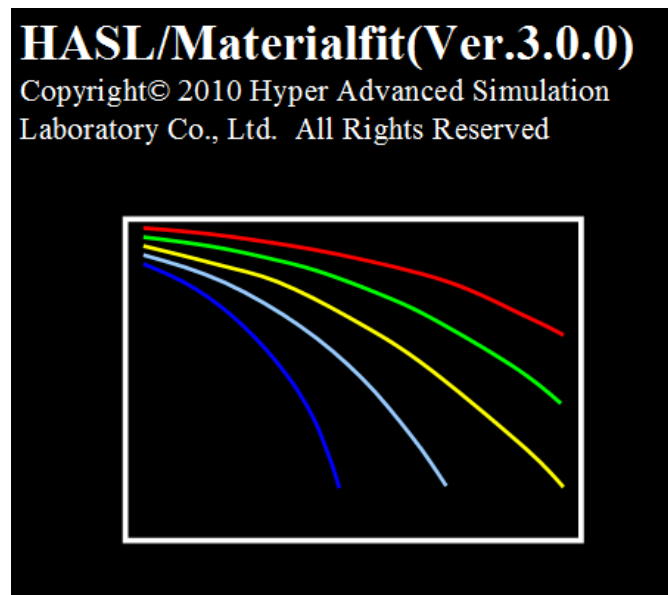

Materialfit(Ver.3.0.0)

改良成果資料(発表用ダイジェスト版)



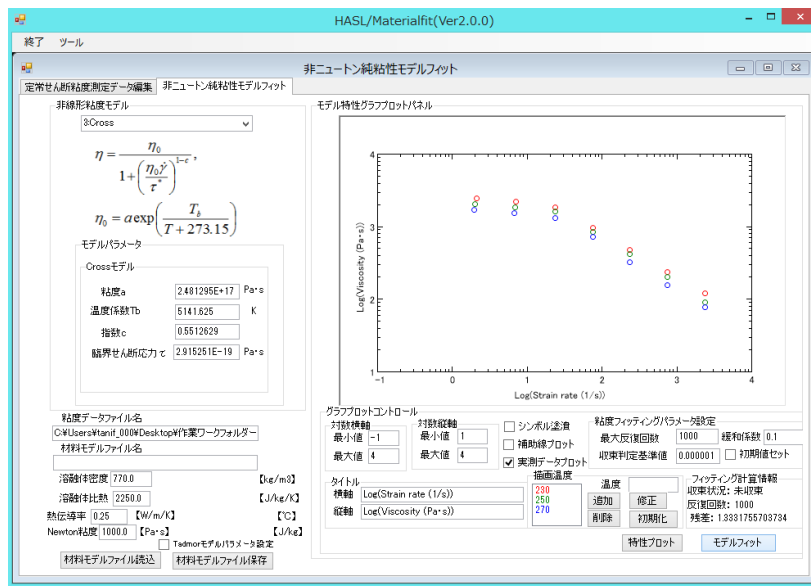
2015/11/25
株式会社HASL

本資料では、Material fit (Ver.3.0.0)の下記改良成果についてご報告します。

- ① 非線形粘度フィット計算の安定化
- ② Giesekus viscoelastic modelを利用した
Material characterization 機能の実装
- ③ 樹脂DB情報の追加

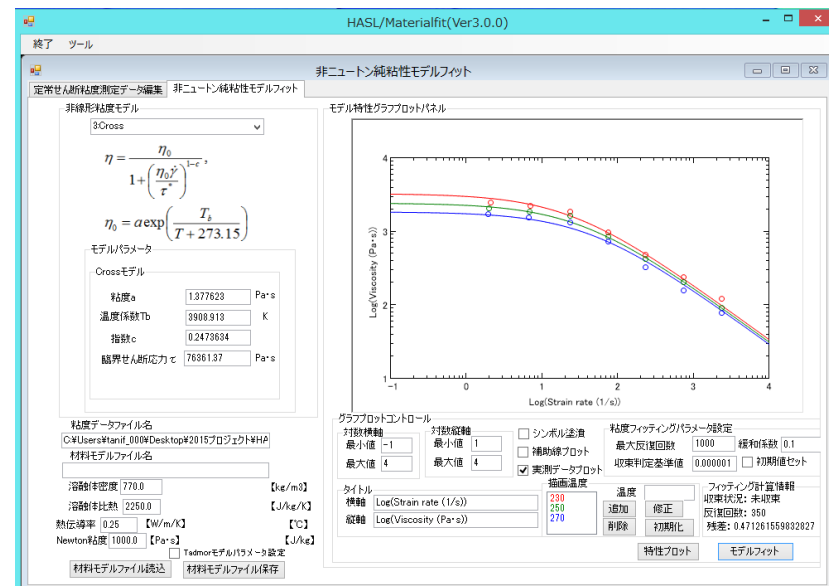
① 非線形粘度フィット計算の安定化

フィッティングアルゴリズムを改良することにより、フィッティング計算の収束性を改善しました。



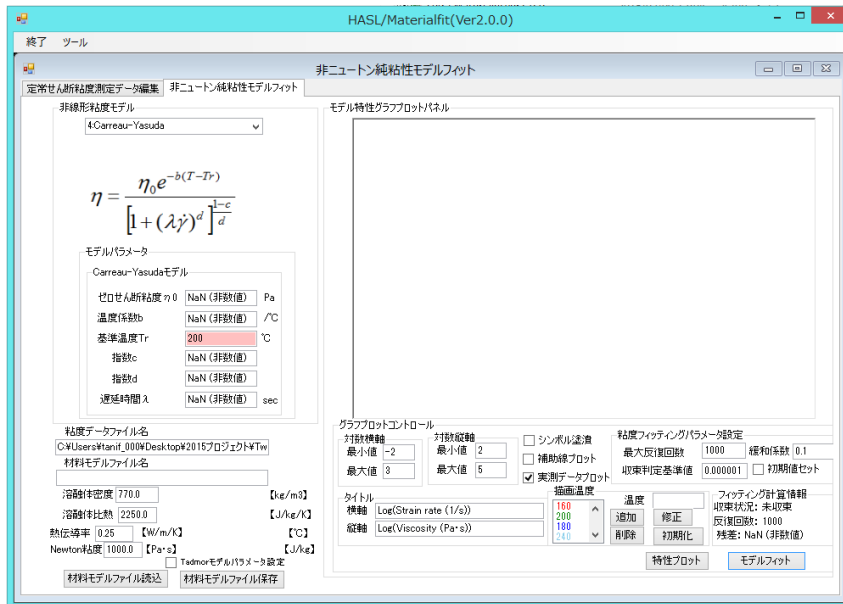
Ver2.0.0

モデル特性が表示されない



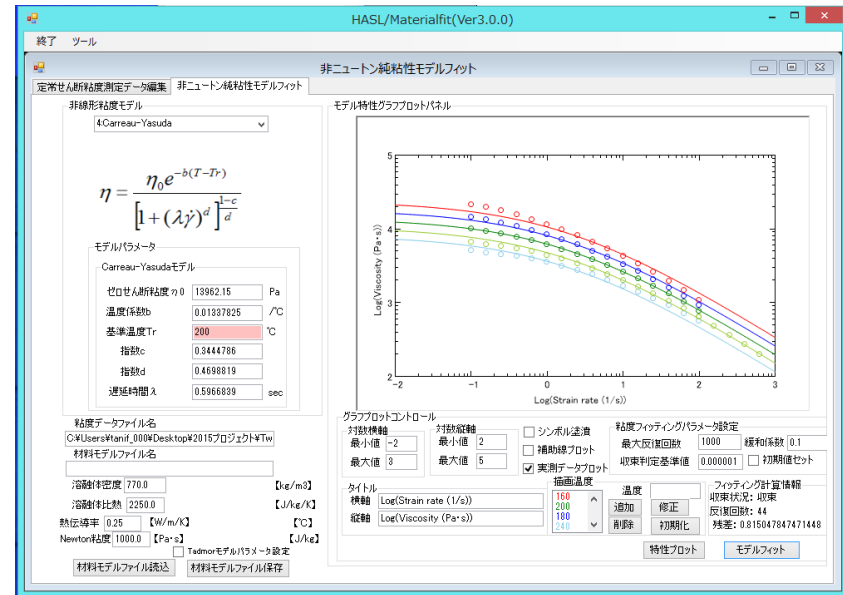
Ver3.0.0

図1 フィッティング計算結果の比較(Carreauモデル用サンプル情報を取えてCrossモデルでフィット)



Ver2.0.0

フィッティング計算が途中で発散



Ver3.0.0

図2 フィッティング計算結果の比較(PP実測データをCarreau-Yasudaモデルでフィット)

② Giesekus viscoelastic modelを利用した Material characterization 機能の実装

Multi-mode Giesekus viscoelastic model

$$\boldsymbol{\tau} = \sum_{k=1}^m \boldsymbol{\tau}_k$$

$$\lambda_k \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_k + \boldsymbol{\tau}_k + \frac{\alpha_k}{G_k} \boldsymbol{\tau}_k \bullet \boldsymbol{\tau}_k = 2G_k \lambda_k \mathbf{D}$$

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_k = \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_k}{\partial t} + \mathbf{v} \bullet \nabla \boldsymbol{\tau}_k - (\nabla \mathbf{v})^T \bullet \boldsymbol{\tau}_k - \boldsymbol{\tau}_k \bullet (\nabla \mathbf{v})$$

(Upper Convective time derivative)

$$\nabla \mathbf{v} = \frac{\partial v_j}{\partial x_i}$$

せん断流動特性:

Steady shear viscosity

$$\eta(\dot{\gamma}) = \sum_k G_k \lambda_k \frac{(1-f_k)^2}{1+(1-2\alpha_k)f_k}$$

$$f_k = \frac{1-\chi_k}{1+(1-2\alpha_k)\chi_k}$$

$$\chi_k^2 = \frac{1}{8\alpha_k(1-\alpha_k)(\dot{\gamma}\lambda_k)^2} \left(\sqrt{1+16\alpha_k(1-\alpha_k)(\dot{\gamma}\lambda_k)^2} - 1 \right)$$

First normal stress coefficient

$$\psi_1 \equiv \frac{N_1}{\dot{\gamma}^2} = 2 \sum_k G_k \frac{f_k(1-\alpha_k f_k)}{\alpha_k(1-f_k)} \frac{1}{\dot{\gamma}^2}$$

Second normal stress coefficient

$$\psi_2 \equiv \frac{N_2}{\dot{\gamma}^2} = - \sum_k G_k f_k \frac{1}{\dot{\gamma}^2}$$

一軸伸長流動特性：

Steady uniaxial elongational viscosity

$$\eta_e^s = \frac{1}{2\alpha} \sum_k G_k \lambda_k \left(3 + \frac{1}{\lambda_k \dot{\epsilon}} \left(\sqrt{1 - 4(1 - 2\alpha_k) \lambda_k \dot{\epsilon} + 4\lambda_k^2 \dot{\epsilon}^2} - \sqrt{1 + 2(1 - 2\alpha_k) \lambda_k \dot{\epsilon} + \lambda_k^2 \dot{\epsilon}^2} \right) \right)$$

Transient uniaxial elongational viscosity

$$\eta_e^+ = \sum_k \left(\frac{4G_k \lambda_k (1 - \exp(-r_1 t / \lambda_k))}{(1 - 2\dot{\epsilon} \lambda_k + r_1) - (1 - 2\dot{\epsilon} \lambda_k - r_1) \exp(-r_1 t / \lambda_k)} + \frac{2G_k \lambda_k (1 - \exp(-r_2 t / \lambda_k))}{(1 + \dot{\epsilon} \lambda_k + r_2) - (1 + \dot{\epsilon} \lambda_k - r_2) \exp(-r_2 t / \lambda_k)} \right)$$

$$r_1 = \sqrt{1 - 4(1 - 2\alpha_k) \dot{\epsilon} \lambda_k + 4(\dot{\epsilon} \lambda_k)^2}$$

$$r_2 = \sqrt{1 + 2(1 - 2\alpha_k) \dot{\epsilon} \lambda_k + (\dot{\epsilon} \lambda_k)^2}$$

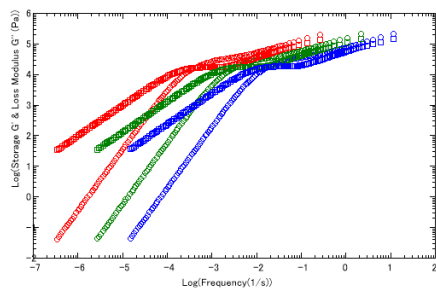
Giesekus modelパラメータの計算手順

1) 粘弾性実測データの収集

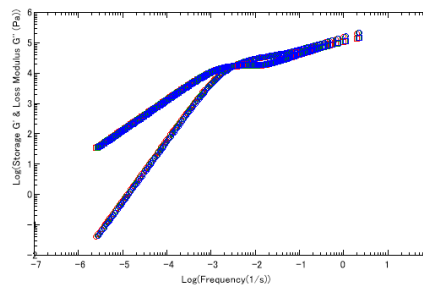
- ・動粘度 (Cox-Merz則が成立する場合は、当情報のみでも計算可)
- ・定常せん断粘度のひずみ速度/温度依存性 (Cox-Merz則が成立しない場合は計算の必須情報)
- ・伸長粘度 (収集が好ましいが、無くても計算可能)

2) 線形スペクトル(離散型緩和弾性率&緩和時間)、シフトファクターの計算:

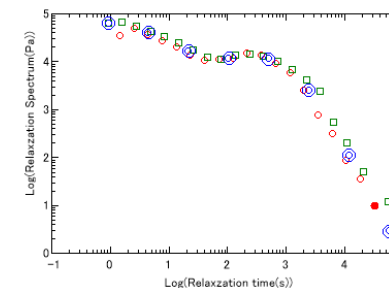
Materialfitの既往運用手順で対応可能



①G',G''の実測データの読み込み



②マスターカーブの作成 (シフトファクターパラメータ決定)



③線形スペクトル (離散型緩和スペクトル)の計算

図3 線形スペクトルの計算手順

3) 線形スペクトル計算後、あるいは線形スペクトル情報の読み込み後、メインメニュー/ツール/粘弾性モデル計算をプルダウン選択し、レオロジーデータ種別のコンボボックスで1.定常せん断粘度を選択します。読み込みボタンを押して、フィッティング対象とするせん断粘度実測データを読み込みます。

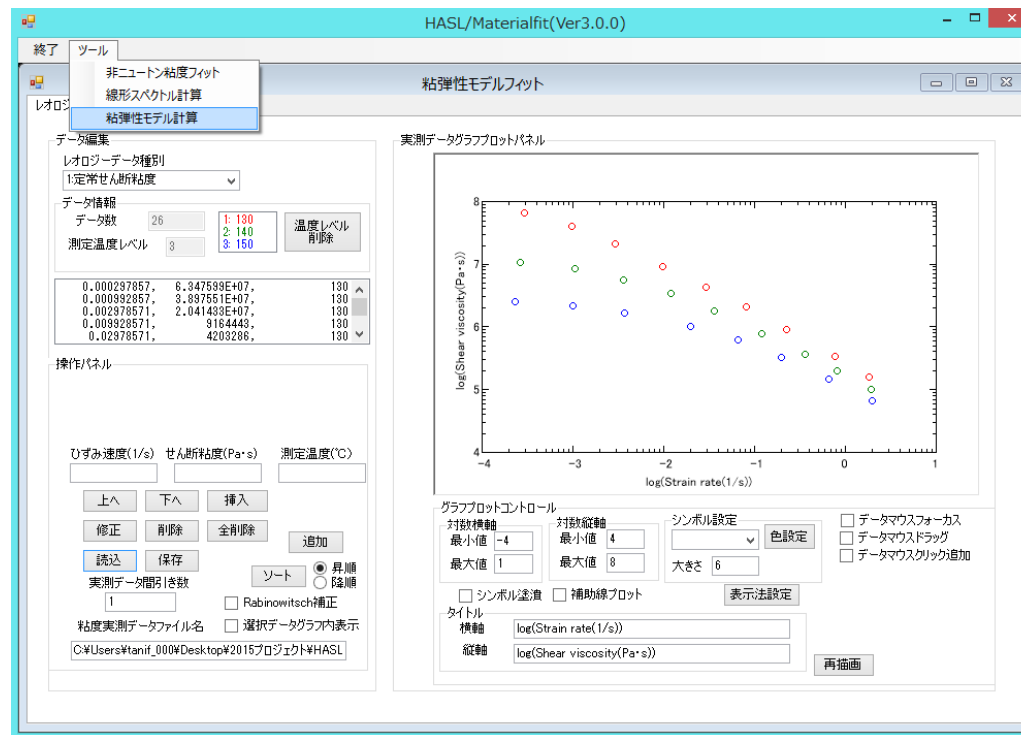


図4 定常せん断粘度の読み込み

4) 粘弾性モデルフィットタブメニューに切り替え、モデル選択コンボボックスで2.Giesekus、レオロジー特性コンボボックスで、1.定常せん断粘度を選択します。この際、Giesekus non-linear parameter パネル内に α_k ($k=1 \sim$ モード数)の初期値が表示されます。当パラメータは、0~1区間に設定され、せん断粘度のひずみ速度依存性を制御します。当パラメータの増加に伴って、ずり流動性は顕著になります。

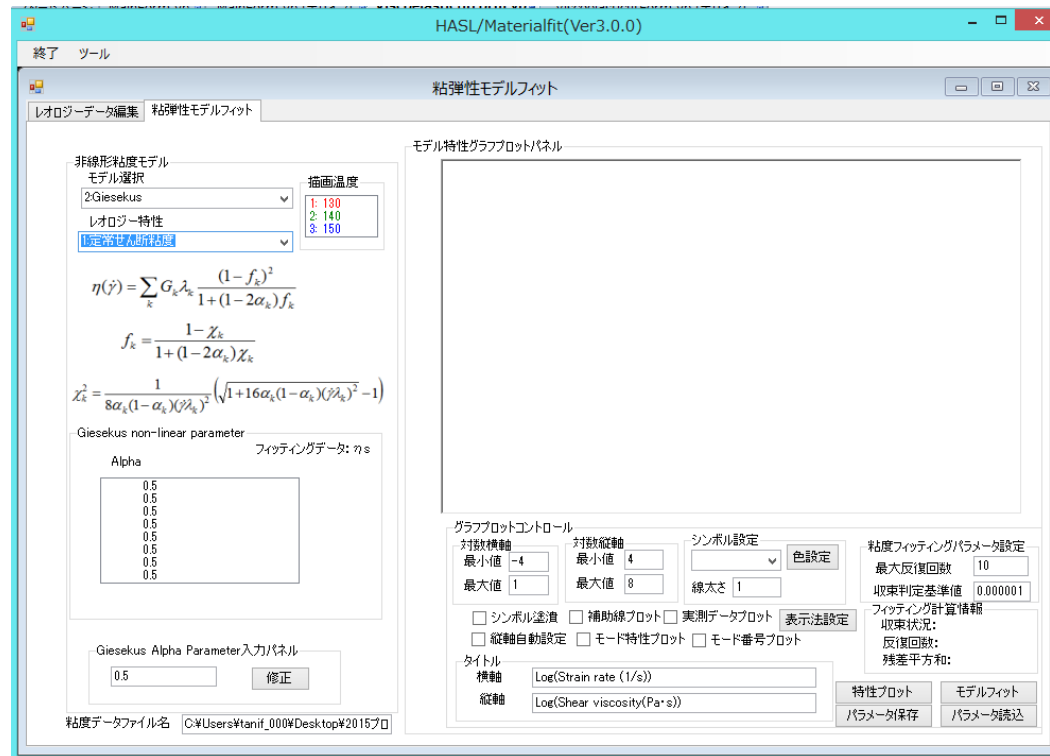


図5 Giesekusモデルせん断粘度特性フィットの選択

4) モデルフィットボタンを押すと、フィッティング計算がスタートして、最適パラメータ α_k ($k=1\sim$ モード数)が計算されます。計算終了後、実測データプロットチェックボックスをONとして特性プロットボタンを押すと、フィッティング状況を確認できます。

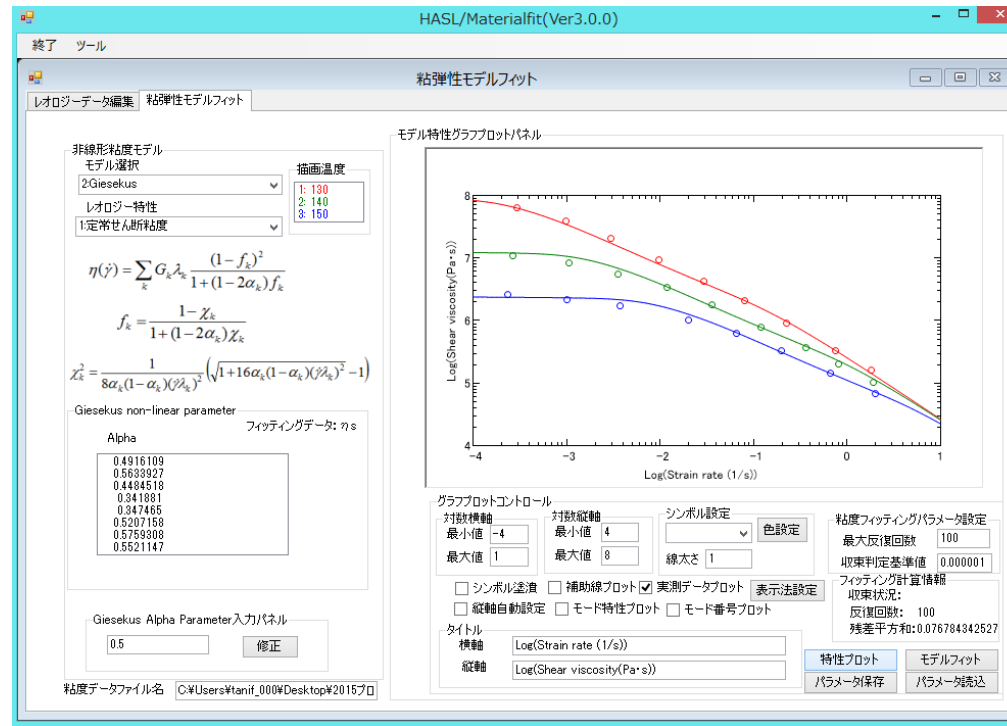


図6 Giesekusモデルを利用したせん断粘度特性のフィッティング結果

過渡一軸伸長粘度の実測データが有れば、そのフィッティング状況を確認することができます。本計算例では、伸長粘度はフィッティング対象としていませんが、せん断粘度のフィッティングで計算された最適 α パラメータを利用して、特性を再現すると、図に示すように短時間側で立ち上がる高ひずみ速度の粘度特性を良好に表現していることが分かります。このように、Giesekusモデルは、ブロー成形やフィルムキャスト成形プロセスで重視されるひずみ硬化性を表現可能な粘弾性モデルです。

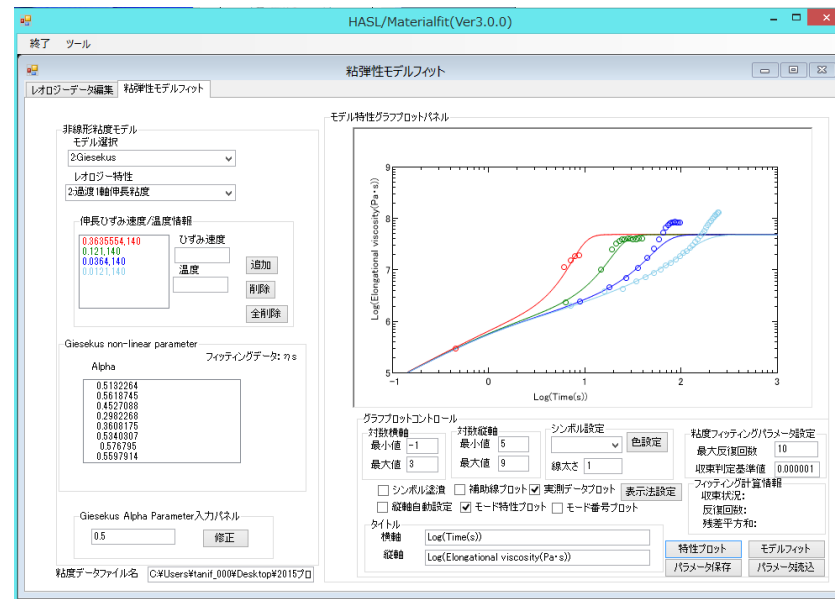


図7 Giesekusモデルを利用した過渡一軸粘度特性プロット

5) モデルパラメータ保存を押して、適当な保存ファイル名を指定すると以下に示す内容が、指定ファイル名+拡張子visparaという名称のテキストファイルに保存されます。このファイルは、モデルパラメータ読みボタンを押すことで、Materialfitに再度読み込み可能です。また、当ファイルは、Flat simulatorにも読み込み可能であり、Film casting 粘弾性解析の入力ファイル情報となります。

温度シフトファクターモデルパラメータ：
モデルスイッチ
(0:WLF,1:Arrhenius),C1,C2,基準温度

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

```

),18.95959,104.5196,140
8,1
160864.8,1,0.5132264
36438.05,4.543988,0.5618745
16915.46,20.64782,0.4527088
11769.18,93.82347,0.2982268
22390.09,426.3326,0.3608175
486.3792,1937.25,0.5340307
0.001133492,8802.844,0.576795
0.006218081,39999.98,0.5597914

```

モード数、モデルID

モデルID=1:Giesekus model
=2 :EPTT model

G_k, λ_k, α_k

k=1~モード数

WLF モデル：
$$a_T = \exp\left(-\frac{C_1(T-T_r)}{C_2+T-T_r}\right)$$

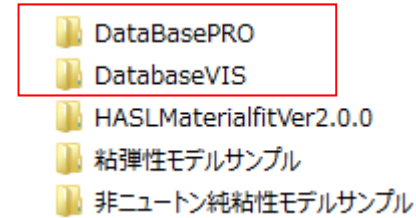
Arrhenius モデル：
$$a_T = \exp\left(C_1\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_r}\right)\right)$$

図8 Giesekusモデルパラメータ保存ファイルの内容

③ 樹脂DB情報の追加

データベース登録樹脂一覧

NO.	材料名	グレード数	グレード名	メーカー
1	ETFE	1	A1	A
2	HDPE	4	B1	B
3			B2	B
4			B3	B
5			B4	B
6	ionomer	2	C1	C
7			C2	C
8	LDPE	2	D1	D
9			D2	D
10	PC	1	E1	E
11	PMMA	1	F1	F
12	PP	8	G1	G
13			G2	G
14			D3	D
15			G3	G
16			G4	G
17			G5	G
18			D4	D
19			D5	D
20	PS	2	H1	H
21			H2	H



システムフォルダー内にDataBaseProとDataBaseVisが追加されました。前者のフォルダー内に含まれるproファイルは、全ての当社流動解析ソフトに材料物性ファイルとしてインポート可能です。また、後者のフォルダーには、フィッティング情報の元データとなった粘度情報が格納されています。

- *) Material fit試用版はFree download可能ですが、Data baseは提供できません(非公開となります)。
- *) 提供されるDatabaseの無断コピー、配布を禁じます。

- ETFE_A1.pro
- HDPE_B1.pro
- HDPE_B2.pro
- HDPE_B3.pro
- HDPE_B4.pro
- ionomer_C1.pro
- ionomer_C2.pro
- LDPE_D1.pro
- LDPE_D2.pro
- PC_E1.pro
- PMMA_F1.pro**
- PP_D3.pro
- PP_D4.pro
- PP_D5.pro
- PP_G1.pro
- PP_G2.pro
- PP_G3.pro
- PP_G4.pro
- PP_G5.pro
- PS_H1.pro
- PS_H2.pro

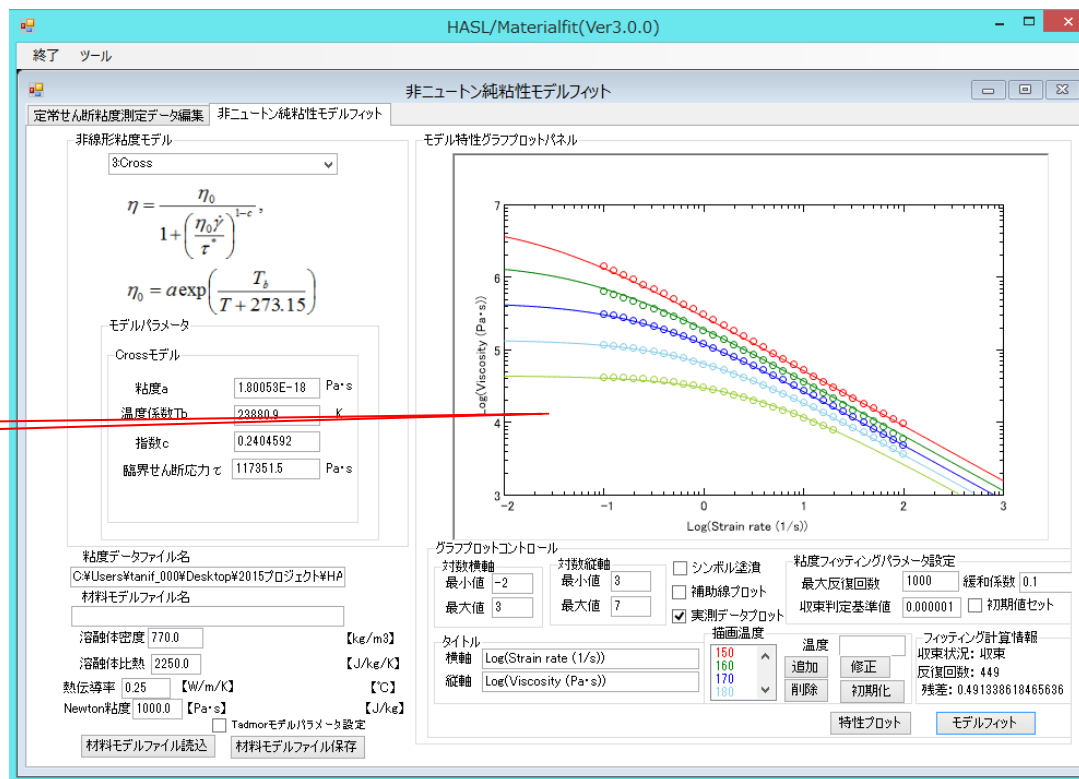


図9 DataBaseVisフォルダーに登録されているPMMA粘度情報のCrossモデルフィット例

ファイル出力ボタンを押すことで、各種グラフプロット情報がテキストファイル出力可能になりました。

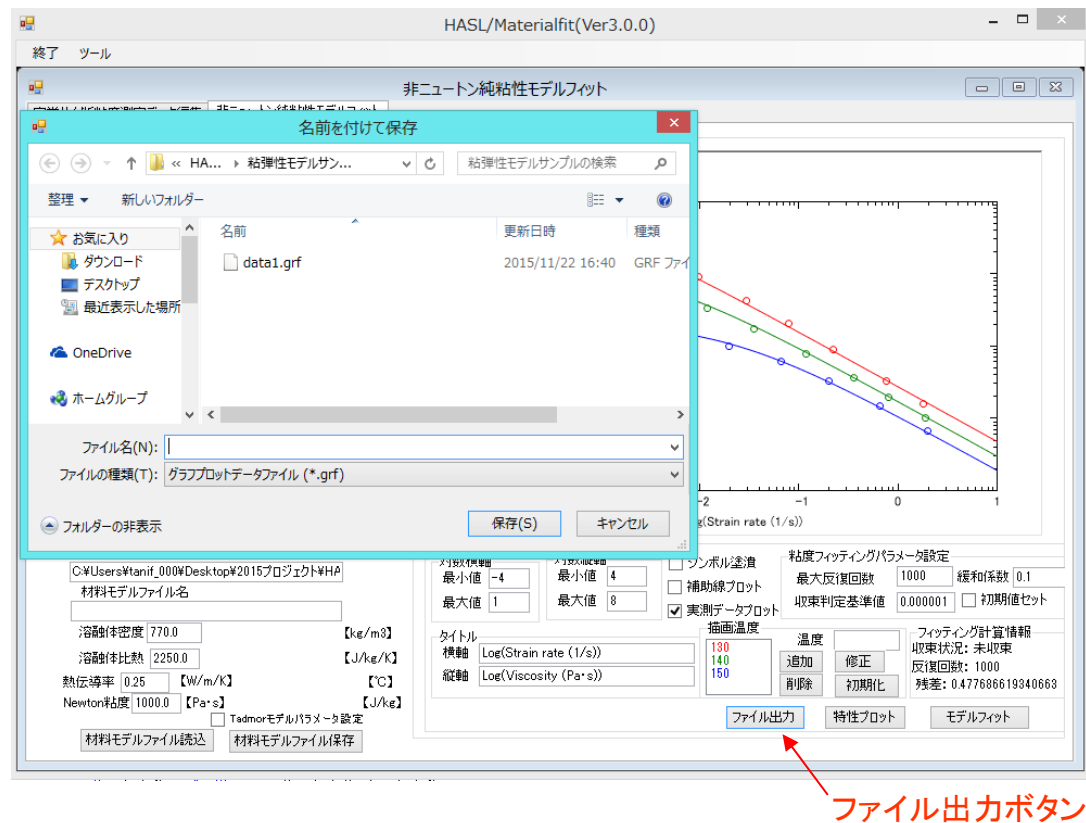


図10 グラフプロット情報のテキストファイル出力機能