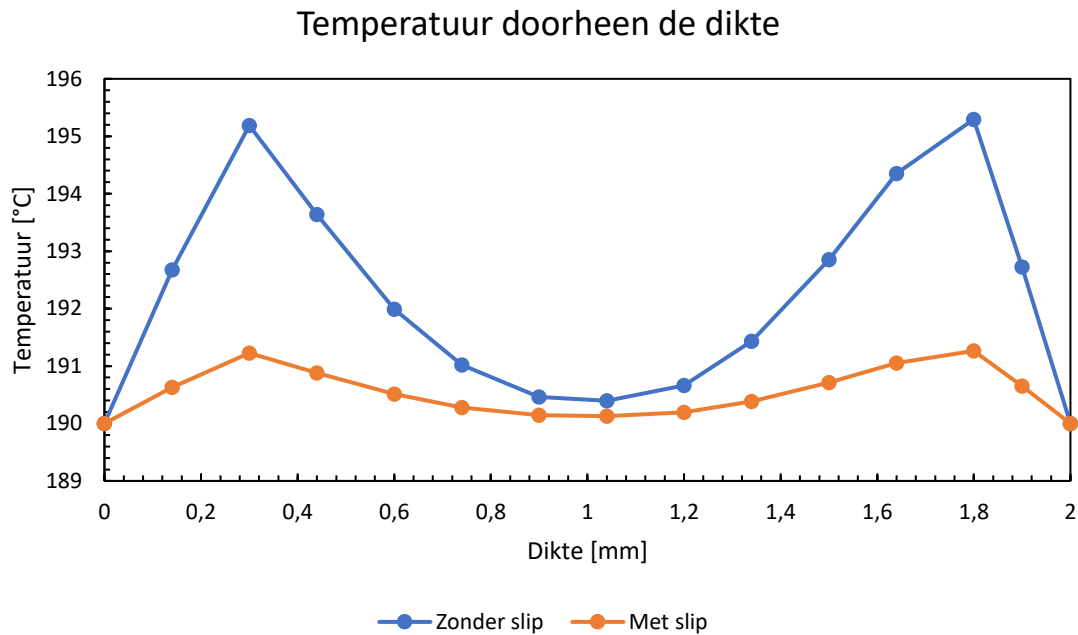
Figuur 3-16 Snelheid doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.5.2.3 Schuifspanning doorheen de dikte



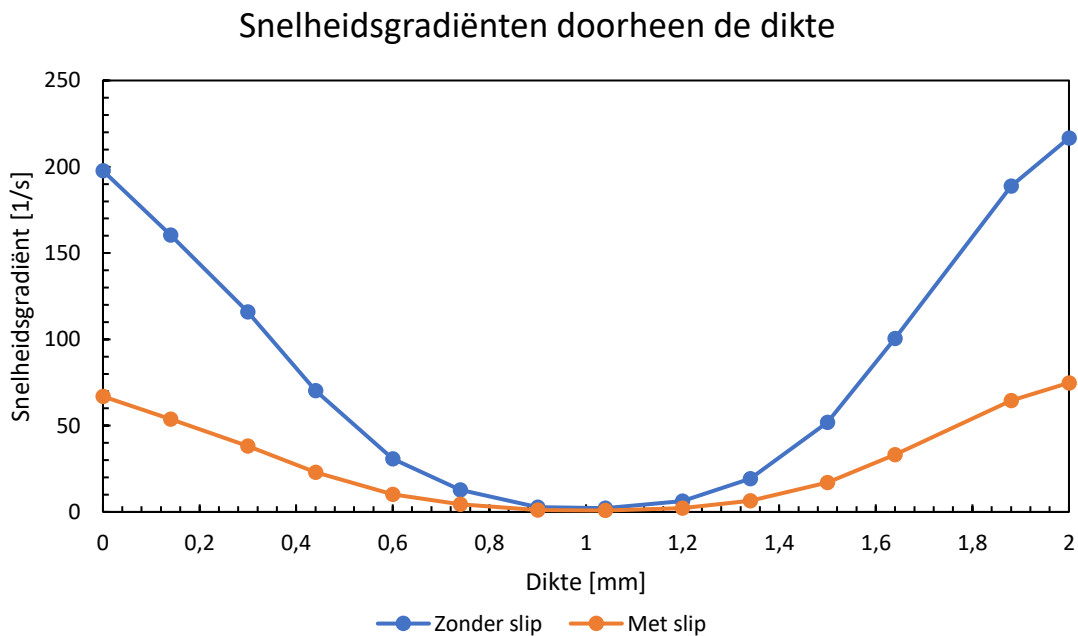
Figuur 3-17 Schuifspanningen doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.5.2.4 *Temperatuur doorheen de dikte*



Figuur 3-18 Temperatuursverloop doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.5.2.5 *Snelheidsgradiënt doorheen de dikte*



Figuur 3-19 Snelheidsgradiënten doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.5.2.6 Samenvatting van de resultaten

Tabel 3-12 Vergelijking tussen berekende en gesimuleerde waarden in PolyXtrue

Parameter	Berekend	PolyXtrue	PA (%)
Drukval ΔP [MPa]	26.5	25.2	- 5
Snelheidsgradiënt $\dot{\gamma}$ [s ⁻¹]	274.5	216.7	- 21
Slipsnelheid v_{slip} [mm/s]	37.2	38.2	3
Drukval bij slip ΔP_{slip} [MPa]	18.2	18.4	1
Snelheidsgradiënt bij slip $\dot{\gamma}_{slip}$ [s ⁻¹]	90.7	74.8	- 8

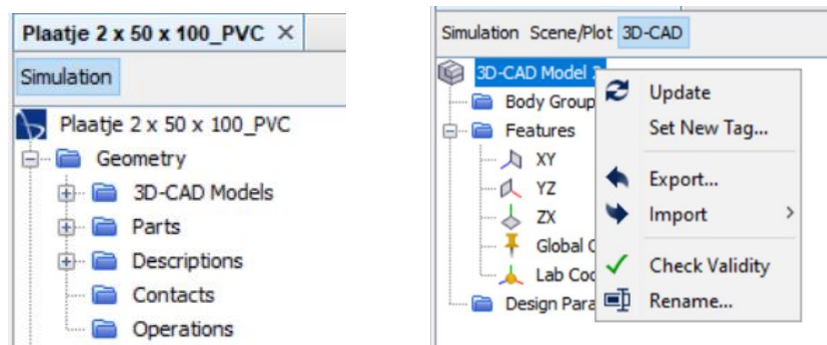
Voor het star PVC uit de database van Virtual Extrusion Laboratory is de maximale procentuele afwijking, bekomen met PolyXtrue 21%. De gesimuleerde druk ligt iets lager dan de berekende druk omdat er rekening werd gehouden met interne opwarming. Enkel voor de snelheidsgradiënten worden procentuele afwijkingen gevonden die groter zijn dan 10%. Als de slipparameters a, b en c gekend zijn van een materiaal kan slip correct gesimuleerd worden met PolyXtrue.

3.6 STAR CCM+

3.6.1 Instellingen

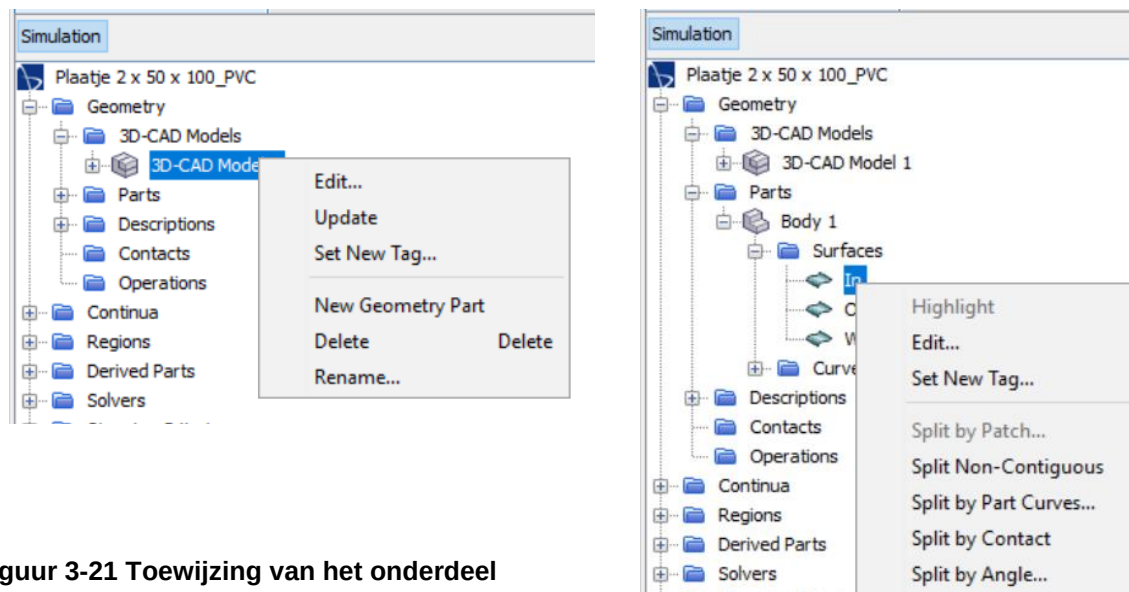
3.6.1.1 Geometrie

De gleufvormige geometrie wordt geïmporteerd in STAR CCM+ via 'Geometry', new '3D CAD Model', import.



Figuur 3-20 Importeren van de geometrie

Elk 3D-model moet via 'New Geometry Part' omgezet worden naar een 'part' om gebruikt te kunnen worden in de simulaties.

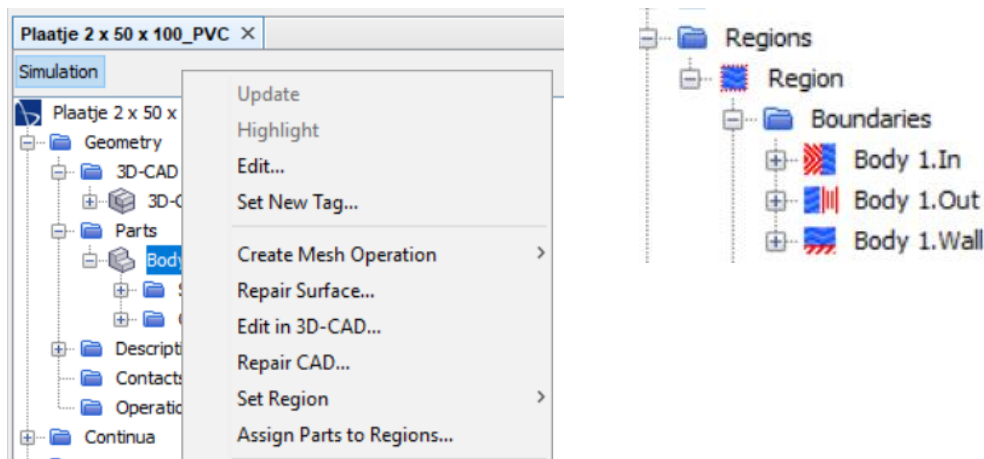


Figuur 3-21 Toewijzing van het onderdeel

Na het aanmaken van een 'New Geometry Part' verschijnt de geometrie onder de titel 'Parts'. De geometrie moet nu opgesplitst worden in aparte vlakken om randvoorwaarden te kunnen toekennen.

Dit kan m.b.v. 'Split by Patch', 'Split Non-Contiguous', 'Split by Part Curves', 'Split by Contact' en 'Split by Angle'. De rechthoekige geometrie wordt hier opgedeeld in een 'inlet', omringende wanden, en een 'outlet'.

Daarna moet de opgedeelde geometrie toegekend worden aan 'regions' via 'Assign Parts to Regions'. De onderverdeling die op 'part'-niveau gemaakt werd, blijft behouden op 'region'-niveau en bevindt zich onder 'boundaries'.



Figuur 3-22 Toekennen van een domein

3.6.1.2 Mesh

In STAR CCM+ wordt een 'Automated mesh' toegepast via 'Geometry', 'Operations', 'Automated mesh'. Er kan gekozen worden tussen verschillende soorten 'meshers' die elk een eigen functie hebben.

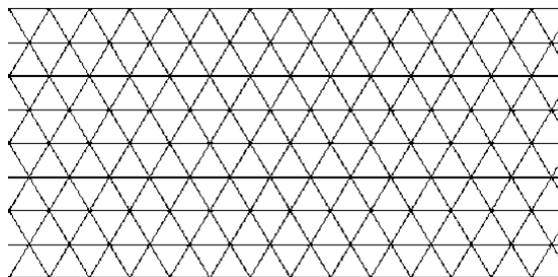
Tabel 3-13 Mesh instellingen STAR CCM+

Mesh types	Surface remesher
	Automatic surface repair
	Prism layer mesher
	Thin mesher
	Tetrahedral mesher
Mesh size	$2.5 \cdot 10^{-4}$ m
Aantal lagen doorheen de dikte	8

De 'surface remesher' verbetert het oppervlak voor de 'volume meshers' en helpt bij het genereren van de onderliggende elementen die gevormd worden door de 'prism layer mesher' [24]. Fouten in de geometrie van het gemeshte oppervlak worden verbeterd door een automatische procedure, 'Automatic surface repair' [25].

Met behulp van de 'prism layer mesher' worden orthogonale, prismatische cellen gegenereerd aan de oppervlakken of grenzen. Deze mesher is nodig om de nauwkeurigheid van de vloeisimulatie te verbeteren [26].

De 'thin mesher' wordt gebruikt om dunne stukken in een 'part' te voorzien van een volume mesh. Stukken met een grotere omvang worden gemesht door de 'tetrahedral mesher' [27]. Het te berekenen volume wordt gevuld met tetraëdrische elementen door de 'tetrahedral mesher'. Dit type mesh voorziet een simpele oplossing het genereren van een complexe mesh [28].



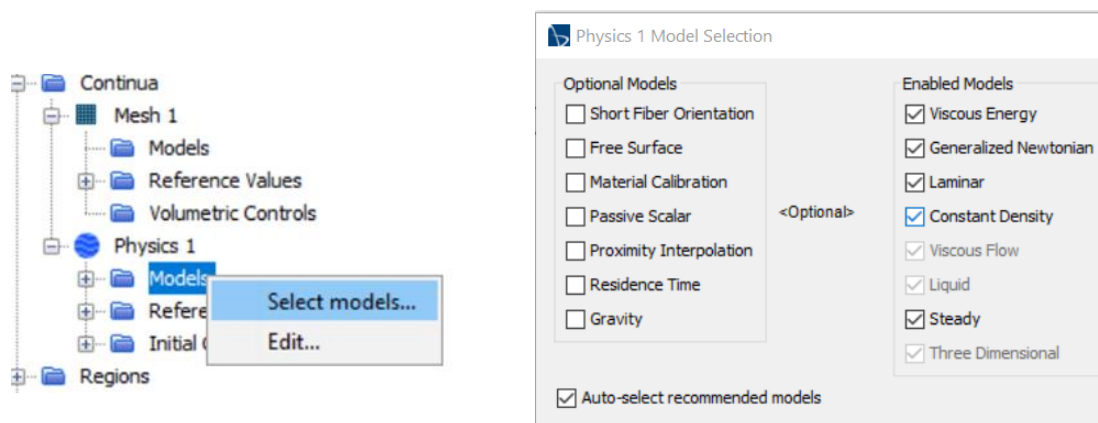
Figuur 3-23 Mesh doorheen de dikte op de lange zijde

3.6.1.3 Materiaal

Voor elke niet-Newtoniaanse vloeistof die gebruikt wordt in de simulatie moet een 'physics continuum' met volgende modellen gemaakt worden:

Tabel 3-14 Physics model selection

Domein	Model
Time	Steady
Space	Three dimensional
Material	Liquid
Flow	Viscous flow / Laminar / Constant density
Rheology	Generalized Newtonian
Optional models	Viscous energy



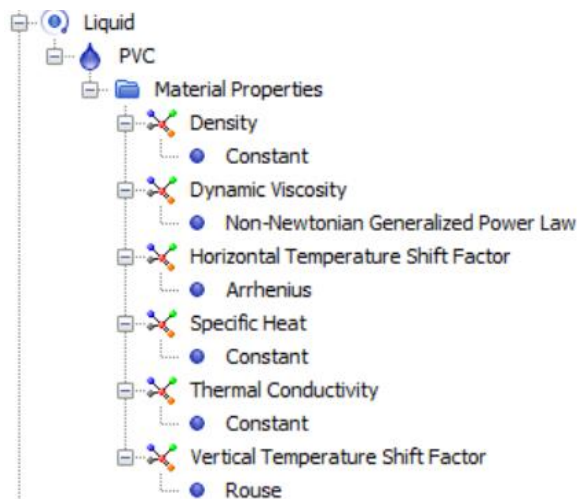
Figuur 3-24 Physics model selection

Het 'Generalized Newtonian Model' wordt gekozen voor niet-Newtoniaanse vloeistoffen met een hoge of variabele viscositeit, zonder elasticiteit. Indien er in de kunststof normaalspanningen of geheugeneffecten aanwezig zijn, dan dient het 'Viscoelastic Model' gekozen te worden. Het 'Viscous Energy Model' zorgt ervoor dat temperatuurspecificaties kunnen worden opgegeven en viskeuze opwarming in rekening wordt gebracht [29].

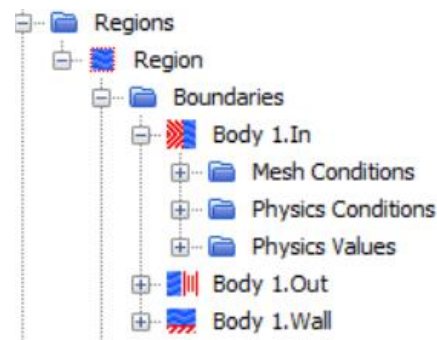
Via het 'liquid' model kunnen de parameters van het materiaal ingegeven worden. Dit is te zien in Tabel 3-15.

Tabel 3-15 Materiaalparameters

Parameter	Type	Specificaties	Waarde
Dichtheid van de smelt	Constant		1000 kg/m ³
Dynamische viscositeit	Non-Newtonian generalized power law	Consistentie index A	46120 Pas ⁿ
		Machtswetexponent n	0.34
		Yielding viscosity	46120 Pas ⁿ
Horizontal TSF	Arrhenius	Activatie energie E _a	5750 J/mol
		Referentie temperatuur	340 K
Specifieke warmtecapaciteit	Constant	/	2500 J/kg*K
Warmtegeleidbaarheid	Constant	/	0.17 W/m*K
Vertical TSF	Constant	/	1



Figuur 3-25 Materiaalparameters



Figuur 3-26 Randvoorwaarden

De horizontale temperatuur-verschuivingsfactor werd gevonden door de temperatuursafhankelijkheid van de machtswet gelijk te stellen aan de vergelijking van Arrhenius, zie vergelijking 3-10.

$$\exp^{-b(T-T_{ref})} = \exp^{\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)} \quad 3-10$$

$$-b * (T - T_{ref}) = \frac{E_a}{R} * \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \leftrightarrow E_a = -R * b * (T - T_{ref}) * \frac{1}{\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)}$$

$$E_a = -8.314 * 0.02 * (190 - 182) * \left(\frac{1}{\frac{1}{190} - \frac{1}{182}} \right) = 5750 \text{ J/mol}$$

3.6.1.4 Randvoorwaarden

De beginvoorwaarden, zoals massadebiet en temperatuur, kunnen ingegeven worden bij de onderverdeling 'region', per 'boundary'.

Tabel 3-16 Randvoorwaarden

Boundary	Type	Physics values	
Instroom	Mass flow inlet	Mass flow rate: 20 kg/h	
		Static temperature: 463 K	
Uitstroom	Pressure outlet	Pressure: 0 Pa	
		Physics conditions	Physics values
Bovenvlak	Wall	Shear stress specification: Slip/No slip	Slip coefficient: 615895 kg/m ² s
Ondervlak		Thermal specification: Temperature	Static temperature: 463 K

De slip coëfficiënt en de slip exponent kunnen bepaald worden door de drukval over de rechthoekige geometrie uit te zetten in functie van het debiet. Volgend machtsverband wordt dan gevonden tussen deze parameters:

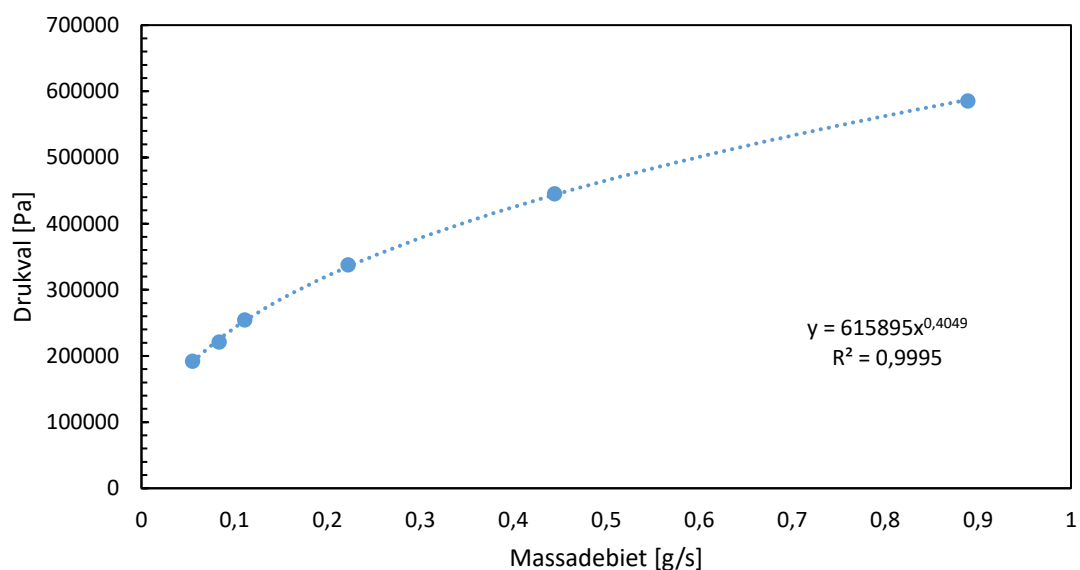
$$y = 615895 x^{0.405} \quad 3-11$$

Deze vergelijking kan gelijk gesteld worden aan de slipvergelijking (vergelijking 2-8) in STAR CCM+ :

$$615895 x^{0.405} = -k_s * |v_s|^{n_s-1} * v_s \quad 3-12$$

$$k_s = 615895 \quad \text{en} \quad n_s = 0.405$$

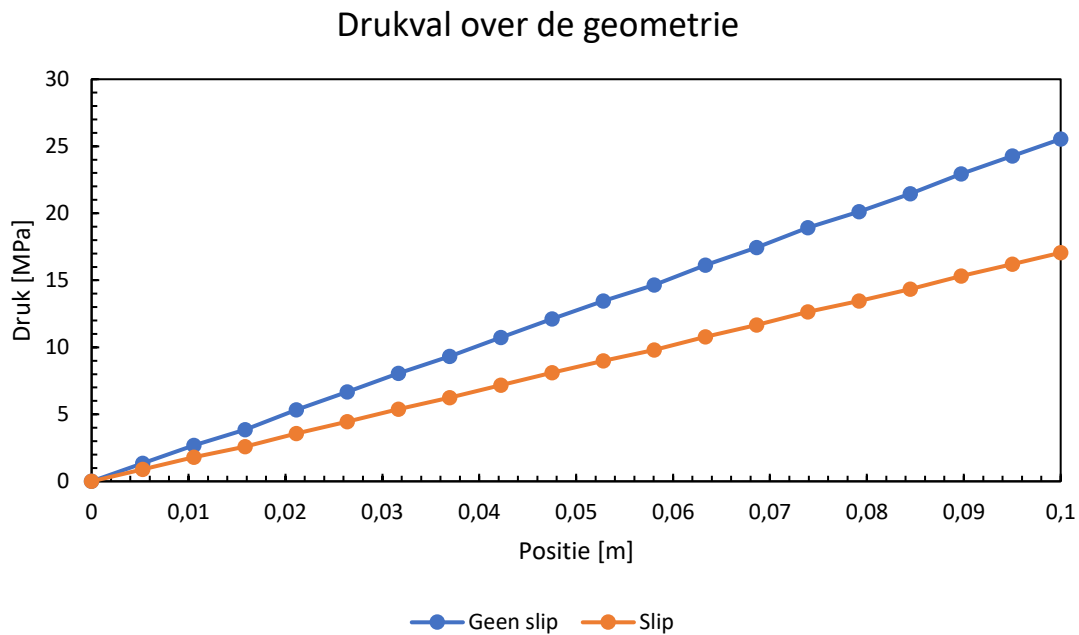
Druk in functie van het massadebiet



Figuur 3-27 Verband tussen druk en massadebiet bij een rechthoekige geometrie

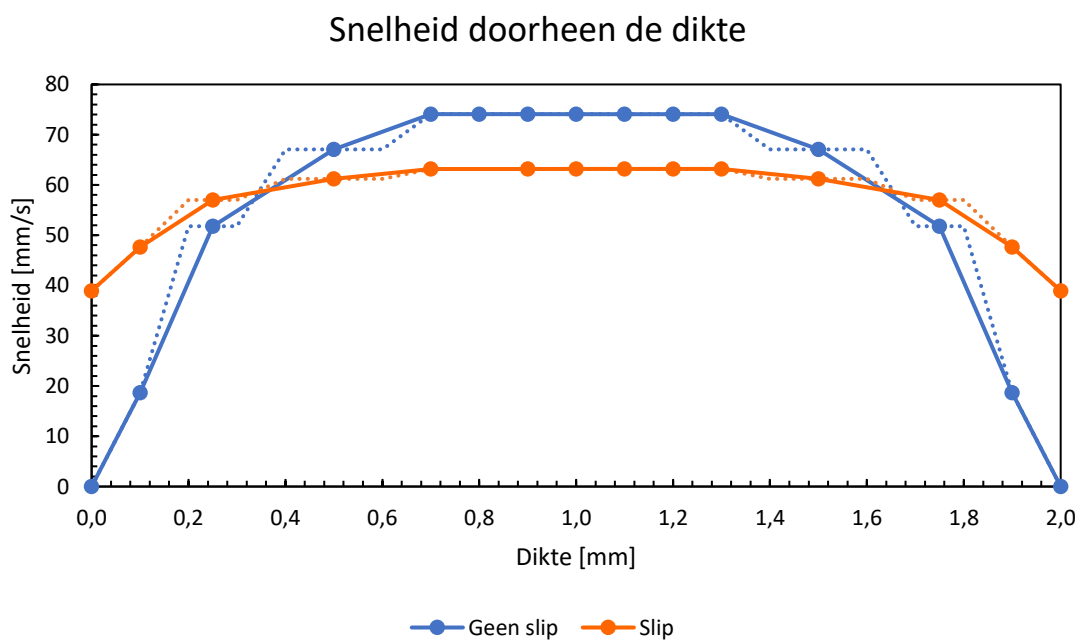
3.6.2 Resultaten

3.6.2.1 Drukval over de geometrie



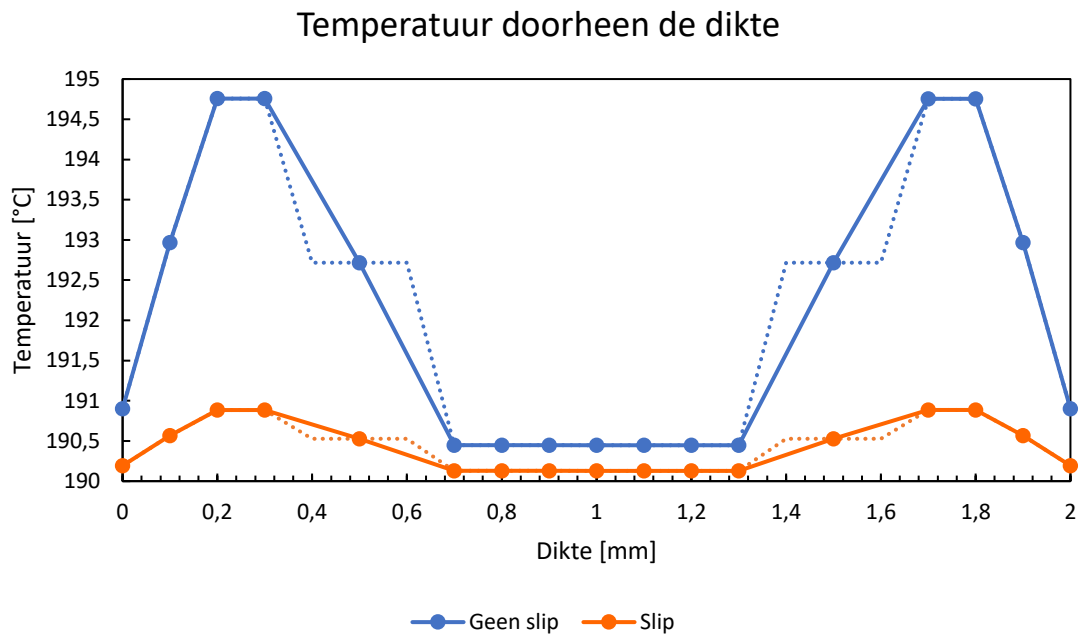
Figuur 3-28 Drukval over de geometrie bij slip en zonder slip

3.6.2.2 Snelheid doorheen de dikte



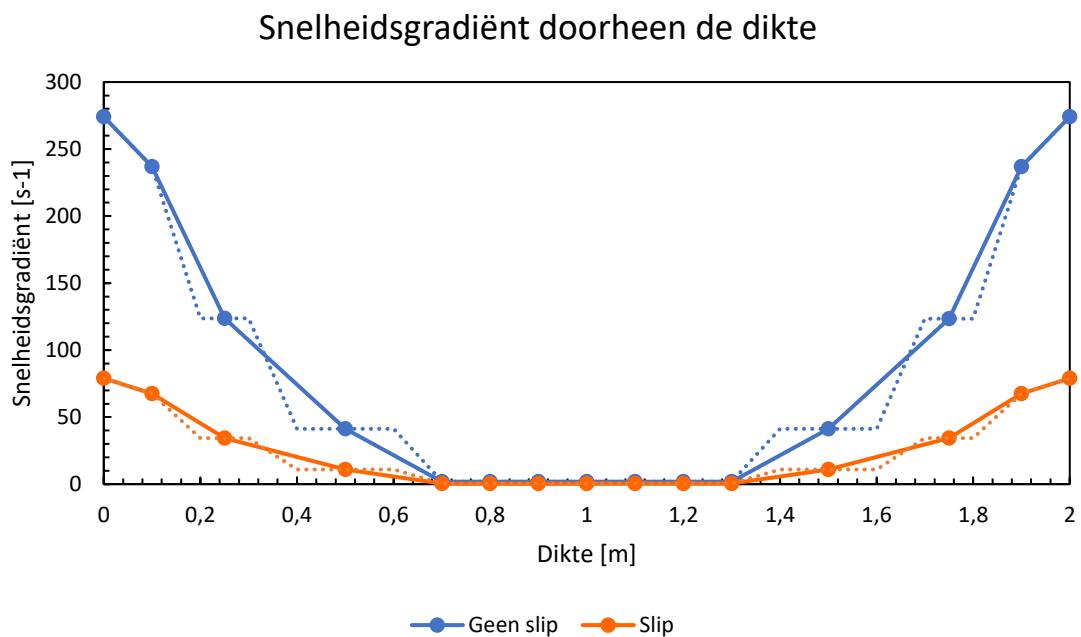
Figuur 3-29 Snelheid doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.6.2.3 *Temperatuur doorheen de dikte*



Figuur 3-30 Temperatuursverloop doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.6.2.4 *Snelheidsgradiënt doorheen de dikte*



Figuur 3-31 Snelheidsgradiënt doorheen de dikte bij slip en zonder slip

3.6.2.5 Samenvatting van de resultaten

Tabel 3-17 Vergelijking tussen berekende en gesimuleerde waarden in STAR CCM+

Parameter	Berekend	STAR CCM+	PA (%)
Drukval ΔP [MPa]	26.5	25.5	- 4
Snelheidsgradiënt $\dot{\gamma}$ [s ⁻¹]	274.5	274.2	- 0.11
Slipsnelheid v_{slip} [mm/s]	37.2	38.9	5
Drukval bij slip ΔP_{slip} [MPa]	18.2	17.1	- 6
Snelheidsgradiënt bij slip $\dot{\gamma}_{slip}$ [s ⁻¹]	90.7	79.0	- 13

De resultaten die bekomen werden met STAR CCM+ vertonen een procentuele afwijking van maximaal 13% met de berekende resultaten. De gesimuleerde waarden liggen iets lager dan de berekende. Dit kan toegewezen worden aan het feit dat er bij de theoretische berekeningen geen rekening gehouden wordt met interne opwarming. Enkel bij de slipsnelheid is de gesimuleerde waarde groter dan de berekende. De procentuele afwijking is hier gelijk aan 5%. Hierbij moet opgemerkt worden dat ondanks voldoende elementen doorheen de dikte, er bij het opvragen van de grafieken steeds meerdere punten met dezelfde waarde naast elkaar tevoorschijn kwamen. Dit resultaat is te zien in de stippellijnen. De reden hiervoor is dat hier 'elemental' gewerkt wordt en niet 'nodal'. Dit houdt in dat er over één element overal dezelfde waarde verondersteld wordt. Om de curve in volle lijn te bekomen werd telkens het midden van de vlakke stukken verbonden. Dit is ook voor de hierop volgende grafieken in deze software het geval. Schuifspanning doorheen de dikte kon hier niet worden opgevraagd.

3.7 Algemeen besluit

De vloeit van een niet-newtoniaanse vloeistof doorheen een gleufvormige geometrie werd gesimuleerd in de softwarepakketten Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue en STAR CCM+. Hierbij werd nagegaan in hoeverre de bekomen resultaten overeen komen met theoretisch berekende waarden.

3.7.1 Samenvatting van de resultaten

Tabel 3-18 Samenvatting van de resultaten

	Berekend	VEL	PolyXtrue	STAR CCM+
Drukval [MPa]	26.5	21.18	25.2	25.5
Snelheidsgradiënt [s^{-1}]	274.5	261.2	216.7	274.2
Slipsnelheid [mm/s]	37.2	31.6	38.2	38.9
Drukval bij slip [MPa]	18.2	17.0	18.4	17.1
Snelheidsgradiënt bij slip [s^{-1}]	90.7	132.8	74.8	79.0

De resultaten uit Virtual Extrusion Laboratory vertonen een maximale procentuele afwijking van 20% met de berekende resultaten. Dit is zoals verwacht aangezien dit softwarepakket dezelfde formules gebruikt als deze die gebruikt werden voor de theoretische berekeningen. De drukval over de gleufvormige geometrie is lager bij de simulaties dan bij de berekeningen. De reden hiervoor is dat de software rekening houdt met viskeuze opwarming en de theoretische berekeningen niet. De snelheidsgradiënten en de slipsnelheid wijken ook licht af van de berekende waarden. Dit kan een gevolg zijn van de discrete benadering met elementen.

Voor het gekende PVC uit de database van VEL komen zowel de resultaten in PolyXtrue als in STAR CCM+ zeer goed overeen met de berekende resultaten en de resultaten in VEL. Deze pakketten vertonen respectievelijk een maximale procentuele afwijking van 21% en 13%. PolyXtrue en STAR CCM+ brengen slip correct in rekening op voorwaarde dat de slipparameters van het materiaal correct ingegeven worden. Deze resultaten leunen dichter aan bij de berekende resultaten dan de simulatieresultaten uit VEL. Dit kan zijn omdat de 'mesh' in PolyXtrue en STAR CCM+ meer elementen bevatte dan de 'mesh' in Virtual Extrusion Laboratory.

4 MATERIAALKARAKTERISATIE

Vooraleer een materiaal verwerkt wordt, is het belangrijk dat alle parameters die invloed hebben op het verwerkingsproces gekend zijn. Het materiaal waaruit de raamprofielen bij Deceuninck geproduceerd worden heeft andere eigenschappen dan het materiaal uit de database van VEL. Om een indruk te krijgen van de procesparameters en voornamelijk van het slipgedrag van dit materiaal, worden er testen uitgevoerd met het RhéoArt toestel. Dit is een dynamische, capillaire reometer die voornamelijk gebruikt wordt voor het testen van materialen zoals PVC. Het voordeel van de RhéoArt is dat het materiaal thermisch minder belast wordt doordat het smelten gebeurt d.m.v. een roterende schroef. Dit principe leunt ook dichter aan bij het werkelijke verwerkingsproces, waar het opsmelten overwegend gebeurt door wrijving [30].

4.1 Materialen

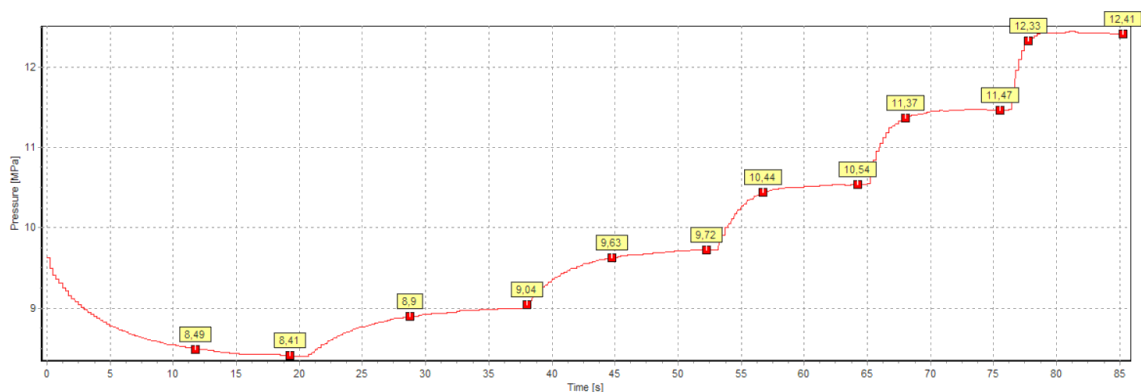
De materiaalkarakterisatie gebeurt op een standaard PVC van Deceuninck. Deze grondstof wordt veelvuldig gebruikt voor het fabriceren van raamprofielen. Alle parameters van dit materiaal moeten gekend zijn om de simulaties correct te kunnen uitvoeren.

4.2 Metingen met RhéoArt

De viscositeit van het materiaal wordt getest bij 170, 195 en 210 °C. Dit telkens met zes verschillende capillairen per temperatuur en twee metingen per capillair. De gegevens zijn te zien in Tabel 4-1. Bij het testen van het materiaal wordt volgend snelheidsgradiëntenverloop opgelegd: 20, 35, 60, 105, 182, 316 s⁻¹. Bij deze snelheidsgradiënten wordt de druk als functie van de tijd afgelezen. Het voorbeeld bij 195°C wordt hieronder uitgewerkt omdat dit het dichtst aanleunt bij de werkelijke verwerkingstemperatuur van PVC.

Tabel 4-1 Gegevens van de gebruikte capillairen

Capillair	Lengte [mm]	Diameter [mm]	L/D
1	0	1	0
2	10	1	10
3	20	1	20
4	0	2	0
5	20	2	10
6	40	2	20



Figuur 4-1 Drukken als functie van de tijd bij opgelegde snelheidsgradiënten

Tabel 4-2 Gemiddelde drukken bij lengtes 0, 10 en 20 mm en diameter 1 mm bij 195°C.

Schijnbare $\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	P [MPa] Capillair l = 0, d = 1	P [MPa] Capillair l = 10, d = 1	P [MPa] Capillair l = 20, d = 1
20	6.99	14.32	20.60
35	7.46	15.91	23.19
60	8.15	18.64	27.61
105	8.97	21.74	32.52
182	9.89	25.07	37.72
316	10.95	28.58	44.28

Tabel 4-3 Gemiddelde drukken bij lengtes 0, 20 en 40 mm en diameter 2 mm bij 195°C.

Schijnbare $\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	P [MPa] Capillair l = 0, d = 2	P [MPa] Capillair l = 20, d = 2	P [MPa] Capillair l = 40, d = 2
20	6.73	15.82	20.45
35	7.34	18.35	24.57
60	7.97	20.99	29.80
105	8.69	23.75	35.60
182	9.42	26.75	41.17
316	10.11	29.44	46.99

4.2.1 Bagley-correctie

Vervolgens wordt een Bagley-correctie toegepast. Hierbij worden de drukken uitgezet als functie van de verhouding L/D . Het snijpunt van de trendlijn met de y-as, m.a.w. waar L/D gelijk is aan nul komt overeen met de intrede-verliezen. Deze moeten worden afgetrokken van de drukken volgens de trendlijn bij een bepaalde L/D -verhouding, zie Figuur 4-2 Bagley-plot voor capillairen met diameter 1 mm.. De gegevens bij verhouding L/D gelijk aan 10 zijn terug te vinden in Tabel 4-4. Resultaten bij schuifspanningen groter dan 300000 Pa worden geschrapt. Deze waarde wordt als grens gekozen waaronder een materiaal het best verwerkt wordt. Boven deze schuifspanning kan er smeltbreuk optreden en is de stroming heel onstabiel.

Tabel 4-4 Drukken en schuifspanningen na Bagley-correctie bij $D = 1\text{mm}$ en $L/D = 10$

P volgens trendlijn [MPa]	P na correctie [MPa]	τ [Pa]
13.970	6.805	170125
15.518	7.863	196563
18.132	9.728	243188
21.075	11.773	294313
24.223	13.913	347813
27.933	16.665	416625

Tabel 4-5 Drukken en schuifspanningen na Bagley-correctie bij $D = 2\text{mm}$ en $L/D = 10$

P volgens trendlijn [MPa]	P na correctie [MPa]	τ [Pa]
14.33	6.86	171438
16.75	8.62	215375
19.58	10.91	272813
22.68	13.46	336438
25.78	15.88	396938
28.84	18.44	461000

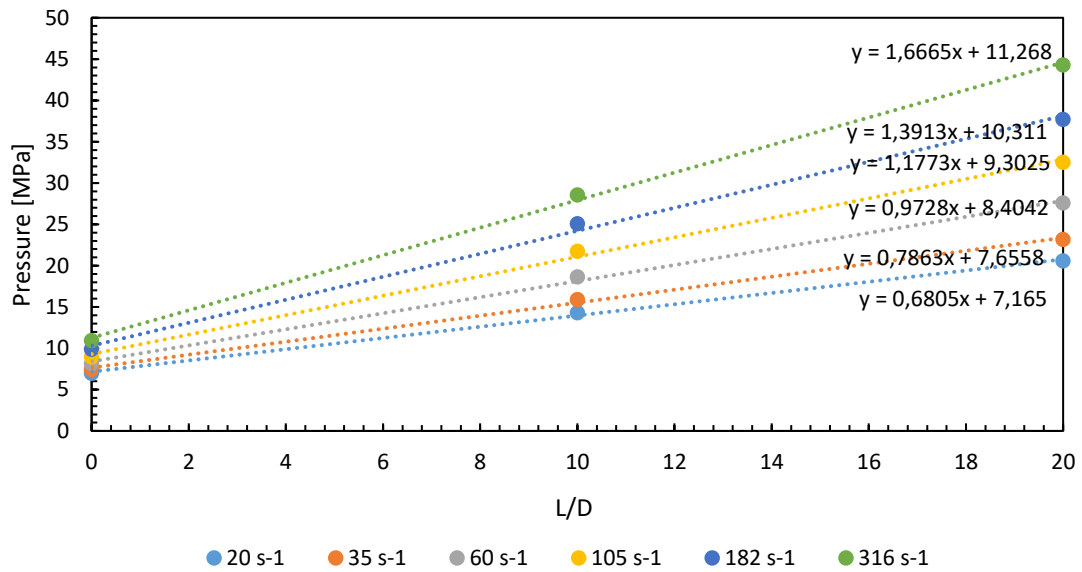
Rekenvoorbeeld bij diameter = 1mm en snelheidsgradiënt = 20 s^{-1} :

Druk P volgens trendlijn = helling*(L/D) + snijpunt met y-as
= $0.681 * 10 + 7.165 = 13.45\text{ MPa}$

Druk P na correctie = Druk P volgens trendlijn – snijpunt met y-as
= $13.45 - 7.165 = 6.285\text{ MPa}$

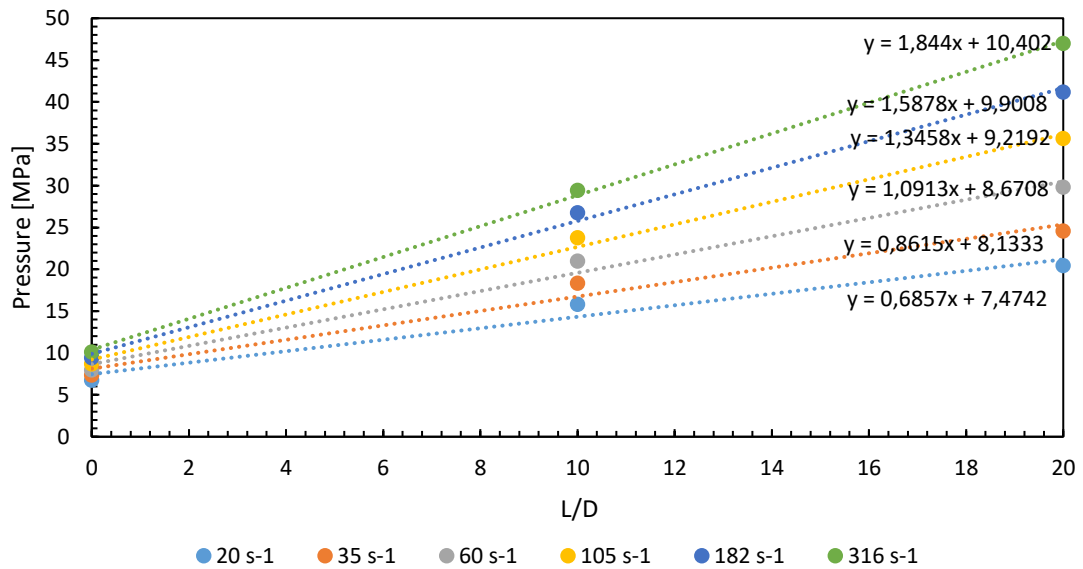
Schuifspanning τ = $\frac{P_{na\text{ correctie}} * 10^6}{4 * \frac{L}{D^2}} = \frac{6.285 * 10^6}{4 * \frac{10}{1}} = 157125\text{ Pa}$

Bagley-plot bij capillairen met $d = 1 \text{ mm}$



Figuur 4-2 Bagley-plot voor capillairen met diameter 1 mm.

Bagley-plot bij capillairen met $d = 2 \text{ mm}$



Figuur 4-3 Bagley-plot voor capillairen met diameter 2 mm.

4.2.2 Mooney analyse

Bij een Mooney-grafiek worden alle punten met gelijke schuifspanningen uitgezet als functie van de verhouding $1/R$ met R de straal van het capillair. De helling van de curve is dan gelijk aan vier maal de slipsnelheid. Om tot deze grafiek te komen worden de schuifspanningen uitgezet als functie van de snelheidsgradiënten in een dubbel logaritmisch diagram. Van deze curve worden de helling en het snijpunt met de y-as bepaald. Op basis van deze lineaire vergelijking worden de schuifspanningen opnieuw bepaald als logaritmische waarde.

Omdat voor het opstellen van de Mooney-grafiek punten van gelijke schuifspanning nodig zijn, moeten de schuifspanningen voor de verhouding $L/D = 10$ gelijk zijn. Hiervoor worden de schuifspanningen bij het capillair met diameter 2 mm als referentie gekozen. Er wordt berekend welke snelheidsgradiënt bij het capillair met diameter 1 mm nodig is om diezelfde schuifspanning te bereiken. Hiervoor wordt de snelheidsgradiënt bij diameter 1 mm lineair geïnterpoleerd.

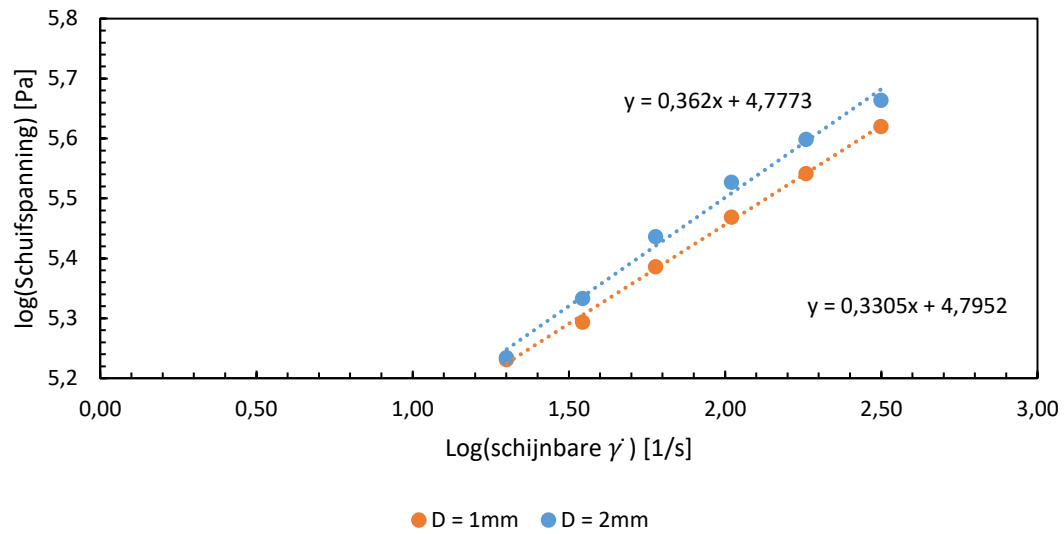
Tabel 4-6 Schijnbare snelheidsgradiënt en schuifspanning bij $L/D = 10$ en $D = 1\text{mm}$

Schijnbare $\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	Log(schijnbare $\dot{\gamma}$)	τ [Pa]	Log (τ)
20	1.30	170125	5.23
35	1.54	196563	5.29
60	1.78	243188	5.39
105	2.02	294313	5.47
182	2.26	347813	5.54
316	2.50	416625	5.62

Tabel 4-7 Schijnbare snelheidsgradiënt en schuifspanning bij $L/D = 10$ met $D = 2\text{mm}$

Schijnbare $\dot{\gamma}$ [s^{-1}]	Log(schijnbare $\dot{\gamma}$)	τ [Pa]	Log (τ)
20	1.30	171438	5.23
35	1.54	215375	5.33
60	1.78	272813	5.44
105	2.02	336438	5.53
182	2.26	396938	5.60
316	2.50	461000	5.66

Schuifspanning als functie van de snelheidsgradiënt



Figuur 4-4 Dubbel logaritmisches diagram met de schuifspanning in functie van de snelheidsgradiënt

Tabel 4-8 'Gefitte' schuifspanningen

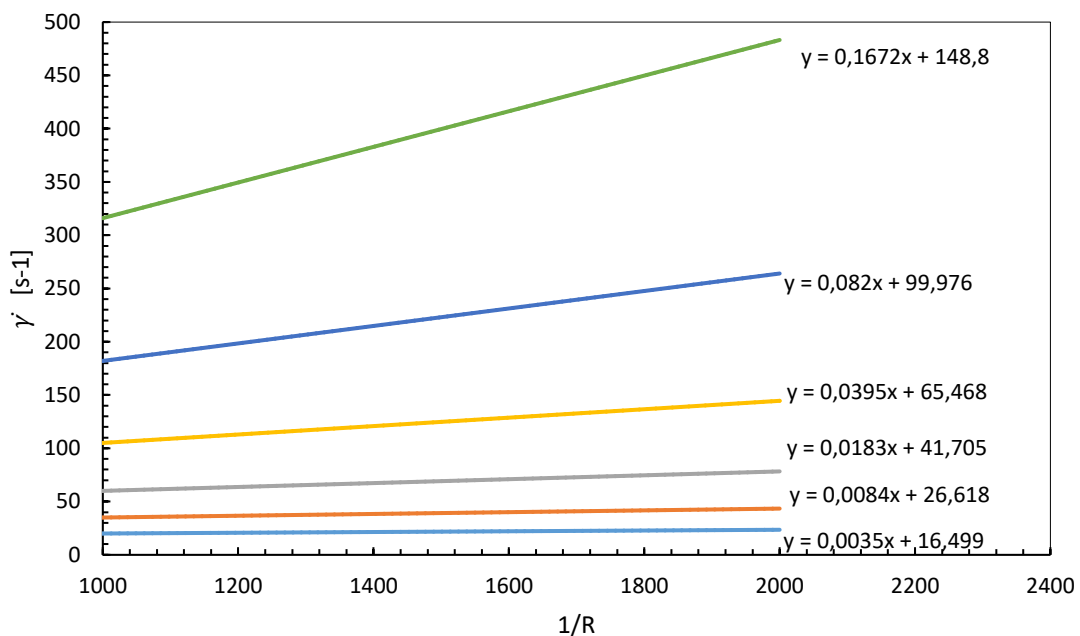
L/D = 10 en D = 1 mm		L/D = 10 en D = 2 mm REFERENTIE	
Log(τ) 'gefit' [Pa]	τ [Pa]	Log(τ) 'gefit' [Pa]	τ [Pa]
5.23	167945	5.25	177141
5.31	202064	5.34	216923
5.38	241463	5.42	263663
5.46	290517	5.51	322876
5.54	348434	5.60	394020
5.62	418130	5.68	481134

De schuifspanningen bij verhouding $L/D = 10$ en $D = 2$ mm worden gekozen als referentie. Er wordt nu bepaald welke snelheidsgradiënten nodig zijn bij $L/D = 10$ met $D = 1$ mm om dezelfde schuifspanningen te bereiken. Hiervoor worden de logaritmes van de snelheidsgradiënten bij $D = 1$ mm lineair geïnterpoleerd.

Tabel 4-9 Benodigde snelheidsgradiënten bij D = 1mm om de referentieschuifspanningen te verkrijgen

Log(τ) 'gefit' [Pa]	τ [Pa]	Log($\dot{\gamma}$) 'geïnterpoleerd' [s ⁻¹]	$\dot{\gamma}$ [s ⁻¹]
5.23	167945	1.37	23.5
5.31	202064	1.64	43.4
5.38	241463	1.89	78.3
5.46	290517	2.16	144.5
5.54	348434	2.42	264.0
5.62	418130	2.68	483.2

In de Mooney-grafiek worden de snelheidsgradiënten weergegeven als functie van de reciproke straal van het capillair voor alle punten met gelijke schuifspanningen (Figuur 4-5).



Figuur 4-5 Mooney-grafiek

Rekenvoorbeeld bij Tabel 3-8.

Vergelijking van de trendlijn: $y = 0,3305x + 4,7952$

'Gefitte' schuifspanning τ : $y = 0,3305 \cdot \log(20 \text{ s}^{-1}) + 4,7952 = 5.23$

Rekenvoorbeeld bij Tabel 3-9.

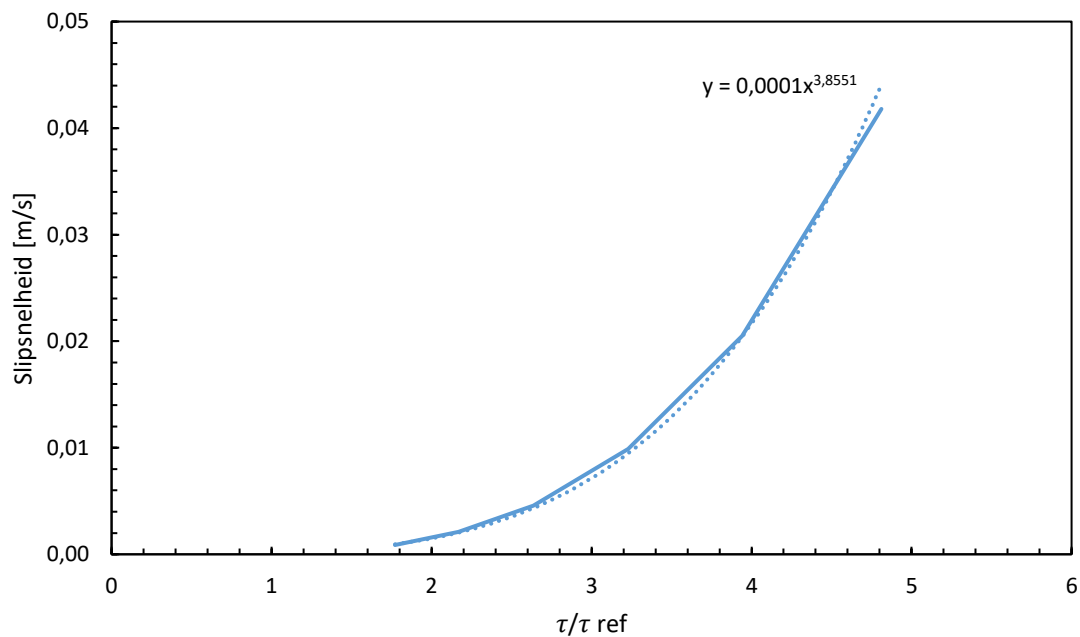
Log($\dot{\gamma}$) 'geïnterpoleerd' = $\frac{(5.25 - 5.23) \cdot (1.54 - 1.30)}{5.31 - 5.23} + 1.30 = 1.37$

4.2.3 Slip

Tabel 4-10 Slipsnelheden en snelheidsgradiënten bij gelijke schuifspanningen

1/R [m]	Snelheidsgradiënten [s ⁻¹]					
2000	23.5	43.4	78.3	144.5	264.0	483.2
1000	20	35	60	105	182	316
4 v _{slip}	3.50E-03	8.38E-03	1.83E-02	3.95E-02	8.20E-02	1.67E-01
v _{slip}	8.75E-04	2.10E-03	4.57E-03	9.88E-03	2.05E-02	4.18E-02
τ [Pa]	177141	216923	263663	322876	394020	481134
$\frac{\tau}{\tau_{ref}}$	1.77	2.17	2.64	3.23	3.94	4.81

Het viervoud van de slipsnelheid kan worden afgelezen als de helling van de trendlijnen op Figuur 4-6. Vervolgens wordt de slipsnelheid uitgezet als functie van de verhouding van de schuifspanning op de referentieschuifspanning van 100000 Pa. Dit is weergegeven in Figuur 4-6.



Figuur 4-6 De slipsnelheid in functie van de verhouding van de schuifspanning en de referentieschuifspanning.

Uit de vergelijking van de trendlijn in Figuur 4-6 kunnen de machtsexponent en de machtscoëfficiënt van de slipsnelheid afgelezen worden. Hierbij is 0.0001 gelijk aan de initiële snelheid v_0 en 3.8551 de slipexponent n_s . Ten slotte kan dan het aandeel van de slipstrooming in de totale smeltstroom berekend worden. Dit wordt gedaan voor het capillair met diameter 2 mm.

Tabel 4-11 Onderverdeling van de smeltstroom

$\dot{\gamma}_{schijnbaar} [s^{-1}]$	$\tau [Pa]$	$v_{slip} [m/s]$	$\dot{V}_{totaal} [m^3/s]$	$\dot{V}_{slip} [m^3/s]$	$\dot{V}_{parabolisch} [m^3/s]$
20	177141	0.00094	1.57E-08	2.94E-09	1.28E-08
35	216923	0.00205	2.75E-08	6.43E-09	2.11E-08
60	263663	0.00434	4.71E-08	1.36E-08	3.35E-08
105	322876	0.00948	8.25E-08	2.98E-08	5.27E-08
182	394020	0.02043	1.43E-07	6.42E-08	7.88E-08
316	481134	0.04412	2.48E-07	1.39E-07	1.10E-07

Rekenvoorbeeld bij Tabel 4-11.

$$v_{slip} = v_0 * \left(\frac{\tau}{\tau_{ref}} \right)^{n_s} = 0.0001 * \left(\frac{177141}{100000} \right)^{3.855} = 0.00094 \text{ m/s}$$

$$\dot{V}_{totaal} = \dot{\gamma}_{schijnbaar} * \pi * R^3 = 20 * \pi * \left(\frac{2*10^{-3}}{2} \right)^3 = 1.57 * 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\dot{V}_{slip} = v_{slip} * \pi * R^2 = 0.00094 * \pi * \left(\frac{2*10^{-3}}{2} \right)^2 = 2.94 * 10^{-9} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\dot{V}_{parabolisch} = \dot{V}_{totaal} - \dot{V}_{slip} = 1.57 * 10^{-8} - 2.94 * 10^{-9} = 1.28 * 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s}$$

De resultaten bij schuifspanningen groter dan 300000 Pa worden geschrapt om de eerder vermelde reden bij Tabel 4-4. Bij dergelijke hoge schuifspanningen treedt zeer veel shear heating op en zal het materiaal beschadigd worden door overbelasting. [7] Nu geweten is welk deel van de smeltstroom slipstroming is, kunnen de snelheidsgradiënten en de afschuifviscositeit opnieuw berekend worden.

Tabel 4-12 Gegevens na slipcorrectie

$\dot{\gamma}_{slipcorr.} [s^{-1}]$	$\log(\dot{\gamma}_{slipcorr.})$	$\log(\tau)$	n	$\dot{\gamma}_{reëel} [s^{-1}]$	$\eta [Pa*s]$
16.25	1.21	5.25	0.42	21.80	8127
26.82	1.43	5.34	0.42	35.96	6032
42.64	1.63	5.42	0.42	57.18	4611
67.08	1.83	5.51	0.42	89.96	3589
100.30	2.00	5.60	0.60	116.67	3377
139.54	2.14	5.68	0.60	162.32	2964

Rekenvoorbeeld bij tabel Tabel 3-12

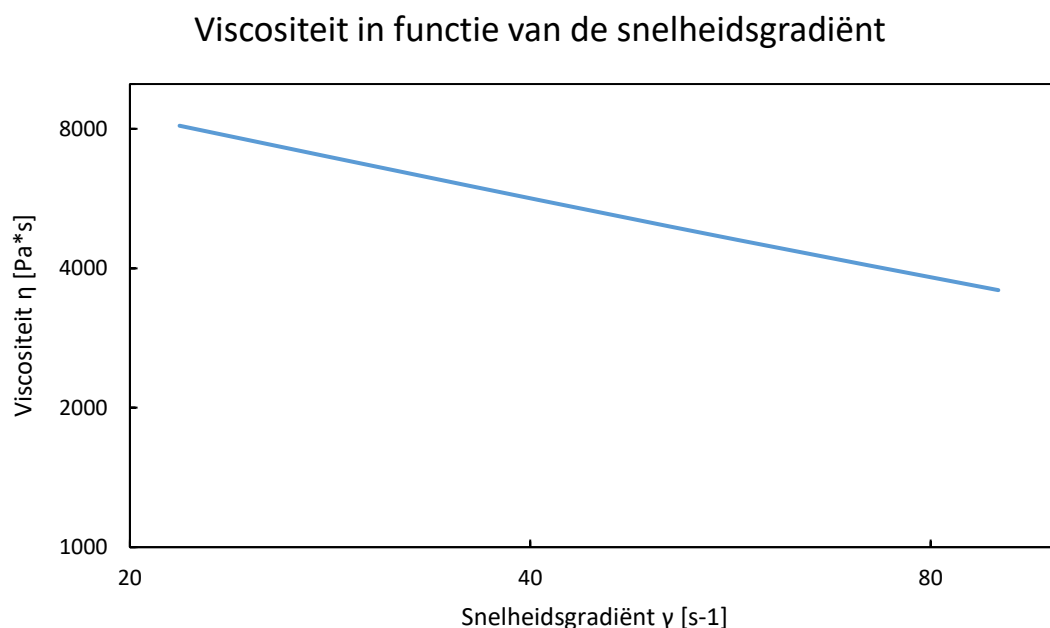
$$\dot{\gamma}_{slipcorr.} = \frac{\dot{V}_{parabolisch} * 4 * R^3}{\pi} = \frac{4 * 1.28 * 10^{-8} * \left(\frac{2 * 10^{-3}}{2}\right)^3}{\pi} = 16.25 \text{ s}^{-1}$$

$$n = \frac{\log(\tau)_2 - \log(\tau)_1}{\log(\dot{\gamma}_{slipcorr.})_2 - \log(\dot{\gamma}_{slipcorr.})_1} = \frac{5.51 - 5.25}{1.83 - 1.21} = 0.42$$

$$\dot{\gamma}_{re\ddot{e}l} = \dot{\gamma}_{slipcorr.} * \left(\frac{3 * n + 1}{4 * n}\right) = 16.25 * \left(\frac{3 * 0.42 + 1}{4 * 0.42}\right) = 21.80 \text{ s}^{-1}$$

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}_{re\ddot{e}l}} = \frac{177141}{21.80} = 8127 \text{ Pa} * \text{s}$$

In Figuur 4-7 is de viscositeit uitgezet als functie van de snelheidsgradiënt.



Figuur 4-7 Viscositeit als functie van de snelheidsgradiënt

4.2.4 Besluit

Na het uitvoeren van verschillende testen met de RhéoArt bleek dat de verkregen data niet altijd consistent waren. De temperaturen in bovenstaand voorbeeld, 170-195-210°C liggen in principe vrij ver uit elkaar. Vanaf 210°C begint PVC ook te degraderen. Hetzelfde materiaal werd daarom ook bij een kleinere temperatuurrange, 182-190-197°C, getest. De verkregen resultaten toonden echter vrij grote afwijkingen bij het opstellen van de Bagley-plots. De resultaten, bekomen met het capillair met lengte 20 mm en diameter 1 mm moesten hier weggelaten worden. Verder traden er ook problemen op door de verkalking van de koelring.

Er wordt door KU Leuven en Deceuninck verder gewerkt met dit toestel tot er goede resultaten bekomen worden maar dit wordt hier niet verder behandeld.

Om het materiaal toch correct te kunnen karakteriseren werd er daarom ook vanuit werkelijke testen teruggerekend naar de viscositeitsdata.

4.3 Reverse engineering

4.3.1 Principe

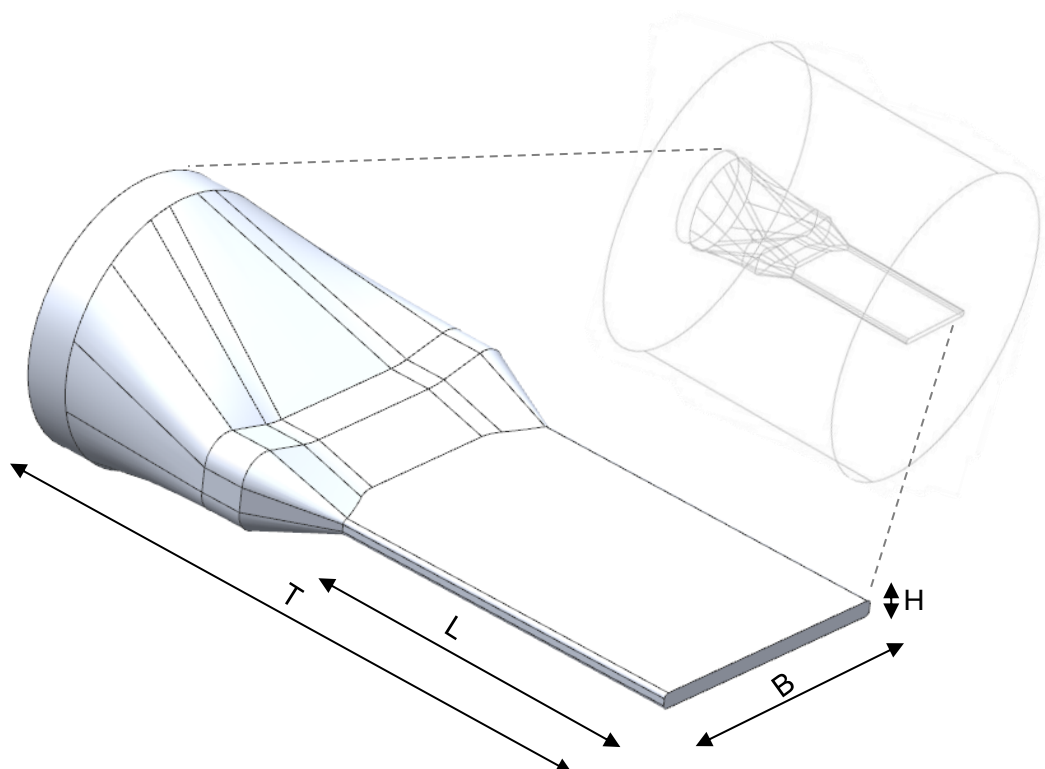
De reologische eigenschappen van het PVC D1340 werden enerzijds bepaald m.b.v. het RhéoArt-toestel. Om er zeker van te zijn dat deze gegevens correct zijn wordt er ook teruggerekend naar de viscositeitsdata vanuit werkelijke testen. Het materiaal wordt geëxtrudeerd door een eenvoudige rechthoekige geometrie. Hierbij worden het massadebiet, de verschillende temperatuurszones, de druk aan de intrede van de matrijs en de oppervlaktetemperatuur van het extrudaat gemeten.

4.3.2 Matrijs

De afmetingen van de matrijs zijn terug te vinden in tabel

Tabel 4-13 Matrijsafmetingen

Onderdeel	Afmeting [mm]
Totale lengte T	85
Landlengte L	45.6
Hoogte H	1.8
Breedte B	30



Figuur 4-8 Matrijsafmetingen

4.3.3 Instellingen

De test wordt uitgevoerd bij drie verschillende temperatuursinstellingen en 3 verschillende debieten per temperatuur.

Tabel 4-14 Testinstellingen

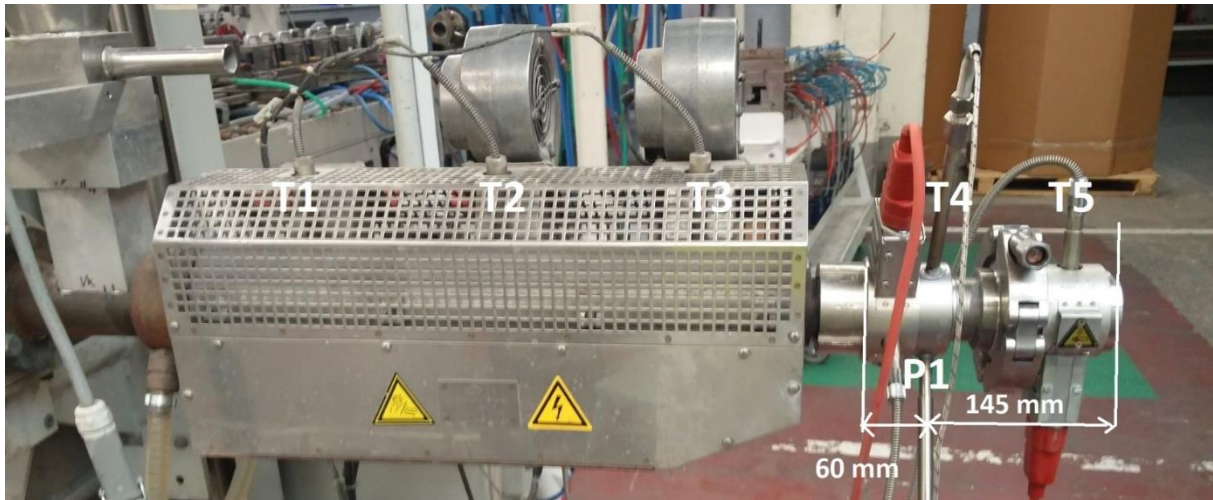
Test	Temperatuur			Debiet		
	Ref-10C°	Ref	Ref+10°C	Ref-20%	Ref	Ref+20%
1	x			x		
2	x				x	
3	x					x
4		x		x		
5		x			x	
6		x				x
7			x	x		
8			x		x	
9			x			x

Tabel 4-15 Ingestelde temperaturen en debieten

Instellingen			
Temperatuur	Referentie -10°C	170	°C
	Referentie	180	°C
	Referentie +10°C	190	°C
Debiet	Referentie -20%	8	kg/h
	Referentie	10	kg/h
	Referentie +20%	12	kg/h

Tabel 4-16 Instelling van de temperatuurzones

Zone	Referentie -10°C	Referentie [°C]	Referentie +10°C
Intrek T0	30	30	30
Extruder T1 T2 T3	170	180	190
	170	180	190
	170	180	190
Adapter T4	170	180	190
Matrijs T5	170	180	190



Figuur 4-9 Testopstelling

4.3.4 Gemeten en berekende resultaten

Tabel 4-17 gemeten en berekende resultaten

Gemeten				Berekend	
Test	Massadebiet [kg/h]	Opp. temperatuur extrudaat [°C]	Druk [MPa]	Temperatuur van de smelt [°C]	Drukval [MPa]
1	8.4	184.5	13.0	180.12	10.96
2	10.3	188.8	13.9	184.11	11.72
3	11.8	190.8	14.2	186.01	11.97
4	7.7	194.1	10.8	190.46	9.10
5	9.6	197.1	11.2	193.32	9.44
6	11	200.5	11.7	196.55	9.86
7	7.2	203.6	8.2	200.83	6.91
8	9.1	206.7	9.3	203.56	7.84
9	10.4	207.1	9.7	203.83	8.18

Rekenvoorbeeld bij de tabel:

De drukval over de geometrie wordt uitgedrukt als een vast percentage van de druk, gemeten aan de intrede.

Drukval = cte * gemeten druk

Met cte: constante (= 0.843)

Temperatuur van de smelt = Opp. temperatuur extrudaat $- \frac{\text{drukval}}{\rho * c_p}$

Met: ρ : dichtheid (=1000 kg/m³)

C_p : specifieke warmtecapaciteit (=2500 J/kgK)

4.3.5 Verwerking van de resultaten

Voor het typisch starre PVC uit de database van VEL zijn alle materiaalparameters, inclusief de slipparameters gekend. Deze materiaalparameters worden gebruikt als richtwaarde voor de start van de 'reverse engineering'. Hierbij wordt elke materiaalparameter gevarieerd binnen een gekozen interval, met een bepaald aantal stappen tot de gemeten resultaten van het PVC D1340 het best benaderd worden. Interne opwarming van de kunststof wordt in rekening gebracht op een discrete manier. Hierbij wordt er verondersteld dat het proces adiabatisch is en er dus geen warmte van de kunststof naar de matrijs stroomt.

Als resultaat worden de verschillende parameters en een bepaalde fout verkregen. De fout is evenredig met de afwijking tussen de berekende materiaalparameters en de gemeten resultaten. Dit proces wordt herhaald tot de fout minimaal is.

De resultaten van het standaard PVC dat gebruikt wordt voor het vervaardigen van raamprofielen zijn terug te vinden in Tabel 4-18.

Tabel 4-18 Materiaalparameters na 'reverse engineering'

Parameter	Waarde	Eenheid
Consistentie index A	51142	$\text{Pa}\cdot\text{s}^n$
Temperatuur gevoeligheid b	0.02897	$1/^\circ\text{C}$
Referentietemperatuur T_{ref}	179.7	$^\circ\text{C}$
Machtswetexponent n	0.3988	/
Slipsnelheid v_{slip}	8.31	mm/s
Slip exponent n_{slip}	1.25	/

5 SIMULATIES: EENVOUDIGE MATRIJS

In STAR CCM+ en PolyXtrue wordt een eenvoudige matrijs gesimuleerd. Dit is dezelfde matrijs als deze die gebruikt werd voor de 'reverse engineering'. Op deze manier kunnen de experimentele resultaten ook vergeleken worden met simulaties.

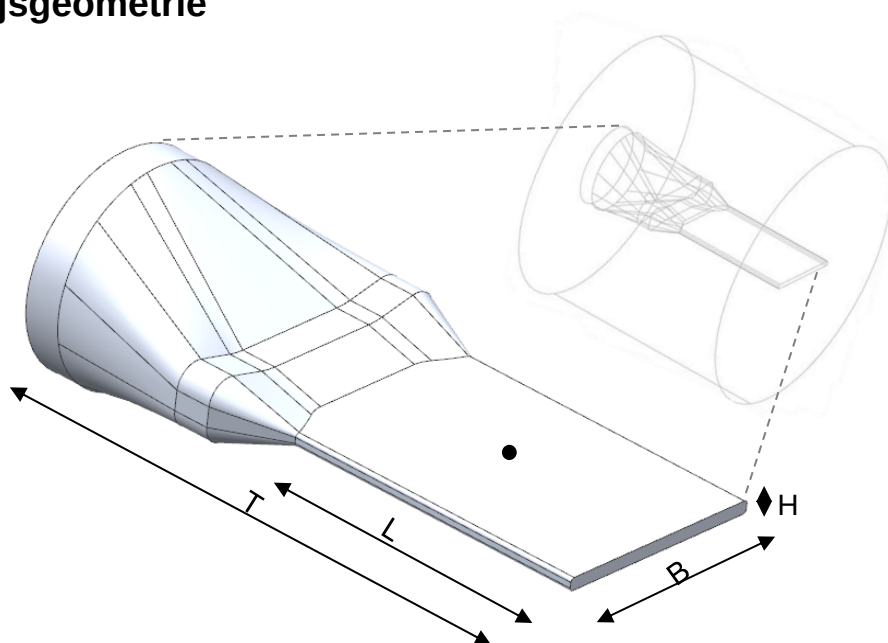
5.1 Materiaal

Het materiaal dat gebruikt wordt voor het simuleren van een eenvoudige matrijs is het PVC D1340, waarvan de materiaalparameters bepaald werden via 'reverse engineering'. Deze gegevens zijn terug te vinden in Tabel 5-1.

Tabel 5-1 Materiaalparameters D1340

Parameter	Waarde	Eenheid
Consistentie index A	51142	$\text{Pa} \cdot \text{s}^n$
Temperatuur gevoeligheid b	0.02897	$1/^\circ\text{C}$
Referentietemperatuur T_{ref}	180	$^\circ\text{C}$
Machtswetexponent n	0.3988	/
Slipsnelheid v_{slip}	8.31	mm/s
Slip exponent n_{slip}	1.25	/

5.2 Matrijsgeometrie



Figuur 5-1 Matrijsgeometrie

De afmetingen van de matrijs zijn terug te vinden in Tabel 4-13.

Bij deze simulaties wordt enkel de holte waardoor de kunststof vloeit gesimuleerd. De wand wordt hierbij op een vaste temperatuur ingesteld. Deze randvoorwaarde is in principe te streng want in werkelijkheid warmt het matrijzenstaal op. Deze temperatuursvoorwaarde wordt dus niet gehaald.

De dataverzameling van de snelheid doorheen de dikte, schuifspanning doorheen de dikte, snelheidsgradiënt doorheen de dikte en temperatuur doorheen de dikte gebeurt steeds op de positie van de zwarte stip in Figuur 5-1.

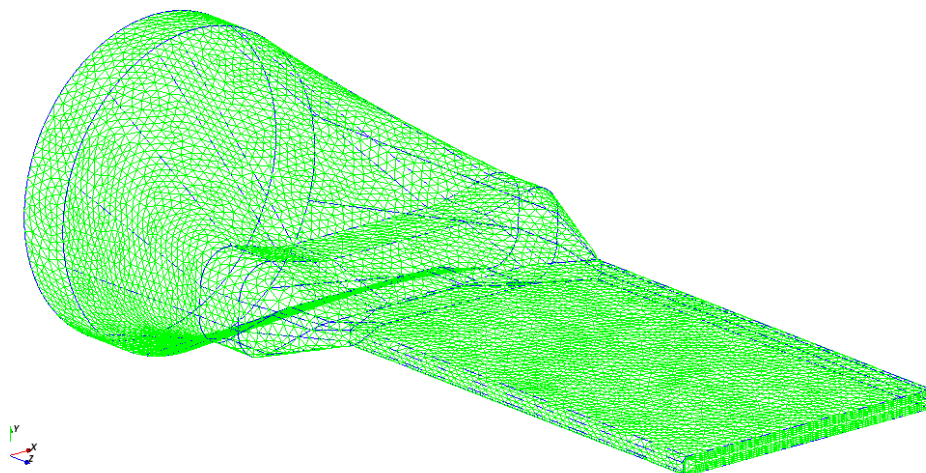
5.3 PolyXtrue

5.3.1 Instelling

5.3.1.1 Mesh

Tabel 5-2 Mesh instellingen

Mesh type	Tetrahedral
Mesh size	$1 \cdot 10^{-3}$ m
Boundary layer	$4 \times 2.22 \cdot 10^{-4}$ m
Number of elements	397503
Number of nodes	72381
Minimum # elements between die walls	$8 > 4$



Figuur 5-2 Mesh bij latjesmatrijs in PolyXtrue

5.3.1.2 Randvoorwaarden

In het tabblad 'geometry groups' worden de in- en uitrede van de matrijs aangeduid. Onderstaande randvoorwaarden worden toegepast:

Tabel 5-3 Randvoorwaarden voor de eenvoudige matrijs

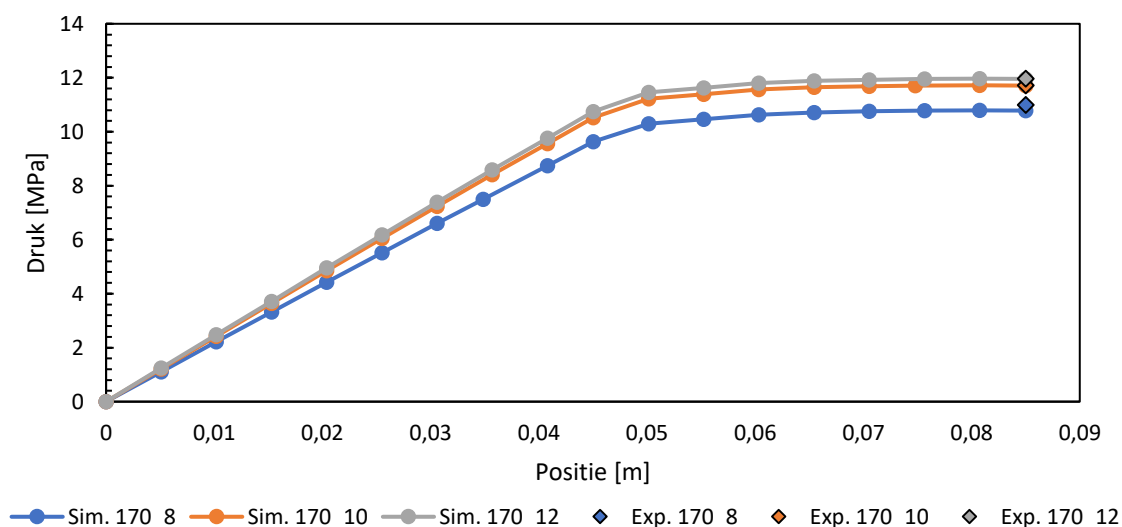
Test	Massadebiet [kg/h]	Temperatuur van de smelt [°C]	Matrijstemperatuur [°C]	Slip/ No slip
1	8.4	180.12	170	Slip
2	10.3	184.11	170	Slip
3	11.8	186.01	170	Slip
4	7.7	190.46	180	Slip
5	9.6	193.32	180	Slip
6	11.0	196.55	180	Slip
7	7.2	200.83	190	Slip
8	9.1	203.56	190	Slip
9	10.4	203.83	190	Slip

5.3.2 Resultaten

5.3.2.1 Drukval over de geometrie

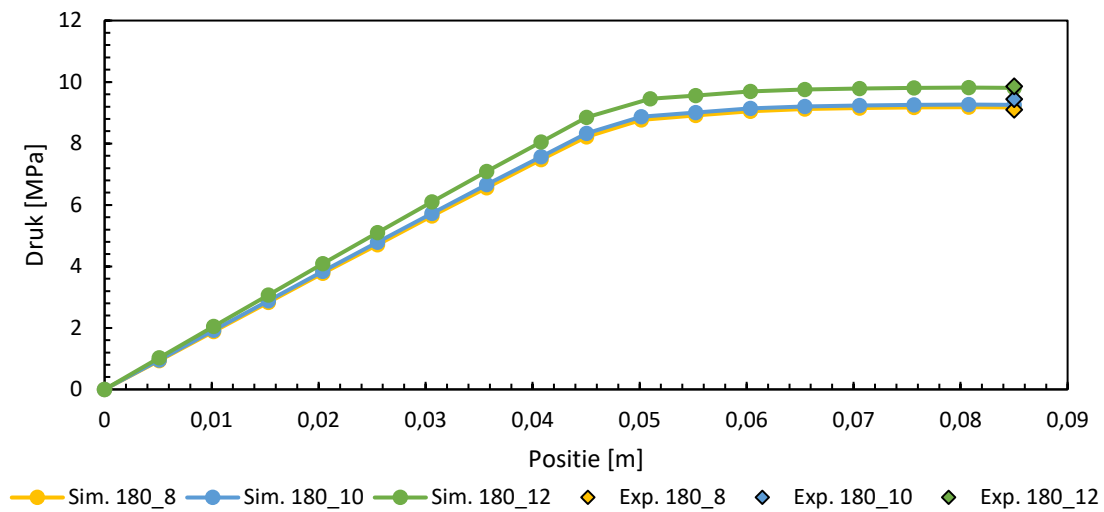
De bekomen resultaten via simulaties worden hier onmiddellijk vergeleken met de experimentele resultaten. Figuur 5-3 t.e.m. Figuur 5-5 tonen het verschil tussen de gesimuleerde en de experimentele drukken bij respectievelijk 170°C, 180°C en 190°C en variërend massadebiet.

Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken (170°C)



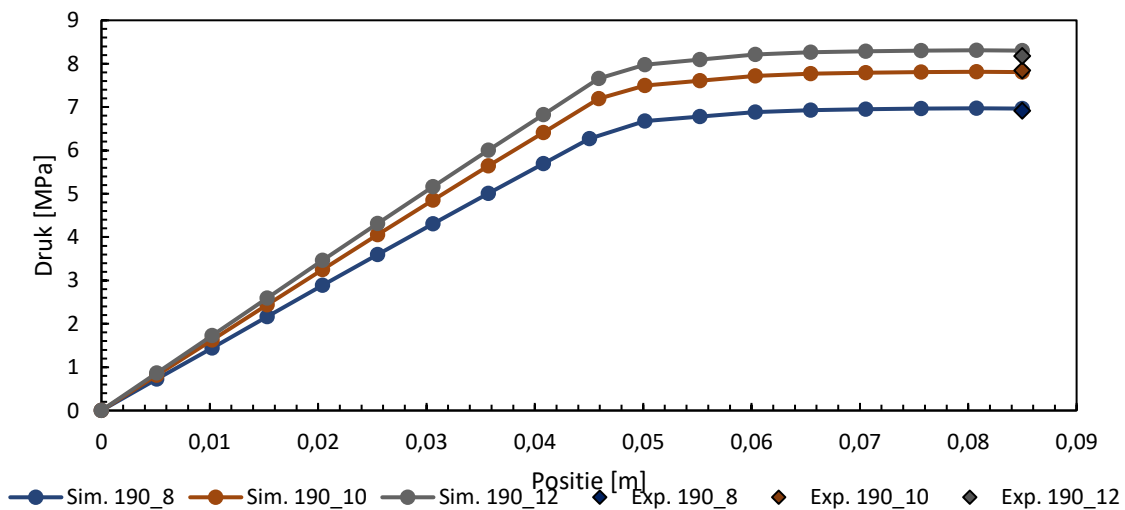
Figuur 5-3 Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken bij 170°C

Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken (180°C)



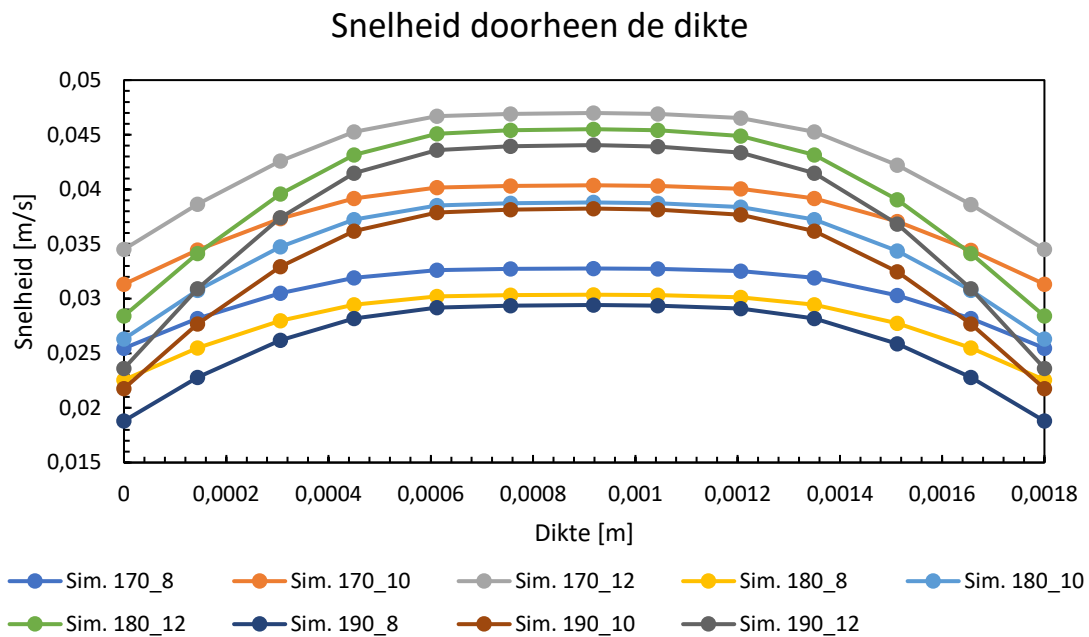
Figuur 5-4 Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken bij 180°C

Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken (190°C)



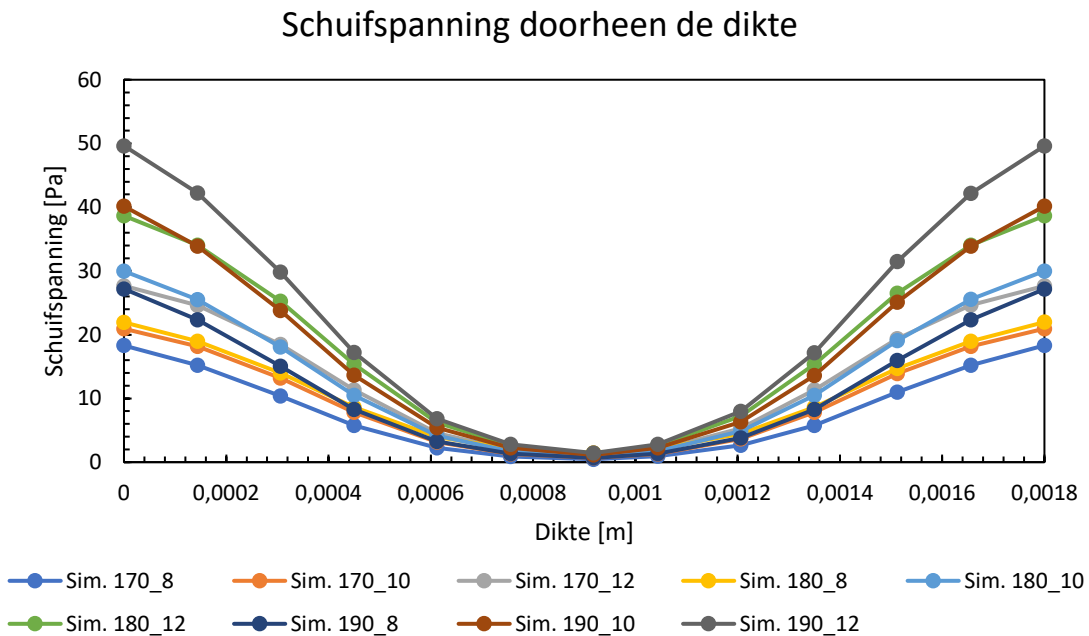
Figuur 5-5 Verschil tussen experimentele en gesimuleerde drukken bij 190°C

5.3.2.2 Snelheid doorheen de dikte



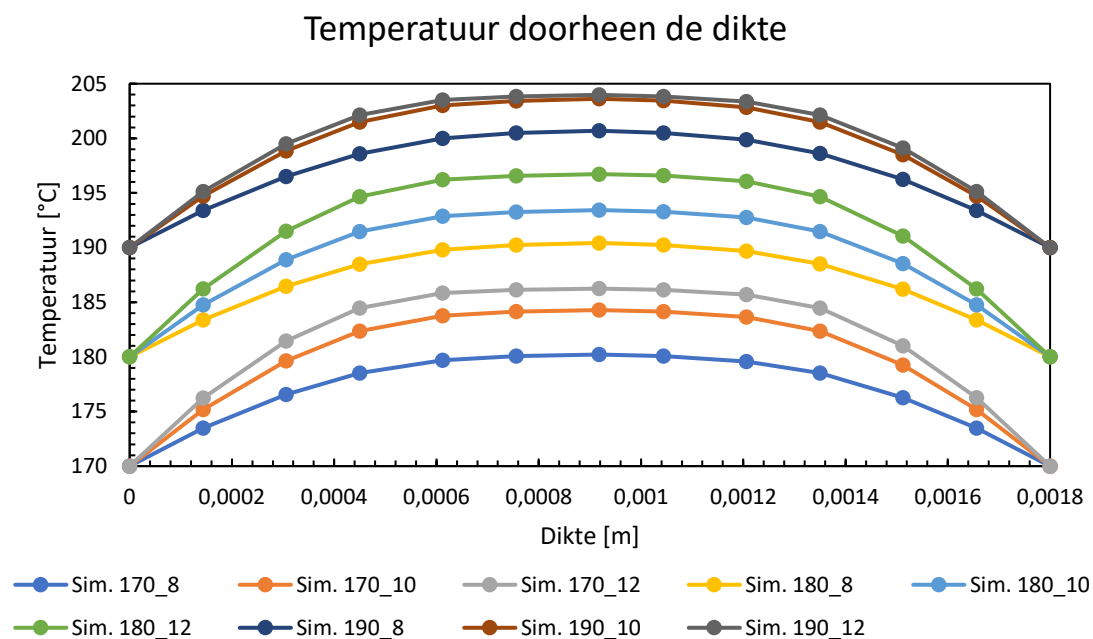
Figuur 5-6 Snelheid doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.3.2.3 Schuifspanning doorheen de dikte



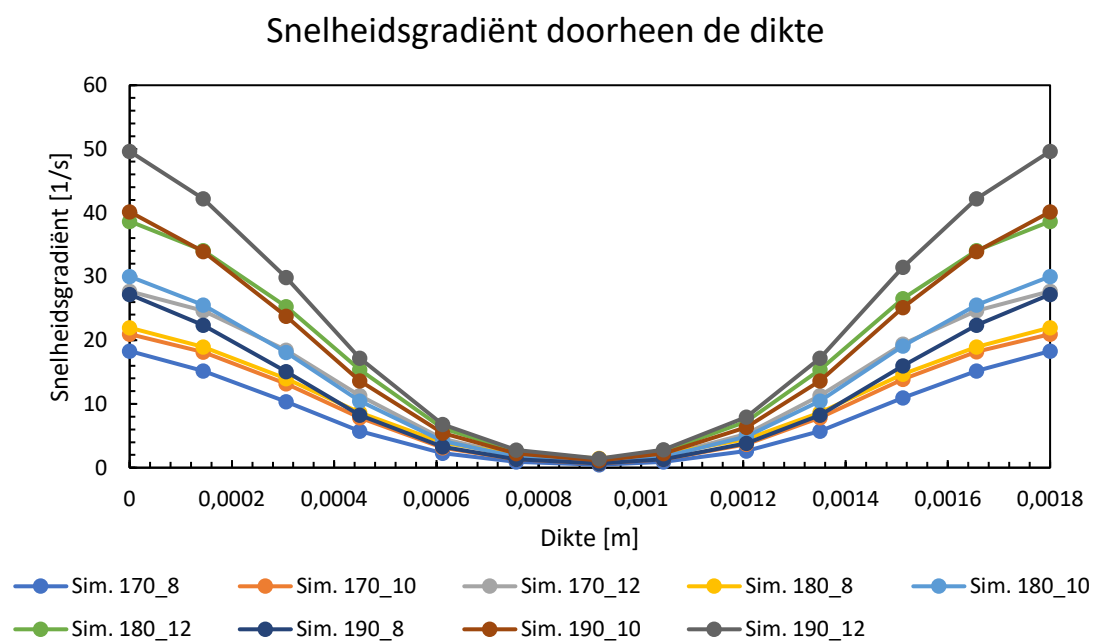
Figuur 5-7 Schuifspanning doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.3.2.4 Temperatuur doorheen de dikte



Figuur 5-8 Temperatuur doorheen de dikte voor test 1 t.e.m. test 9

5.3.2.5 Snelheidsgradiënt doorheen de dikte



Figuur 5-9 Snelheidsgradiënt doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.3.2.6 Samenvatting van de resultaten

Tabel 5-4 Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken in PolyXtrue

Test	Experimentele druk [MPa]	Gesimuleerde druk [MPa]	PA [%]
1	10.995	10.784	2
2	11.718	11.714	0.04
3	11.971	11.959	0.10
4	9.1044	9.1756	-0.8
5	9.4416	9.2609	2
6	9.8631	9.8135	0.5
7	6.9126	6.9657	-0.8
8	7.8399	7.8069	0.5
9	8.1771	8.3042	-1.6

Wanneer de materiaalparameters die bekomen werden via 'reverse engineering' ingevuld worden in PolyXtrue, dan is de maximale procentuele afwijking tussen de gesimuleerde drukken en de experimentele drukken gelijk aan 2%.

De slipsnelheid is het kleinste bij test 7 en het grootst bij test 3. Bij test 7 wordt het laagste massadebiet bij de hoogste temperatuur doorheen de matrijs geduwd. Bij test 3 is dit het hoogste massadebiet bij de laagste temperatuur. De andere slipsnelheden liggen hier tussenin, afhankelijk van het massadebiet en de temperatuur. Het massadebiet werd ingesteld aan de hand van een toerental. Door stijgende temperatuur, en dus dalende viscositeit kon dit niet steeds op de exacte massadebieten van 8, 10 of 12 kg/h gehouden worden. Bijgevolg is het mogelijk dat de slipsnelheid voor een bepaalde test iets hoger of lager ligt dan verwacht. Het verloop is te zien in Figuur 5-6. Het is opmerkelijk hoe sommige situaties meer slip vertonen bij een beperkte stijging van de maximale snelheid. Afhankelijk van het debiet kunnen hoofdzakelijk drie groepen onderscheiden worden met ongeveer dezelfde maximale snelheid. Binnen deze drie groepen treedt steeds het meeste slip op bij de laagste temperatuur (170°C) en het minst bij de hoogste temperatuur (190°C).

De schuifspanning doorheen de dikte (Figuur 5-7) is het laagst voor test 7 en het hoogst voor test 3. De schuifspanningen, horend bij de overige testen, liggen hier tussenin, afhankelijk van temperatuur en massadebiet.

Het temperatuursverloop doorheen de dikte is maximaal in het midden en minimaal aan de wand. Het typische 'shear heating' verloop is hier niet zichtbaar omdat de opgelegde randvoorwaarden te streng zijn. De temperatuur werd gemeten in het midden van het vlakke stuk zoals te zien op Figuur 5-1.

De snelheidsgradiënt doorheen de dikte (Figuur 5-9) is het laagst voor test 1 en het grootst voor test 9. Bij test 1 wordt het kleinste debiet bij de laagste temperatuursinstelling doorheen de matrijs geduwd, bij test 9 is dit het grootste debiet bij de hoogste temperatuursinstelling. De snelheidsgradiënt is in principe enkel afhankelijk van het massadebiet. De snelheidsgradiënten van de andere testen liggen hier ergens tussenin om dezelfde reden als bij de slipsnelheid.

5.4 STAR CCM+

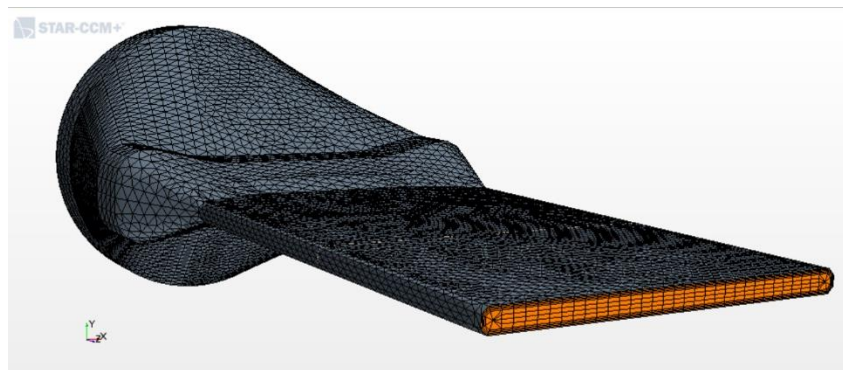
5.4.1 Instelling

5.4.1.1 Mesh

In STAR CCM+ wordt een 'Automated mesh' toegepast met volgende mesh-types:

Tabel 5-5 Mesh-instellingen STAR CCM+

Mesh types	Surface remesher
	Automatic surface repair
	Prism layer mesher
	Thin mesher
	Tetrahedral mesher
Mesh size	$1 \cdot 10^{-3}$ m
Number of layers through thickness	4
Number of prism layers	4
Number of elements	375600



Figuur 5-10 Mesh-instelling voor een simpele matrijs in STAR CCM+

5.4.1.2 Materiaal

Om het materiaalgedrag correct te kunnen beschrijven worden de modellen, te zien in Tabel 5-7, geselecteerd. De in te stellen parameters zijn te zien in Tabel 5-8.

Tabel 5-6 Physical model selection

Domein	Model
Time	Steady
Space	Three dimensional
Material	Liquid
Flow	Viscous flow / Laminar / Constant density
Rheology	Generalized Newtonian
Optional models	Viscous energy

Tabel 5-7 Materiaalparameters

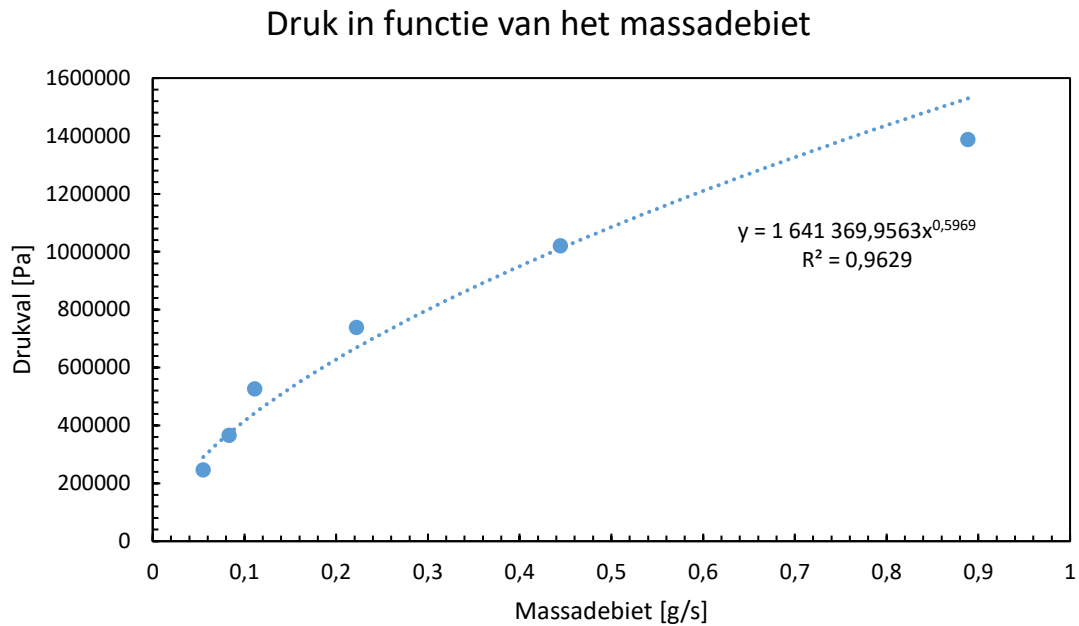
Parameter	Type	Specificaties	Waarde
Dichtheid	Constant		1420 kg/m ³
Dynamische viscositeit	Non-Newtonian generalized power law	Consistentie index A	51142 Pas ⁿ
		Machtswetexponent n	0.39885
		Yielding viscosity	51142 Pas ⁿ
Horizontal temperature shift factor	Arrhenius	Activatie energie E _a	7880 J/mol
		Referentie temperatuur	453.15 K
Specifieke warmtecapaciteit	Constant	/	1771 J/kg*K
Warmtegeleidbaarheid	Constant	/	0.17 W/m*K
Vertical temperature shift factor	Constant	/	1

5.4.1.3 Randvoorwaarden

Als randvoorwaarden wordt het gemeten massadebiet en de gemeten temperaturen uit de werkelijke testen ingevuld. Dit is zichtbaar in Tabel 5-9.

Tabel 5-8 Randvoorwaarden

Boundary	Type	Physics values		
Instroom	Mass flow inlet	Test	Mass flow rate [kg/h]	Static temperature [°C]
		1	8.4	180.12
		2	10.3	184.11
		3	11.8	186.01
		4	7.7	190.46
		5	9.6	193.32
		6	11	196.55
		7	7.2	200.83
		8	9.1	203.56
		9	10.4	203.83
Uitstroom	Pressure outlet	Pressure: 0 Pa		
		Physics conditions		Physics values
Wanden	Wall	Shear stress specification: Slip		Slip coefficient: 1641369 kg/m ² s Slip exponent: 0.5969
		Thermal specification: Temperature		Static temperature: 443/453/463 K



Figuur 5-11 'Fitting' van PVC D1340 op het slipmodel in STAR CCM+

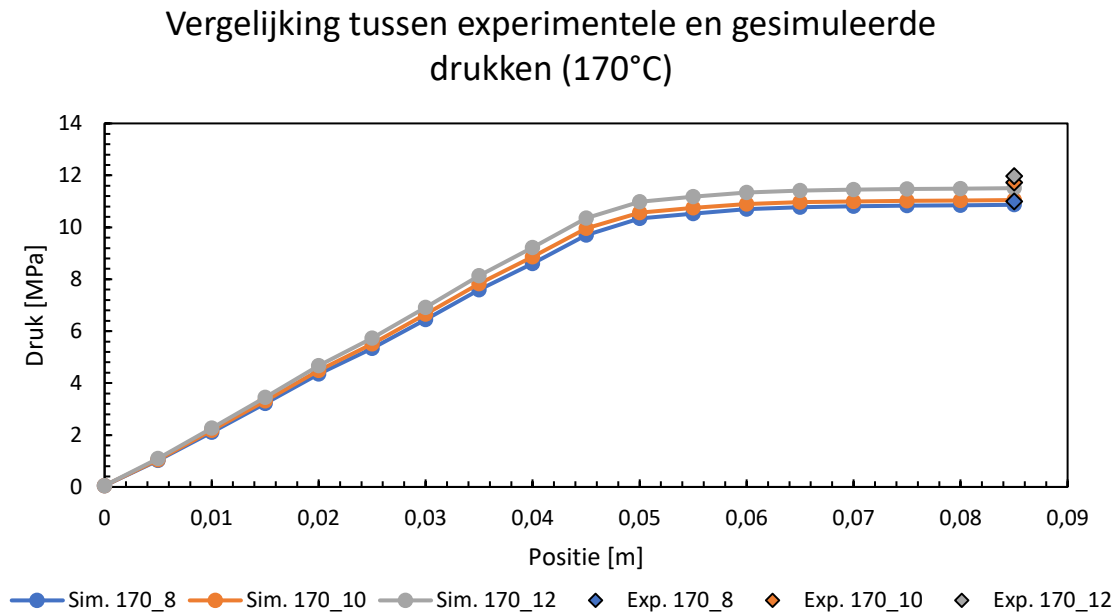
De slip coëfficiënt en de slip exponent worden bepaald door de drukval over de rechthoekige geometrie uit te zetten in functie van het massadebiet. Uit het machtsverband tussen deze parameters kunnen de slip coëfficiënt en de slip exponent afgeleid worden. Dit is analoog aan de fitting van het materiaal uit de database van Virtual Extrusion Laboratory in Figuur 3.27.

Hier moet opgemerkt worden dat deze 'fitting' gebeurde met de experimentele reologische data, verkregen met de werkelijke testen. De correlatiecoëfficiënt is gelijk aan 0.9629, terwijl dit bij het materiaal uit de database van VEL 0.9995 was.

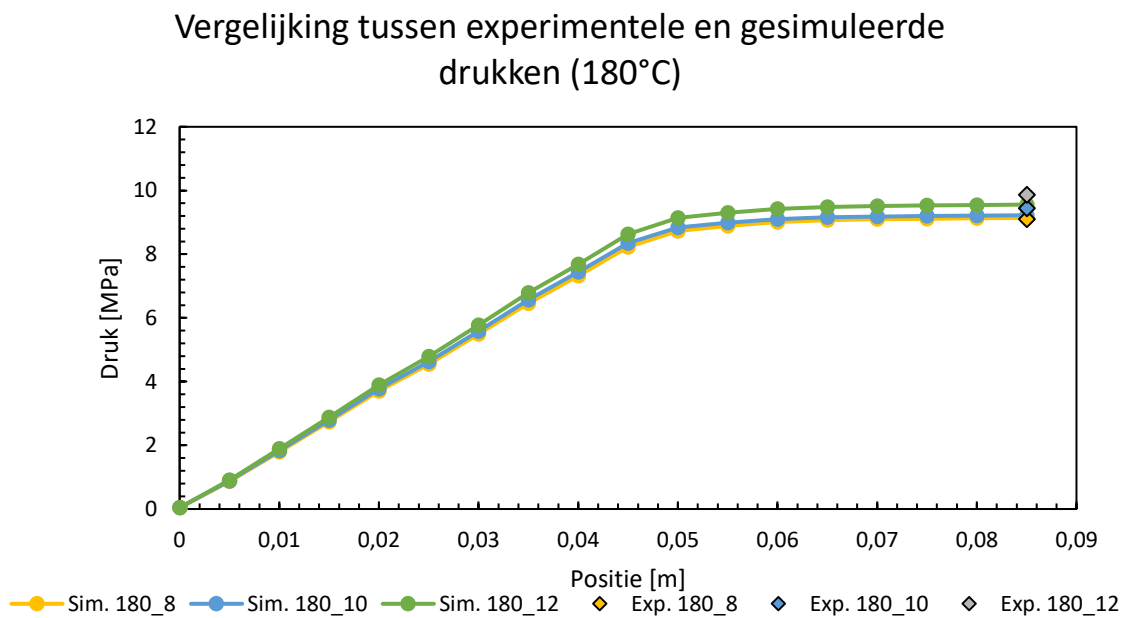
5.4.2 Resultaten

5.4.2.1 Drukval over de geometrie

Figuur 5-11 t.e.m. Figuur 5-13 geven de drukval over de geometrie weer, bij 170°C, 180°C en 190°C.

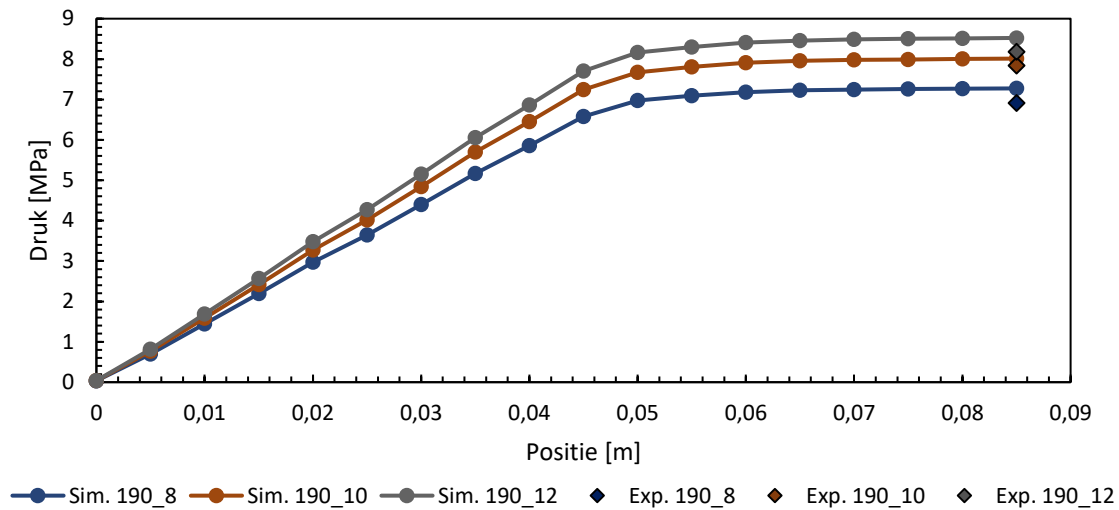


Figuur 5-12 Verschil tussen experimentele en gesimuleerde druk bij 170°C



Figuur 5-13 Verschil tussen experimentele en gesimuleerde druk bij 180°C

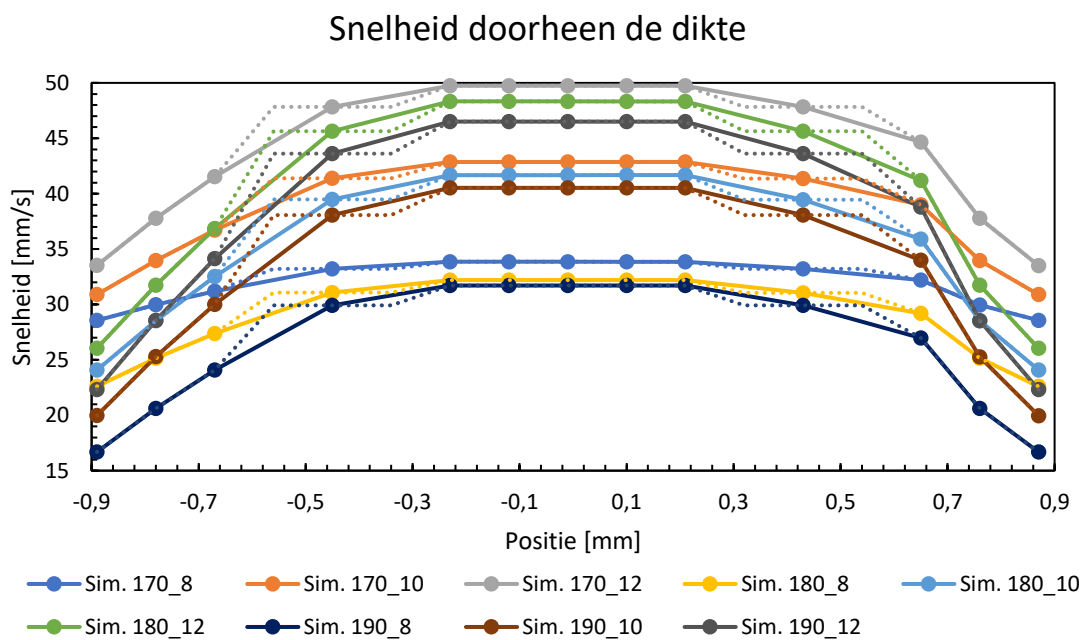
Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken (190°C)



Figuur 5-14 Verschil tussen experimentele en gesimuleerde drukken bij 190°C

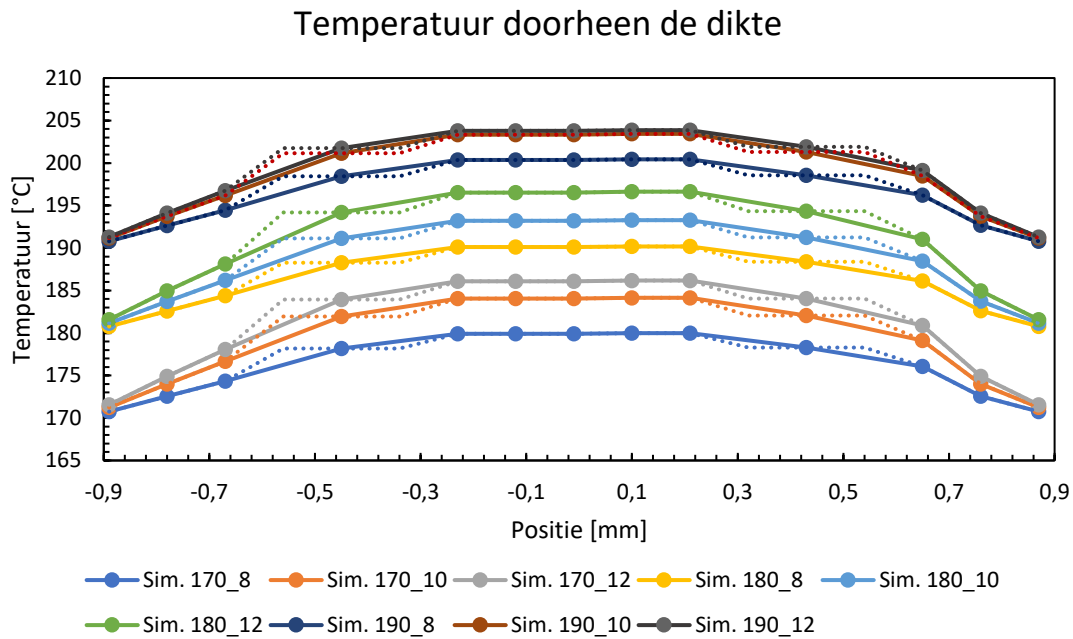
De snelheid doorheen de dikte, temperatuur doorheen de dikte en de snelheidsgradiënt doorheen de dikte worden voor alle instellingen weergegeven in Figuur 5-14, Figuur 5-15 en Figuur 5-16.

5.4.2.2 Snelheid doorheen de dikte



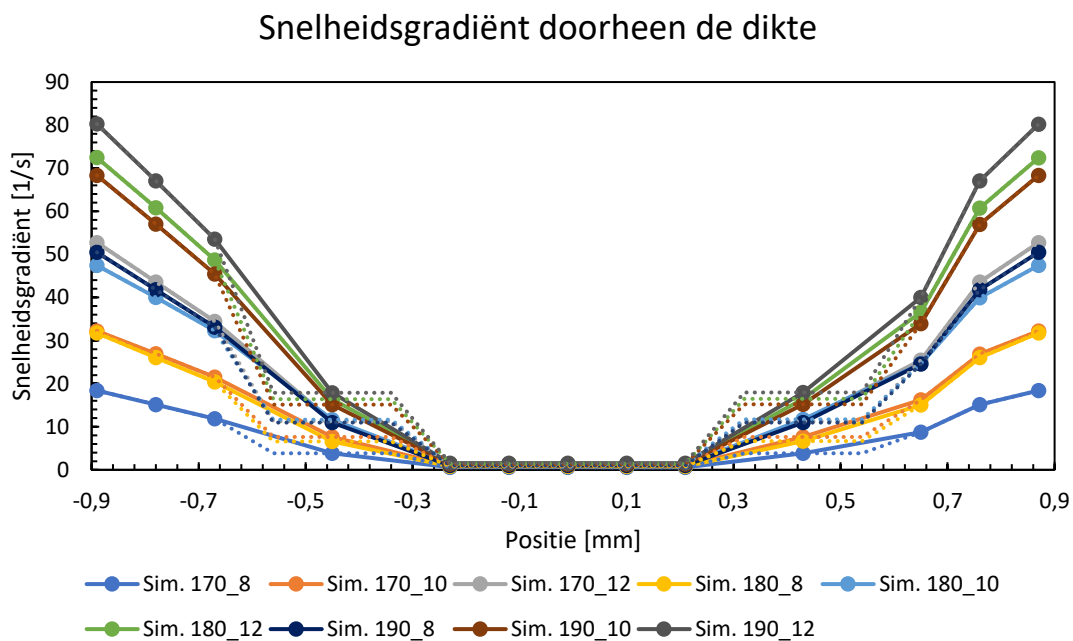
Figuur 5-15 Snelheid doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.4.2.3 *Temperatuur doorheen de dikte*



Figuur 5-16 Temperatuur doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.4.2.4 *Snelheidsgradiënt doorheen de dikte*



Figuur 5-17 Snelheidsgradiënt doorheen de dikte bij test 1 t.e.m. test 9

5.4.2.5 Samenvatting van de resultaten

Tabel 5-9 Vergelijking tussen experimentele en gesimuleerde drukken in STAR CCM+

Test	Experimentele druk [MPa]	Gesimuleerde druk [MPa]	PA [%]
1	10.995	10.867	-1.2
2	11.718	11.050	-6
3	11.971	11.507	-4
4	9.1044	9.138	0.4
5	9.4416	9.224	-3
6	9.8631	9.558	-3
7	6.9126	7.273	6
8	7.8399	8.011	3
9	8.1771	8.523	5

De resultaten voor druk, snelheid, temperatuur en snelheidsgradiënt in STAR CCM+ zijn analoog aan de resultaten die bekomen werden in PolyXtrue. De maximale procentuele afwijking tussen de gesimuleerde en de experimentele drukken is hier gelijk aan 6% terwijl dit in PolyXtrue slechts 2% was. De procentuele afwijking in PolyXtrue is kleiner omdat in dit slipmodel de 'gefitte' waarden, bekomen via 'reverse engineering', rechtstreeks ingevuld konden worden. Om deze waarden te kunnen invullen in het slipmodel, beschikbaar in STAR CCM+ diende een extra 'fitting' uitgevoerd te worden. Tussen het verloop van de druk in functie van het massadebiet geldt een machtsverband dat gelijk gesteld werd aan het slipmodel in STAR CCM+. Dit werd eerder besproken bij de rechthoekige geometrie. Figuur 5-11 geeft deze fitting voor PVC D1340 weer. De correlatiecoëfficiënt is hier slechts 0.96, wat een grotere procentuele afwijking tot gevolg heeft.

5.5 Besluit

Uit de bovenstaande resultaten kan besloten worden dat zowel PolyXtrue als STAR CCM+ zeer accurate resultaten geven bij het simuleren van de latjesmatrijs met het gekarakteriseerde materiaal. Ondanks de maximale procentuele afwijking van 6% bij STAR CCM+ in vergelijking met de maximale procentuele afwijking van 2% bij PolyXtrue kan gezegd worden dat beide pakketten zeer goede resultaten leveren.

6 SIMULATIES: COMPLEXE MATRIJS

Uit voorgaande simulaties en testen kan besloten worden dat slip correct berekend wordt wanneer PVC door een rechthoekige geometrie of een simpele matrijs stroomt bij gekende materiaaldata. Ten slotte wordt nog nagegaan hoe goed de gesimuleerde resultaten overeenkomen met experimentele data bij een profielmatrijs. Er wordt gestart met de simulatie van een kokerprofiel. Daarna wordt overgegaan naar een reeds geproduceerd raamprofiel waarvan de simulaties niet overeenkwamen met de werkelijke parameters die optraden bij het proces. Deze profielen werden beide vervaardigd uit het eerder gekarakteriseerde PVC. Deze simulaties worden enkel uitgevoerd in PolyXtrue.

6.1 Kokerprofiel

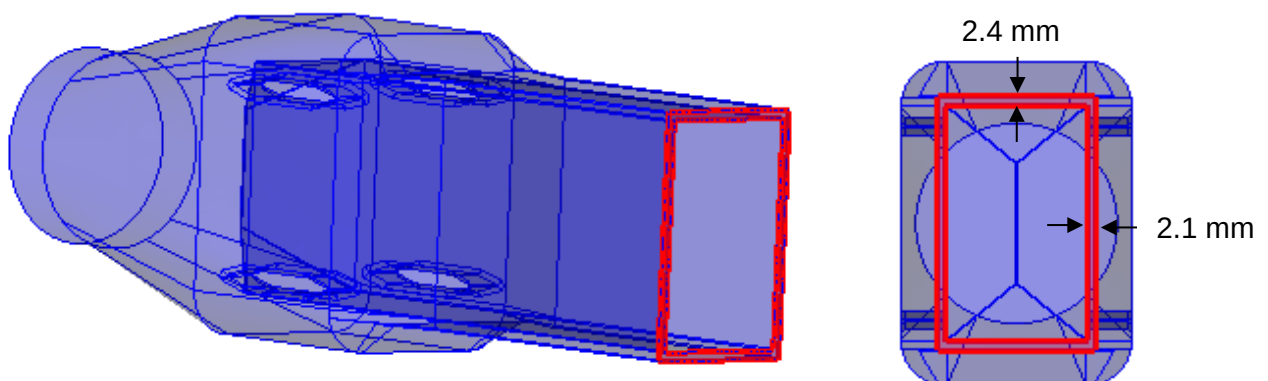
In Figuur 6-5 is een kokerprofiel te zien met verschillende wanddiktes. Omdat de overgang van de latjesmatrijs naar een complexe profielmatrijs groot is, wordt dit kokerprofiel gesimuleerd als tussentijdse stap.

Met dit kokerprofiel werden al testen uitgevoerd. De werkelijke procesparameters zijn gekend en worden gebruikt om de simulatie in te stellen.

6.1.1 Materiaal

Het materiaal dat gebruikt wordt voor deze simulaties is het eerder gekarakteriseerde PVC van Deceuninck. De gegevens hiervan zijn terug te vinden in Tabel 4-18.

6.1.2 Matrijsgeometrie: kokerprofiel



Figuur 6-1 Kokermatrijs

6.1.3 Instelling

6.1.3.1 Mesh

De mesh-instellingen voor deze matrijs zijn te zien in Tabel 6-4.

Tabel 6-1 Mesh-instellingen

Mesh type	Tetrahedral
Mesh size	$2 \cdot 10^{-3}$ m
Boundary layer	$4 \times 2.22 \cdot 10^{-4}$ m
Number of elements	1684564
Number of nodes	303914
Minimum # elements between die walls	$8 > 4$
Rekentijd	71 minuten

6.1.3.2 Randvoorwaarden

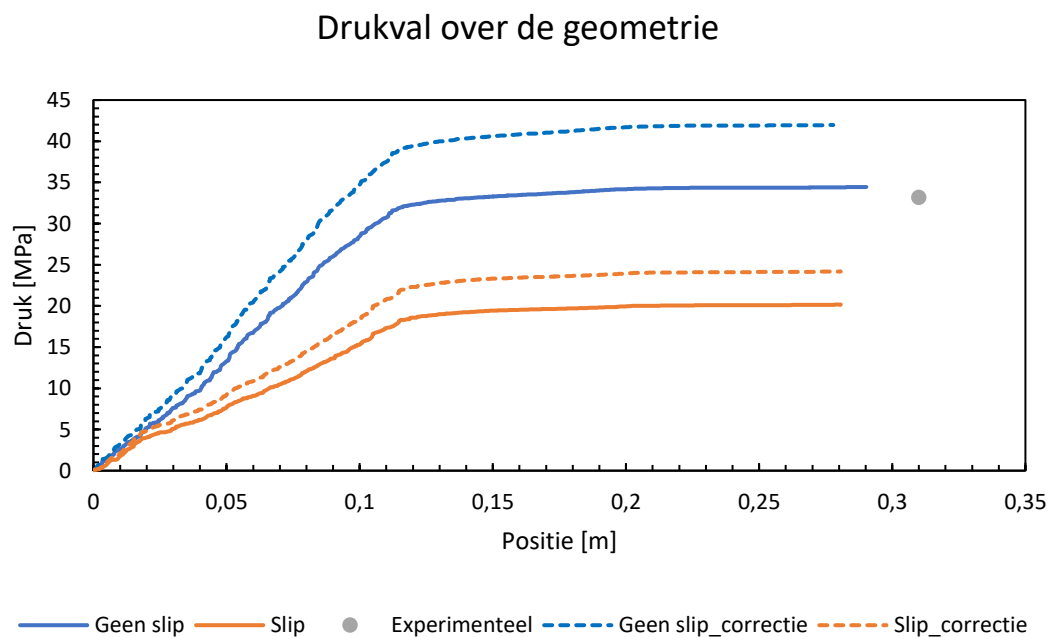
De randvoorwaarden worden hetzelfde gekozen als de ingestelde procesparameters bij de werkelijke testen om een zo goed mogelijke overeenkomst te hebben met het werkelijke proces.

Tabel 6-2 Randvoorwaarden complexe matrijs

Massadebiet	99.42 kg/h
Temperatuur van de smelt	192°C
Matrijstemperatuur	200°C
Slip	No slip / slip

6.1.4 Resultaten

6.1.4.1 Drukval over de geometrie



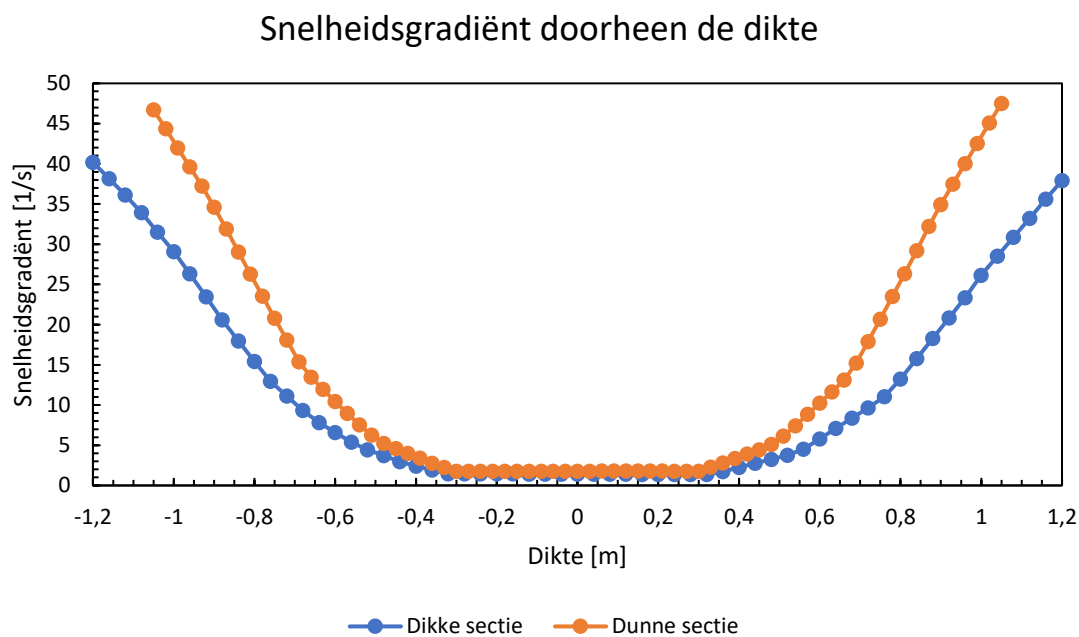
Figuur 6-2 Drukval over de geometrie bij slip en zonder slip voor de kokermatrijs

De drukval met slip is 15.8 MPa, zonder slip is dit 21.6 MPa. In werkelijkheid was dit 23.4 MPa. Mogelijke verklaringen voor het afwijken van de resultaten zijn als volgt:

Eenzijds kan de afwerking van het oppervlak van de profielmatrijs verschillen van die bij de latjesmatrijs, gebruikt bij het karakteriseren van het materiaal. De resultaten kunnen hierdoor afwijken want slip is sterk afhankelijk van de ruwheid van de wand. Om dit te controleren werden de simulaties ook uitgevoerd zonder slip in rekening te brengen. De drukval over de geometrie stijgt hierbij maar blijft kleiner dan het werkelijke resultaat.

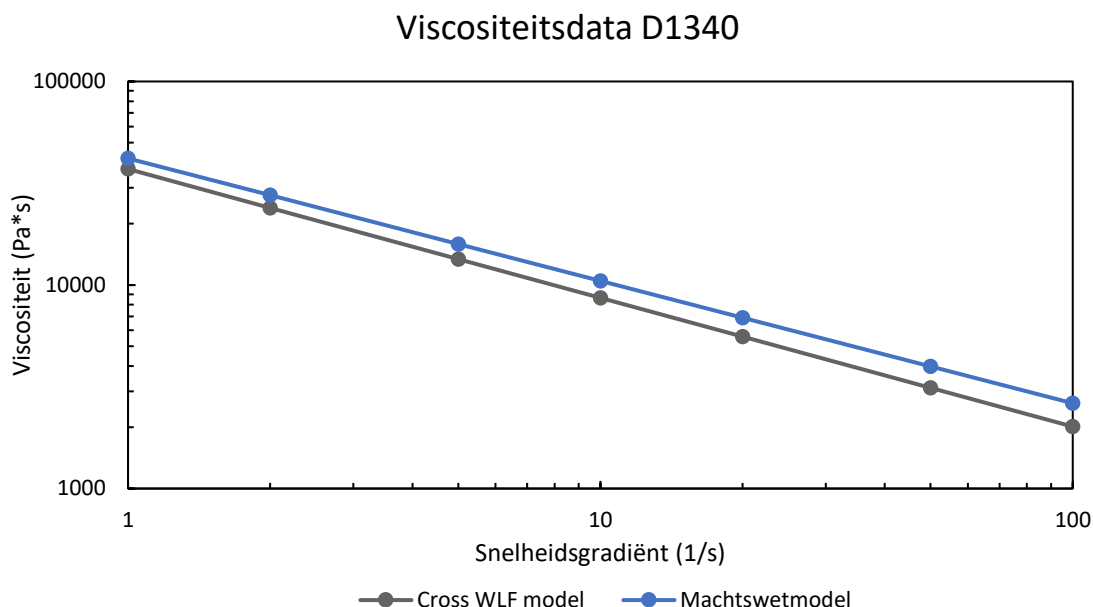
Een tweede mogelijke verklaring is dat de geleringsgraad van het PVC helemaal anders is bij een profiel- of kokermatrijs dan bij de latjesmatrijs. De geleringsgraad heeft een significante invloed op de drukopbouw. Dit werd eerder besproken in paragraaf 2.3.4.

Ook de 'fitting' van de viscositeitsdata van een eerste orde machtswetmodel naar het Cross WLF model wordt herbekeken in de 'range' aan snelheidsgradiënten die optreden bij het kokerprofiel. De optredende snelheidsgradiënten in de landlengte van het kokerprofiel zijn zichtbaar in Figuur 6-7.



Figuur 6-3 Snelheidsgradiënten doorheen de dikte in dikke en dunne sectie

Vertrekkend vanuit bovenstaand resultaat wordt de ‘gefitte’ viscositeitsdata herbekeken in een range van 0 tot 100 s⁻¹. Dit is zichtbaar in Figuur 6-8. In deze grafiek wordt een dubbele logaritmische schaal gebruikt.



Figuur 6-4 Vergelijking van tussen Cross WLF en eerste orde model

De viscositeitsdata die bepaald werd via ‘reverse engineering’ werd verkregen in de vorm van een eerste orde machtswetmodel (vergelijking 3-6). Om die data te kunnen gebruiken in PolyXtrue, waar de data als Cross WLF model ingevoerd moet worden, diende een extra ‘non-linear least square fitting’ toegepast te worden.

Uit de vergelijking van het eerste orde model en het Cross WLF model volgt dat de viscositeitsdata die ingevoerd werden in PolyXtrue ongeveer 20% lager ligt bij 192°C dan de oorspronkelijk bekomen data via ‘reverse engineering’. Een mogelijke oorzaak voor deze onderschatting is dat er zich bij de fitting van het eerste orde model naar het Cross WLF model een randeffect voordoet, waarbij geneigd wordt naar het Newtoniaans plateau terwijl de bepaalde punten langs een rechte lijn liggen.

Tabel 6-3 Vergelijking viscositeitsdata 1e orde en cross WLF

Snelheidsgradiënt [1/s]	Viscositeit [Pa.s] 1 ^e orde	Viscositeit [Pa.s] Cross WLF	PA [%]
20	6912.1	5644.5	-19
50	3984.1	3178.9	-21

Bij een onderschatting van 20% van de viscositeit, kan een evenwaardige onderschatting van de drukval verondersteld worden. De gesimuleerde resultaten leunen bijgevolg dichter aan bij de werkelijke resultaten dan er uit de simulaties blijkt.

Als er een drukstijging verondersteld wordt van 20%, dan zijn de resultaten van de kokermatrijs zoals te zien in Tabel 6-7. Deze resultaten zijn ook te zien in Figuur 6-6 met de aanduiding ‘correctie’.

Tabel 6-4 Onderschatting druk

Werkelijke druk [MPa]	23.4			
	Simulatie	PA [%]	Simulatie +20%	PA [%]
Druk [MPa] slip	15.8	-33	18.9	-20
Druk [MPa] geen slip	21.6	-8	26.0	12

Wanneer geen slip in rekening wordt gebracht, dan stijgt de gesimuleerde druk boven de druk, gemeten tijdens het werkelijke proces. Hieruit blijkt dat de afwijkende resultaten met slip een gevolg zijn van de afwerking van de matrijswand. Het materiaal slipt meer in deze matrijs dan bij de latjesmatrijs. Bijgevolg is de bekomen druk te laag. Om correcte slipparameters voor deze matrijs te bekomen dient de referentieschuifspanning in vergelijking 2-2 aangepast te worden. Uit dit resultaat blijkt dat PVC wel degelijk slipt en dat het belangrijk is om slip in rekening te brengen bij het simuleren.

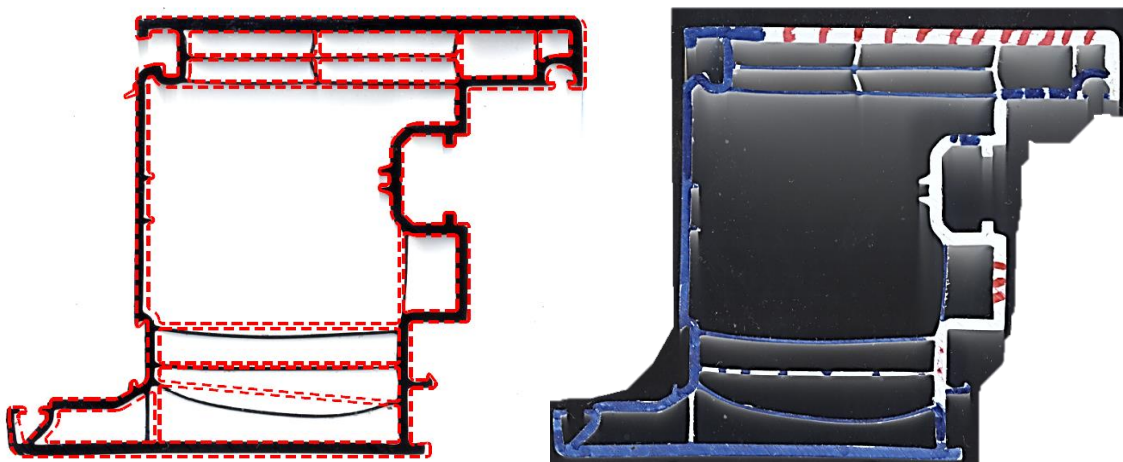
6.2 Profielmatrijs

6.2.1 Materiaal

Het materiaal dat gebruikt wordt voor deze simulaties is het eerder gekarakteriseerde PVC van Deceuninck. De gegevens hiervan zijn terug te vinden in Tabel 4-18.

6.2.2 Werkelijke resultaten

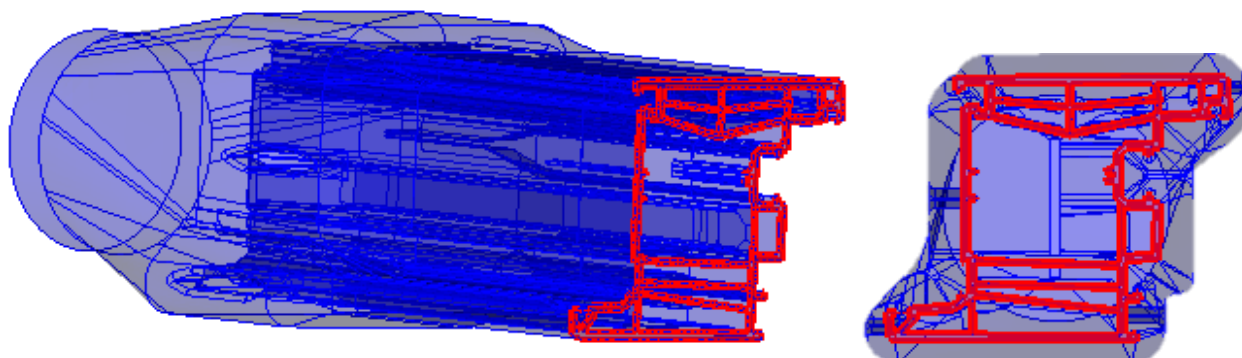
De belangrijkste resultaten bij het extruderen van een raamprofiel zijn de drukval over de geometrie en het snelheidsverloop in de dwarsdoorsnede aan de uittrede van de matrijs. Na productie wordt een scan gemaakt van de dwarsdoorsnede waarop aangeduid wordt welke delen te dik of te dun zijn. Dit beeld kan vergeleken worden met het snelheidsverloop in de dwarsdoorsnede. De drukval over de geometrie kan gemeten worden m.b.v. een druksensor en is bij het werkelijke proces gelijk aan 33.2 MPa.



Figuur 6-5 Diktebepaling van het werkelijke profiel

6.2.3 Matrijsgeometrie: raamprofiel

De gebruikte matrijs is die van een raamprofiel en is te zien in Figuur 6-1.



Figuur 6-6 Complexe matrijs: raamprofiel

Instelling

6.2.3.1 Mesh

De mesh-instellingen voor deze matrijs zijn te zien in Tabel 6-1. Er wordt gebruik gemaakt van tetraëdrische elementen met een minimum van 8 lagen doorheen de dikte.

Tabel 6-5 Mesh-instellingen

Mesh type	Tetrahedral
Mesh size	$1 \cdot 10^{-3}$ m
Boundary layer	$4 \times 2.22 \cdot 10^{-4}$ m
Number of elements	8244011
Number of nodes	1493575
Minimum # elements between die walls	$8 > 4$
Rekentijd	381 minuten

6.2.3.2 Randvoorwaarden

De randvoorwaarden worden identiek gekozen als de ingestelde procesparameters bij de werkelijke testen.

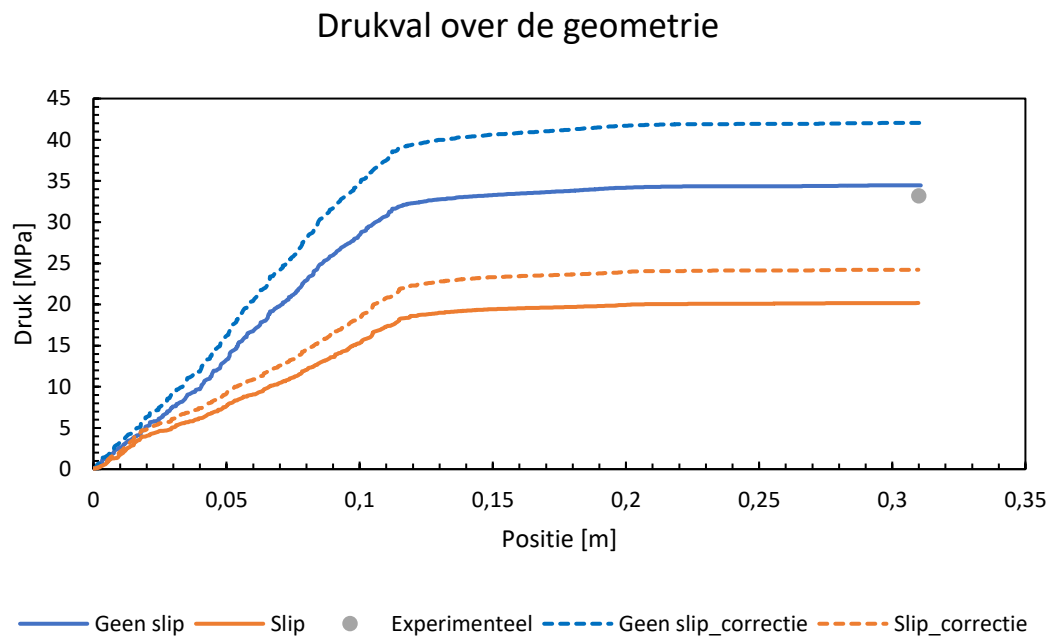
Tabel 6-6 Randvoorwaarden complexe matrijs

Massadebiet	257 kg/h
Temperatuur van de smelt	192°C
Matrijstemperatuur	200°C
Slip	No slip / slip

6.2.4 Resultaten

Bij de profielmatrijs worden enkel de drukval over de geometrie en het snelheidsbeeld in de dwarsdoorsnede, aan de uittrede van de matrijs vergeleken.

6.2.4.1 Drukval over de geometrie



Figuur 6-7 Drukval over de geometrie bij slip en zonder slip voor een profielmatrijs

Vanuit de werkelijke testen wordt een drukval van 33.2 MPa verwacht. Initieel wordt de profielmatrijs gesimuleerd met slip. De bekomen drukval is dan 20.2 MPa en wijkt daarmee 40% af van de werkelijke waarde. Om na te gaan of dit resultaat een gevolg is van de structuur van de wand wordt de simulatie ook uitgevoerd zonder slip. Wanneer slip verwaarloosd wordt, wordt een drukval van 34.5 MPa gevonden.

De snelheidsgradiënten die optreden bij de profielmatrijs liggen tussen 100 en 150 s⁻¹. Bij een onderschatting van 22% van de viscositeit kan een even grote onderschatting van de druk verondersteld worden. De bekomen resultaten voor de drukval over de geometrie zien er dan als volgt uit:

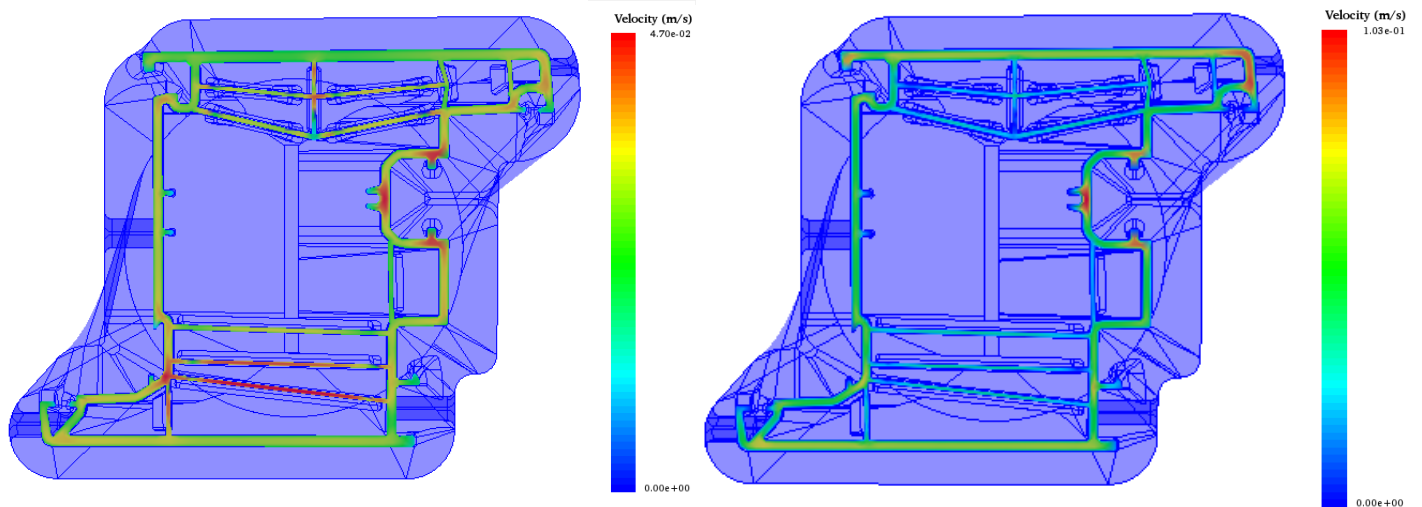
Tabel 6-7 Onderschatting van de druk

Werkelijke druk [MPa]	33.2			
	Simulatie	PA [%]	Simulatie +22%	PA [%]
Druk [MPa] slip	20.2	-40	24.2	-28
Druk [MPa] geen slip	34.5	4	42.0	27

Bij een stijging van de druk van 22% is de drukval waarbij slip verwaarloosd wordt 27% groter dan de druk bij de werkelijke testen. Ook hier heeft de afwerking van het matrijsoppervlak een belangrijke invloed op het slippgedrag. Door het aanpassen van de referentieschuifspanning in vergelijking 2-2 kunnen correcte slippparameters voor deze matrijs bekomen worden.

6.2.4.2 Snelheidsbeeld aan de uittrede

In Figuur 6-4 en Figuur 6-5 is het snelheidsbeeld in de dwarsdoorsnede, aan de uittrede van de matrijs te zien, bij slip en zonder slip.



Figuur 6-8 Vergelijking tussen het snelheidsbeeld bij slip en zonder slip

Tabel 6-8 Snelheden in de dwarsdoorsnede aan de uittrede van de matrijs

Slip	
Maximale uittredesnelheid [m/s]	0.0465
Minimale uittredesnelheid [m/s]	0.0060
Gemiddelde uittredesnelheid [m/s]	0.030
Deviatie aan de uittrede [%]	23
Geen slip	
Maximale uittredesnelheid [m/s]	0.10
Minimale uittredesnelheid [m/s]	0.00036
Gemiddelde uittredesnelheid [m/s]	0.037
Deviatie aan de uittrede [%]	54

Om een uniform snelheidsprofiel te bekomen moeten de verhoudingen van de oppervlakte van elke sectie op de totale doorsnede gelijk zijn aan de verhoudingen van het volumedebiet van de overeenkomstige sectie op het totale volumedebiet.

$$\frac{A_i}{\sum_{i=m}^n A_i} = \frac{\dot{V}_i}{\sum_{i=m}^n \dot{V}_i} \quad 6-1$$

Het volumedebiet kan berekend worden als volgt:

$$\dot{V} = v * W * X \quad 6-2$$

Met A: de oppervlakte [m²]

$\dot{V}$: het volumedebiet [m³/s]

v : de snelheid [m/s]

W : Breedte van de sectie [m]

X : Hoogte van de sectie [m]

In werkelijkheid wenst men dat de gemiddelde snelheid en elk deel van de dwarsdoorsnede constant is na uittrede. Met slip wordt een snelheidsdeviatie van 23% aan de uittrede gevonden. Zonder slip is dit 54%. In het snelheidsbeeld zonder slip vloeit er amper materiaal door de dunne secties in de binnenkant en veel materiaal door de dikkere secties. Als slip wel in rekening wordt gebracht is de verdeling constanter. . Hierbij moet opgemerkt worden dat de schaal van het snelheidsbeeld met slip kleiner is dan die van het snelheidsbeeld zonder slip in Figuur 6-4. De delen die op de scan van het werkelijke profiel (Figuur 6-1) rood gekleurd zijn, zijn te dik. De in het blauw aangeduide delen zijn te dun. In deze secties vloeit er respectievelijk te veel of te weinig materiaal. Het werkelijke resultaat valt niet echt af te leiden uit de snelheidsbeelden die bekomen werden met de simulaties.

7 BESLUIT

Het doel van deze masterproef was om na te gaan of slip enerzijds correct in rekening kan gebracht worden met simulatiesoftware. Anderzijds werd een vergelijkende studie uitgevoerd tussen de vloeisimulatiemodules van de softwarepakketten Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue, Simcenter NX en STAR CCM+. Bijkomend werden verschillende materiaalkarakterisaties uitgevoerd om het slipgedrag van het gebruikte PVC te kunnen karakteriseren.

Uit de vergelijking van de slipmodellen van de verschillende softwarepakketten volgt dat Virtual Extrusion Laboratory, PolyXtrue en STAR CCM+ over een geschikt model beschikken om slip in rekening te brengen bij het simuleren van niet-Newtoniaanse vloeistoffen zoals polymeersmelten. Om dit praktisch na te gaan werd de vloeier doorheen een rechthoekige geometrie gemodelleerd met een PVC dat over gekende slipparameters beschikt. Uit de vergelijking van de bekomen resultaten met VEL, PolyXtrue en STAR CCM+ met theoretische berekeningen volgt dat alle drie de pakketten slip correct in rekening brengen met dit materiaal. Onderlinge verschillen kunnen te wijten zijn aan de toegepaste 'mesh' of het aanwezige slipmodel in de software. De procentuele afwijking van de resultaten ten opzichte van de berekende resultaten is te zien in Tabel 7-1.

Tabel 7-1 Samenvatting van de resultaten: rechthoekige geometrie

	Berekend	PA [%]		
		VEL	PolyXtrue	STAR CCM+
Drukval [MPa]	26.5	- 20	- 5	- 4
Snelheidsgradiënt [s^{-1}]	274.5	- 5	- 21	- 0.11
Slipsnelheid [mm/s]	37.2	- 15	3	5
Drukval bij slip [MPa]	18.2	- 7	1	- 6
Snelheidsgradiënt bij slip [s^{-1}]	90.7	+ 47	- 8	- 13

De raamprofielen bij Deceuninck worden uit een ander type PVC geproduceerd dan het materiaal uit de database van VEL. Het PVC van Deceuninck werd eerst gekarakteriseerd om het vervolgens te kunnen gebruiken bij de simulaties. De materiaalkarakterisatie werd initieel uitgevoerd met een dynamische, capillaire reometer, de RhéoArt. Hierbij deden zich enkele moeilijkheden voor, waardoor er m.b.v. 'reverse engineering' teruggerekend werd vanuit werkelijke testen om de reologische data van dit materiaal te bekomen.

De werkelijke testen met de latjesmatrijs werden ter controle opnieuw gesimuleerd met de bepaalde reologische data. Dit gebeurde enkel met PolyXtrue en STAR CCM+ omdat deze pakketten het meest relevant zijn voor het bedrijf. Beide pakketten vertoonden hierbij zeer goede resultaten met maximale procentuele afwijkingen voor de drukval over de geometrie van respectievelijk 2% en 6%.

Tabel 7-2 Samenvatting resultaten PolyXtrue en STAR CCM+

Test	1	2	3	4	5	6	7	8	9
PA [%] PolyXtrue	2	0.04	0.10	-0.8	2	0.5	-0.8	0.5	-1.6
PA [%] STAR CCM+	-1.2	-6	-4	0.4	-3	-3	6	3	5

Bij de simulaties van een complexe matrijs werd gestart met het simuleren van een kokerprofiel. De gevonden drukvallen over de geometrie bij slip en zonder slip waren hierbij te laag. Maar na het controleren van de viscositeitsdata werd een onderschatting vastgesteld van 20%. Hierdoor kon een evenredige drukstijging verondersteld worden waardoor duidelijk werd dat eventuele afwijkingen een gevolg zijn van de afwerking van het matrijsoppervlak. Door het aanpassen van de referentieschuifspanning bij het bepalen van de slipparameters kunnen correcte resultaten bekomen worden. Uiteindelijk werd er nog een profielmatrijs gesimuleerd met het gekarakteriseerde materiaal. De verkregen resultaten zijn hier analoog aan de resultaten, verkregen met de kokermatrijs. Na correctie van de onderschatting van de viscositeitsdata blijkt dat het materiaal meer slijpt in deze matrijs door de afwerking van het matrijsoppervlak.

Tabel 7-3 Resultaten profielmatrijs

Werkelijke druk [MPa]	33.2			
	Simulatie	PA [%]	Simulatie +22%	PA [%]
Druk [MPa] slip	20.2	-40	24.2	-28
Druk [MPa] geen slip	34.5	4	42.0	27

Ten slotte kan besloten worden dat slip correct gesimuleerd kan worden in zowel PolyXtrue als STAR CCM+. Oorspronkelijk was het onzeker of dit fenomeen correct in rekening kon gebracht worden. Met behulp van 'reverse engineering' kunnen de reologische data en het slijpgedrag van een materiaal accuraat bepaald worden. De invloed van de afwerking van het matrijsoppervlak kan hierbij niet in rekening gebracht worden en moet in het achterhoofd gehouden worden bij het interpreteren van de resultaten. Afwijkingen op de bekomen resultaten zijn hieraan te wijten. Dit onderzoek toont aan dat er enerzijds slip optreedt bij de extrusie van (raam)profielen in PVC. Anderzijds toont het het belang aan om dit fenomeen in rekening te brengen bij simulaties. Correcte input voor de simulaties is essentieel voor het bekomen van juiste resultaten.

8 VOORUITZICHTEN

In de toekomst zal door KU Leuven en Deceuninck verder gewerkt worden met de RhéoArt totdat er goede resultaten bekomen worden. Een mogelijkheid om hiermee verder te werken is om de RhéoArt te voorzien van een spleetmatrijs met meerdere druksensoren langsheen het kanaal i.p.v. de verschillende capillairen. Hierdoor hoeft geen Bagley-correctie meer te gebeuren.

Er zal ook verder gewerkt worden met 'reverse engineering'. Hierbij kan de invloed van verschillende condities op de gelering van het materiaal nagegaan worden.

Bij het 'fitten' en invullen van de reologische data volgens het Cross WLF model in PolyXtrue zal onderzocht worden waarom deze viscositeitsdata lager liggen dan bij het eerste orde model.

Referenties

- [1] B. M. Kunststofverwerking and P. F. Desplentere, "Machines en Processing : Extrusie," no. September, 2014.
- [2] Dratec, "Extrusiematrijzen," pp. 2–7, 2019.
- [3] H. M. Caesar, "Polyvinylchloride (PVC)," 1993.
- [4] E. Jookan, *Chemie van de polymeren*. 2007.
- [5] J. C. Chauffoureaux, C. Dehennau, and J. van Rijckevorsel, "Flow and Thermal Stability of Rigid PVC," *J. Rheol. (N. Y. N. Y.)*, vol. 23, no. 1, pp. 1–24, 2002.
- [6] S. P. en K. 2019, "Additieven," 2019. [Online]. Available: <http://www.pvcinfo.nl/pvc/additieven>.
- [7] F. Desplentere, S. Deceur, and M. Vandaele, "Advanced Rheological Characterization for Thermal Sensitive Materials Using Shear Heating Device."
- [8] S. G. Hatzikiriakos, "Wall slip of molten polymers," *Prog. Polym. Sci.*, vol. 37, no. 4, pp. 624–643, 2012.
- [9] P. Deng, J. Zhang, F. Liu, K. Liu, H. Liu, and L. Zhang, "Shear-induced flow behavior of three polymers in different size dies," *J. Macromol. Sci. Part B Phys.*, vol. 52, no. 5, pp. 651–661, 2013.
- [10] S. G. Hatzikiriakos, "Slip mechanisms in complex fluid flows," *Soft Matter*, vol. 11, no. 40, pp. 7851–7856, 2015.
- [11] I. Fras, P. Cassagnau, and A. Michel, "Lubrication and slip flow during extrusion of plasticized PVC compounds in the presence of lead stabilizer," *Polymer (Guildf.)*, vol. 40, no. 5, pp. 1261–1269, 1999.
- [12] D. Y. He, "Influence of dosage of lubricant and FUNCTION on U-PVC extrude." .
- [13] J. W. Summers, E. B. Rabinovitch, and P. C. Booth, "Measurement of PVC fusion (gelation)," *J. Vinyl Technol.*, vol. 8, no. 1, pp. 2–6, 1986.
- [14] G. Menges, "PVC-Gelation Model," vol. 3, no. 3, pp. 3–7, 1981.
- [15] W. Guoquan and C. Yiaoting, "Test methods for gelation of PVC plastisol," *Polym. Test.*, vol. 10, no. 4, pp. 315–324, 1991.
- [16] A. Dewilde, "DETERMINATION OF THE DEGREE OF GELATION OF PVC-U USING A DSC Ph . Vanspeybroeck , prof ., ir ., Becetel , Belgium Determination of the degree of gelation by Differential Scanning Calorimetry."
- [17] M. Properties *et al.*, "Extrusion solutions from extrusion experts," pp. 1–5, 2019.
- [18] M. Gupta, "EFFECT OF WALL SLIP ON THE FLOW IN A FLAT DIE FOR SHEET EXTRUSION," no. 3, pp. 1191–1196, 2011.
- [19] Simcenter, "Flow Solver Reference Manual Simcenter 12.0.2."
- [20] H. F. Regimes *et al.*, "Partial Slip Models," no. 109, pp. 1–3, 2019.
- [21] S. P. Software, "GUID-50A6C176-6B7E-4BD0-B42FBB9204CB5B47," 2019.
- [22] F. Desplentere, "Reologie," no. september, 2018.
- [23] Moldflow, "Cross-WLF viscosity model," vol. 2018, pp. 1–6, 2018.
- [24] S. Remesher, "Surface Remesher," vol. m, pp. 1–2, 2019.
- [25] S. Proximity and S. Quality, "Automatic Surface Repair," pp. 1–2, 2019.

- [26] P. L. Mesher, "Prism Layer Mesher," vol. M, pp. 1–4, 2019.
- [27] I. P. Meshing, "Thin Mesher," vol. M, pp. 1–2, 2019.
- [28] Siemens, "Tetrahedral Mesher," vol. M, pp. 1–2, 2017.
- [29] Siemens, "Setting Up Viscous and Viscoelastic Fluid Flow," pp. 2–4, 2019.
- [30] RhéoArt, "Rheology Systems for Research and Development Laboratories - Technology Applications Forming materials and polymers - Materials Quality control The origin of RhéoArt," pp. 1–3, 2018.

FACULTEIT INDUSTRIËLE INGENIEURSWETENSCHAPPEN
CAMPUS BRUGGE
Spoorwegstraat 12
8200 BRUGGE, België
tel. + 32 50 66 48 00
iiw.brugge@kuleuven.be
www.iw.kuleuven.be

