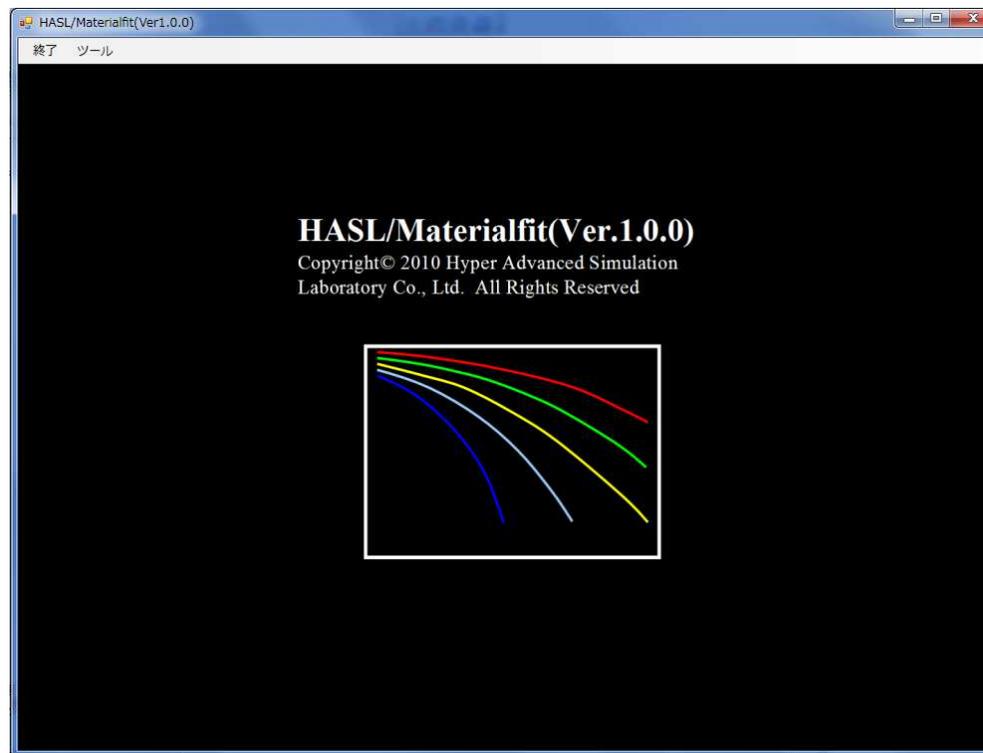


プリプロセッシング関連

1) 材料特性フィッティングツールHASL/Materialfit(全ソフト共通成果)

→ フラットダイ解析の材料特性として利用

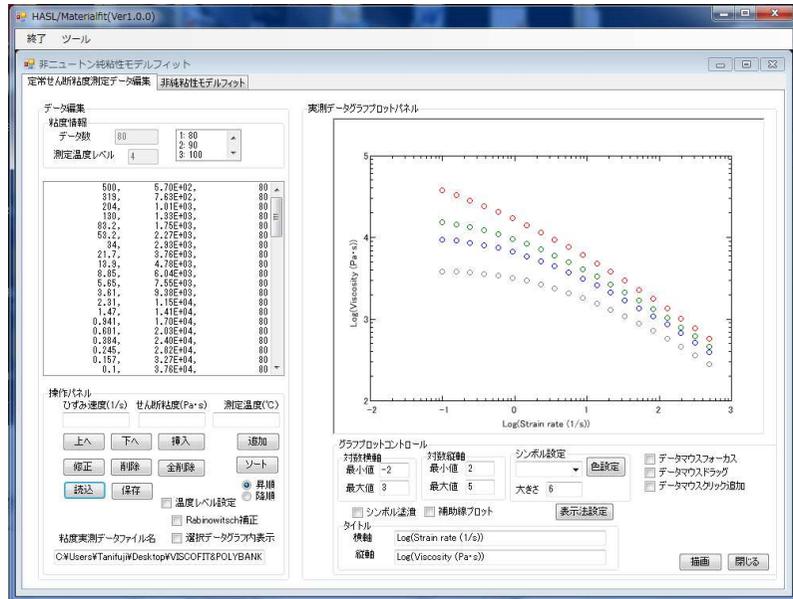


HASL/Materialfit起動画面

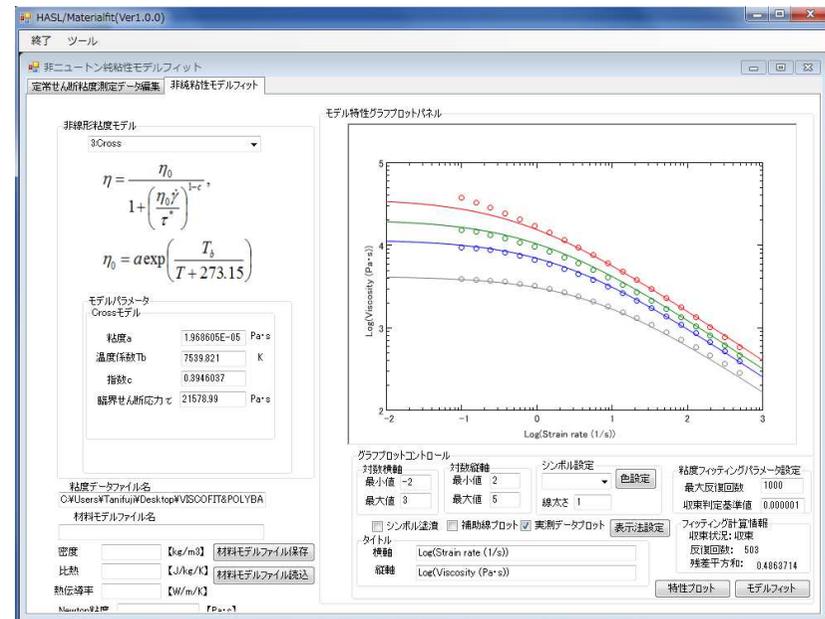
HASL/Materialfit(Ver.1.0.0)機能一覧

分類	フィティング対象	フィティングモデル	フィティングアルゴリズム	出力	リリース形態
非ニュートン純粘性流体の粘度フィッティング	せん断粘度の温度、ひずみ依存特性	Power-law, Cross, Carreau, Carreau-Yasuda	Newton-Raphson法	非ニュートン純粘性モデルパラメータ	Web経由 Freeware 2012/11末 リリース 開始
粘弾性流体レオロジー特性のフィッティング	貯蔵/損失弾性率の周波数、温度依存性	WLF, Arrhenius 温度シフトモデル &Multi-mode exponential type PTT visco-elastic model	Tschoegl公式 & 周波数フィルター付き Newton-Raphson法	温度シフトファクターモデルパラメータ、離散型緩和スペクトル(緩和弾性率 G_i 、緩和時間 λ_i)	Web経由 Shareware 2012/11末 リリース 開始
	せん断粘度、第一法線応力差のひずみ速度、温度依存性 過渡一軸伸長粘度のひずみ速度依存性		Simplex法	EPTTモデル非線形パラメータ(ξ_i, ε_i)	

非ニュートン純粘性モデルフィッティング例



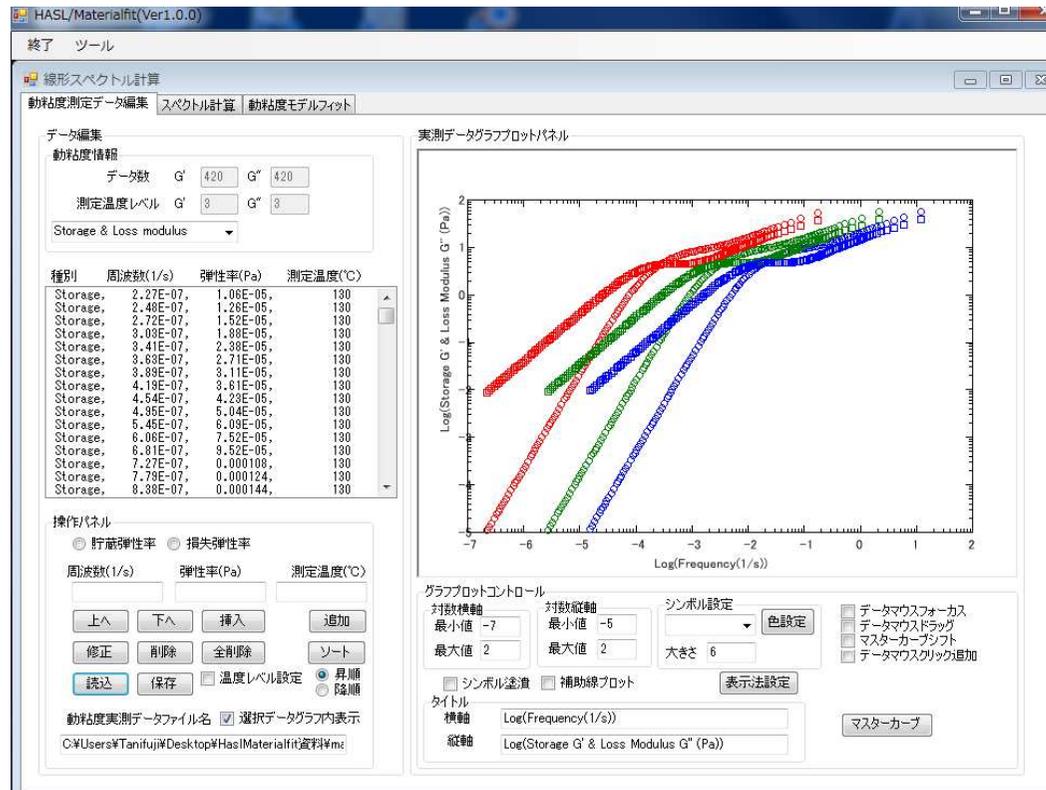
I) せん断粘度実測データの読込



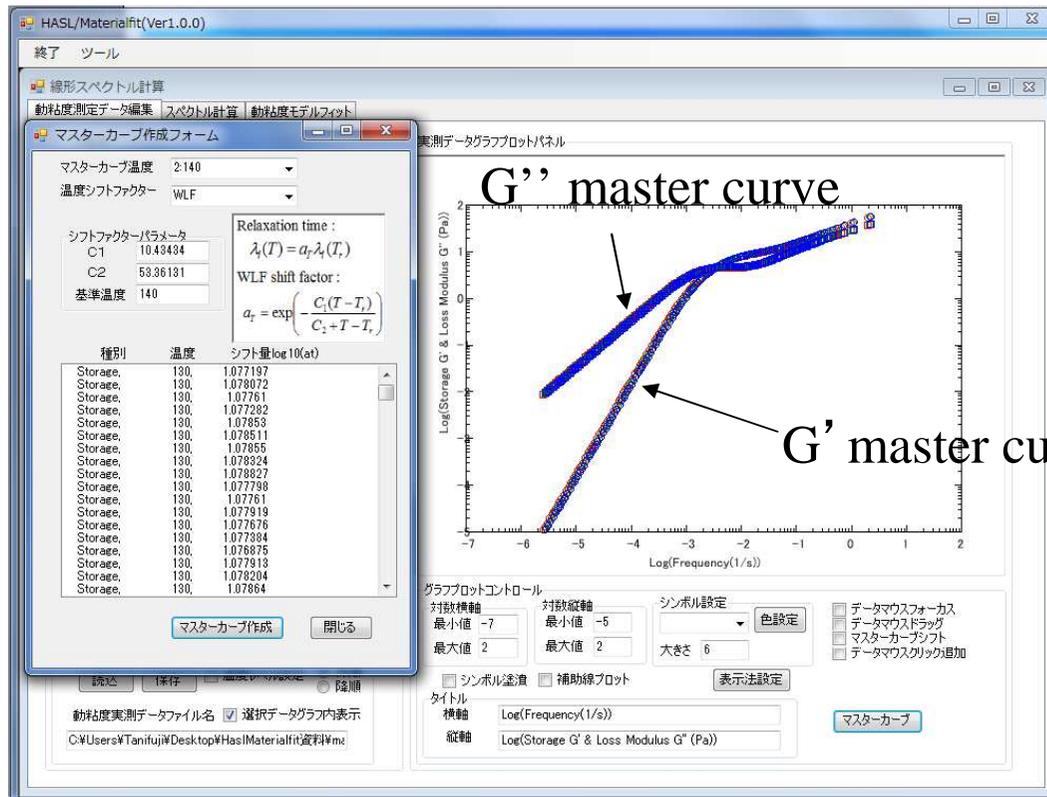
II) フィッティングモデルの選択 & フィッティング計算

粘弾性モデルフィッティング手順

I) 貯蔵/損失弾性率の周波数/温度依存性情報の読込



Ⅱ) 温度時間換算則を利用したシフトファクターの計算 (マスターカーブの作成)



計算されたWLFシフト
ファクターパラメータ

シフトファクターパラメータ
C1 10.43434
C2 53.36131
基準温度 140

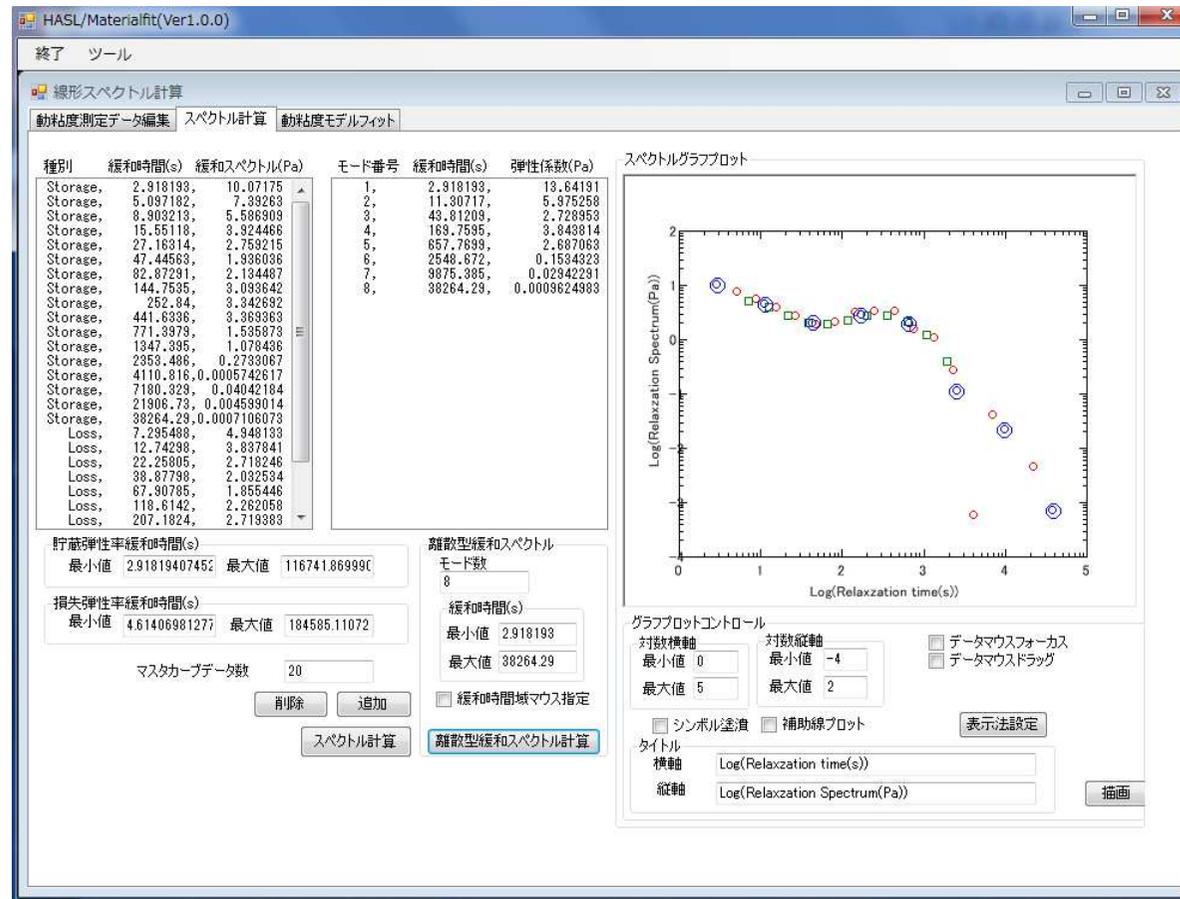
Relaxation time :

$$\lambda_i(T) = a_T \lambda_i(T_r)$$

WLF shift factor :

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

Ⅲ) Tschoeglの公式を利用した緩和スペクトルの計算

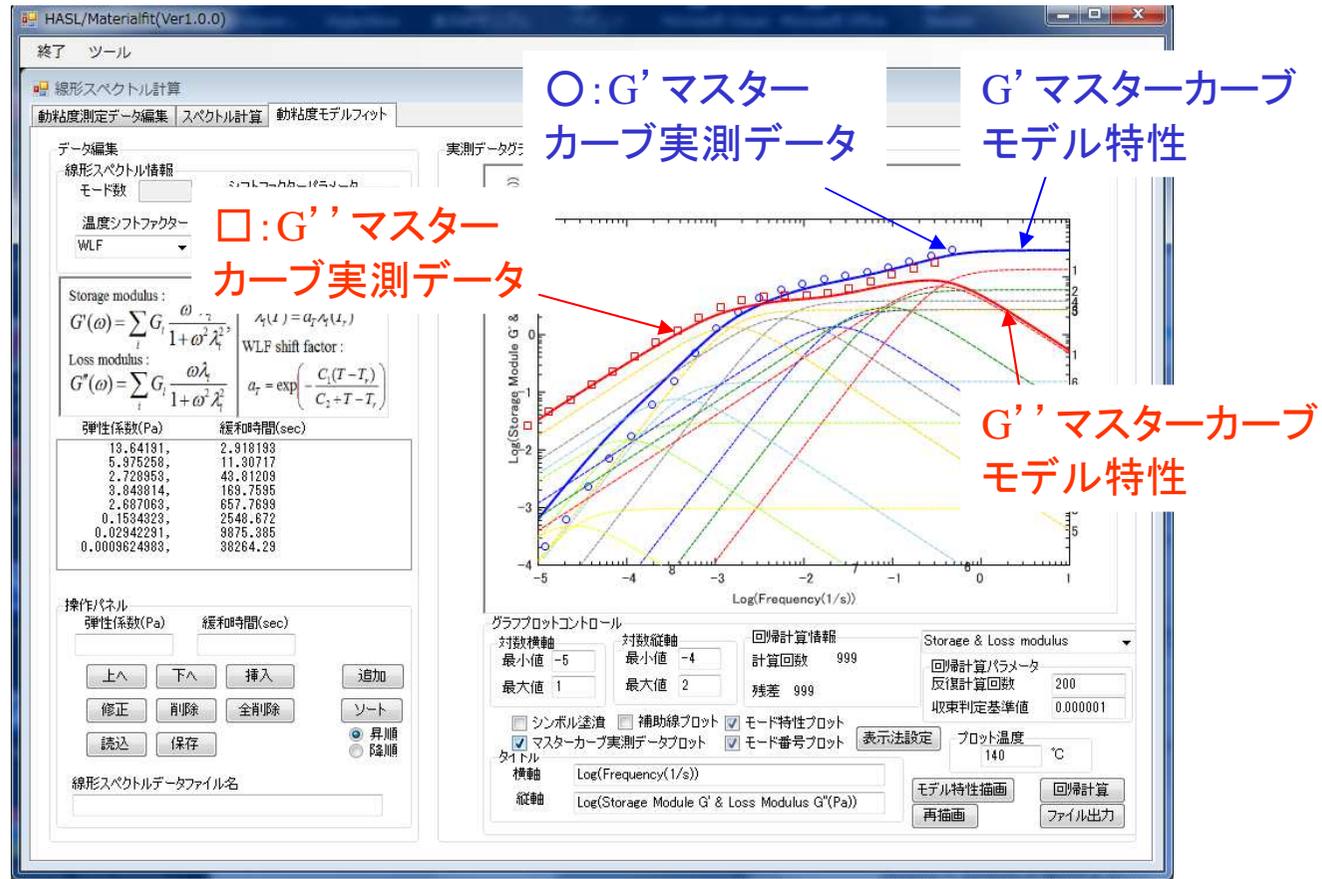


○: Tschoeglの公式を利用しG'から計算した緩和スペクトル

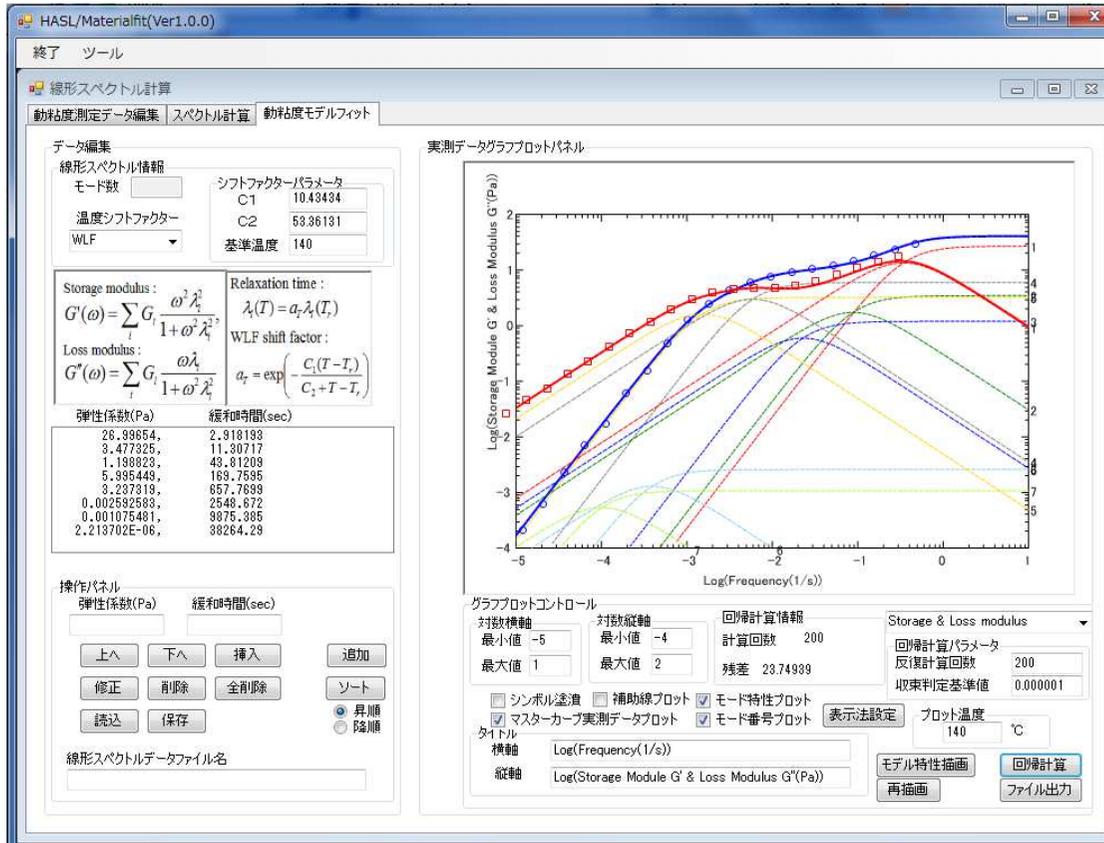
□: Tschoeglの公式を利用しG''から計算した緩和スペクトル

◎: 分散型緩和スペクトル

IV) 離散型緩和スペクトルを利用したG',G''実測データの再現



V) 回帰計算(周波数フィルター付きNewton-Raphson法)による G', G'' 実測データフィッティング状況の改善



計算された離散型緩和スペクトル
(マスターカーブ基準温度140°C)

弾性係数(Pa)	緩和時間(sec)
26.99654,	2.918193
3.477325,	11.30717
1.198823,	43.81209
5.995449,	169.7595
3.237319,	657.7699
0.002592583,	2548.672
0.001075481,	9875.385
2.213702E-06,	38264.29

ゼロせん断粘度:

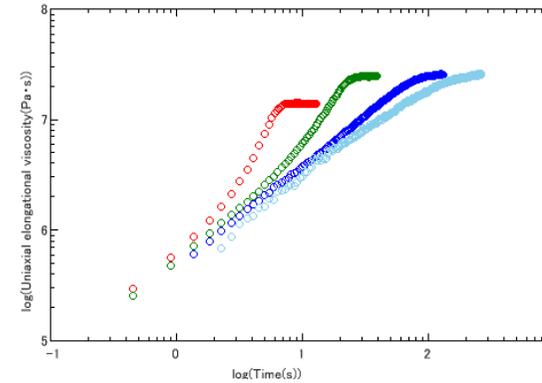
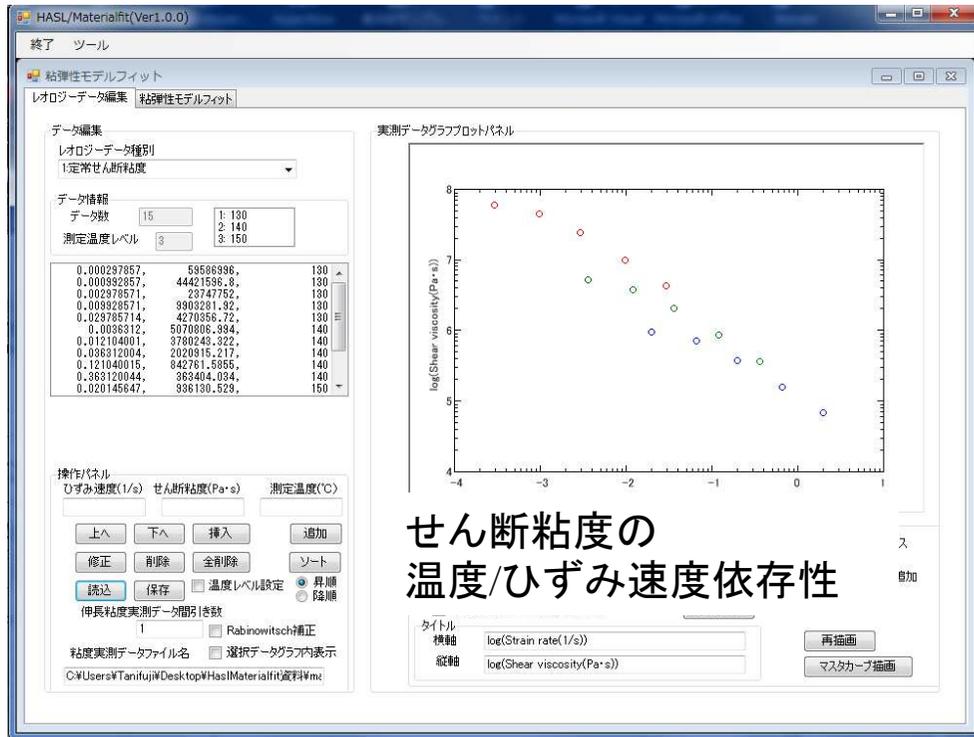
$$\sum_{k=1}^{Modenumber} G_k \lambda_k = 3365.368 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

平均緩和時間:

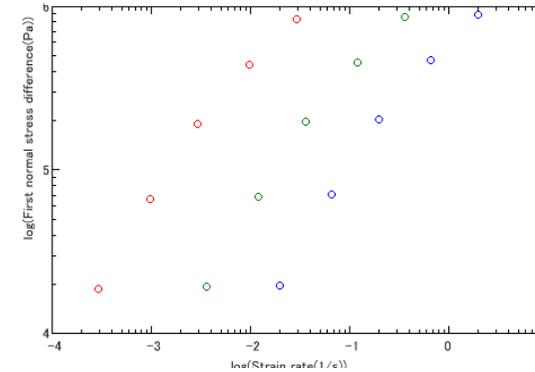
$$\frac{\sum_{k=1}^{Modenumber} G_k \lambda_k^2}{\sum_{k=1}^{Modenumber} G_k \lambda_k} = 1947.721 \text{ s}$$

VI) SIMPLEX法を利用した非線形レオロジー特性のフィッティング

非線形レオロジー特性読込画面



過渡一軸伸長粘度
ひずみ速度依存性



過渡一軸伸長粘度
ひずみ速度依存性

フィッティング対象は、3種の非線形レオロジー特性の6通りの組み合わせに対応可能

The screenshot displays the HASL/Materialfit (Ver1.0.0) software interface. The main window is titled '粘弾性モデルフィット' (Viscoelastic Model Fitting) and contains several panels:

- モデル特性グラフプロットパネル (Model Characteristic Graph Plot Panel):** A log-log plot showing Log(Elongations, Pa·s) on the y-axis (ranging from 5 to 8) versus Log(Time(s)) on the x-axis (ranging from -1 to 3). The plot contains experimental data points (red circles) and several fitted curves in different colors (green, blue, cyan).
- Exponential-Phan-Thien/Tannerモデルパラメータ (Exponential-Phan-Thien/Tanner Model Parameters):** A table with columns for ϵ_i , ϵ_i , Status, and 粘度 η (Pa·s). The table lists 6 rows of parameters, all with Status 'Fix' and a viscosity of 0.0. A dropdown menu labeled 'フィッティングデータ' (Fitting Data) is open, showing options: 1. η s&N1, 2. η s, 3. N1, 4. η e, 5. η s& η e, and 6. η s& η e&N1.
- EPTTモデルパラメータ入力パネル (EPTT Model Parameter Input Panel):** Input fields for ϵ_i (0.1) and ϵ_i (0.1), with radio buttons for '計算' (Calculation) and '固定' (Fixed), and a '修正' (Modify) button.
- グラフプロットコントロール (Graph Plot Control):** Controls for the x-axis (対数横軸, 最小値 -1, 最大値 3) and y-axis (対数縦軸, 最小値 5, 最大値 8). It includes checkboxes for 'シンボル塗潰' (Symbol fill), '補助線プロット' (Auxiliary line plot), '実測データプロット' (Measured data plot), '縦軸自動設定' (Auto y-axis setting), 'モード特性プロット' (Mode characteristic plot), and 'モード番号プロット' (Mode number plot).
- 粘度フィッティングパラメータ設定 (Viscosity Fitting Parameter Settings):** A panel with '最大反復回数' (Maximum iterations) set to 100 and '収束判定基準値' (Convergence criterion) set to 0.000001. It also includes 'フィッティング計算情報' (Fitting calculation information) with fields for '収束状況' (Convergence status), '反復回数' (Iterations), and '残差平方和' (Residual sum of squares).

非線形パラメータ入力 & フィッティング対象選択パネル

Simplex計算パラメータ入力パネル & フィッティング状況の経過出力

粘弾性モデルフィッティング例

直鎖ポリスチレン(Linear-PS) & 分岐ポリスチレン(Branch-PS)溶融体

両者は、せん断粘度が、ほぼ等しく、伸長粘度と法線応力差が大きく異なる。

動粘度(G' , G''), せん断粘度, 過渡一軸伸長粘度, 第一法線応力差をNAPLESを利用して予測。

Linear-PS粘弾性モデルパラメータ

$G_i(\text{Pa})$	$\lambda_i(\text{s})$	ξ_i	ε_i
71009.86	2.936497	0.00574057	0.1206302
72.84265	9.384807	0.1273147	0.1702322
43795.77	29.99309	0.06785554	0.0444641
52198.17	95.85551	0.3467348	0.3648337
51.26009	306.3464	0.1047293	0.1047293
50.6242	979.0582	0.09283812	0.1051762
0.02387634	3128.992	0.09916066	0.1047293
0.08315446	10000.01	0.09332789	0.1044991

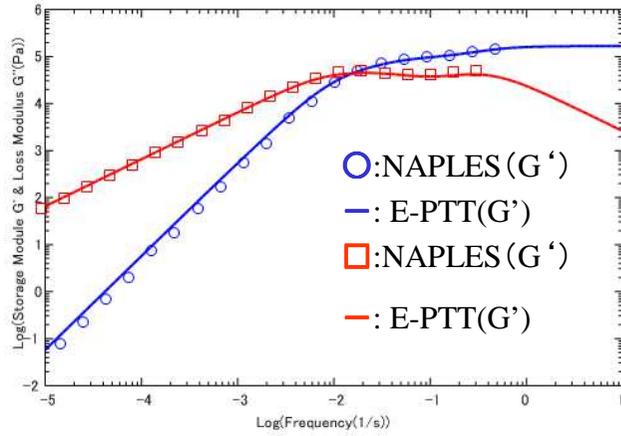
(モード数8, WLFシフトモデルパラメータ $C_1:10.57784, C_2:53.98968, T_r:140^\circ\text{C}$)

Relaxation time :

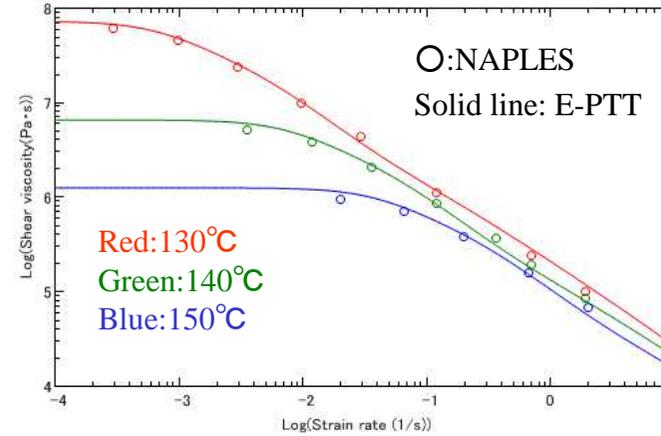
$$\lambda_i(T) = a_T \lambda_i(T_r)$$

WLF shift factor :

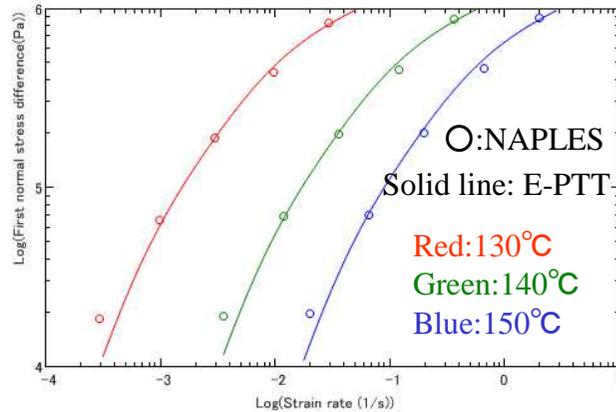
$$a_T = \exp\left(-\frac{C_1(T-T_r)}{C_2+T-T_r}\right)$$



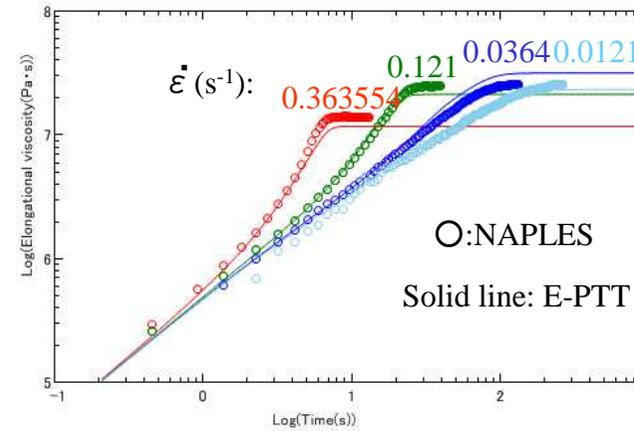
G', G'' vs. ω (Linear-PS, 140°C)



η_s vs. $\dot{\gamma}$ (Linear-PS)



N_1 vs. $\dot{\gamma}$ (Linear-PS)

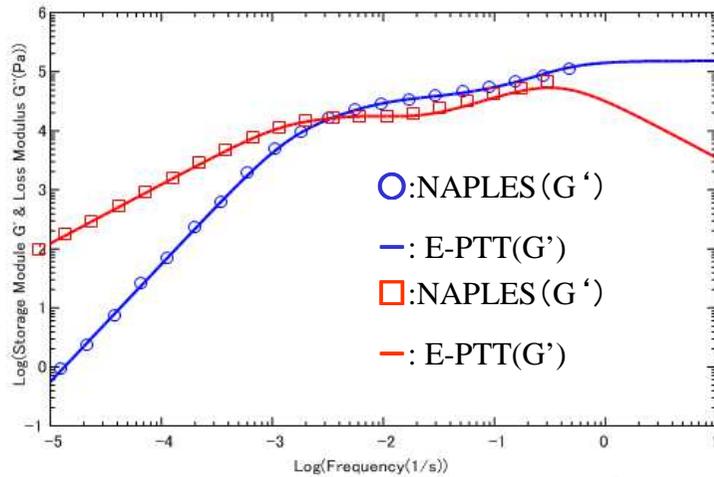


η_e vs. t (Linear-PS, 140°C)

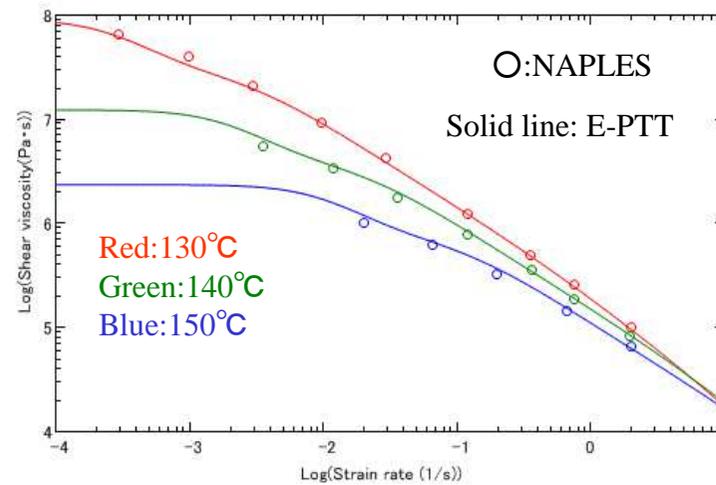
Branch-PS粘弾性モデルパラメータ

$G_i(\text{Pa})$	$\lambda_i(\text{s})$	ξ_i	ε_i
98272.26	2.939091	0.03391094	0.1775516
14539.14	10.98789	0.1269411	0.08372492
4806.628	41.07857	0.06934773	0.05118947
19408.59	153.5736	0.01745899	0.02039197
15222.59	574.1399	0.2945009	0.1065498
0.5868651	2146.441	0.2631713	0.1995464
0.0635608	8024.536	0.187684	0.07452005
0.156529	30000.01	0.2074547	0.02892948

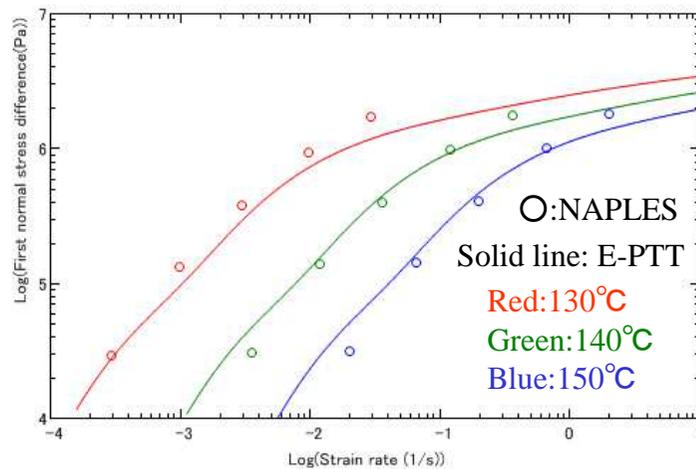
(モード数8, WLFシフトモデルパラメータ C_1 :18.85245, C_2 :103.9854, T_r :140°C)



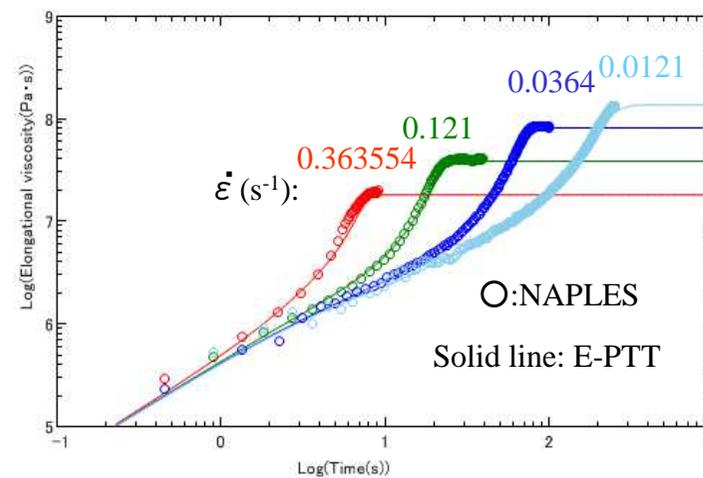
G', G'' vs. ω (Branch-PS, 140°C)



η_s vs. $\dot{\gamma}$ (Branch-PS)



N_1 vs. $\dot{\gamma}$ (Branch-PS)



η_e vs. t (Branch-PS, 140°C)

ポストプロセッシング関連

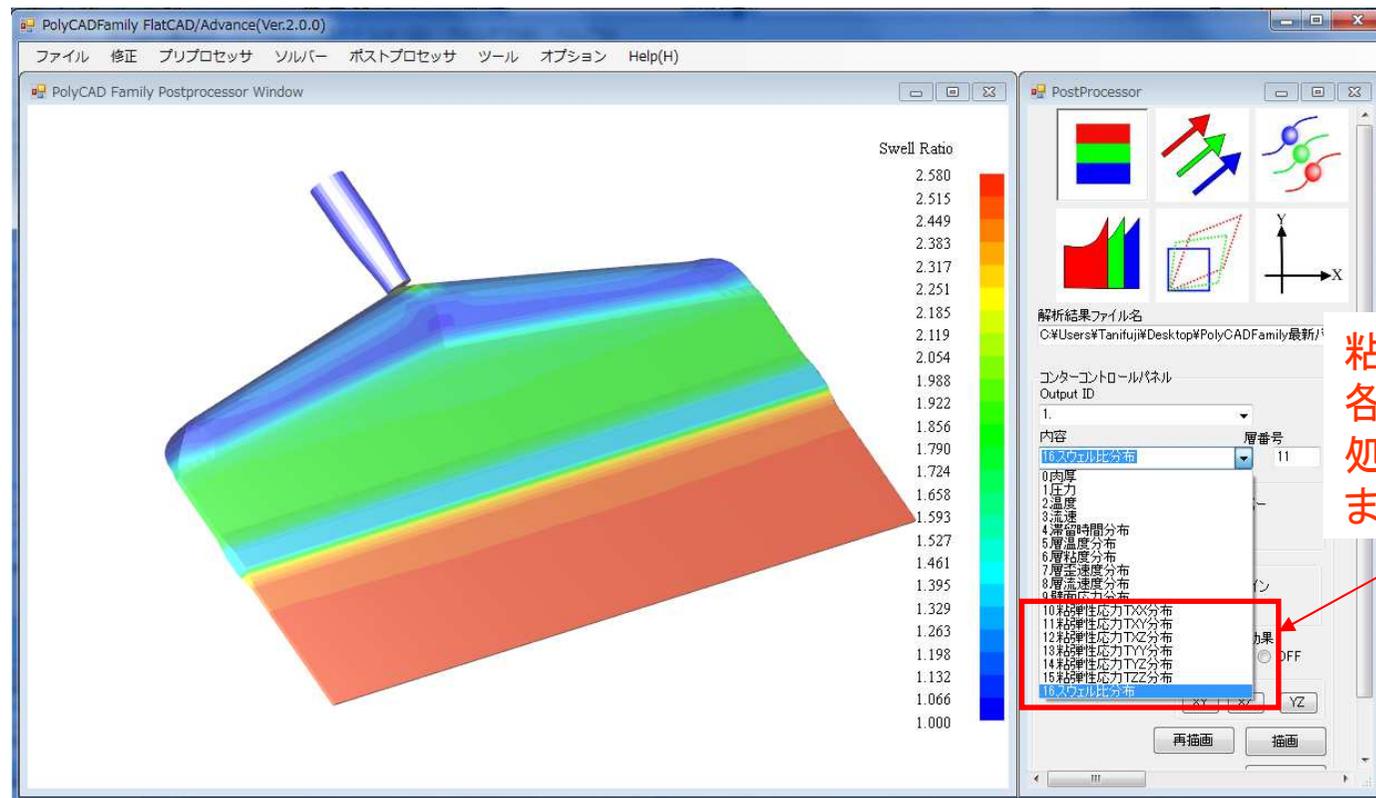
2) 3D化解析結果のマウスフォーカス表示

I) 『ツール』プルダウンメニューで『Result mouse focus』を選択します。

II) Result mouse focus』フォーム内にマウスフォーカス(マウスポインターが一番近い)節点の各種計算結果が数値出力されます。

Coordinate(mm)		Result information	
Node number	2371	Pressure(MPa)	0.02090981
x	-20.91474	Temperature(°C)	169.4014
y	-182.1784	Velocity(cm/sec)	0.0119807031005
z	19.40376	Res. Time(sec)	434.1232
Thick.(mm)	0.96761	Layer number	1
		Layer temp(°C)	160.0729
		Layer stress(KPa)	0.0205067221409
		Layer strain(1/sec)	0.02050672
		Layer velocity(cm/sec)	0
		Layer viscosity(Pa·sec)	1000

3) 粘弾性応力計算結果(各種応力分布、スウェール比分布)のコンター図、グラフ図出力の機能の追加



粘弾性解析に関わる
各種計算結果の図化
処理項目が追加され
ました。

ソルバー関連

4) マルチモード指数型PTT粘弾性モデルを利用したコートハンガー ダイ内粘弾性応力

ダイ内のせん断支配の流動パターンは、非ニュートン純粘性解析で十分精度良く定量化できる。しかし、ダイ流出後の押出物の形態には、純粘性解析では捉えられない法線応力効果が大きな影響を及ぼす。

非線形粘弾性構成方程式

(Multi mode Exponential type PTT model):

$$\nabla \boldsymbol{\tau}_i + f_{GS}(\boldsymbol{\tau}_i, \mathbf{D}) + \lambda(\boldsymbol{\tau}_i)^{-1} \bullet \boldsymbol{\tau}_i = 2G_i \mathbf{D},$$

$$f_{GS}(\boldsymbol{\tau}_i, \mathbf{D}) = \xi_i (\mathbf{D} \bullet \boldsymbol{\tau}_i + \boldsymbol{\tau}_i \bullet \mathbf{D}), \quad \lambda(\boldsymbol{\tau}_i)^{-1} = \frac{1}{\lambda_i} \left(1 + \frac{\varepsilon_i}{G_i} \text{trace}(\boldsymbol{\tau}_i) \right) \mathbf{I}$$

$\boldsymbol{\tau}_i$: モード <i>i</i> の粘弾性応力テンソル	ξ_i, ε_i : 物質パラメータ	G_i : モード <i>i</i> の緩和弾性率,
\mathbf{D} : 変形速度テンソル	$0 \leq \xi_i \leq 2, \varepsilon_i \geq 0$	λ_i : モード <i>i</i> の緩和時間

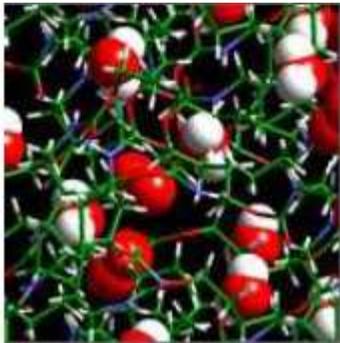
を利用し、従来の純粘性解析では表現されない法線応力を定量化。

粘弾性応力計算機能の適用例

コートハンガーダイ内樹脂流動の 多階層解析

目的

メソ/マクロスケールシミュレーション統合化技術を利用した
コートハンガーダイ内樹脂流動の粘弾性応力分布の評価



Molecular Dynamics

Micro-scale simulation

$<10^{-7}\text{m}$

$<10^{-7}\text{sec}$

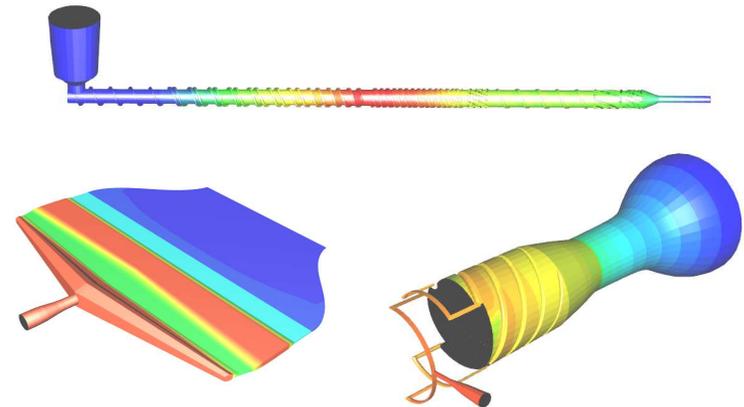


Rheology

Meso-scale simulation

$10^{-7}\sim 10^{-4}\text{m}$

$10^{-3}\sim 10^3\text{sec}$



Polymer processing

Macro-scale simulation

$10^{-3}\text{m}<$

$0.1\text{sec}<$

多階層解析技術

1) Meso-scale simulation

NAPLES



動粘度,せん断粘度,
伸長粘度,法線応力差



2)Material characterization

Materialfit



緩和スペクトル,
非線形
粘弾性パラメータ



Nextru
CAD
Advance

Flat
CAD

Spiral
CAD

3)Macro-scale simulation

Flowsimulator



流動, 応力, 温度, 物性,
滞留時間分布, 形状

解析条件

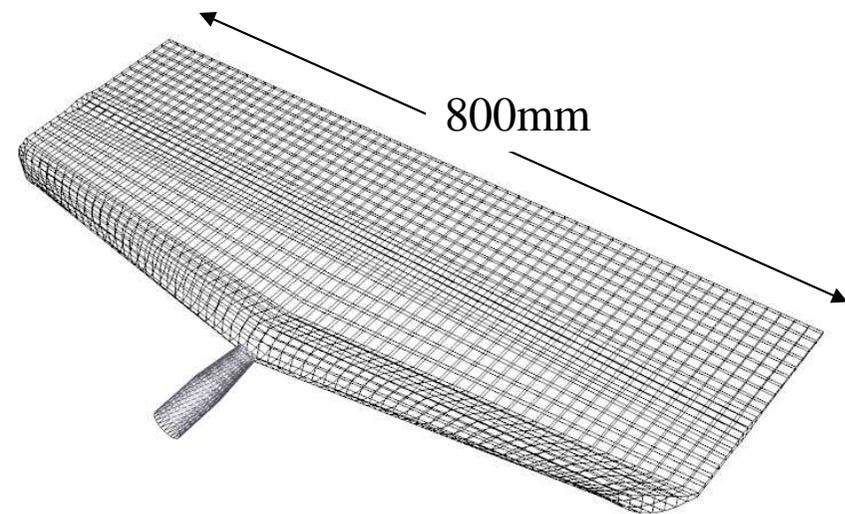
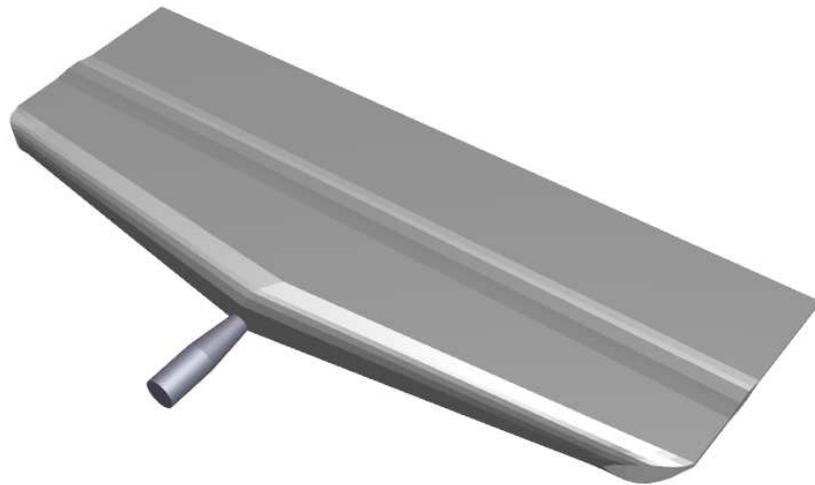
- ・材料物性 :Materialfitの適用例でご紹介した材料物性

直鎖ポリスチレン(Linear-PS) &
分岐ポリスチレン(Branch-PS)溶融体

両者は、せん断粘度が、ほぼ等しく、伸長粘度と法線応力差が大きく異なる。

動粘度(G' , G''), せん断粘度, 過渡一軸伸長粘度, 第一法線応力差をNAPLESを利用して予測。これらの情報をMaterialfitに読み込み、多モードE-PTTモデルパラメータを算出。

・有限要素解析モデル

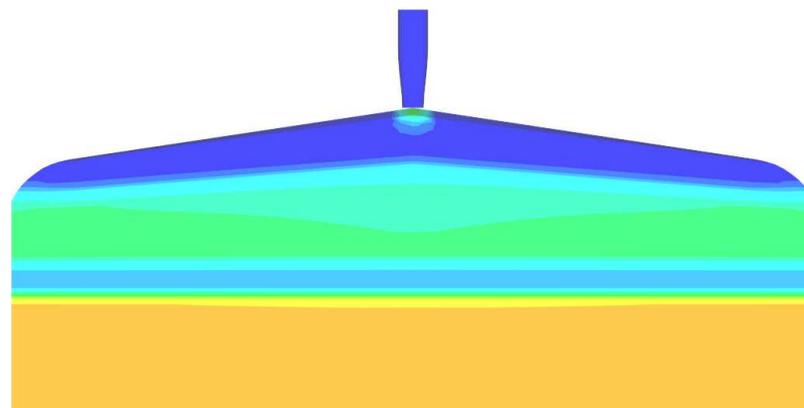


FEAモデル(Flat Simulator解析用モデル)

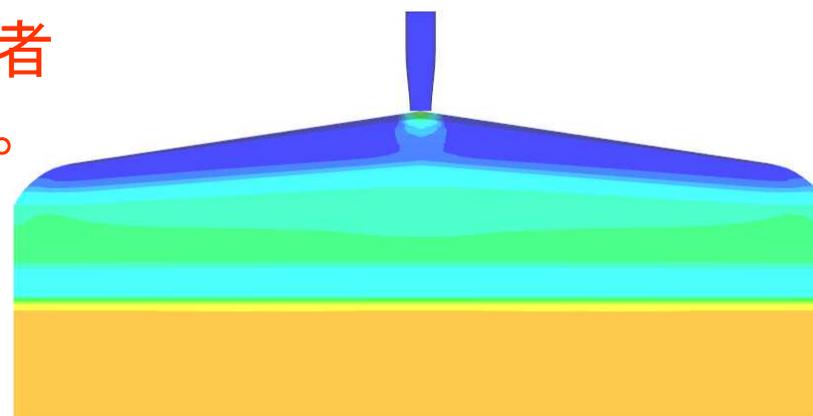
・成形(計算)条件

流量	20kg/h
流入温度	220°C
ダイ壁面温度境界条件	環境温度200°C 熱伝達係数0.3W/m ² /K

解析結果

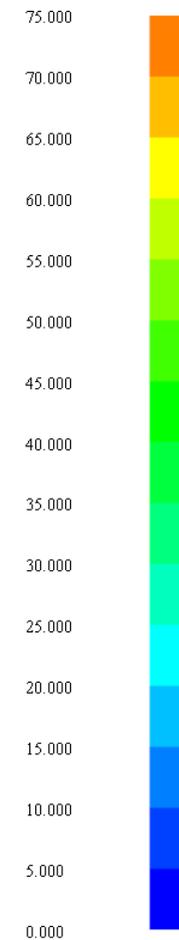


Linear-PS



Branch-PS

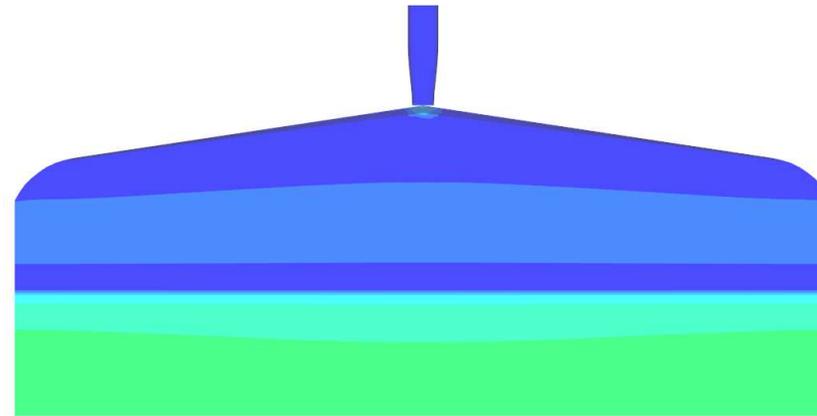
Shear stress (KPa)



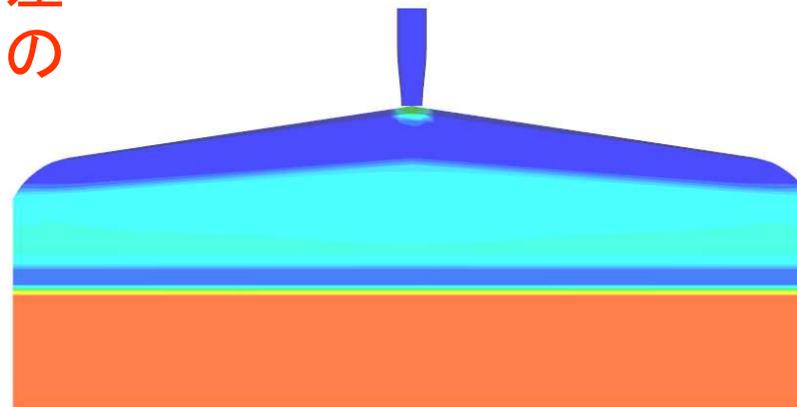
予想通り、せん断
応力分布は、両者
間でほぼ等しい。

せん断応力分布解析結果

第一法線応力差
は、Branch-PSの
方が大きい。



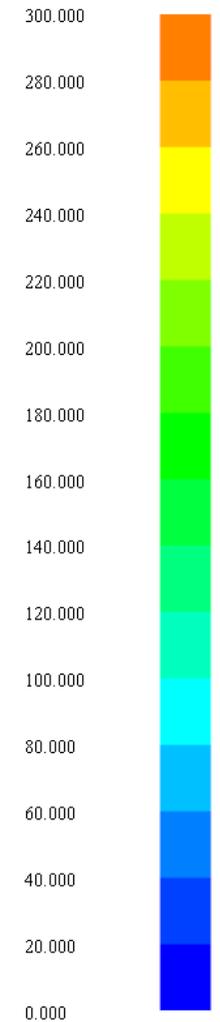
Linear-PS



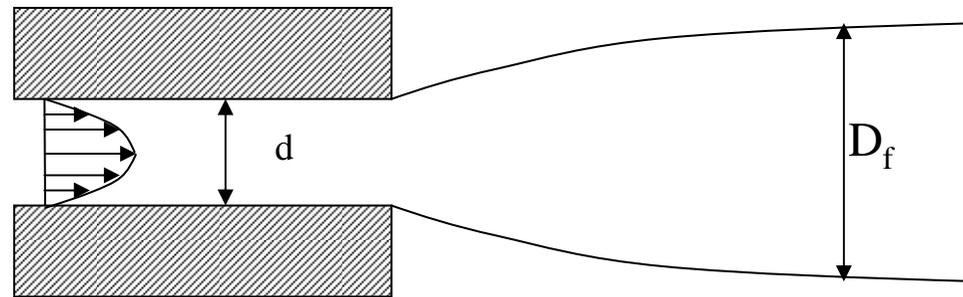
Branch-PS

第一法線応力差分布解析結果

First normal stress
difference (KPa)



せん断応力 τ と第一法線応力差 N_1 を計算することで、スウェル比の簡易予測が可能。

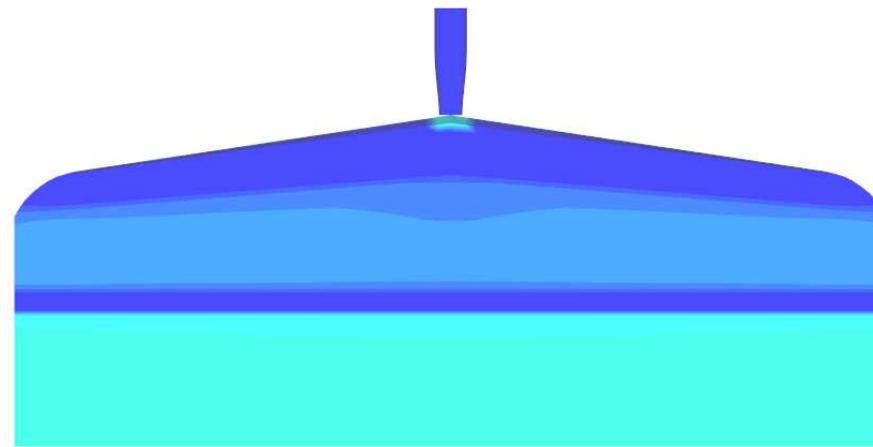


$$\chi = \frac{D_f}{d} = \left[1 + \frac{1}{12} \left(\frac{N_1}{\tau} \right)_w^2 \right]^{1/4}$$

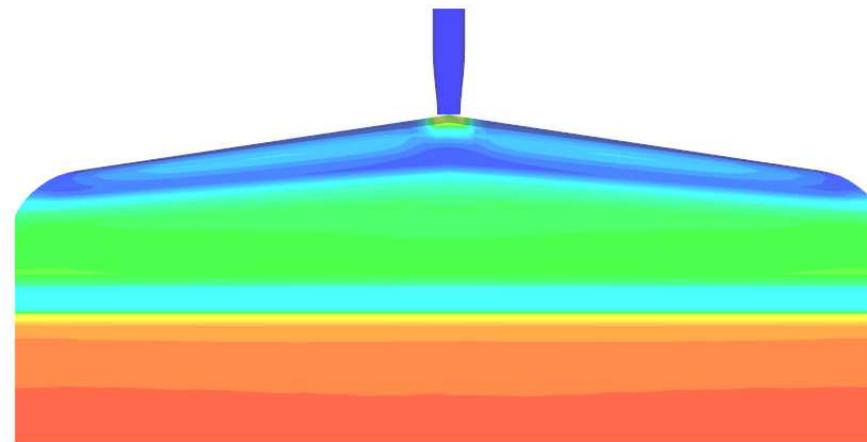
$$N_1 = \tau_{yy} - \tau_{zz},$$

$$\tau = \tau_{yz}$$

Tanner's theory



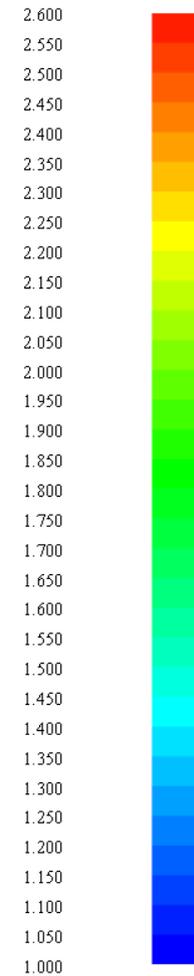
Linear-PS

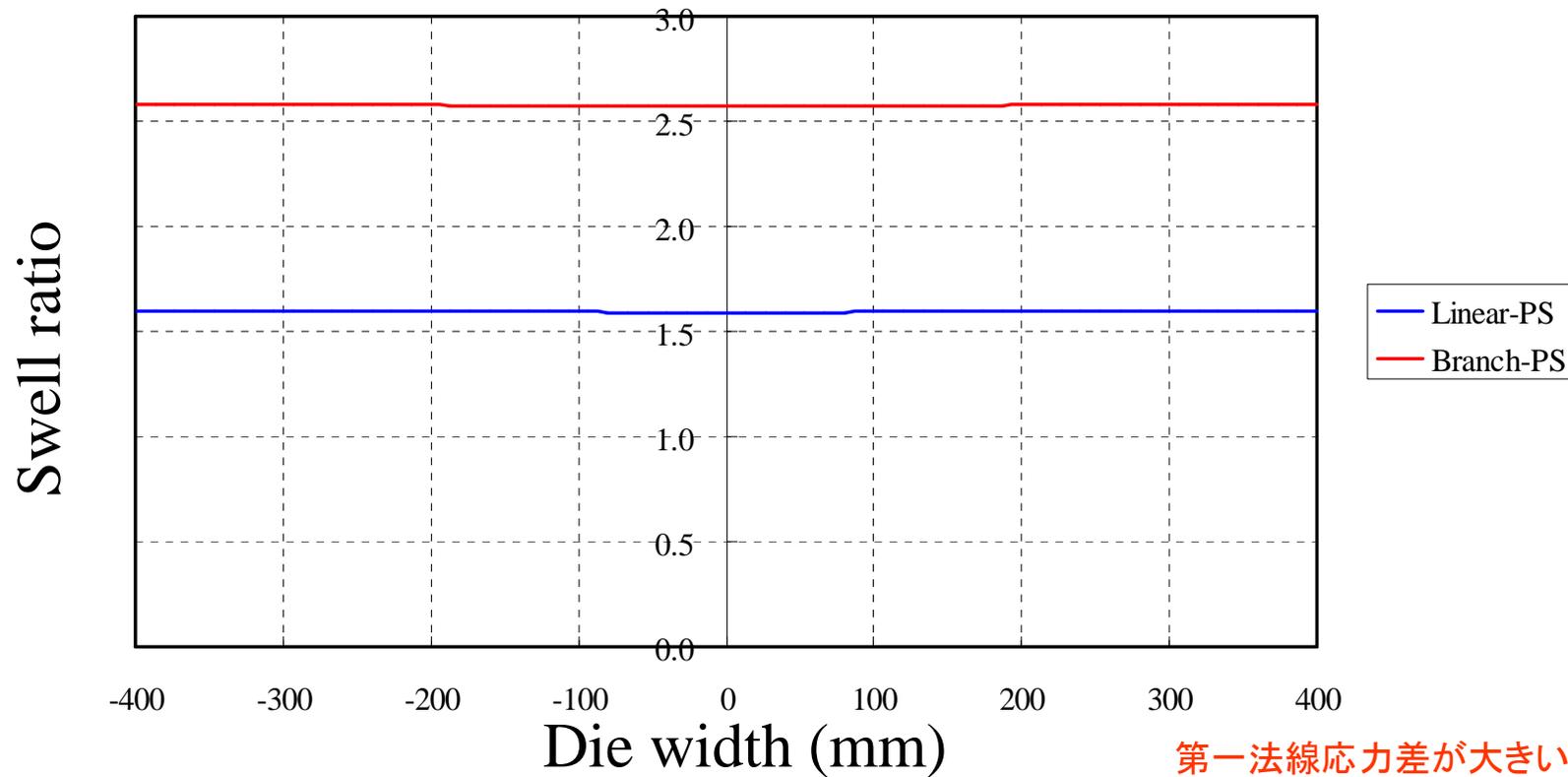


Branch-PS

スウェル比分布解析結果

Swell ratio

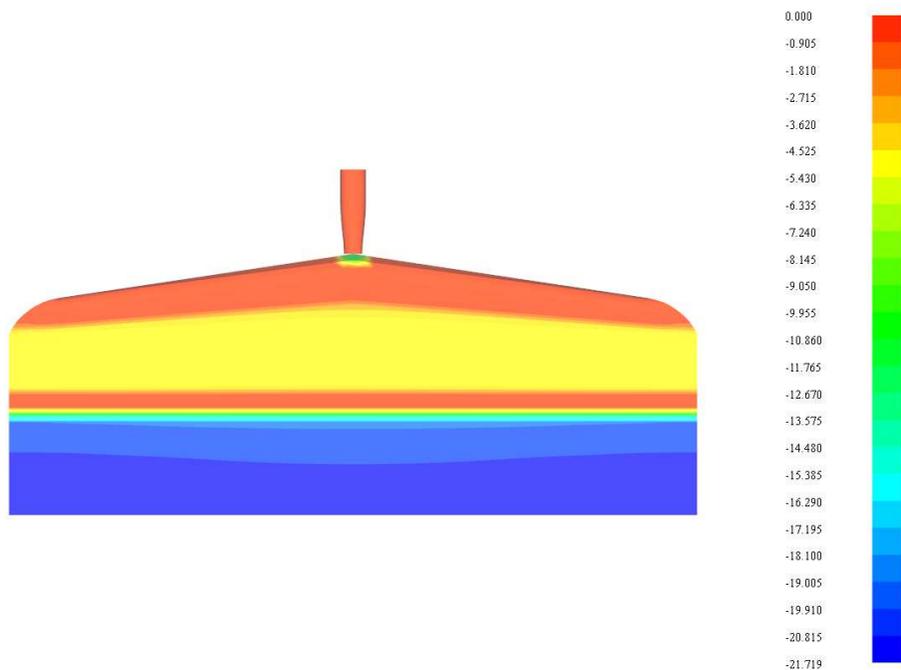




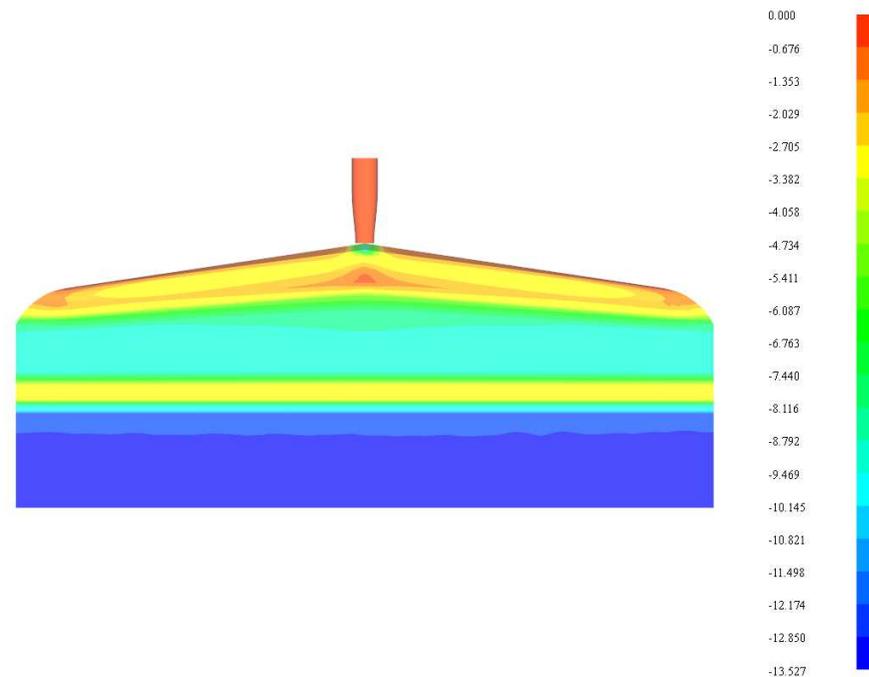
ダイリップ位置でのスウェル比
(フィルム肉厚/ダイリップクリアランス)の比較

第一法線応力差が大きいBranch-PSの方が、Linear-PSよりも大きなスウェル比を呈する。
せん断流動を定量化対象とする純粘性解析では、この差が表現できない。

Second normal stress difference (KPa)



Second normal stress difference (KPa)



第二法線応力差分布解析結果

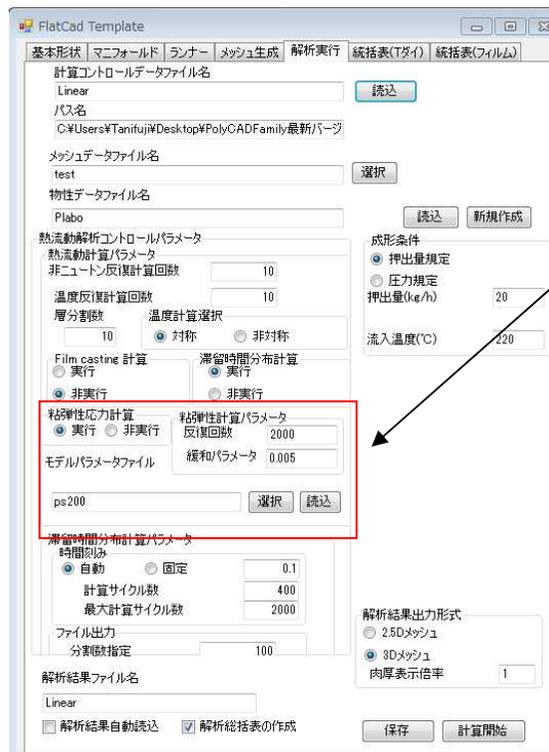
E-PTTモデルは、第二法線応力差の表現が可能(とパラメータによって第一法線応力差の比が表現される)。第二法線応力差は、多層フィルムの包み込み現象に影響を及ぼすことが知られています。

まとめ

- ・NAPLES, HASL/Materialfit, Flat Simulatorを併用し、コートハンガーダイの多階層解析を試みた。
- ・従来の非ニュートン純粘性解析では、分析できない法線応力差に関わる粘弾性効果が、容易に、且つ、低コストで定量化可能になった。
(8モードEPTTモデルを利用した当テスト解析に要した計算時間は5分以内です。)
- ・せん断応力が等しく、法線応力差の異なるLinear-PSとBranch-PSについて、コートハンガーダイで製造されるフィルム肉厚が大きく異なる可能性が示唆された。
- ・メソスケールシミュレーションで予測した情報をマクロスケールシミュレーションに受け継ぐことで、熔融樹脂のレオロジー特性と成形性の関係がシミュレーションベースで予測可能になった。

粘弾性応力計算機能の運用方法

I) Materialfitで作成した粘弾性モデルパラメータファイル
(任意名+拡張子vispara)を作業フォルダー内に準備します。



II) 計算実行タブメニューの粘弾性応力計算の入力パネルで、ラジオボタンを実行とし、粘弾性計算パラメータ(反復計算回数、緩和パラメータ)を設定し、粘弾性モデルパラメータファイル名を選択します。

III) 実行ボタンを押すと、流動解析、滞留時間の計算に次いで粘弾性応力計算が行われます。