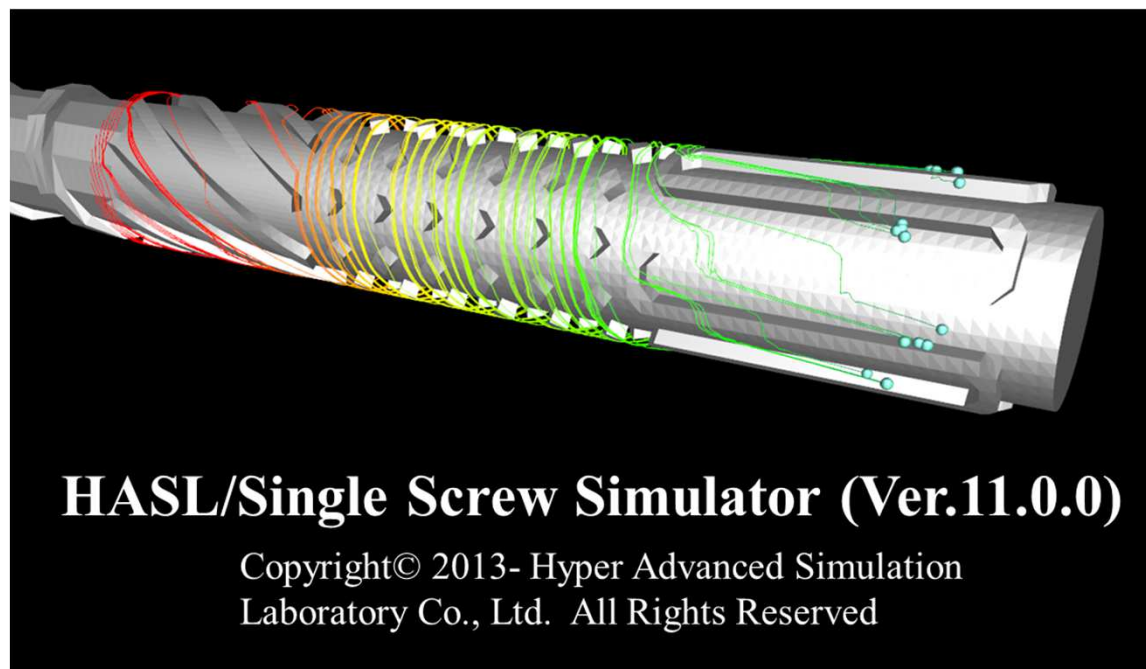


Single Screw Simulator (Ver.12.0.0)

改良成果資料



2022/11/16
株式会社HASL

○改良成果一覧

①ユーザ定義多成分移流方程式の解析機能の実装 pp.2-55

② 改良成果

- (1) 滞留時間分布(RTD)解析機能 pp.57-64
- (2) モデリング機能改良 (フライトR加工, フライト削除) pp.65-77
- (3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能 pp.78-81
- (4) 臨界せん断応力の設定 pp.82-86
- (5) 解析のリスタート機能 pp.87-93

③ SSSカスタマイズ機能(ユーザ定義ルーチン作成) p.94

詳細は以下の別資料を参照ください.

- SingleScrewSimulatorVer12.0.0(2022)カスタマイズ環境設定方法.pptx

① ユーザ定義多成分移流方程式の解析機能の実装

$$(A_i + \mathbf{u} \cdot \nabla) f_i = B_i$$

A_i, B_i : ユーザ定義任意関数 ($i=1 \sim n$)

f_i : ユーザ定義未知関数 ($i=1 \sim n$)

n : ユーザ定義方程式数

\mathbf{u} : 流速ベクトル

∇ : ナブラ演算子

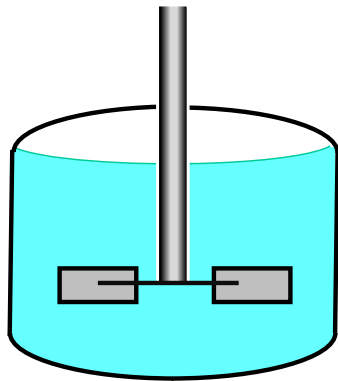
用途: 履歴情報計算, 濃度計算
滞留時間分布(RTD)計算
化学反応モデル計算(反応押出解析)
繊維破断, 液滴分裂, 溶融可塑化, etc.

① ユーザ定義移流方程式の解析機能の実装

$$\frac{Df}{Dt} = g$$

: ユーザが自由に定義可能な移流方程式
(連立偏微分方程式)

D/Dt : 物質微分(Material derivative)

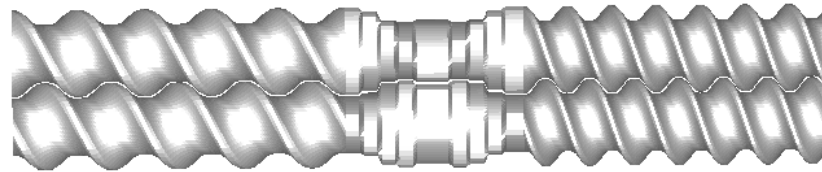


Chemical reactor

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \cancel{u \cdot \nabla f} = g$$

Uniformity

$$\nabla f = 0 \Rightarrow f(t)?$$



Screw extruder

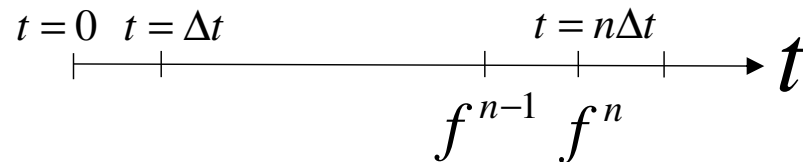
$$\frac{Df}{Dt} = \cancel{\frac{\partial f}{\partial t}} + u \cdot \nabla f = g$$

Steady state

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \Rightarrow f(z)?$$

移流方程式の離散化法

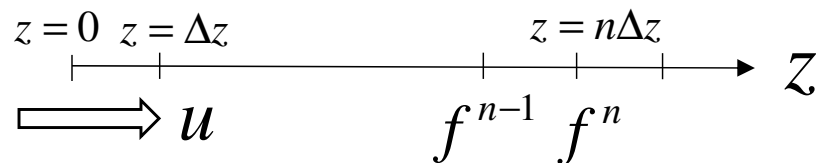
Chemical reactor $\frac{\partial f}{\partial t} = g$



Backward difference

$$\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} = g^n \Rightarrow f^n = f^{n-1} + \Delta t g^n$$

Screw extruder $u \frac{\partial f}{\partial z} = g$



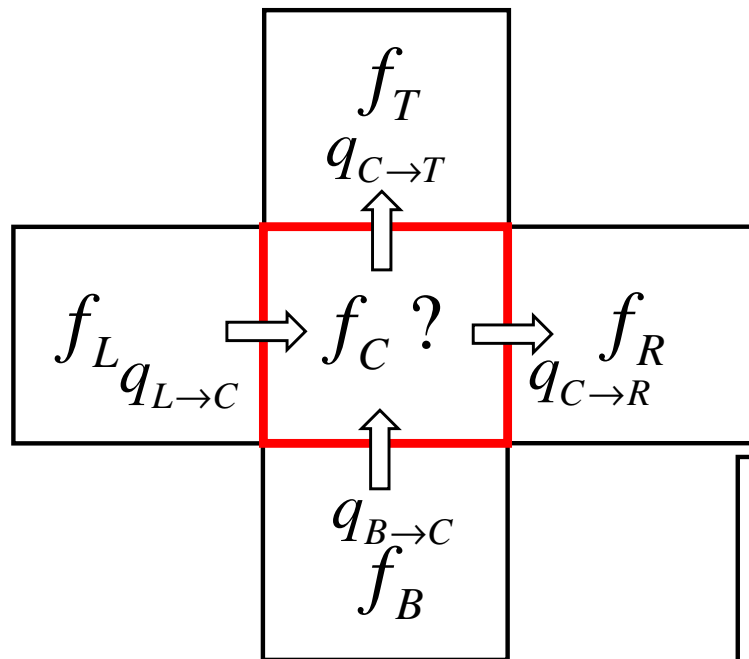
Upwind difference

$$u \frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta z} = g^n \Rightarrow f^n = f^{n-1} + \frac{\Delta z}{u} g^n$$

$$\Updownarrow \text{等価} \\ \because \Delta t = \frac{\Delta z}{u}$$

定常移流方程式の離散化式

$$\mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

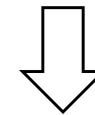


定常状態における濃度収支式
(2D 風上差分表現):

$$f_C (q_{C \rightarrow T} + q_{C \rightarrow R}) - f_L q_{L \rightarrow C} - f_B q_{B \rightarrow C} = \text{vol} \times g$$

流量収支式(非圧縮条件):

$$q_{L \rightarrow C} + q_{B \rightarrow C} = q_{C \rightarrow T} + q_{C \rightarrow R}$$



$$f_C = \frac{f_L q_{L \rightarrow C} + f_B q_{B \rightarrow C} + \text{vol} \times g}{q_{L \rightarrow C} + q_{B \rightarrow C}}$$

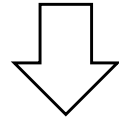
メリット: 全体系で構成された連立方程式を解くことで、濃度分布を容易に定量化可能.

デメリット: 要素分割刻み幅よりスケールの小さい濃度不均一性を表現できない。(解析結果が要素分割密度に依存)

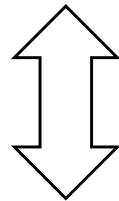
非定常移流方程式の離散化式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

後退差分 $\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f^n = g$



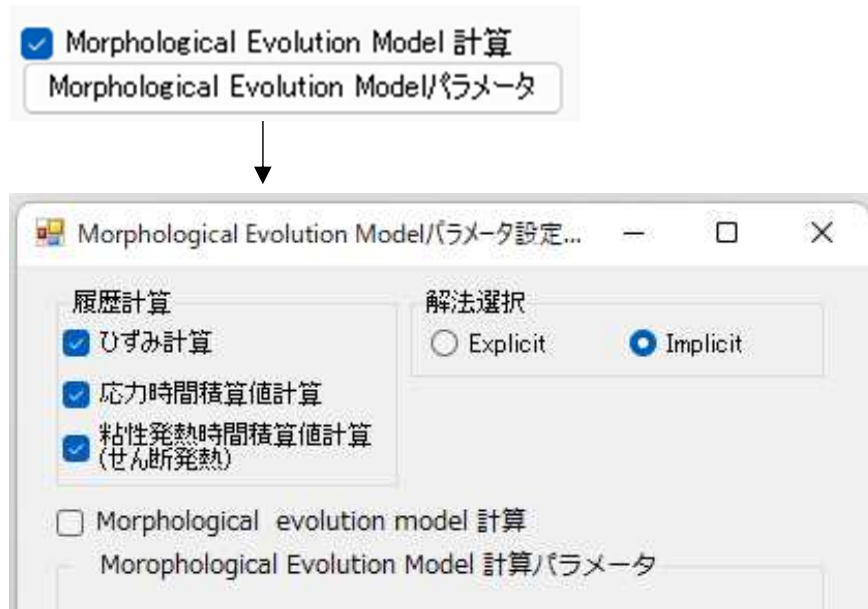
$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) f^n = g + \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$



$$(A + \mathbf{u} \cdot \nabla) f = B$$

$$A = \frac{1}{\Delta t}, B = g + \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$

履歴情報計算への活用例



○ Explicit (陽解法): 非定常移流方程式に対応

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

○ Implicit (陰解法): 定常移流方程式に対応

$$\mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

* 対象となる履歴情報に応じて, 発生項 g を以下のように定義して解析

履歴情報	発生項 g
ひずみ (歪み速度履歴)	$\dot{\gamma}$
応力履歴	$\eta \dot{\gamma}$
粘性発熱履歴	$\eta \dot{\gamma}^2$

ユーザ定義ルーチン

表1 ユーザが自由にカスタマイズ可能なサブルーチン

ユーザ定義ルーチン名	機能
1) initialsetforchem	化学反応種の初期設定及び解析条件の設定
2) viscal	粘度計算
3) tempcal	温度計算
4) chemfscal	化学反応式の左辺及び右辺荷重ベクトルの設定
5) chemvariable	化学反応成分の代数的関係式の計算
6) chemwrite	化学反応解析結果のファイル出力

コーディングシーケンス

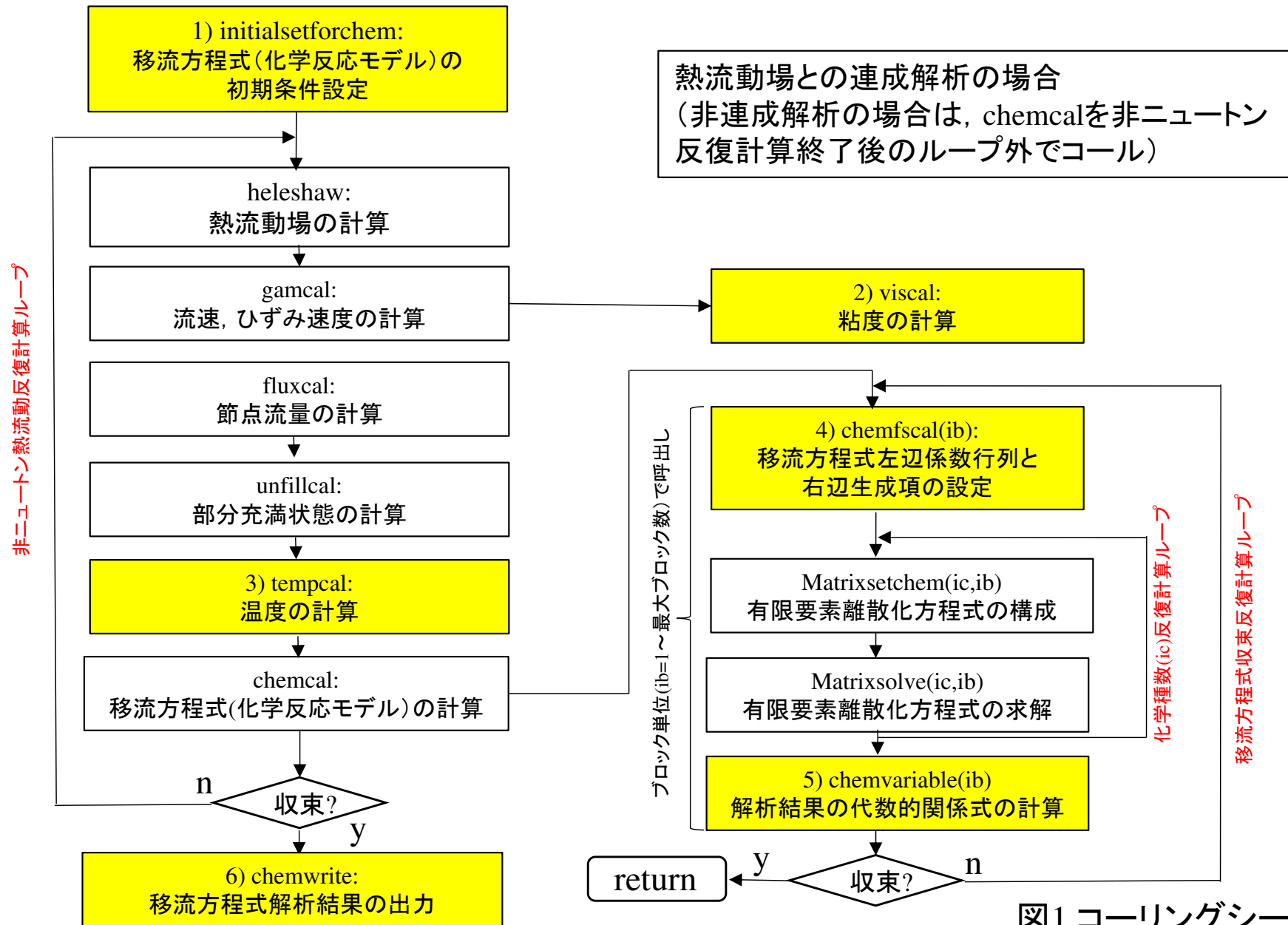


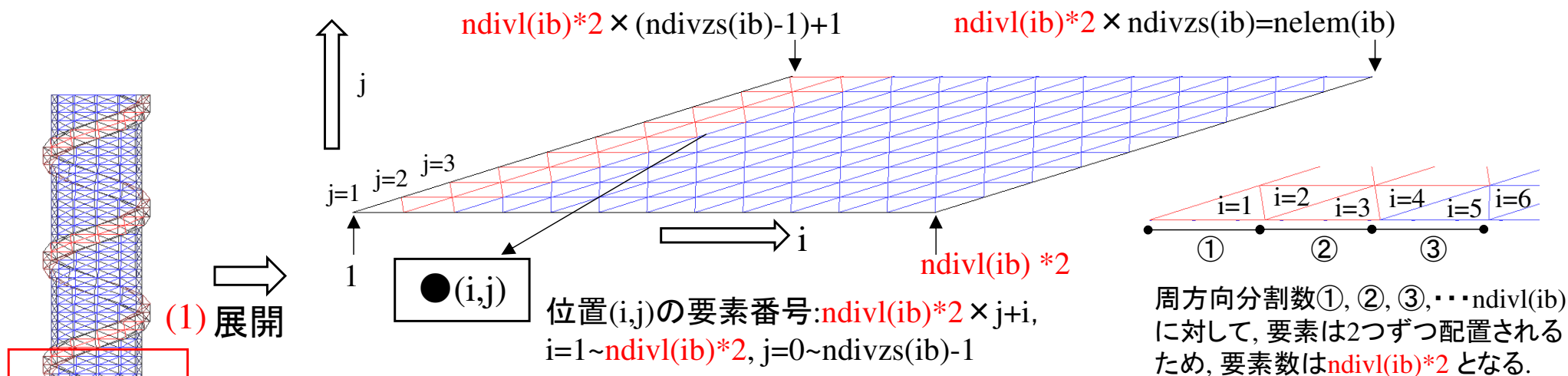
図1 コーリングシーケンス

表2 解析モデル要素情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
nelem(ib)	要素数
ndivl(ib)	周方向要素分割数
ndivzs(ib)	軸方向要素分割数
ibtype(ib)	スクリュモデル定義 (0: 標準定義, 1: 矩形領域定義)
inqc(ie,ib)	要素構成節点数 (SSSは三角形要素で構成されるため 3)
ndiv	肉厚方向の要素分割数
ientab(ie,ib)	要素ieを構成する節点番号リスト(ローカル)
entab(ientab(ie,ib),ib)	要素ieを構成する節点番号リスト(グローバル) (例) 要素ieを構成する節点番号は以下で抽出できる. entab(ientab(ie,ib)+ii-1,ib), ii=1 ~ 3(inqc(ie,ib))
height(ie,ib)	要素ieの肉厚(ie=1~nelem(ib),単位cm)
vol(ie,ib)	要素ieの体積(ie=1~nelem(ib),単位cm ³)

要素情報

(1) 標準定義(フライトあり)



(2) 矩形領域定義

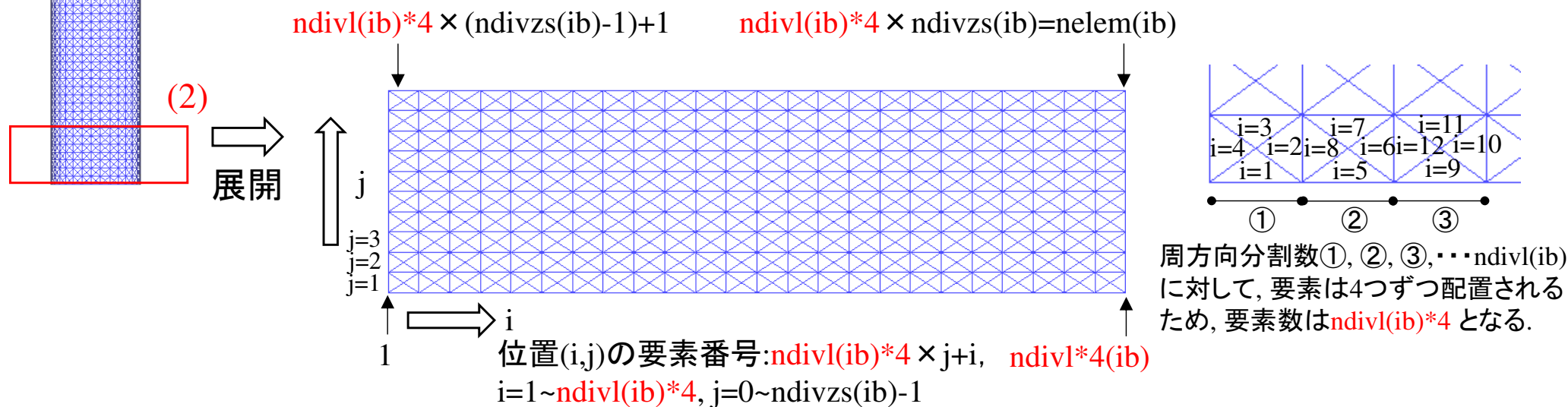
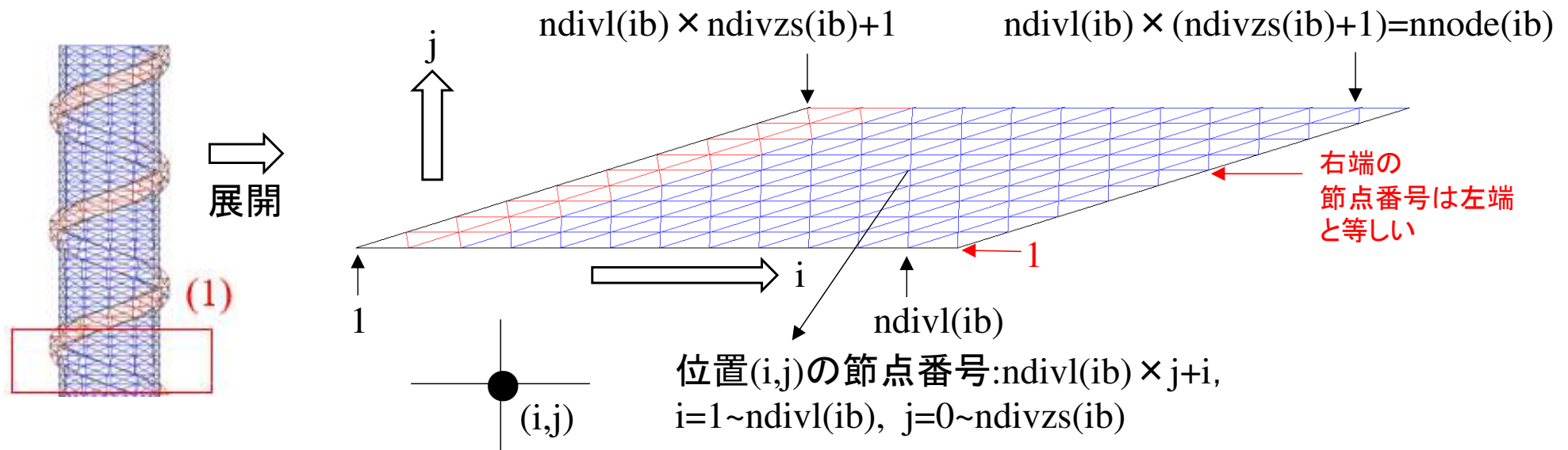


表3 解析モデル節点情報 (ib: ブロック数)

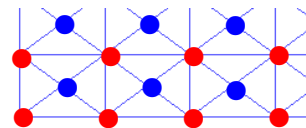
変数名	内容
nnode(ib)	節点数
xnode(in,ib),ynode(in,ib),znode(in,ib)	節点inのx,y,z座標(in=1~nnode(ib),単位cm)
nren(in,ib)	節点inを含む(隣接する)要素数
nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,1)	節点inを含む(隣接する)要素番号 (ii=1~nren(in,ib))

(1) 標準定義(フライトあり)



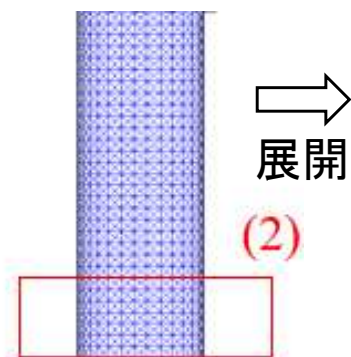
節点情報

(2) 矩形領域定義



外周節点(●)と内部節点(●)に分けて、
以下のように定義されます。

・外周節点(●)



$$\text{ndivl(ib)} \times \text{ndivzs(ib)} + 1$$

j=3
j=2
j=1

1

(i,j)

位置(i,j)の節点番号: $\text{ndivl(ib)} \times j + i$,
 $i=1 \sim \text{ndivl(ib)}$, $j=0 \sim \text{ndivzs(ib)}$

外周節点の総数
 $\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1)$

右端の
節点番号は左端
と等しい

1

ndivl(ib)

・内部節点(●)

$$\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1) + \text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} - 1) + 1$$

外周節点の総数

内部節点の総数

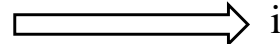
$$\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1) + \text{ndivl(ib)} \times \text{ndivzs(ib)} = \text{nnode(ib)}$$

位置(i,j)の節点番号:
 $\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1)$
 $+ \text{ndivl(ib)} \times j + i$,
 $i=1 \sim \text{ndivl(ib)}$, $j=1 \sim \text{ndivzs(ib)}$



j=3
j=2
j=1

$$\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1) + 1$$



$$\text{ndivl(ib)} \times (\text{ndivzs(ib)} + 1) + \text{ndivl(ib)}$$

表4 境界条件,成形条件情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
tempinlet	流入温度(°C)
pprescribedinlet	流入口設定圧力(MPa)
pprescribed	流出口圧力(MPa)
qprescribed	押出量(kg/h)
flowrateinlet	流入口設定流量(cc/s)
rpm	スクリュ回転数(rpm)
href(1,ie,ib)	要素ieのスクリュ面熱伝達係数(W/cm ² /K)
tbound(1,ie,ib)	要素ieのスクリュ面境界温度(°C)
href(2,ie,ib)	要素ieのバレル面熱伝達係数(W/cm ² /K)
tbound(2,ie,ib)	要素ieのバレル面境界温度(°C)
iboundt(in,ib)	節点inの温度境界条件(0:拘束, 非0:自由)
ibound(in,ib)	節点inの圧力境界条件(0:拘束, 非0:自由)

表5 物性情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
rhoh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の密度(g/cm ³)
cph(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の比熱(J/g/K)
vish(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の粘度(Pa・s)

i=1 : スクリュ表面, i=ndiv+1 : バレル表面

表6 解析結果要素情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
temh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の温度(°C)
gam(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)のひずみ速度(J/g/K)
uh(i,ie,ib),vh(i,ie,ib),wh(i,ie,ib)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の流速ベクトル成分(cm/s)
tempe(ie,ib)	要素ieの温度
fille(ie,ib)	要素ieの充満率
filleavb(ie,ib)	要素ieの平均充満率(濃度計算用)

表7 解析結果節点情報 (ib: ブロック数)

変数名	内容
pres(in,ib)	節点inの圧力(Pa)
temp(in,ib)	節点inの温度(°C)
visn(in,ib)	節点inの粘度(Pa・s)
gamn(in,ib)	節点inのひずみ速度(s ⁻¹)

表8 ユーザ定義変数 (ib: ブロック数)

変数名	内容
chemcnumber	解析対象とする移流方程式の本数(化学種数)
chemvnumber	解析で考慮する配列変数の数
commonvnumber	ルーチン間で共用するスカラー変数の数
chemcname(i)	化学種の名称 (i=1~chemcnumber)
chemvname(i)	配列変数の名称 (i=1~chemvnumber)
chemc(i,ie,ib)	化学種の要素濃度 (i=1~chemcnumber, ie=1~nelem(ib))
chemcn(i,in,ib)	化学種の節点濃度 (i=1~chemcnumber, ie=1~nelem(ib))
chempar(i,ie,ib)	化学種依存の要素変数 (i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(ib))
chemparn(i,in,ib)	化学種依存の節点変数 (i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(ib))
commonvpar(i)	ルーチン間で共用するスカラー変数 (i=1~commonvnumber)

ユーザ定義ルーチンの利用方法

- 1) 公開されているソースコードを用途向きに書き直す.
- 2) Fortran compiler を利用して, 実行ファイルSingleScrewSimulator.exe 作成.
- 3) 実行ファイルSingleScrewSimulator.exe を¥bin¥x86¥Systemフォルダーにコピー.
- 4) GUIに新しく設けられた, ユーザ定義解析タブ内のユーザ定義ルーチンをチェック状態にする.
- 5) 従来通りの方法に従ってプログラムを実行.

4)

☐ ユーザ定義ルーチン／RTD解析 (デフォルト) ← チェック状態とするとユーザ定義ルーチンをコール

☐ 熱流動解析との連成 ← チェック状態 : 熱流動解析との連成 (各非ニュートン反復計算毎にコール)
非チェック状態 : 熱流動解析と非連成 (熱流動解析後にコール)

計算パラメータ

反復計算回数	20	← ユーザが定義した連立非線形偏微分方程式の反復収束計算回数 (線形の場合は1)
反復計算の緩和係数	1.0	← 反復収束計算の緩和係数 (0.0~1.0)
マトリクスソルバ反復計算回数	50000	← 離散化方程式の反復法マトリックスソルバー (Gauss-Seidel法) の最大反復計算回数
マトリクスソルバの収束基準値	1.0E-06	← 反復法マトリックスソルバーの反復計算終了基準値 ε
RTD解析の時間刻み	0.2	

$$\frac{\|Ax - B\|}{\|B\|} \leq \varepsilon \rightarrow \text{反復計算終了}$$

* ユーザ定義ルーチンの解析対象は, 1ブロック (熱流動解析開始) 以降になります.

ユーザ定義ルーチンの利用例紹介

① 濃度計算／定常移流方程式 pp.20-24

② 滞留時間(RTD)計算／非定常移流方程式 pp.25-32

*標準解析機能として実装 (p.57～)

③ 化学反応モデル計算(反応押出解析) pp.33-55
／非定常移流方程式 & 熱流動場連成解析

◎ ポリプロピレン(PP)の反応押出解析の事例紹介

* 当事例の化学反応モデルおよび検証内容の詳細については,
TwinScrewSimulator Ver.9.0.0 改良成果資料 および 成果報告会動画を参照ください。
(当社ウェブサイトにて一般公開)



ユーザ定義ルーチンの利用例紹介

① 濃度計算

$$\mathbf{u} \cdot \nabla f = 0$$

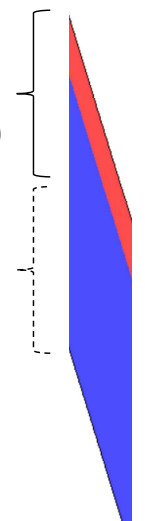
f : Concentration [-]

流入口境界例

スクリュ入口の周方向半分に
濃度を設定(流量で重み付け,
均一化した場合に $f = 0.5$ に漸近)

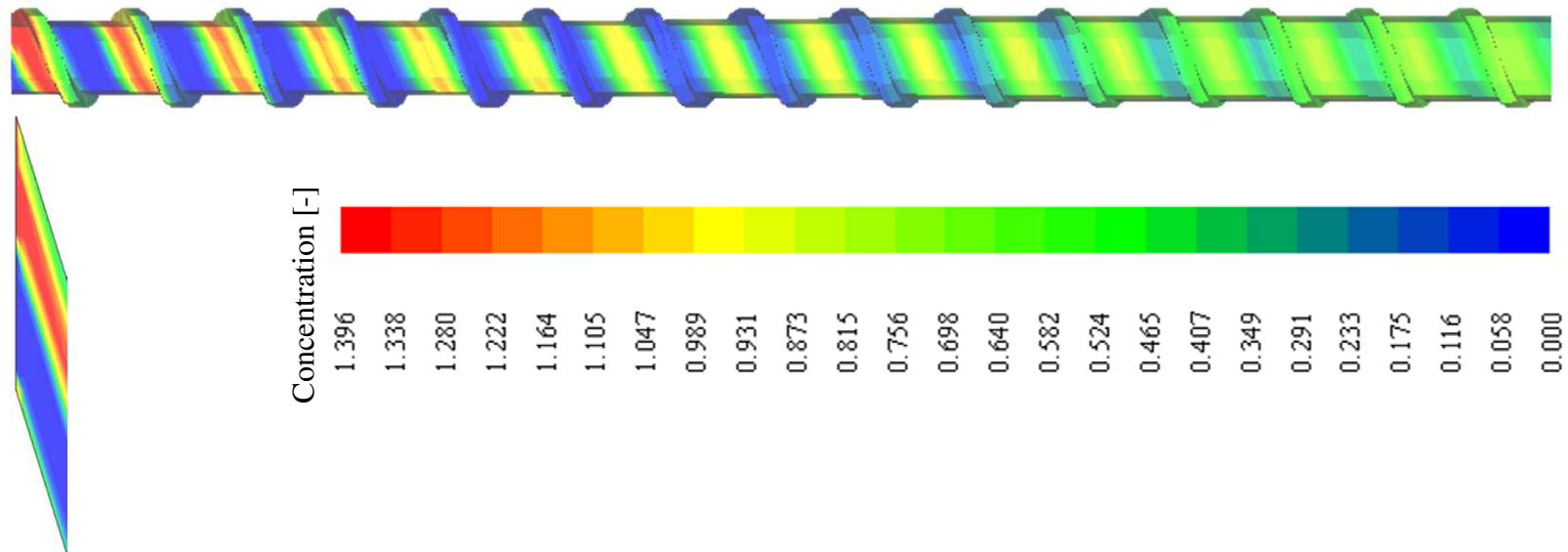
残りの周方向半分は濃度0 設定

展開図



解析結果例

⇒ Flow direction



サンプルプログラム

① 濃度計算(フォルダ名:conc)

Initialsetforchem の内容

```
c+++++
c+   User define variable number
c+++++
c
c   Number of chemical species
c   chemcnumber=1 ← 単一成分濃度
c
c   Number of chemical variable
c   chemvnumber=0
c
c   Number of common variable
c   commonvnumber=0
c+++++
```

```
c+++++
c   User define initial/boundary condition
c+++++
c   chemcname(1)='test sample 1' ← ポストタイトル
c
c   do ib=1,iblock ← 全ブロックに設定
c
c   do ie=1,nelem(ib) } ← 要素濃度の初期設定
c   chemc(1,ie,ib)=0.0
c   end do
c
c   do in=1,nnode(ib) } ← 節点濃度の初期設定
c   chemcn(1,in,ib)=0.0
c   end do
c
c   if(ib.eq.1) then ← 1ブロック目に流入境界条件を設定
c
c   qsumtotal=0.0
c   do in=1,ndivl(ib) } ← 流入口に設定されている全流量の計算
c   qsumtotal=qsumtotal+qfluxb(in,ib)
c   end do
c
c   qsumhalf=0.0
c   do in=1,ndivl(ib)/2 } ← 流入口境界 (in=1~iinletnodelist/2)
c   qsumhalf=qsumhalf+qfluxb(in,ib) } ← の半領域に設定されている流量の計算
c   end do
c
c   do ii=1,ndivl(ib)/2 } ← 流入口境界 (in=1~iinletnodelist/2)
c   chemcn(1,ii,ib)=0.5*qsumtotal/qsumhalf } ← の半領域に濃度を設定, 残りの半領域の濃度は0
c   end do } (当設定によって濃度平均値は0.5に漸近)
c
c   end if
c
c   end do
c+++++
```

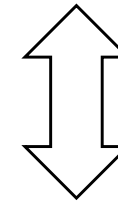
chemfscal の内容

subroutine chemfscal(ib) ← ブロック毎に呼出される

```
c+++++
c+  User define left hand side coefficient & right hand source
c+++++
c  do ie=1,nlem(ib)
c
c    chemf(1,ie,ib)=0.0
c    chems(1,ie,ib)=0.0
c
c  end do
c+++++
```

← 比較

$$\mathbf{u} \cdot \nabla f = 0$$



$$(A_i + \mathbf{u} \cdot \nabla) f_i = B_i$$

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$(chemf(ic,ie,ib) + \mathbf{u} \cdot \nabla) f(ic,ie,ib) = chems(ic,ie,ib)$$

$$ic=1, f(1,ie)=chemc(1,ie,ib)$$

$$chemf(1,ie,ib)=0.0$$

$$chems(1,ie,ib)=0.0$$

A_i, B_i : ユーザ定義任意関数 ($i=1 \sim n$)

f_i : ユーザ定義未知関数 ($i=1 \sim n$)

n : ユーザ定義方程式数

\mathbf{u} : 流速ベクトル

∇ : ナブラ演算子

User define model タブメニューの設定

Single Screw Simulator Template

スクリュ形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統括表 ユーザ定義解析

☒ ユーザ定義ルーチンの利用/RTD解析 (デフォルト) ← ユーザ定義ルーチンのコール

☐ 熱流動解析との連成 ← 当濃度計算は、熱流動解析に影響を及ぼさないため、非連成 (チェックボックスを非チェック)

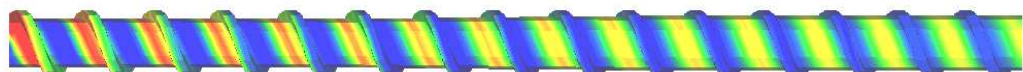
計算パラメータ

反復計算回数	1	← 線形方程式の定常解析では、反復計算を要しないため 1 に設定
反復計算の緩和係数	1	
マトリクスソルバ反復計算回数	50000	
マトリクスソルバの収束基準値	1E-06	
RTD解析の時間刻み	0.2	

解析結果例：スクリュ回転数が濃度分布に与える影響比較

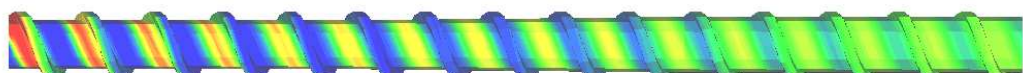
- ・スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=15 (571.5 mm), 2ブロック構成
- ・解析条件(共通): 流量規定 5cm³/sec, 入口圧力 0.001MPa
- ・樹脂データ: Newton流体 (1000 Pa・s)

条件1: スクリュ回転数 30 rpm

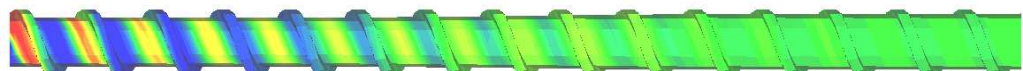


→ Flow direction

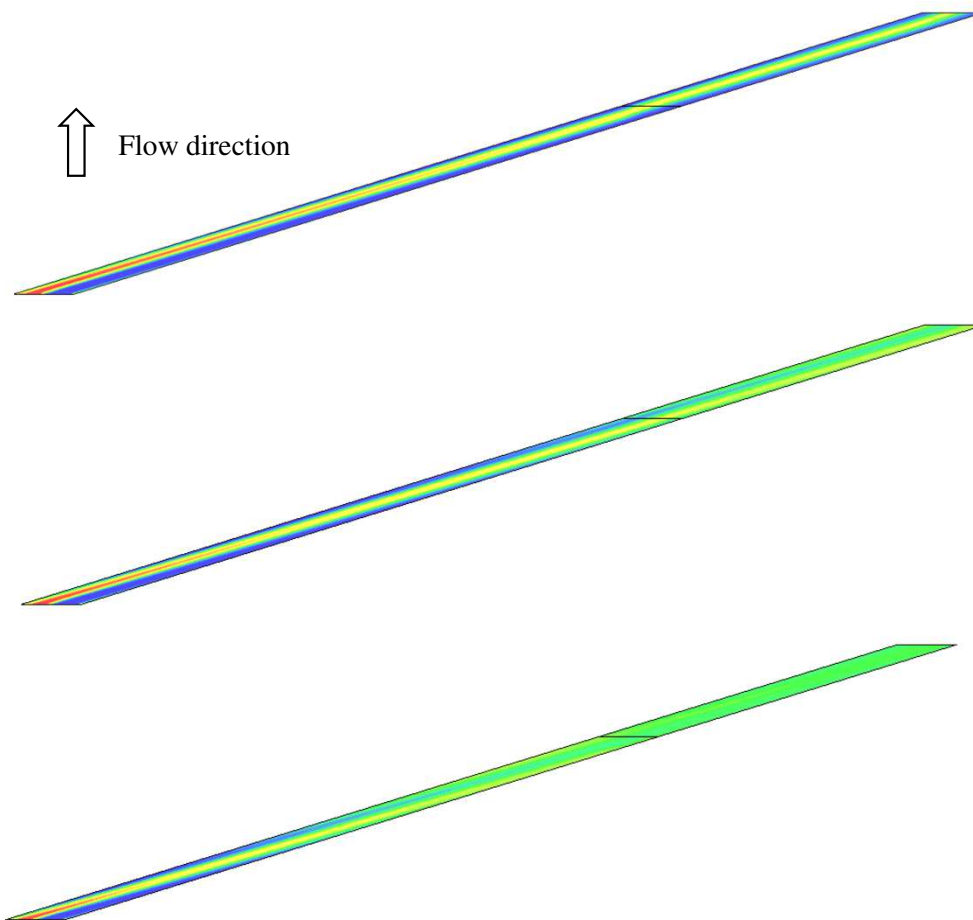
条件2: スクリュ回転数 60 rpm



条件3: スクリュ回転数 120 rpm



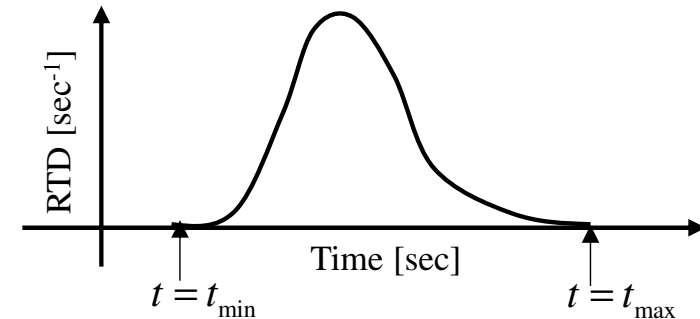
1.396 1.338 1.280 1.222 1.164 1.105 1.047 0.989 0.931 0.873 0.815 0.756 0.698 0.640 0.582 0.524 0.465 0.407 0.349 0.291 0.233 0.175 0.116 0.058 0.000



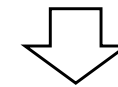
濃度分布予測結果 (プロジェクト名: conc_**)

② 滞留時間分布(RTD : Residence Time Distribution)の計算

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \nabla f = 0$$



$$f_{out}(t) = f_{in} \int_0^t RTD(t) dt$$

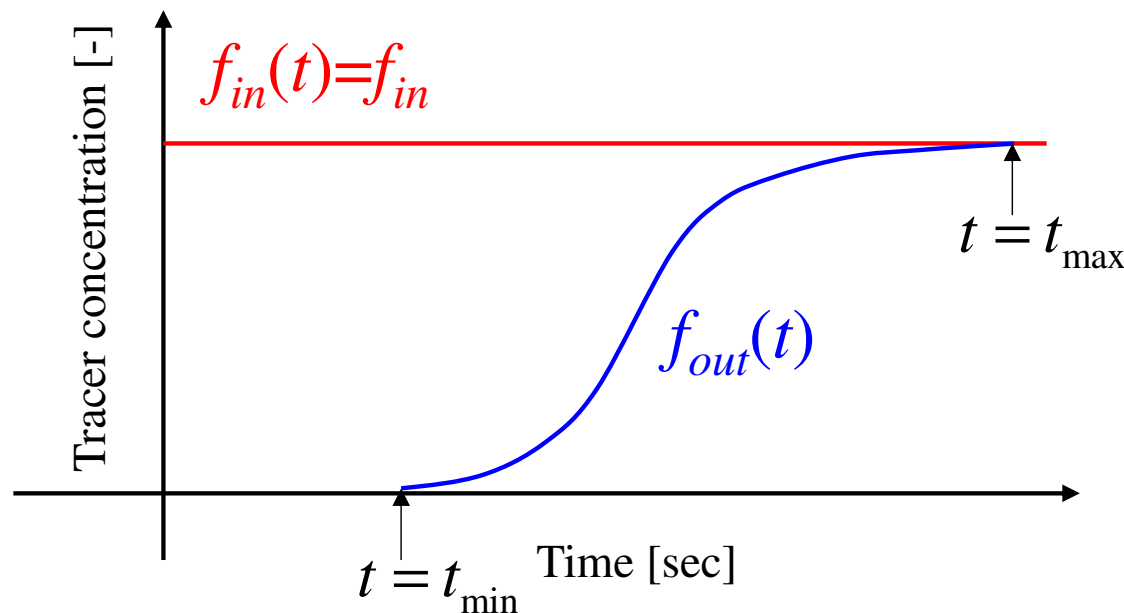


$$RTD(t) = \frac{1}{f_{in}} \frac{df_{out}(t)}{dt}$$

$$\int_{t_{min}}^{t_{max}} RTD(t) dt = 1$$

$$\because f_{out}(t_{max}) = f_{in}$$

$$\langle t_{res} \rangle = \int_{t_{min}}^{t_{max}} t \times RTD(t) dt$$



② 滞留時間分布(RTD)計算(フォルダ名:rtd)

Initialsetforchem の内容

```
c+++++
c+  User define variable number
c+++++
c   Number of chemical species
c   chemcnnumber=1 ← 単一成分濃度
c   Number of chemical variable
c   chemvnumber=0
c
c   Number of common variable ← 非定常計算刻みとシミュレ
c   commonvnumber=2 ← シュレーション時間として利用する
c                           変数の数
c+++++
```

各種配列変数のダイナミックアロケーション (ユーザ定義不要の固定構文)



```
c
c   Definition of common number variable
c
c   commonvpar(1)=rtdtime ← 時間刻み:0.2 sec, GUIから入力可能
c   commonvpar(2)=0.0 ← シミュレーション時刻
```

```
c+++++
c   User define initial/boundary condition
c+++++
c   chemcname(1)='test sample 1' ← ポストタイトル
c
c   do ib=1,iblock ← 全ブロックに設定
c
c   do ie=1,nelem(ib)
c   chemc(1,ie,ib)=0.0 } ← 要素濃度の初期設定
c   end do
c
c   do in=1,nnode(ib)
c   chemcn(1,in,ib)=0.0 } ← 節点濃度の初期設定
c   end do
c
c   if(ib.eq.1) then ← 1ブロック目を指定
c
c   do ii=1,ndivl(ib)
c   chemcn(1,ii,ib)=1.0 } ← 流入口に配置された節
c   end do                点に対する境界条件
c                           (濃度:1) の設定
c   end if
c
c   end do
c+++++
```

chemfsal の内容

subroutine chemfsal(ib) ← ブロック毎に呼出される

```

C+++++
C+   User define left hand side coefficient & right hand source
C+++++
      do ie=1,nelem(ib)
C
C→  chemf(1,ie,ib)=1.0/commonvpar(1)
      chems(1,ie,ib)=chemc(1,ie,ib)/commonvpar(1) ←
C
      end do
C+++++

```

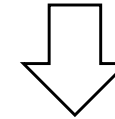
$ic=1, f(1,ie,ib)=chemc(1,ie,ib), \Delta t=commonvpar(1)$

$chemf(1,ie,ib)=1/\Delta t=1/commonvpar(1)$

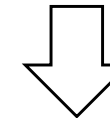
$chems(1,ie,ib)=f^{n-1}/\Delta t=chemc(1,ie,ib)/commonvpar(1)$

後退差分

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = 0$$

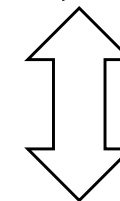


$$\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f^n = 0$$



$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) f^n = \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$

比較



TSSが解析対象とする移流方程式:

$$(\text{chemf}(ic,ie,ib) + \mathbf{u} \cdot \nabla) f(ic,ie,ib) = \text{chems}(ic,ie,ib)$$

chemvariable の内容

subroutine chemvariable(ib) ← ブロック毎に呼出される

```

volout=0.0
csum=0.0
iz=ndivzs(ib)-4 ← 流出口境界条件の影響を緩和するための境界層数: 4

```

```

if(ibtype(ib).eq.0) then ← ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合

```

```

  do i=1,2*ndivl(ib) ← 周方向要素数分のループ
    ie=i+iz*2*ndivl(ib) ← 流出口境界位置の要素番号に変換
    volout=volout+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)
    csum=csum+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc(1,ie,ib)
  end do

```

```

else ← ブロック ib のスクリュメッシュが矩形領域定義の場合

```

```

  do i=1,4*ndivl(ib) ← 周方向要素数分のループ
    ie=i+iz*4*ndivl(ib) ← 流出口境界位置の要素番号に変換
    volout=volout+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)
    csum=csum+filleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc(1,ie,ib)
  end do

```

```

end if

```

流出口境界で計算される濃度の周方向体積重み付け
 平均値: $csum/volsum$ の計算

filleavb(ie,ib): ブロックibの要素ieの充満率

vol(ie,ib): ブロックibの要素ieの体積

chemc(1,ie,ib): ブロックibの要素ieの濃度

$$volsum = \sum_{ie=ns}^{ne} filleavb(ie,ib) * vol(ie,ib)$$

$$csum = \sum_{ie=ns}^{ne} filleavb(ie,ib) * vol(ie,ib) * chemc(1,ie,ib)$$

スクリュ形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状

ブロック数

削除対象番号

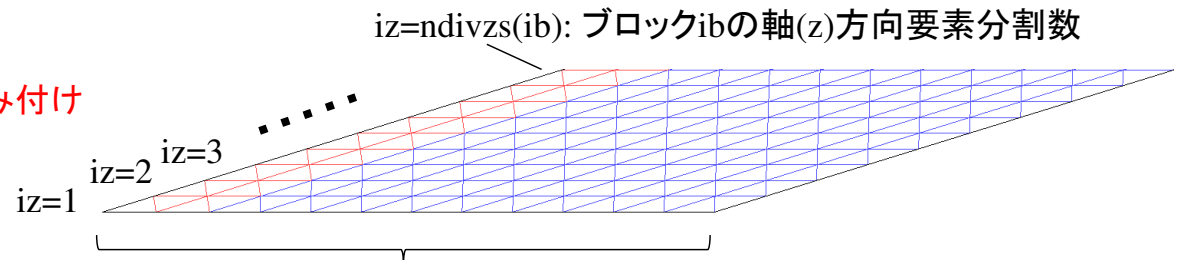
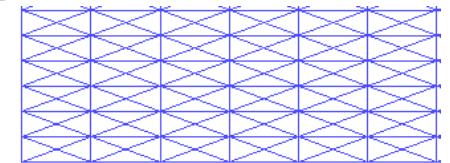
パレル直径 mm

スクリュ形状基本パラメータ

ゾーン数

フライト幅方向分割数

☐ 矩形領域定義 ☐ 逆ねじ



ndivl(ib): ブロックibの周方向要素分割数

標準定義の場合(ibtype(ib)=0), 周方向要素数は $2*ndivl(ib)$

矩形領域定義の場合(ibtype(ib)=1), 周方向要素数は $4*ndivl(ib)$

chemvariable の内容(続き)

```
if(ib.eq.1) then  
commonvpar(2)=commonvpar(2)+commonvpar(1)  
end if
```

1ブロック目の場合
 $t=t+\Delta t$

```
if(ib.eq.iblock) then  
write(99,*) ib,',',commonvpar(2),',',csum/volout  
end if
```

スクリュモデルの最終ブロック(iblock)の場合

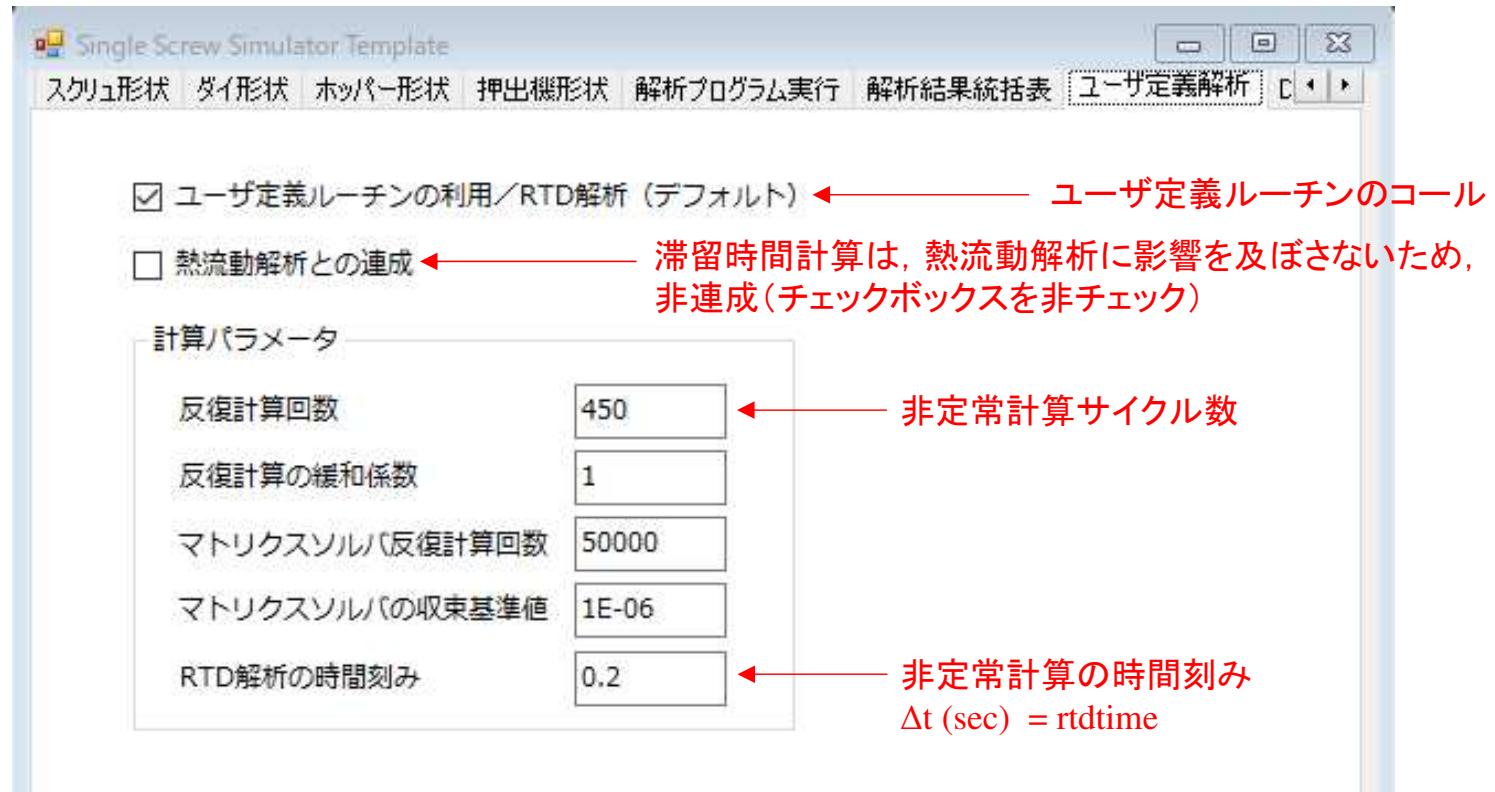
```
write(*,*) ib,',',commonvpar(2),',',csum/volout
```

実行ウィンドウ(出力番号:*)へのシミュレーション時刻と流出口平均濃度のエコープリント

cheminf ファイル (出力番号:99)へのシミュレーション時刻と流出口平均濃度のエコープリント

cheminf ファイルの出力内容は, 解析終了後に解析結果ファイル名.rtd に自動コピーされます.

User define model タブメニューの設定



* 解析事例の詳細は、p.57～を参照ください。

SSS出力ファイル

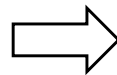
(xxx.rtd, xxx:プロジェクト名; rtd**)

File Edit Format View Help

rtd_straight.rtd - メモ帳

3	0.2000000	0.0000000E+00
3	0.4000000	0.0000000E+00
3	0.6000000	0.0000000E+00
3	0.8000000	1.4012985E-45
3	1.0000000	1.8216880E-44
3	1.2000000	2.9427268E-43
3	1.4000000	3.9698785E-42
3	1.6000000	4.6304506E-41
3	1.8000000	4.7561331E-40
3	2.0000000	4.3710381E-39
3	2.2000000	3.6392262E-38
3	2.4000000	2.7726071E-37
3	2.6000000	1.9490346E-36
3	2.8000000	1.2729759E-35
3	3.0000000	7.7706462E-35
3	3.200001	4.4559510E-34
3	3.400001	2.4109729E-33
3	3.600001	1.2356626E-32
3	3.800001	6.0194333E-32
3	4.000000	2.7956876E-31
3	4.200000	1.2413390E-30
3	4.400000	5.2824407E-30
3	4.600000	2.1592047E-29
3	4.800000	8.4947955E-29
3	5.000000	3.2227038E-28
3	5.199999	1.1809667E-27

コンマ区切りで
エクセルに読み込み



流出口(スクリュ出口)
のブロック番号

シミュレーション時刻

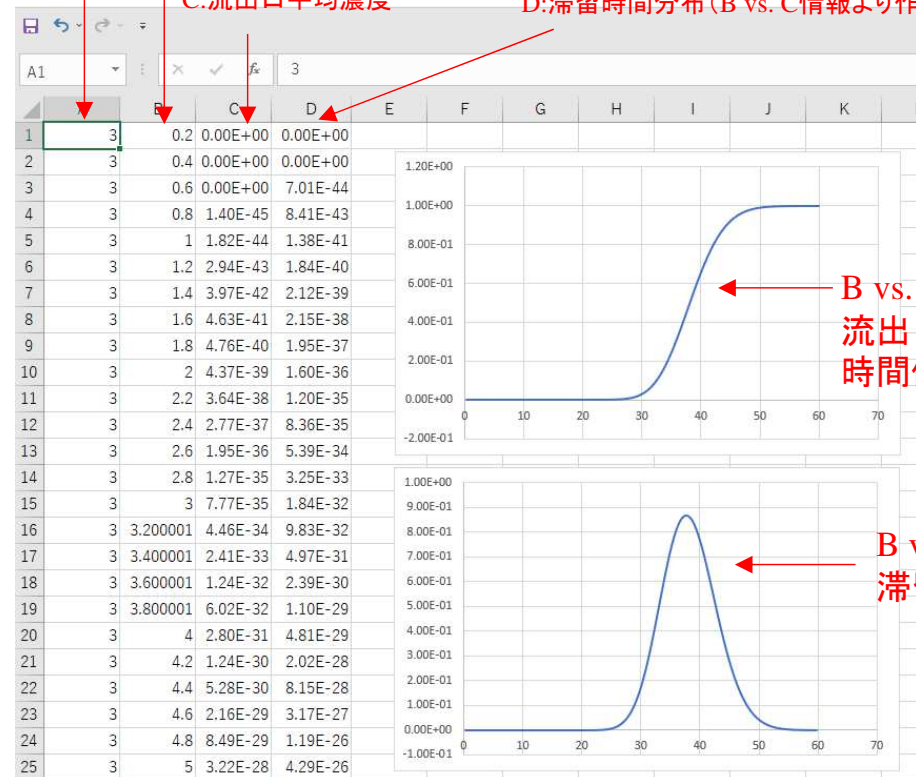
流出口平均濃度

A:流出口(スクリュ出口)のブロック番号

B:シミュレーション時刻

C:流出口平均濃度

D:滞留時間分布(B vs. C情報より作成)



B vs. C :
流出口平均濃度の
時間依存性

B vs. D :
滞留時間分布

滞留時間分布情報の作成方法

1) Dカラムの1行目に数式 $=(C2-C1)/0.2$ を入力してリターンキーを押す. ((C2-C1)/計算時間刻み: $\Delta t=0.2$ の場合)

	A	B	C	D	E
1	3	0.2	0.00E+00	0.2	
2	3	0.4	0.00E+00		
3	3	0.6	0.00E+00		
4	3	0.8	1.40E-45		
5	3	1	1.82E-44		
6	3	1.2	2.94E-43		
7	3	1.4	3.97E-42		

2) Dカラムの1行目をマウスクリックし, マウス右ボタンを押してコピーを選択.

A	B	C	D
3	0.2	0.00E+00	0.00E+00
3	0.4	0.00E+00	
3	0.6	0.00E+00	
3	0.8	1.40E-45	
3	1	1.82E-44	
3	1.2	2.94E-43	
3	1.4	3.97E-42	
3	1.6	4.63E-41	

3) Dカラムの2行目から末尾行までをマウスドラッグ選択し, 再度マウス右ボタンを押して形式の貼り付けをマウスクリック選択.

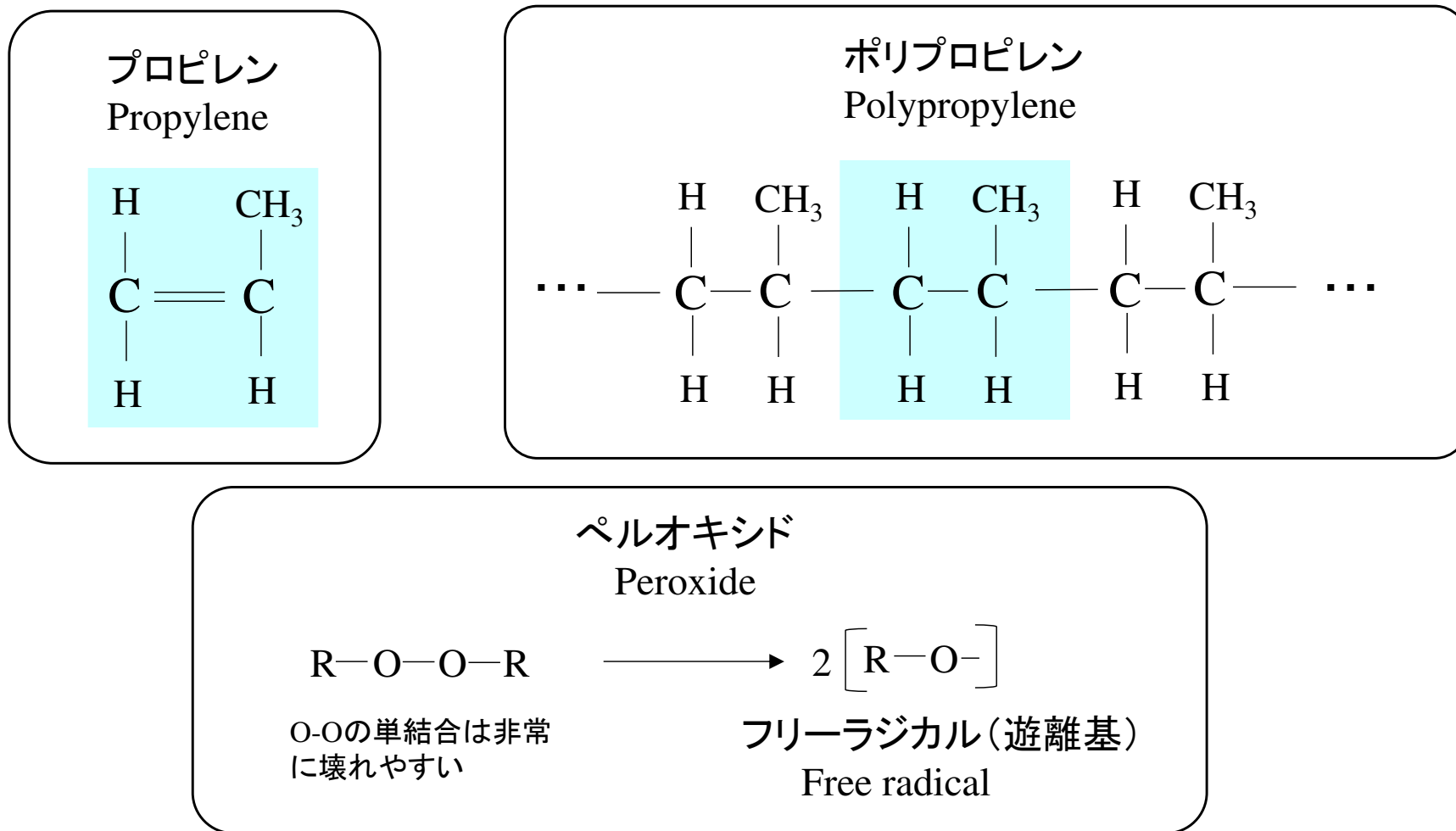
D2	A	B	C	D	E
1	3	0.2	0.00E+00	0.00E+00	
2	3	0.4	0.00E+00	0.00E+00	
3	3	0.6	0.00E+00	7.01E-44	
4	3	0.8	1.40E-45	8.41E-43	
5	3	1	1.82E-44	1.38E-41	
6	3	1.2	2.94E-43	1.84E-40	
7	3	1.4	3.97E-42	2.12E-39	
8	3	1.6	4.63E-41	2.15E-38	
9	3	1.8	4.76E-40	1.95E-37	
10	3	2	4.37E-39	1.60E-36	
11	3	2.2	3.64E-38	1.20E-35	
12	3	2.4	2.77E-37	8.36E-35	

4) Dカラムの一番最後の行のみ削除する

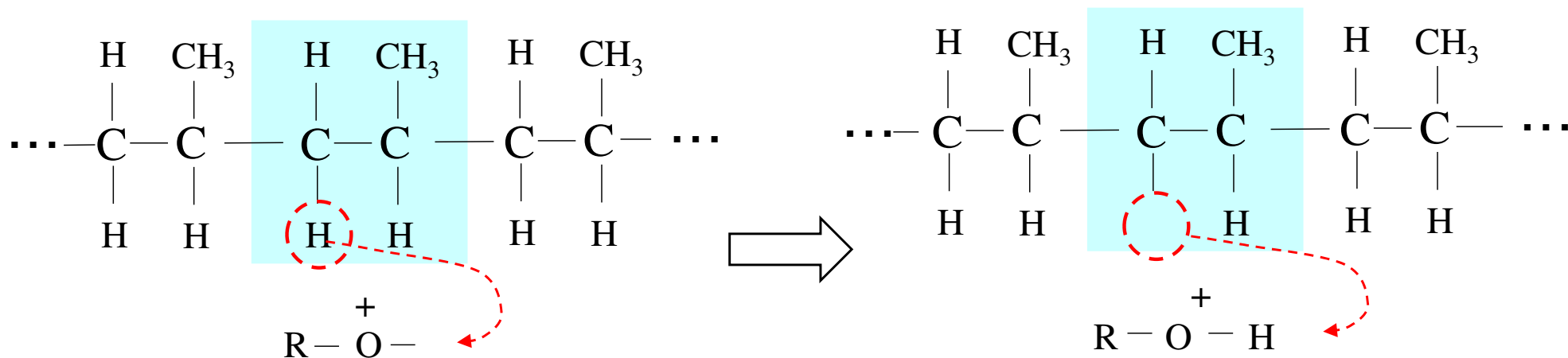
296	3	59.20015	0.999934	2.35E-04
297	3	59.40015	0.999938	2.00E-04
298	3	59.60015	0.999942	1.75E-04
299	3	59.80016	0.999946	1.55E-04
300	3	60.00016	0.999949	
301				

③ 化学反応モデル計算(反応押出解析)

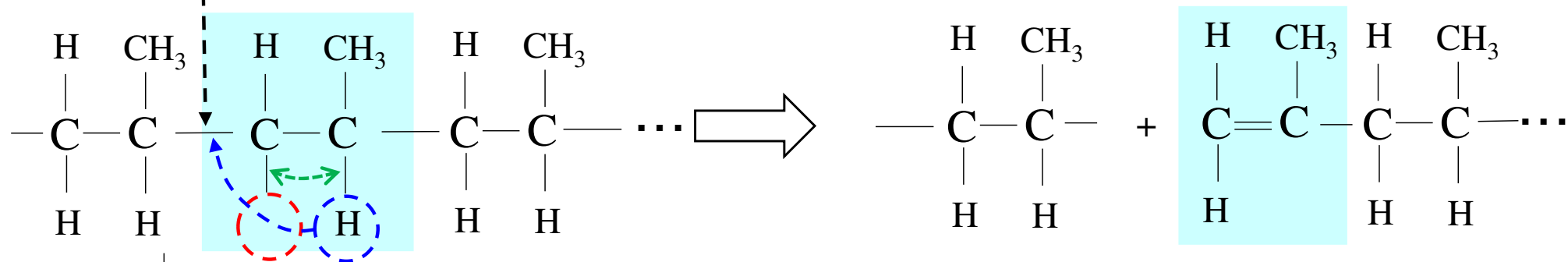
解析事例：二軸スクリュ内における過酸化物によるポリプロピレンの分解反応解析



フリーラジカルによる水素原子の引き抜き



高分子鎖のβ切断



Transfer

Termination

Free radical reaction kinetic model ^{1),2)}

ペルオキシド(Peroxide)の濃度変化

$$\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I]$$

ペルオキシドラジカル(Peroxide radical)の濃度変化

$$\frac{D[R^o]}{Dt} = 2fk_d [I] - \kappa_1 [R^o] \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) [P_n]$$

ポリプロピレン高分子鎖(鎖数 n)の濃度変化

$$\frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - (n-1) [P_n] \right)$$

$[I]$: ペルオキシド濃度[mol/m³]

$[R^o]$: ラジカル濃度[mol/m³]

$[P_n]$: 鎖数 n の高分子濃度[mol/m³]

κ_d : ペルオキシド分解速度定数[s⁻¹]

κ_1 : 高分子鎖分解速度定数[m³/mol/s]

1) Suwanda, D., Lew, R. and Balke, S. T.: “Reactive extrusion of polypropylene I: Controlled degradation”, *J. Appl. Polym. Sci.* , **35**(4),1019-1032(1988)

2) Suwanda, D., Lew, R. and Balke, S. T.: “Reactive extrusion of polypropylene II: Degradation kinetic modeling”, *J. Appl. Polym. Sci.* , **35**(4),1033-1048(1988)

PPの分解プロセスを表現する化学反応モデル

ペルオキシド(Peroxide)の濃度変化

$$\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I]$$

モーメント方程式 * 3)

$$\frac{DQ_0}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_1 - 3Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{DQ_1}{Dt} = -2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{DQ_2}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{-\frac{1}{3}Q_3 + \frac{1}{3}Q_1 - 2Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$Q_3 = \frac{2Q_2}{Q_1 Q_0} (2Q_2 Q_0 - Q_1^2) \quad * 4)$$

Q_i : i番目のモーメント [mol/m³]
 f : Initial efficiency (0.6~1)

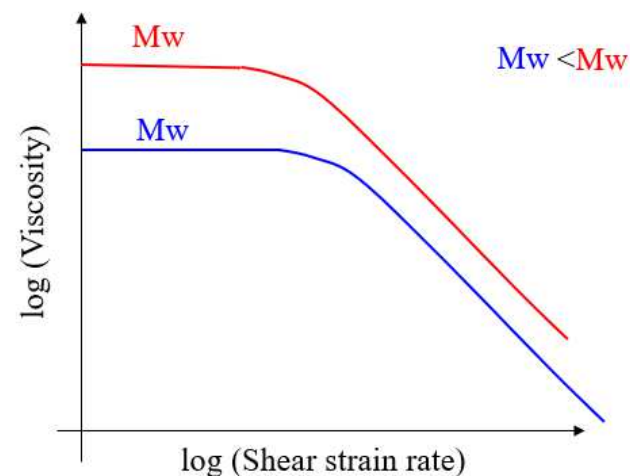
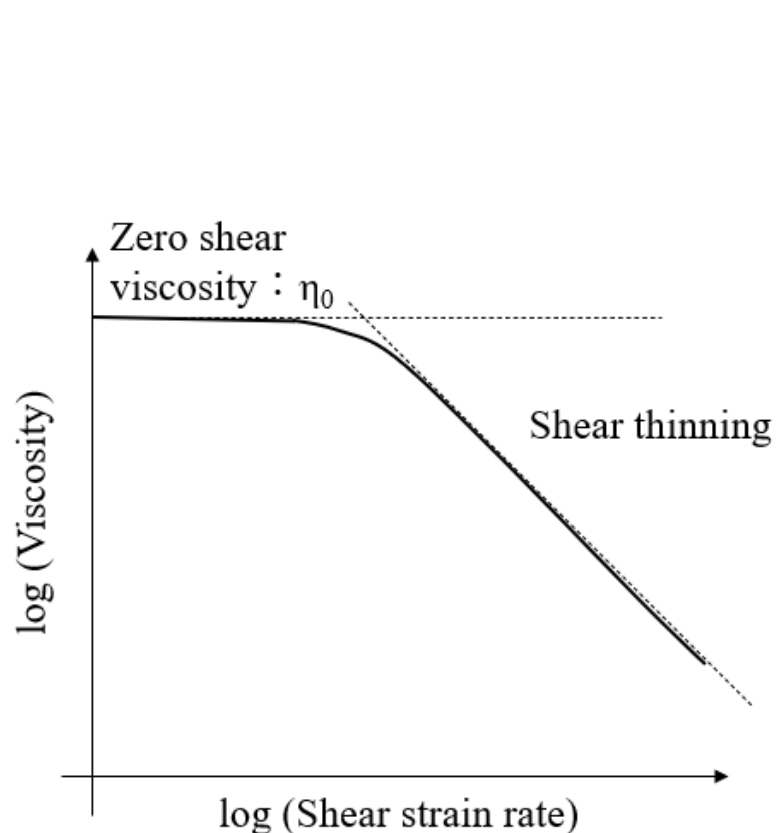
(参考文献)

TwinScrewSimulator Ver.9.0.0 改良成果資料

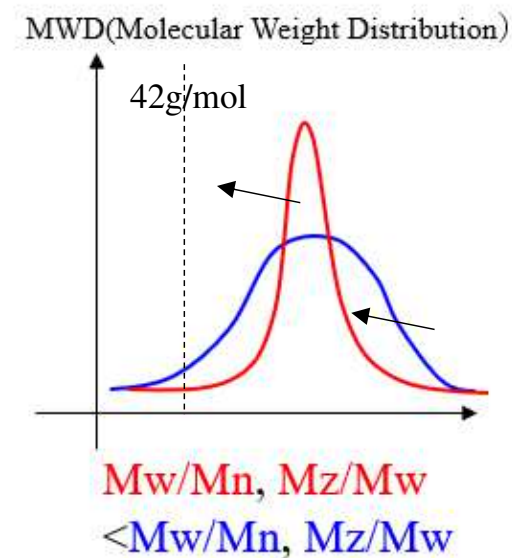
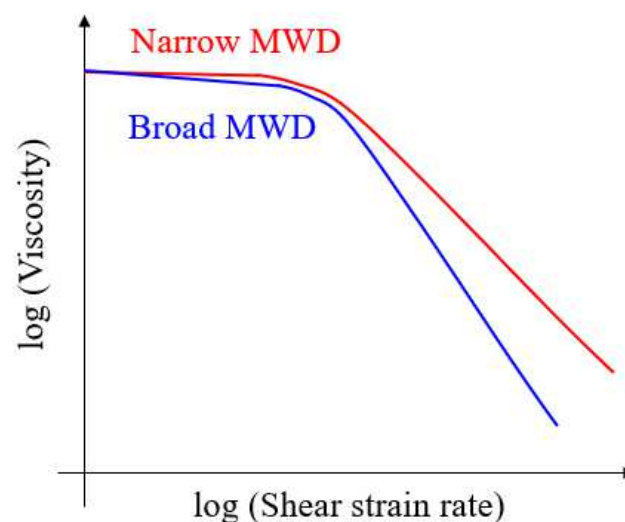
3) Tzoganakis, C., Vlachopoulos, J. and Hamielec A. E., "Production of Controlled-Rheology Polypropylene Resins by Peroxide Promoted Degradation During Extrusion", *Polym. Eng. Sci.*, **28**(3),170-180(1988)

4) Hulburt, H. M. and Katz, S. "Some Problems in Particle Technology : A Statistical Mechanical Formulation", *Chem. Eng. Sci.* , **19**,555-574(1964)

粘度と各種平均分子量との関係



Mn: 数平均分子量
Mw: 重量平均分子量
Mz: z平均分子量



Modified Cross model⁶⁾

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + C(\eta_0 \dot{\gamma})^{1-n}},$$

$$\eta_0 = B \exp\left(\frac{T}{T_0}\right),$$

$$B = k_1 \bar{M}_w^{3.7},$$

$$C = k_2 \frac{\bar{M}_z}{\bar{M}_w}$$

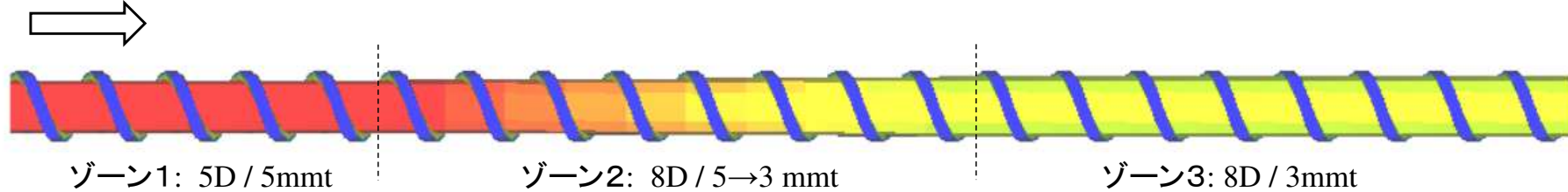
非噛合型異方向回転二軸スクリュの
2D FAN法を利用した等温完全充満
部分領域の解析

6) Fukuoka, T. and Min, K. , “Flow Analysis a Reactive Processing in a Twin Screw Extruder”, *Seikei-Kakou*, **7**(8),521—528(1995)

解析条件

- ・スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=21 (800.1 mm), 1ブロック構成
- ・解析条件(共通): 流量規定 5cm³/sec, 入口圧力 0.001MPa, スクリュ回転数 60rpm
バレル温度 200°C, 入口温度 200°C

Flow direction



粘度モデルの比較

Case	Thermal condition for chemical model	Viscous model
1	Non-isothermal	Cross
2	Non-isothermal	Modified Cross ⁶⁾

u: 流動情報

T: 温度情報

C: 化学成分情報

η : 粘度情報

u, T \rightarrow C

u, T \rightarrow C

$\eta(\dot{\gamma}, T, C)$

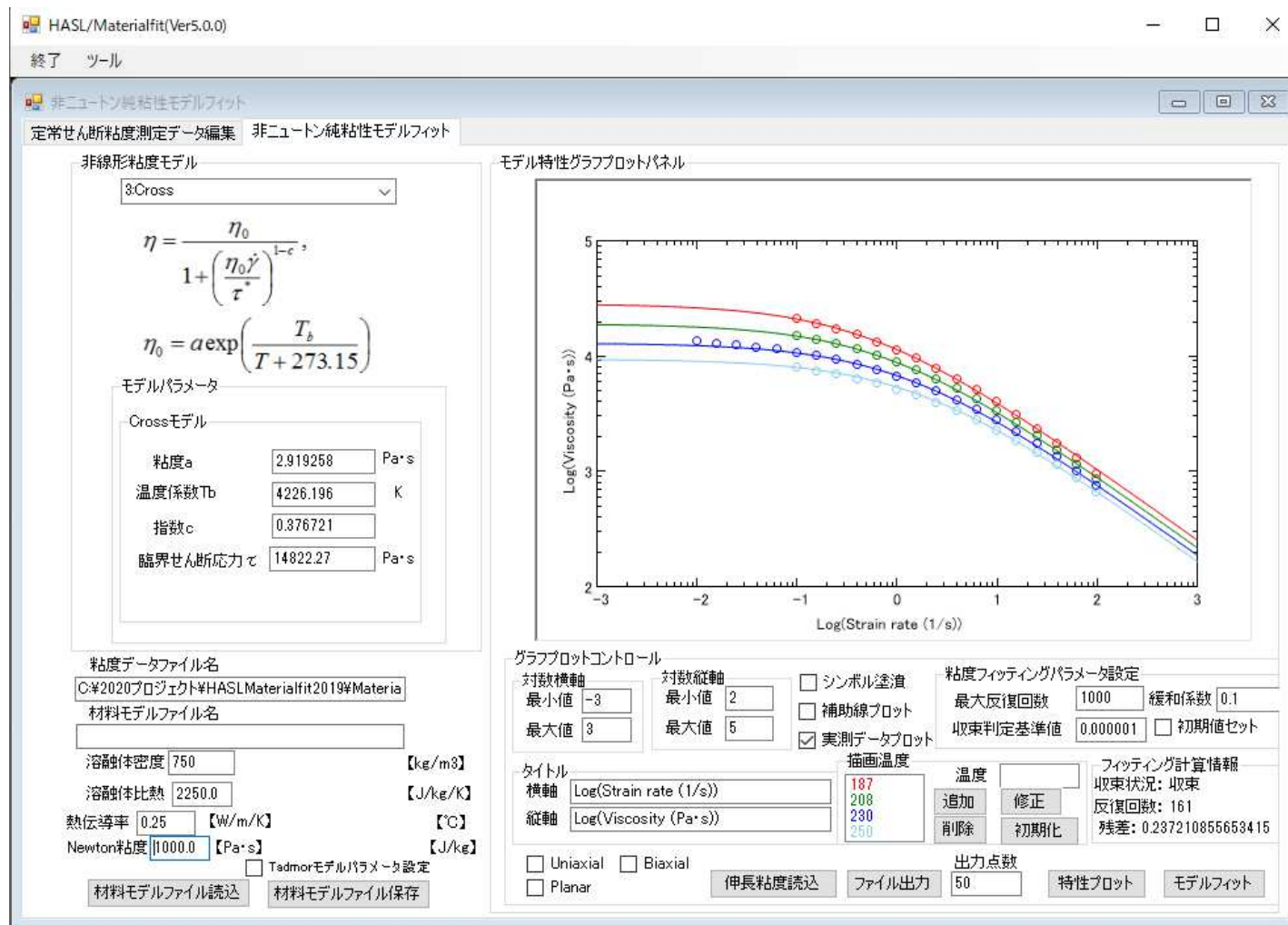


図11 フローカーブのCross モデルフィット (Material fit data base, PP_D3)

解析条件

入力基本情報

$$\rho : 750 \text{ kg/m}^3$$

$$\bar{M}_n : 74400 \text{ kg/mol}$$

$$\bar{M}_w : 356000 \text{ kg/mol}$$

$$\bar{M}_z : 1176000 \text{ kg/mol}$$



各種モーメント流入境界値

$$Q_0 = \frac{\rho}{\bar{M}_n} = \frac{750 \text{ kg/m}^3}{74400 \text{ kg/mol}} = 0.010 \text{ mol/m}^3$$

$$Q_1 = \frac{\rho}{m_0} = \frac{750 \text{ kg/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} = 1.7857 \times 10^4 \text{ mol/m}^3$$

$$Q_2 = \frac{\bar{M}_w Q_1}{m_0} = \frac{356000 \text{ kg/mol} \times 1.7857 \times 10^4 \text{ mol/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} \\ = 1.5136 \times 10^{11} \text{ mol/m}^3$$

$$Q_3 = \frac{\bar{M}_z Q_2}{m_0} = \frac{1176000 \text{ kg/mol} \times 1.5136 \times 10^{11} \text{ mol/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} \\ = 4.2381 \times 10^{18} \text{ mol/m}^3$$

ペルオキシド流入境界値

$$[I_0]: 1000 \text{ ppm} = 10^{-3} \text{ mol/m}^3$$

$$\text{分解速度定数} [s^{-1}] \quad k_d = 1.98 \times 10^{12} \exp \left(-\frac{1.49 \times 10^4}{T + 273.15} \right)$$

$$\text{Initiator efficiency} [-] \quad f = 1.0$$

計算条件

非ニュートン反復計算数: 10

化学反応成分: 4 種

化学反応モデル反復計算数: 10

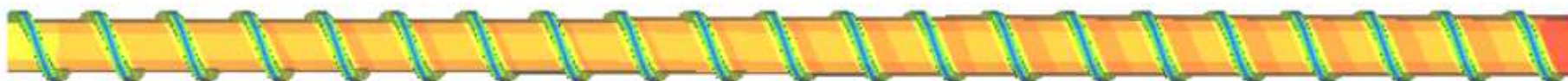
化学反応モデル緩和係数: 1.0

計算時間: 40.2 sec

Intel® Core™ i7-9700

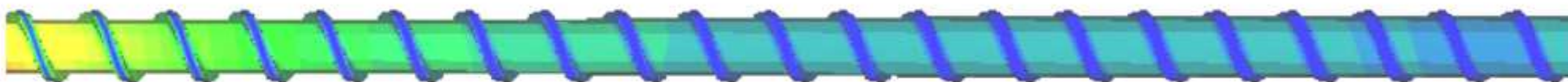
CPU @3.00 GHz

解析結果例： 粘度分布 (Pa·s)

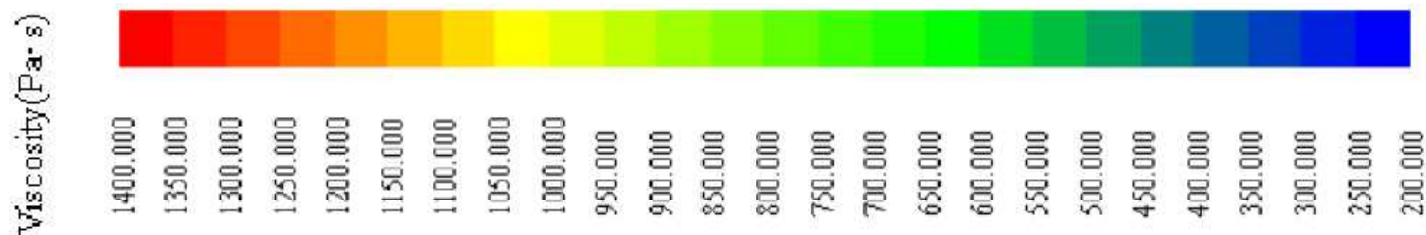


Flow direction
→

Case1 : Cross model



Case2 : Modified Cross model



③ PP分解反応計算

Initialsetforchemの内容

```

double precision dio,q0o,q1o,q2o,q3o,dm0
C
C+++++
C+   User define variable number
C+++++
C
C   Number of chemical species
C
chemcnumber=4
C
C   Number of chemical variable
C
chemvnumber=6
C
C   Number of common variable
C
commonvnumber=2
C
C+++++

```

← 当ルーチン内で利用する変数の型宣言

```

C+++++
C   User define Initial/Boundary condition set
C+++++
dio=1.0d-03
q0o=1.0081d-02
q1o=1.7857d+04
q2o=1.5136d+11
q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o
dm0=4.2D-02

```

← 化学反応計算の初期値 (境界値) 設定

```

C
C   chemcname(1)='Peroxide (moles/m3)'
C   chemcname(2)='Q0 (moles/m3)'
C   chemcname(3)='Q1 (moles/m3)'
C   chemcname(4)='Q2 (moles/m3)'
C
C   chemvname(1)='Q3 (moles/m3)'
C   chemvname(2)='Mn (kg/m3)'
C   chemvname(3)='Mw (kg/m3)'
C   chemvname(4)='Mz (kg/m3)'
C   chemvname(5)='Mw/Mn (-)'
C   chemvname(6)='Mz/Mw (-)'
C
C   dmw=dm0*q1o/q0o
C   dmw=dm0*q2o/q1o
C   dmz=dm0*q3o/q2o
C
C   commonvpar(1)=dmw
C   commonvpar(2)=dmz/dmw

```

← 解析対象とする移流方程式の数=4

← 代数的関係式の数=6

← コモン変数の数=2

← ポスト項目の見出し

← 各種平均分子量の初期値設定

← Viscalと共用する変数定義

```

c      do ib=1,iblock  ← 全ブロックに設定
c
c      do ie=1,nelem(ib)
c
c      chemc(1,ie,ib)=dio
c      chemc(2,ie,ib)=q0o  化学種要素変数の初期設定
c      chemc(3,ie,ib)=q1o
c      chemc(4,ie,ib)=q2o
c
c      chempar(1,ie,ib)=q3o
c      chempar(2,ie,ib)=dmn
c      chempar(3,ie,ib)=dmw
c      chempar(4,ie,ib)=dmz
c      chempar(5,ie,ib)=chempar(3,ie,ib)/chempar(2,ie,ib)
c      chempar(6,ie,ib)=chempar(4,ie,ib)/chempar(3,ie,ib)
c      end do
c
c      do in=1,nnode(ib)
c      chemcn(1,in,ib)=dio
c      chemcn(2,in,ib)=q0o
c      chemcn(3,in,ib)=q1o  化学種節点変数の初期設定
c      chemcn(4,in,ib)=q2o
c
c      chemparn(1,in,ib)=q3o
c      chemparn(2,in,ib)=dm0*q1o/q0o
c      chemparn(3,in,ib)=dm0*q2o/q1o
c      chemparn(4,in,ib)=dm0*q3o/q2o
c      chemparn(5,in,ib)=chemparn(3,in,ib)/chemparn(2,in,ib)
c      chemparn(6,in,ib)=chemparn(4,in,ib)/chemparn(3,in,ib)
c
c      end do

```

```

c      if(ib.eq.1) then
c
c      do ii=1,ndivl(ib)
c      chemcn(1,ii,ib)=dio  ブロック1の流入口
c      chemcn(2,ii,ib)=q0o  (in=1~iinletnodelist)に
c      chemcn(3,ii,ib)=q1o  濃度境界値を設定
c      chemcn(4,ii,ib)=q2o
c      end do
c      end if
c
c      end do

```

chemfscalの内容

```

c subroutine chemvariable(ib)  ← ブロック毎に呼出される
c
c double precision dk0,actv,dkd,th ← 当ルーチン内で利用する変数の型宣言
c fc=1.0 ← Initiator efficiency
corg te=200.0+273.15
c dk0=1.98d+012 } ペルオキシド分解速度定数
c actv=1.4947d+04 } パラメータ
corg dkd=dk0*dexp(-actv/te)
c
c do ie=1,nelem(ib)
c
c te=tempe(ie,ib)+273.15 } ペルオキシド分解速度定数の計算
c dkd=dk0*dexp(-actv/te) } tempe(ie, ib): ブロックibの要素ieの温度
c
c Peroxide implicit difference
c
c chemf(1,ie,ib)=dkd } ←  $\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I] \Rightarrow \left( \kappa_d + \frac{D}{Dt} \right) [I] = 0$ 
c chems(1,ie,ib)=0.0
c
c th=2.0*fc*dkd*chemc(1,ie,ib)
c
c Moment q0,q1,q2 explicit difference
c
c q0
c chemf(2,ie,ib)=0.0
c chems(2,ie,ib)=th*(chemc(3,ie,ib)-3.0*chemc(2,ie,ib)) } ←  $\frac{DQ_0}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left( \frac{Q_1 - 3Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$ 
c & /((chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib)))
c
c q1
c chemf(3,ie,ib)=0.0
c chems(3,ie,ib)=-2.0*th*chemc(2,ie,ib) } ←  $\frac{DQ_1}{Dt} = -2f\kappa_d [I] \left( \frac{Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$ 
c & /((chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib)))
c
c q2
c chemf(4,ie,ib)=0.0
c chems(4,ie,ib)=th*(-chempar(1,ie,ib)/3.0 } ←  $\frac{DQ_2}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left( \frac{-\frac{1}{3}Q_3 + \frac{1}{3}Q_1 - 2Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$ 
c & +chemc(3,ie,ib)/3.0-2.0*chemc(2,ie,ib))
c & /((chemc(3,ie,ib)-chemc(2,ie,ib)))
c
c end do
c
c return
c stop
c end

```

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$\left(chemf(ic,ie,ib) + \frac{D}{Dt} \right) f(ic,ie,ib) = chems(ic,ie,ib)$$

変数対応関係

$[I]$: chemc(1,ie,ib)

Q_0 : chemc(2,ie,ib)

Q_1 : chemc(3,ie,ib)

Q_2 : chemc(4,ie,ib)

chemvariableの内容

subroutine chemvariable(ib) ← ブロック毎に呼出される

double precision q0o,q1o,q2o,dm0 ← 当ルーチン内で利用する変数の型宣言

dm0=4.2D-02 ← プロピレンの分子量: 4.2D-02 kg/m³

do ie=1,nelem(ib)

q0o=chemc(2,ie,ib)
q1o=chemc(3,ie,ib)
q2o=chemc(4,ie,ib)

Closure relation

q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o ← Closure relation

chempar(1,ie,ib)=q3o
chempar(2,ie,ib)=dm0*q1o/q0o
chempar(3,ie,ib)=dm0*q2o/q1o
chempar(4,ie,ib)=dm0*q3o/q2o
chempar(5,ie,ib)=chempar(3,ie,ib)/chempar(2,ie,ib)
chempar(6,ie,ib)=chempar(4,ie,ib)/chempar(3,ie,ib)

end do

return
stop
end

変数対応関係

Chempar(1,ie,ib) : Q_3

Chempar(2,ie,ib) : 数平均分子量 M_n

Chempar(3,ie,ib) : 重量平均分子量 M_w

Chempar(4,ie,ib) : Z平均分子量 M_z

Chempar(5,ie,ib) : M_w/M_n

Chempar(6,ie,ib) : M_z/M_w

viscalの内容

nonnew : 非ニュートン識別番号

1:Newtonian

2:Power law

3:Log polynomial

4:Carreau

5:Carreau Yasuda

6:Cross

c*** (6) Cross Model

```

c
  if(nonnew.eq.6) then
    eta0=bcoef*exp(tref/(temhi+273.15))
    eta=eta0/(1.0+(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
    vish(i,ie,ib)=eta
  c
  Molecular weight average eta0 shift proposed by Fukuoka & Min
  c
    eta0=(chempar(3,ie,ib)/commonvpar(1))*3.7*eta0
  c
  MWD shift of shear thinning
  c
    dc=chempar(6,ie,ib)/commonvpar(2)
corg eta=eta0/(1.0+(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
    eta=eta0/(1.0+dc*(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
  c
    vish(i,ie,ib)=omgc*eta+(1.0-omgc)*vishold
  end if
c

```

$\eta_0 = a \exp\left(\frac{T_b}{T + 273.15}\right)$
 $\eta_0(t) = \left(\frac{M_w(t)}{M_w(0)}\right)^{3.7} \eta_0(0)$
 $dc = \frac{M_z(t)/M_w(t)}{M_z(0)/M_w(0)}$
 $\eta = \frac{\eta_0}{1 + dc * \exp\left(\frac{\eta_0 * gamm}{rcoef}\right)^{1-dn}}$

$a \rightarrow bcoef$ (Material fit パラメータ),
 $T_b \rightarrow tref$ (Material fit パラメータ),
 $T \rightarrow temhi$: 要素ieの層iの温度

chemwriteの内容

subroutine chemwrite

```
dimension chemcon(4,20),chemparameter(6,20)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
open(110,File='CHEMCON',access='sequential',status='unknown',
&    recl=220)
open(111,File='CHEMPAR',access='sequential',status='unknown',
&    recl=220)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
do ib=1,iblock
  if(chemcnumber.gt.0) then
    do in=ndivl(ib)+1,nnode(ib)
      do ic=1,chemcnumber
        volsum=0.0
        csum=0.0
        do ii=1,nren(in,ib)
          ine=nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,ib)
          if(unfillmask.eq.1) then
            volsum=volsum+vol(ine,ib)*fille(ine,ib)
            csum=csum+vol(ine,ib)*chemc(ic,ine,ib)*fille(ine,ib)
          else
            volsum=volsum+vol(ine,ib)
            csum=csum+vol(ine,ib)*chemc(ic,ine,ib)
          end if
        end do
        chemcn(ic,in,ib)=csum/volsum
      end do
    end do
  end if
```

ローカル変数の定義: 化学種4成分, 代数関係式6成分

出力ファイルオープン

機番110: ファイル名CHEMCON, 化学種4成分出力用

機番111: ファイル名CHEMPAR, 代数関係式6成分

ブロックのループ

境界節点を除く, 節点番号ループ

化学種ループ

節点inを含む要素数ループ

ine: 節点inを含む要素番号

unfillmask: 0 ; 未充满領域も計算量を表示

: 1 ; 未充满領域の計算量を非表示

流入境界を除く節点の化学種濃度を体積重み付けの要素濃度より計算

unfillmask: 1 の場合は, 要素充满率を考慮した体積重み付け平均,

unfillmask: 0 の場合は, 要素充满率を無視した体積重み付け平均

nren(in,ib): ブロックibの節点inを含む要素数

nrelem(inrelem(in,1)+ii-1,ib): ブロックibの節点inを含むii番目の要素番号

fille(ine,ib) : ブロックibの要素ineの充满率 (0 or 1)

非チェック: unfillmask=0

チェック: unfillmask=1

☐ Result display considered with unfill

設定/開じる

* Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム下部

c

```

if(chemvnumber.gt.0) then
do in=ndivl(ib)+1,nnode(ib) ← 境界節点を除く, 節点番号ループ
do ic=1,chemvnumber ← 代数関係式数ループ
volsum=0.0
csum=0.0
do ii=1,nren(in,ib) ← 節点inを含む要素数ループ
ine=nrelem(inrelem(in,ib)+ii-1,ib) ← ine:節点inを含む要素番号
if(unfilmask.eq.1) then ← unfilmask:0 ; 未充満領域も計算量を表示
volsum=volsum+vol(ine,ib)*fille(ine,ib) :1 ; 未充満領域の計算量を非表示
csum=csum+vol(ine,ib)*chempar(ic,ine,ib)*fille(ine,ib)
else
volsum=volsum+vol(ine,ib)
csum=csum+vol(ine,ib)*chempar(ic,ine,ib)
end if
end do
chemparn(ic,in,ib)=csum/volsum
end do
end do
end if

```

流入口境界を除く節点の代数関係式
を体積重み付けの要素濃度より計算

unfilmask:1の場合は, 要素充満率を考慮した体積重み付け平均(未充満領域を非表示),
unfilmask:0の場合は, 要素充満率を無視した体積重み付け平均(未充満領域も表示)

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

```
if(chemnumber.ne.0) then
```

```
if(ibtype(ib).eq.0) then
```

```
do iz=0,ndivzs(ib)
```

```
ntops=ndivl(ib)*iz+1
```

```
ntope=ndivl(ib)*(iz+1)
```

```
do ic=1,chemnumber
```

```
chemcon(ic,ib)=0.0
```

```
end do
```

```
do ic=1,chemnumber
```

```
countn=0.0
```

```
do in=ntops,ntope
```

```
countn=countn+1.0
```

```
chemcon(ic,ib)=chemcon(ic,ib)+chemcn(ic,in,ib)
```

```
end do
```

```
chemcon(ic,ib)=chemcon(ic,ib)/countn
```

```
end do
```

```
write(110,*) znode(ntops,ib)*10.0,'',
```

```
&  
&  
&  
&  
&
```

```
chemcon(1,ib),',',',',  
chemcon(2,ib),',',',',  
chemcon(3,ib),',',',',  
chemcon(4,ib)
```

```
end do
```

```
else
```

```
cccccccccc ↑ ibtype(ib).eq.1
```

ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合

軸方向分割数ループ

軸方向分割数iz断面内の開始節点番号

軸方向分割数iz断面内の終了節点番号

化学種 ic の数平均値の計算

軸方向分割数iz断面のz座標と
各種数平均化学種計算値の
ファイルCHEMCON への出力

軸垂直断面内の化学種
平均値の計算

以下の矩形領域定義のコードは省略(詳細は直接ソースコードを参照ください)

化学種変数と数平均
値対応関係

[I]: chemcon(1)

Q₀: chemcon(2)

Q₁: chemcon(3)

Q₂: chemcon(4)

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

```

if(chemvnumber.ne.0) then
  if(ibtype(ib).eq.0) then
    do iz=0,ndivzs(ib)
      ntops=ndivl(ib)*iz+1
      ntope=ndivl(ib)*(iz+1)

```

ブロック ib のスクリュメッシュが標準定義の場合
 軸方向分割数ループ
 軸方向分割数 iz 断面内の開始節点番号
 軸方向分割数 iz 断面内の終了節点番号

```

do ic=1,chemvnumber
  chemparameter(ic,ib)=0.0
end do
do ic=1,chemvnumber
  countn=0.0
  do in=ntops,ntope
    countn=countn+1.0
    chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)+chemparn(ic,in,ib)
  end do
  chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)/countn
end do
write(111,*) znnode(ntops,ib)*10.0,',',
&
&
&
&
&
&
&
end do

```

代数関係式 ic の
数平均値の計算

軸垂直断面内の代数的
関係式平均値の計算

軸方向分割数 iz 断面の z 座標と
各種数平均代数的関係式
計算値のファイルCHEMPAR
への出力

```

c
else
cccccccccc ↑ ibtype(ib).eq.1

```

ブロック ib のスクリュメッシュが
矩形領域定義の場合

以下の矩形領域定義のコードは省略(詳細は直接ソースコードを参照ください)

数平均値と代数的関係式対応関係

```

chemparameter(1) : Q3
chemparameter(2) : 数平均分子量 Mn
chemparameter(3) : 重量平均分子量 Mw
chemparameter(4) : Z平均分子量 Mz
chemparameter(5) : Mw/Mn
chemparameter(6) : Mz/Mw

```

User define model タブメニューの設定

Single Screw Simulator Template

スクリュー形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統括表 ユーザ定義解析

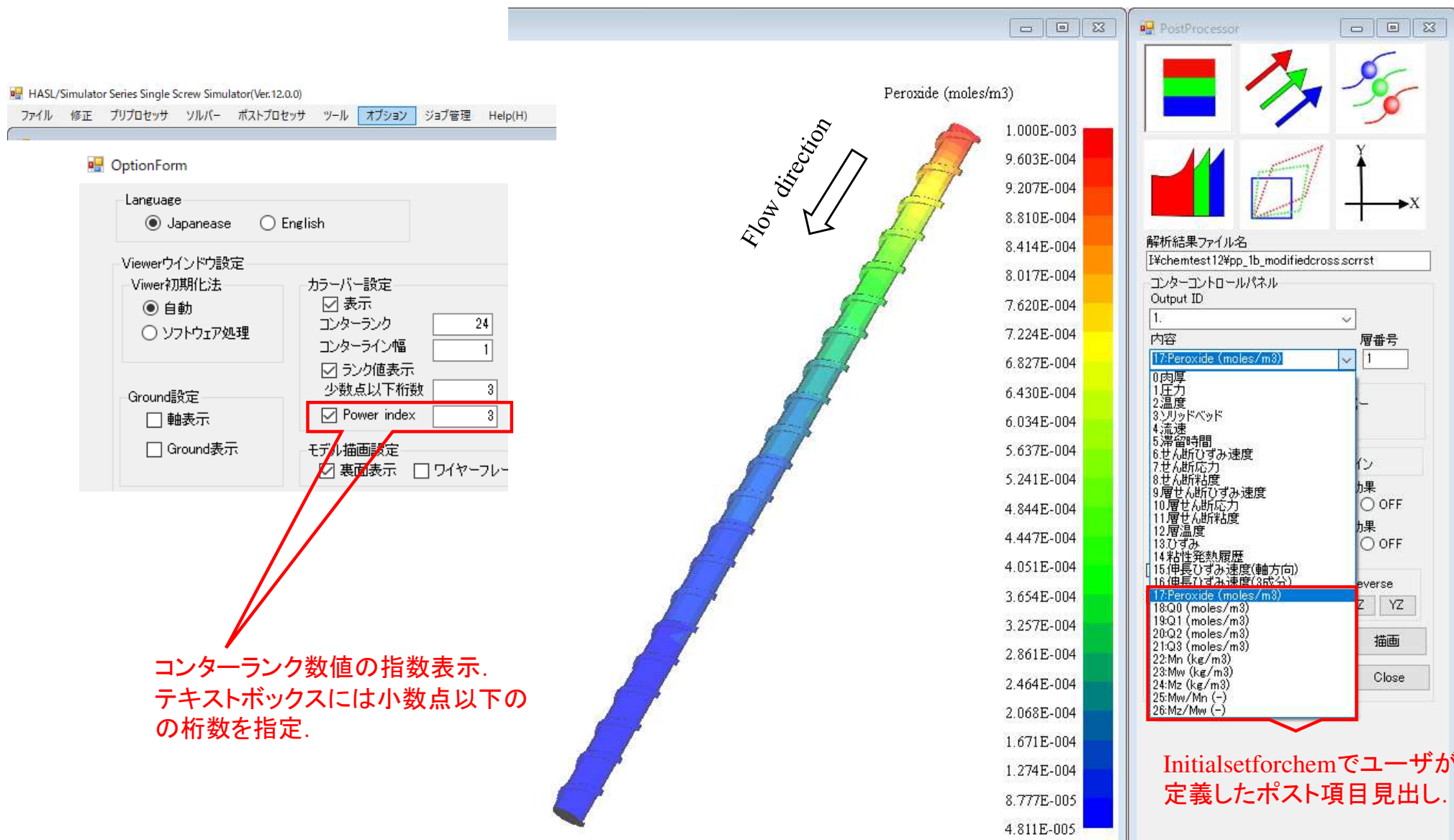
☒ ユーザ定義ルーチンの利用/RTD解析 (デフォルト) ← ユーザ定義ルーチンのコール

☒ 熱流動解析との連成 ← 当化学反応計算は、熱流動解析に影響を及ぼすため、
熱流動場との連成解析 (チェックボックスをチェック)

計算パラメータ

反復計算回数	10	← 非線形反復計算回数
反復計算の緩和係数	1	
マトリクスソルバ反復計算回数	20000	
マトリクスソルバの収束基準値	1E-06	
RTD解析の時間刻み	0.2	

解析結果例： ペルオキシド濃度 (mol/m³), Case2: Modified Cross model



コンターランク数値の指数表示.
 テキストボックスには小数点以下の
 の桁数を指定.

SSS出力ファイル (CHEMCON, プロジェクト名; pp**)

CHEMCON - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

0.000000E+00	1.000000E-03	1.0081000E-02	17857.00	1.5136000E+11
3.175000	9.8075939E-04	1.0119480E-02	17857.00	1.4818532E+11
6.350000	9.6868741E-04	1.0143602E-02	17856.96	1.4625820E+11
9.525000	9.5648953E-04	1.0167991E-02	17856.96	1.4436337E+11
12.70000	9.4420608E-04	1.0192607E-02	17857.03	1.4250644E+11
15.87500	9.3183777E-04	1.0217361E-02	17857.05	1.4068644E+11
19.05000	9.1939484E-04	1.0242223E-02	17857.02	1.3890388E+11
22.22500	9.0689218E-04	1.0267206E-02	17856.99	1.3715976E+11
25.40000	8.9434226E-04	1.0292271E-02	17856.93	1.3545447E+11
28.57500	8.8176149E-04	1.0317413E-02	17856.91	1.3378898E+11
31.75000	8.6916424E-04	1.0342623E-02	17856.93	1.3216374E+11
34.92500	8.5655990E-04	1.0367843E-02	17856.95	1.3057835E+11
38.09999	8.4395875E-04	1.0393035E-02	17856.93	1.2903259E+11
41.27499	8.3137600E-04	1.0418214E-02	17856.95	1.2752682E+11
44.44999	8.1882108E-04	1.0443344E-02	17856.98	1.2606056E+11
47.62499	8.0630137E-04	1.0468346E-02	17856.92	1.2463292E+11
50.80000	7.9383160E-04	1.0493253E-02	17856.88	1.2324413E+11
53.97499	7.8142365E-04	1.0518066E-02	17856.87	1.2189402E+11
57.14999	7.6908356E-04	1.0542703E-02	17856.81	1.2058146E+11
60.32499	7.5682235E-04	1.0567162E-02	17856.71	1.1930616E+11
63.49999	7.4465183E-04	1.0591458E-02	17856.65	1.1806785E+11
66.67499	7.3258067E-04	1.0615569E-02	17856.60	1.1686593E+11
69.84999	7.2061876E-04	1.0639503E-02	17856.62	1.1570001E+11
73.02499	7.0877076E-04	1.0663196E-02	17856.62	1.1456886E+11
76.20000	6.9704576E-04	1.0686655E-02	17856.62	1.1347205E+11
79.37500	6.8545277E-04	1.0709904E-02	17856.72	1.1240918E+11
82.55000	6.7398982E-04	1.0732799E-02	17856.67	1.1137814E+11
85.72501	6.6266622E-04	1.0755382E-02	17856.58	1.1037875E+11
88.90001	6.5149489E-04	1.0777768E-02	17856.64	1.0941148E+11
92.07501	6.4047478E-04	1.0799855E-02	17856.71	1.0847457E+11
95.25002	6.2960945E-04	1.0821632E-02	17856.78	1.0756716E+11
98.42502	6.1889872E-04	1.0843026E-02	17856.74	1.0668778E+11
101.6000	6.0834904E-04	1.0864089E-02	17856.69	1.0583619E+11

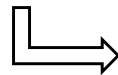
↑
Z座標

↑
[I]

↑
 Q_0

↑
 Q_1

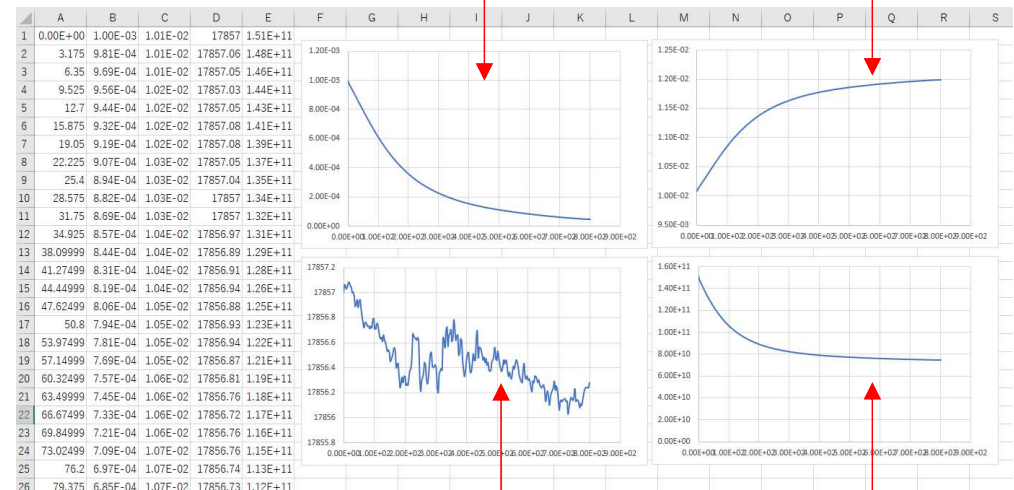
↑
 Q_2



コンマ区切りで
エクセルに読み込み

A vs. B :
z座標 vs. ペルオキ
シド濃度

A vs. C :
z座標 vs. Q_0



A vs. D :
z座標 vs. Q_1

A vs. E :
z座標 vs. Q_2

SSS出力ファイル

(CHEMPPAR, プロジェクト名; pp**)

CHEMPPAR - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

0.000000E+00	4.5956216E+18	74396.82	356001.8	1275213.	4.785177	3.582043
1.250000	4.5499855E+18	74334.25	354310.3	1268573.	4.766447	3.580399
2.500000	4.5320531E+18	74309.46	353643.6	1265956.	4.759066	3.579749
3.750000	4.5131555E+18	74283.17	352939.8	1263192.	4.751271	3.579059
5.000000	4.4937689E+18	74256.06	352215.5	1260350.	4.743255	3.578348
6.250000	4.4741599E+18	74228.47	351481.8	1257470.	4.735132	3.577625
7.500000	4.4544627E+18	74200.62	350743.0	1254571.	4.726953	3.576894
8.750000	4.4346146E+18	74172.35	349996.9	1251642.	4.718694	3.576152
10.00000	4.4145884E+18	74143.70	349242.2	1248682.	4.710341	3.575402
11.25000	4.3946020E+18	74114.91	348487.7	1245721.	4.701990	3.574647
12.50000	4.3746327E+18	74085.95	347731.9	1242755.	4.693624	3.573890
13.75000	4.3545924E+18	74056.73	346971.6	1239773.	4.685211	3.573125
15.00000	4.3344692E+18	74027.23	346206.4	1236771.	4.676743	3.572352
16.25000	4.3142481E+18	73997.35	345435.7	1233748.	4.668214	3.571570
17.50000	4.2938999E+18	73967.11	344658.2	1230699.	4.659612	3.570780
18.75000	4.2733976E+18	73936.45	343872.9	1227619.	4.650923	3.569977
20.00000	4.2526971E+18	73905.29	343078.0	1224502.	4.642128	3.569162
21.25000	4.2318685E+18	73873.72	342276.4	1221358.	4.633260	3.568337
22.50000	4.2110550E+18	73841.96	341473.1	1218209.	4.624375	3.567508

z座標

Q_3

Mn

Mw

Mz

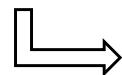
Mw/Mn

Mz/Mw

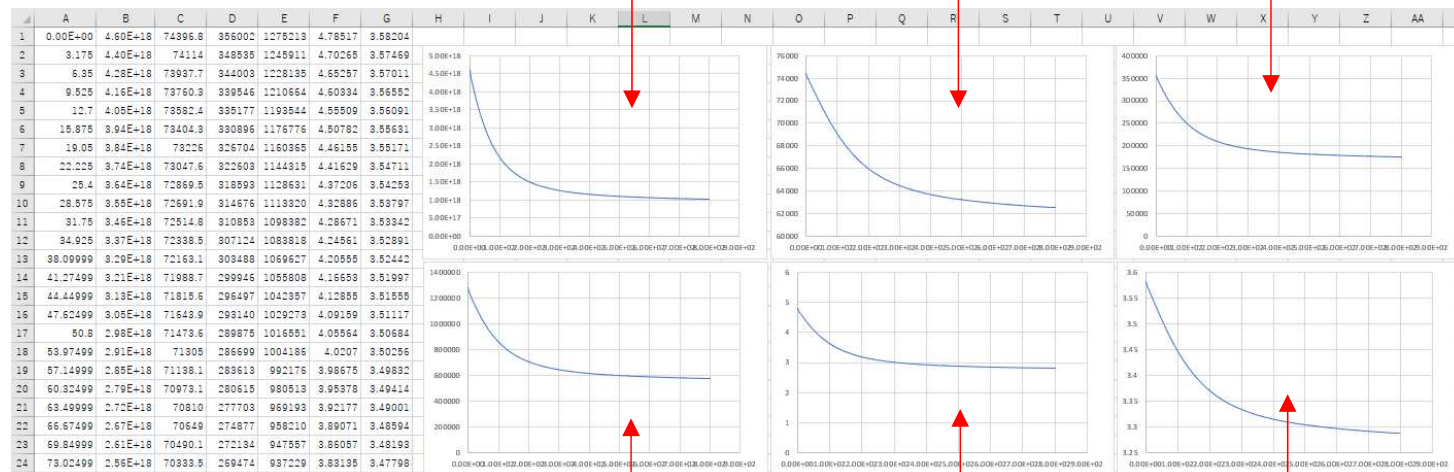
A vs. B :
z座標 vs. Q_3

A vs. C :
z座標 vs. Mn

A vs. D :
z座標 vs. Mw



コンマ区切りで
エクセルに読み込み



A vs. E :
z座標 vs. Mz

A vs. F :
z座標 vs. Mw/Mn

A vs. G :
z座標 vs. Mz/Mw

○改良成果一覧

①ユーザ定義多成分移流方程式の解析機能の実装

② 改良成果

- (1) 滞留時間分布(RTD)解析機能
- (2) モデリング機能改良 (フライトR加工, フライト削除)
- (3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能
- (4) 臨界せん断応力の設定
- (5) 解析のリスタート機能

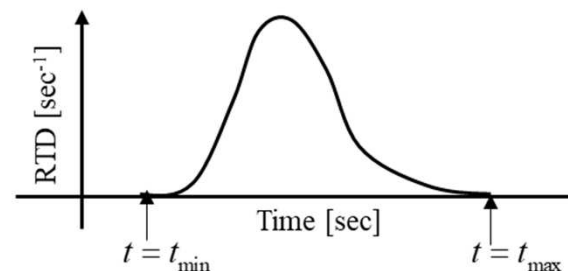
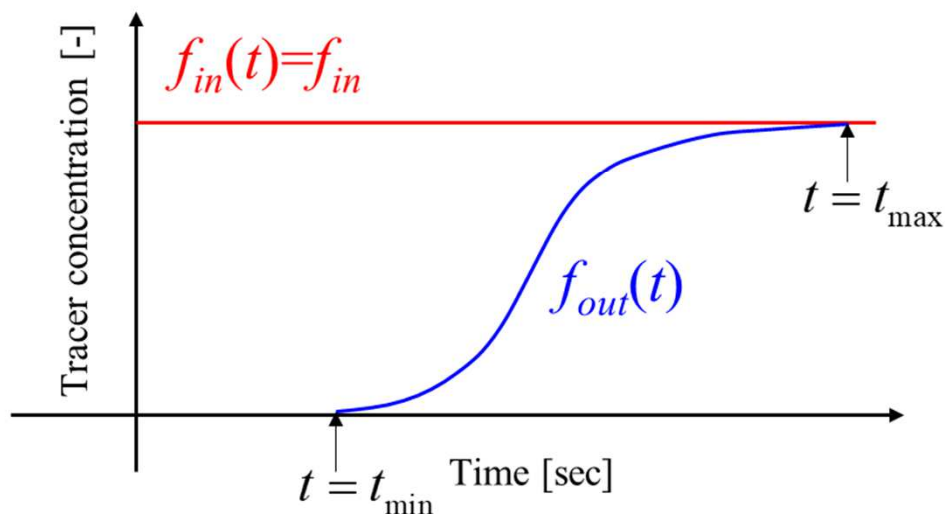
③ SSSカスタマイズ機能(ユーザ定義ルーチン作成)

② 改良成果

(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能

本機能では、以下に示す輸送方程式を解析し、スクリュ出口に到達する樹脂の濃度分布および滞留時間分布をグラフ化することが可能になりました。

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \nabla f = 0$$



$$f_{out}(t) = f_{in} \int_0^t RTD(t) dt$$



$$RTD(t) = \frac{1}{f_{in}} \frac{df_{out}(t)}{dt}$$

$$\int_{t_{min}}^{t_{max}} RTD(t) dt = 1$$

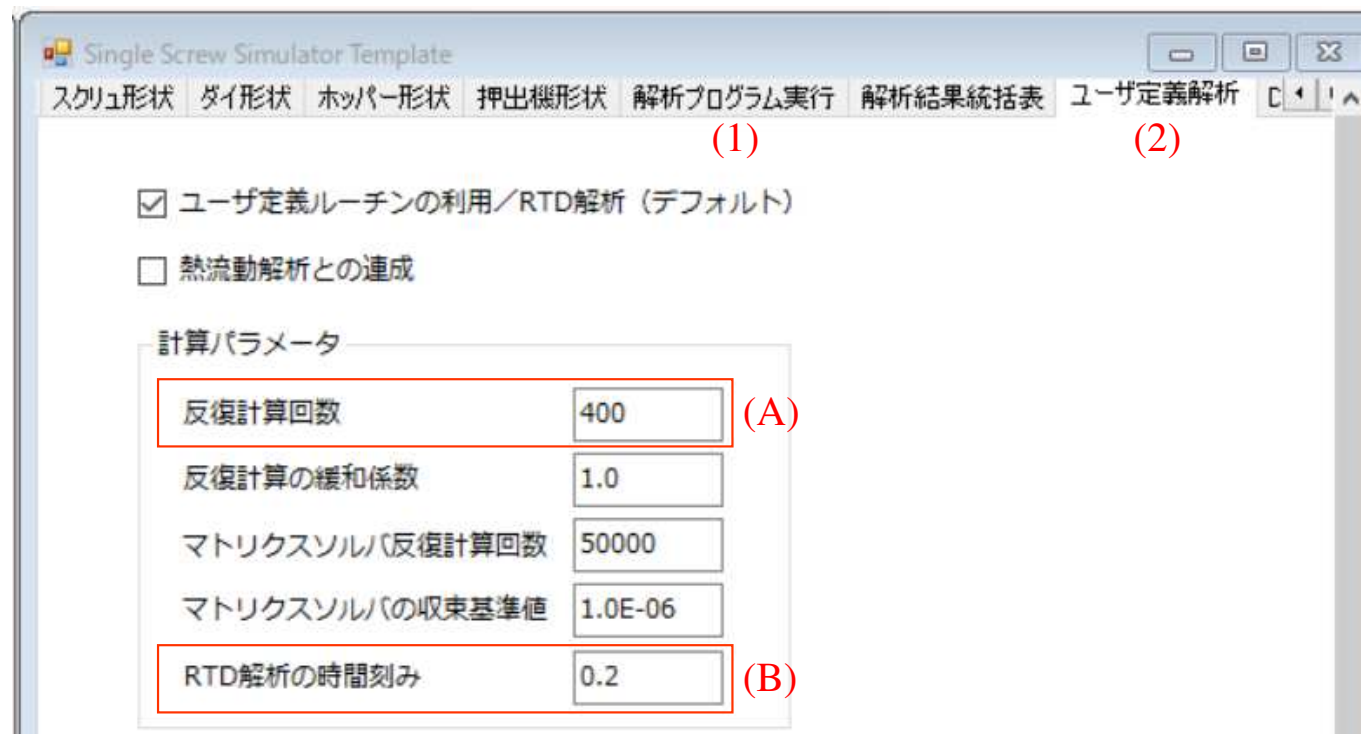
$$\because f_{out}(t_{max}) = f_{in}$$

$$\langle t_{res} \rangle = \int_{t_{min}}^{t_{max}} t \times RTD(t) dt$$

(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能

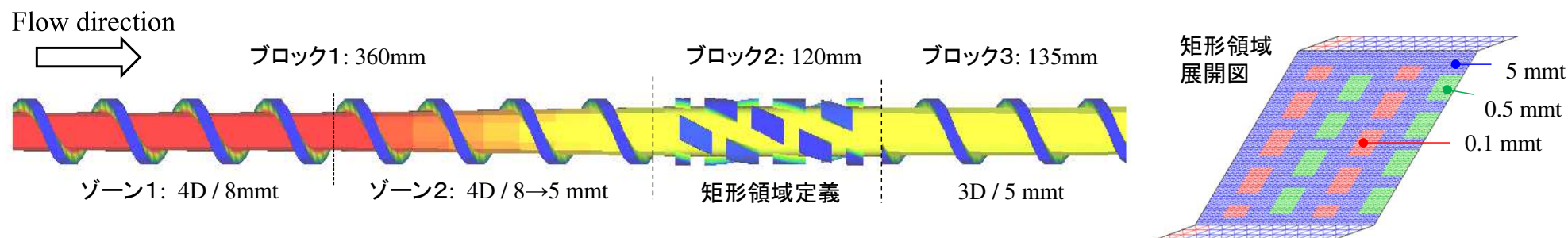
利用手順

- (1). 従来通りの運用で, 解析プログラム実行タブにて解析条件を設定します.
- (2). ユーザ定義解析タブに移動し, ユーザ定義ルーチンの利用／RTD解析にチェックを入れます.
- (3). 計算パラメータ内 (A) 非定常反復計算回数 および (B) RTD解析の時間刻みを設定します.
(A) × (B) が滞留時間の最大観測時間になります (* 解析対象は1ブロック(熱流動解析開始)以降).
- (4). (3)の設定後, 解析プログラム実行タブに移動し, 条件保存および解析実行します.



(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例1

- ・スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, ピッチ 45mm, $L/D=16.14$ (615.0 mm), 3ブロック構成



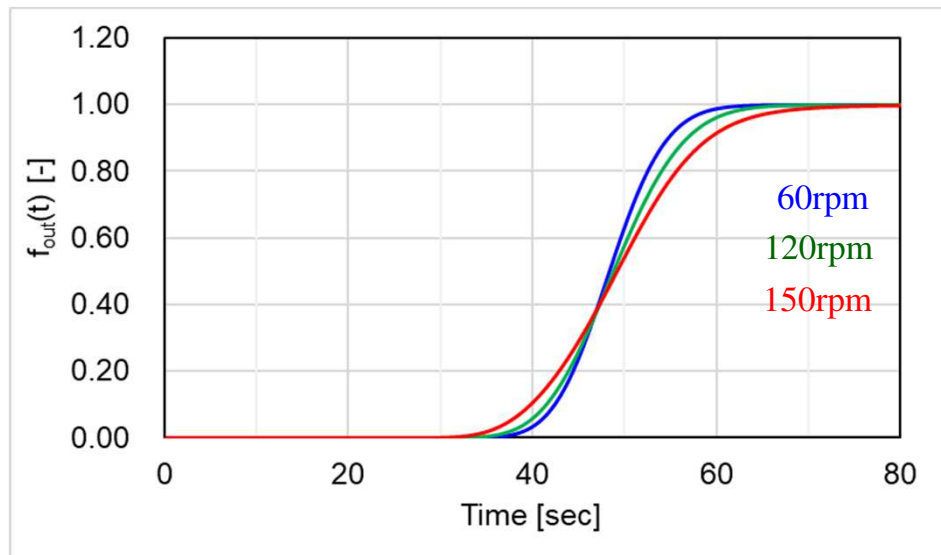
- ・樹脂データ(共通): HDPE_B3 (Materialfit データベース)
- ・解析条件(共通): 流量規定, 入口圧力 0.001MPa, バレル温度 200°C, 入口温度 200°C

◎事例1: 回転数(N)がRTDに与える影響確認

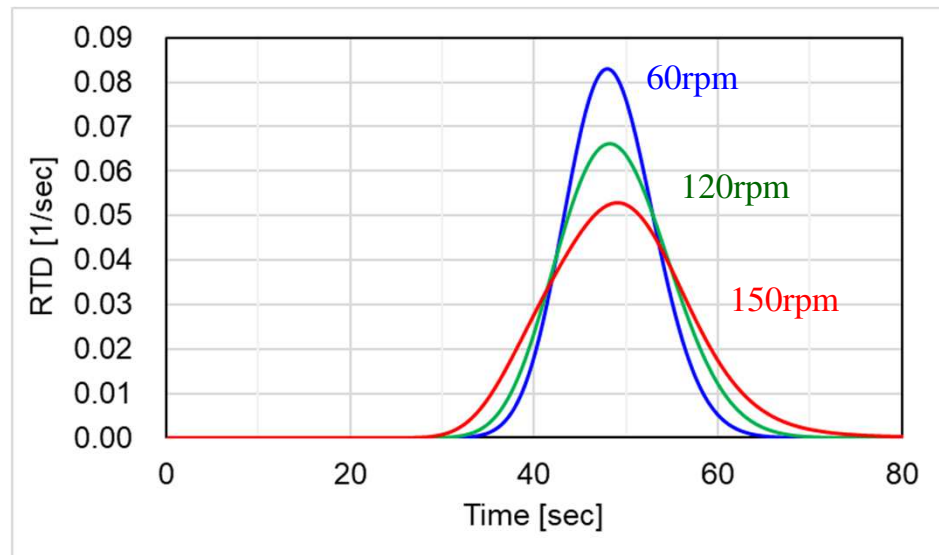
条件	押出量(Q)	回転数(N)
1-1	20.79 kg/h (7.5cm ³ /s)	60 rpm
1-2	20.79 kg/h (7.5cm ³ /s)	120 rpm
1-3	20.79 kg/h (7.5cm ³ /s)	150 rpm

(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例1

○スクリュ出口の濃度($f_{out}(t)$) 予測結果



○スクリュ出口の滞留時間分布(RTD) 予測結果



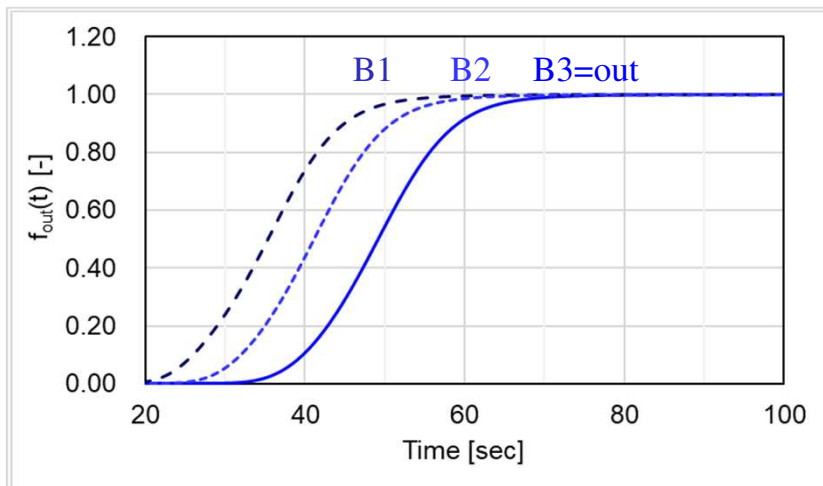
○平均滞留時間の比較

条件	解析結果: $\sum_{i=1}^{500} t_i RTD(t_i) \Delta t$ [sec]	平均滞留時間: Vol / Q_{ex} [sec]	
1-1: 60rpm	48.4	51.2	
1-2: 120rpm	48.9	51.2	* .suminf ファイル から抽出
1-3: 150rpm	49.4	51.2	

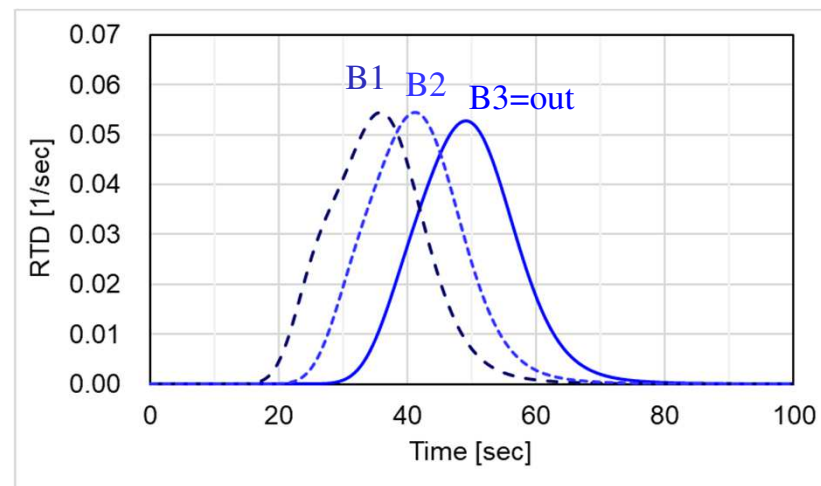
(Δt : 0.2 sec, 500 cycle unsteady analysis)

(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例1

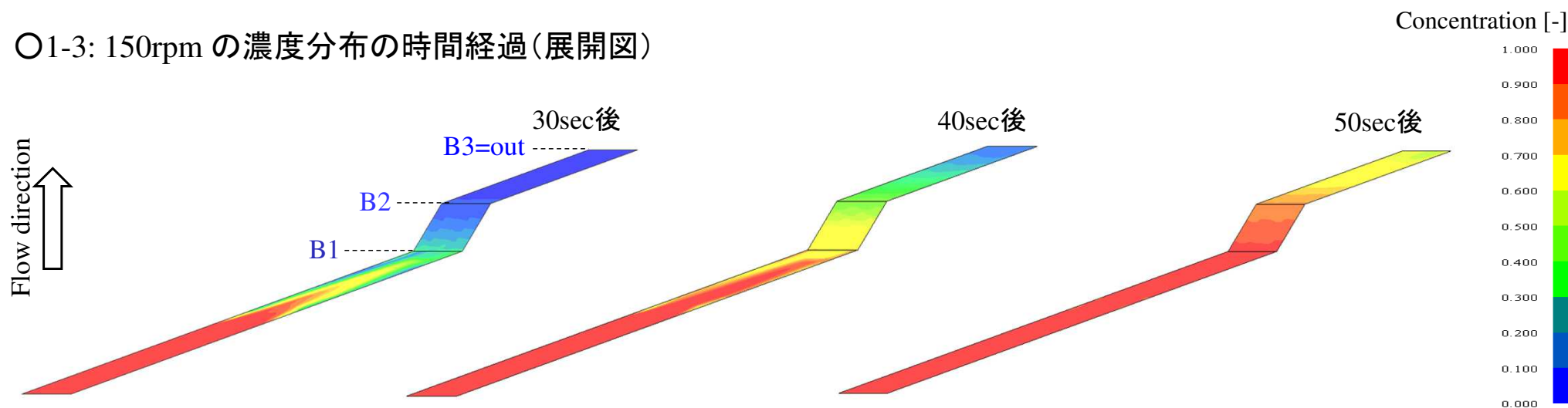
○1-3: 150rpm の各ブロック終点における出口濃度



○1-3: 150rpm の各ブロック終点におけるRTD分布



○1-3: 150rpm の濃度分布の時間経過(展開図)



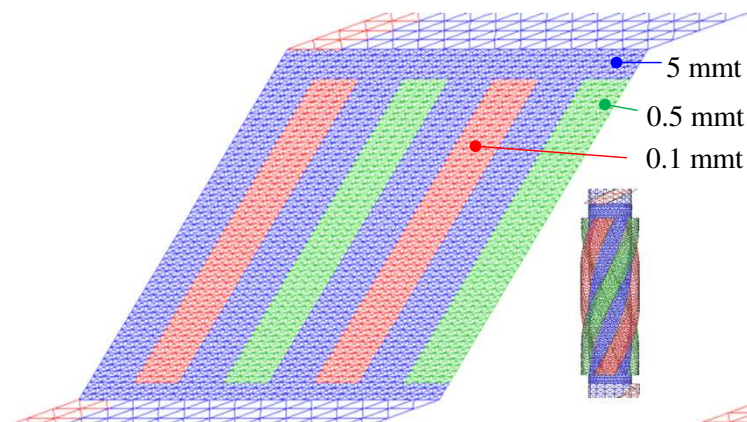
(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例2

◎事例2: ミキシング部(矩形領域)の流路形状がRTD分布に与える影響確認

- ・樹脂データ(共通): HDPE_B3 (Materialfit データベース)
- ・解析条件(共通): 流量規定, 入口圧力 0.001MPa, バレル温度 200°C, 入口温度 200°C, 押出量 13.86 kg/h (5cm³/sec), スクリュ回転数 30rpm
- ・スクリュモデル: 矩形領域の形状を変えた以下の3種類

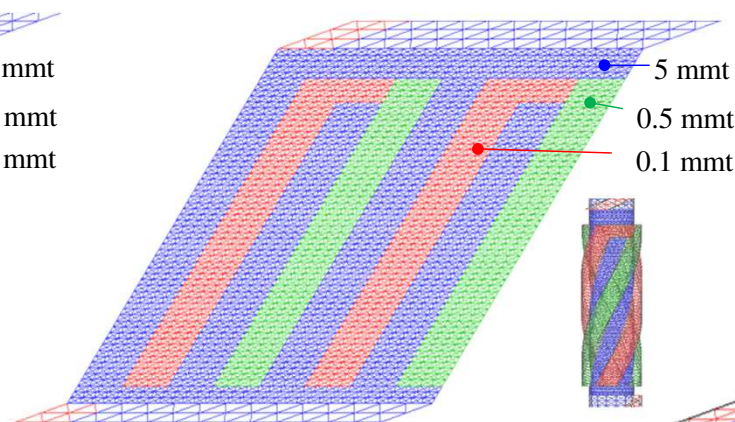
【条件2-1】

ブロック1: 45mm ブロック2: 120mm ブロック3: 45mm



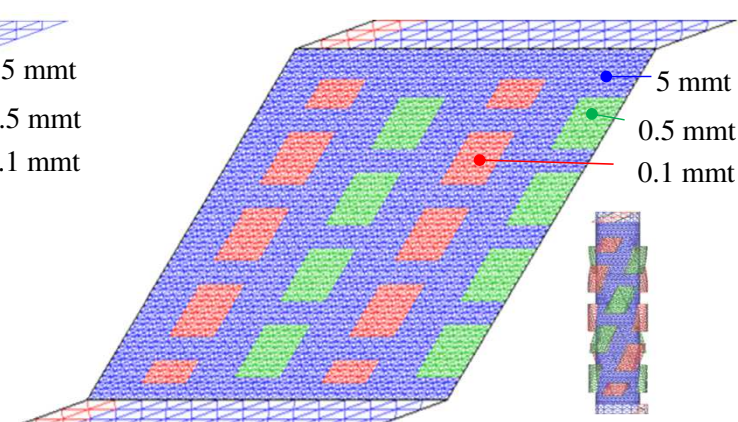
【条件2-2】

ブロック1: 45mm ブロック2: 120mm ブロック3: 45mm



【条件2-3】

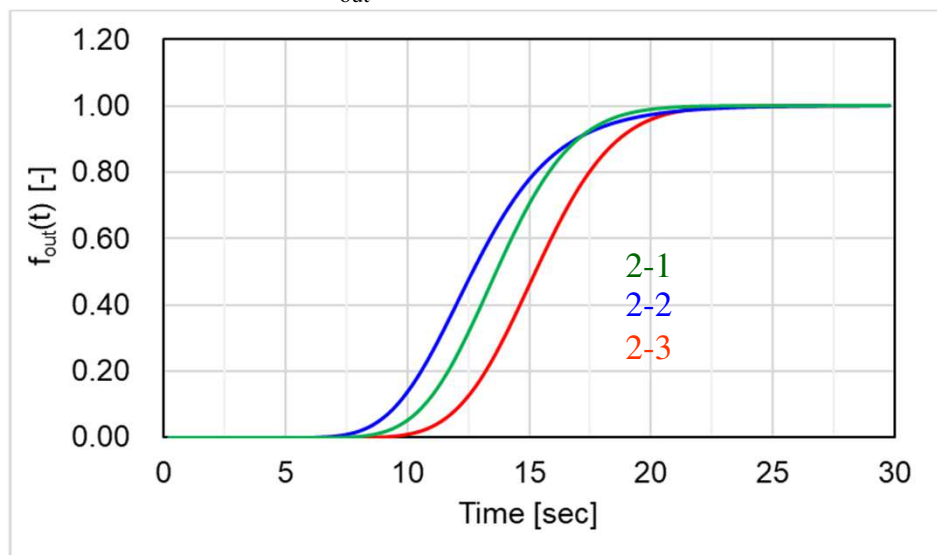
ブロック1: 45mm ブロック2: 120mm ブロック3: 45mm



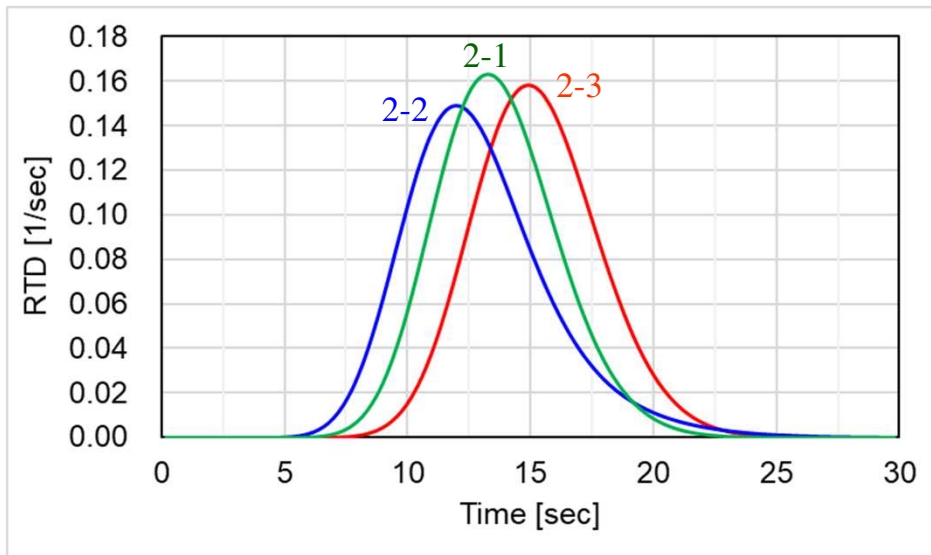
(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例2

●事例2: ミキシング部(矩形領域)の流路形状がRTD分布に与える影響確認

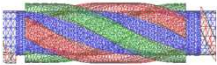

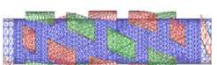
○スクリュ出口の濃度($f_{out}(t)$) 予測結果



○スクリュ出口の滞留時間分布(RTD) 予測結果



○平均滞留時間の比較

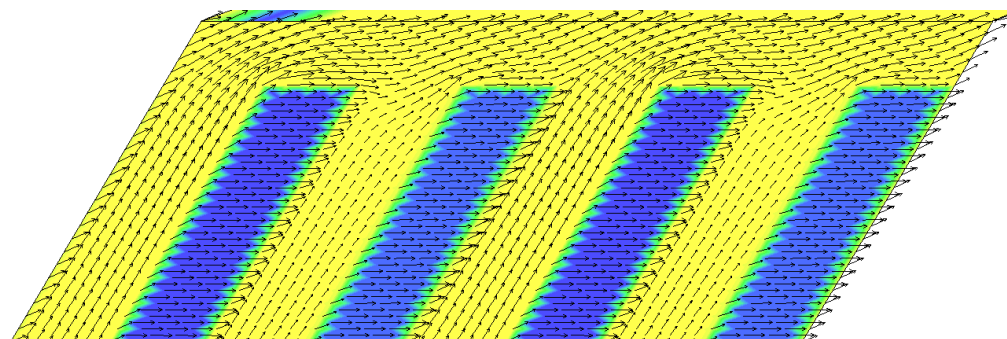
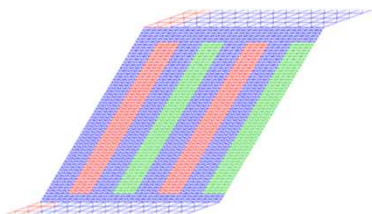
条件	解析結果: $\sum_{i=1}^{150} t_i RTD(t_i) \Delta t$ [sec]	平均滞留時間: Vol / Q_{ex} [sec]	
2-1: 	13.7	17.6	
2-2: 	12.9	17.4	* .suminf ファイル から抽出
2-3: 	15.3	19.4	

(Δt : 0.2 sec, 150 cycle unsteady analysis)

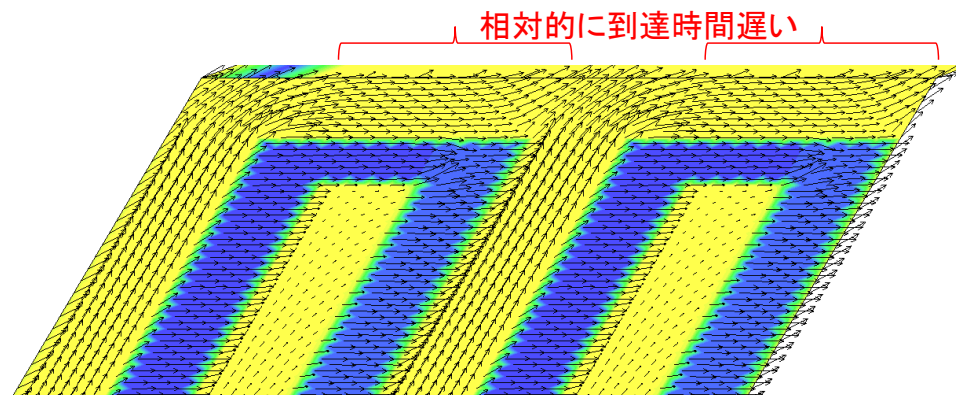
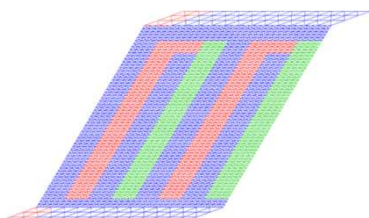
(1) 滞留時間分布(RTD)解析機能／解析事例2

○展開図の流速ベクトル分布(矩形領域下流側)

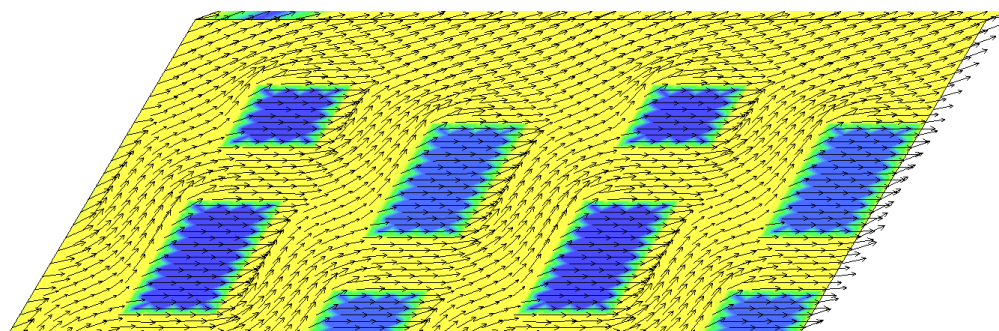
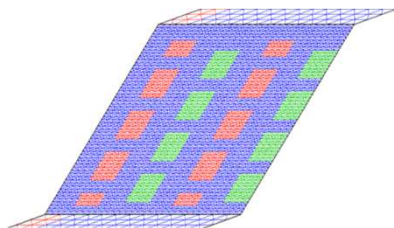
【条件2-1】



【条件2-2】



【条件2-3】(事例1)



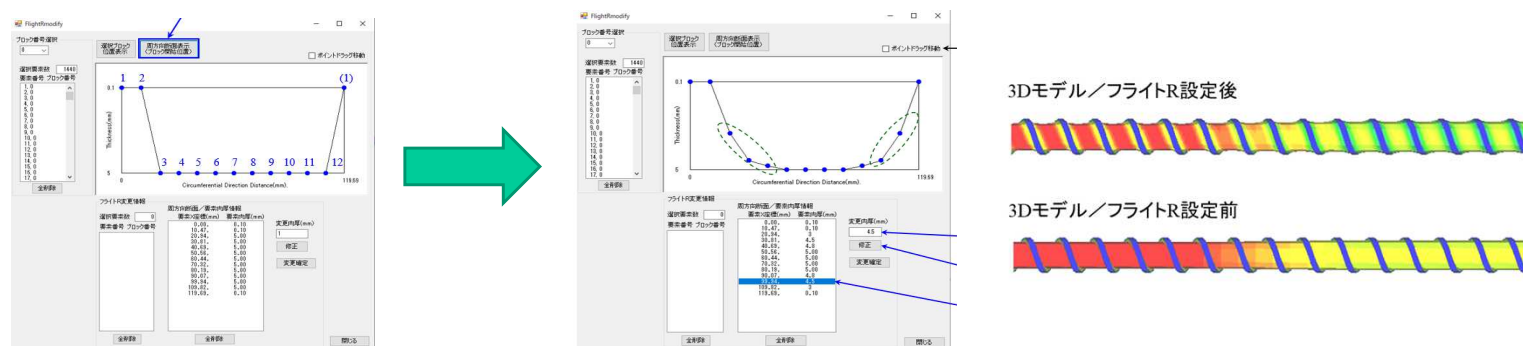
② 改良成果

(2) モデリング機能改良 (フライトR加工, フライト削除)

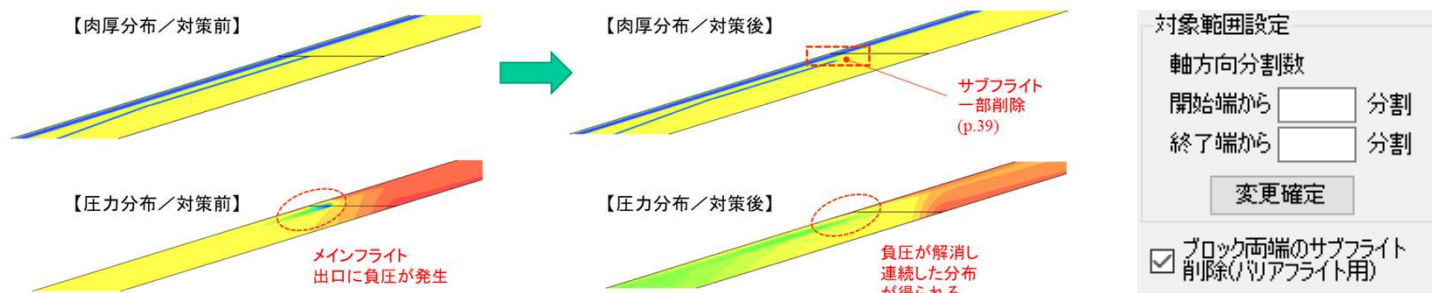
本機能では, 昨年度 ver.11で追加された, (1)フライト部のR付け, および (2)フライト端部の一部削除の効率化を, 用途拡大を目的に拡張しました.

昨年度 ver.11 追加機能(詳細は, ver11 改良成果資料参照ください)

① フライト部のR付け: ブロック毎にR形状(肉厚変更)を一括で設定.

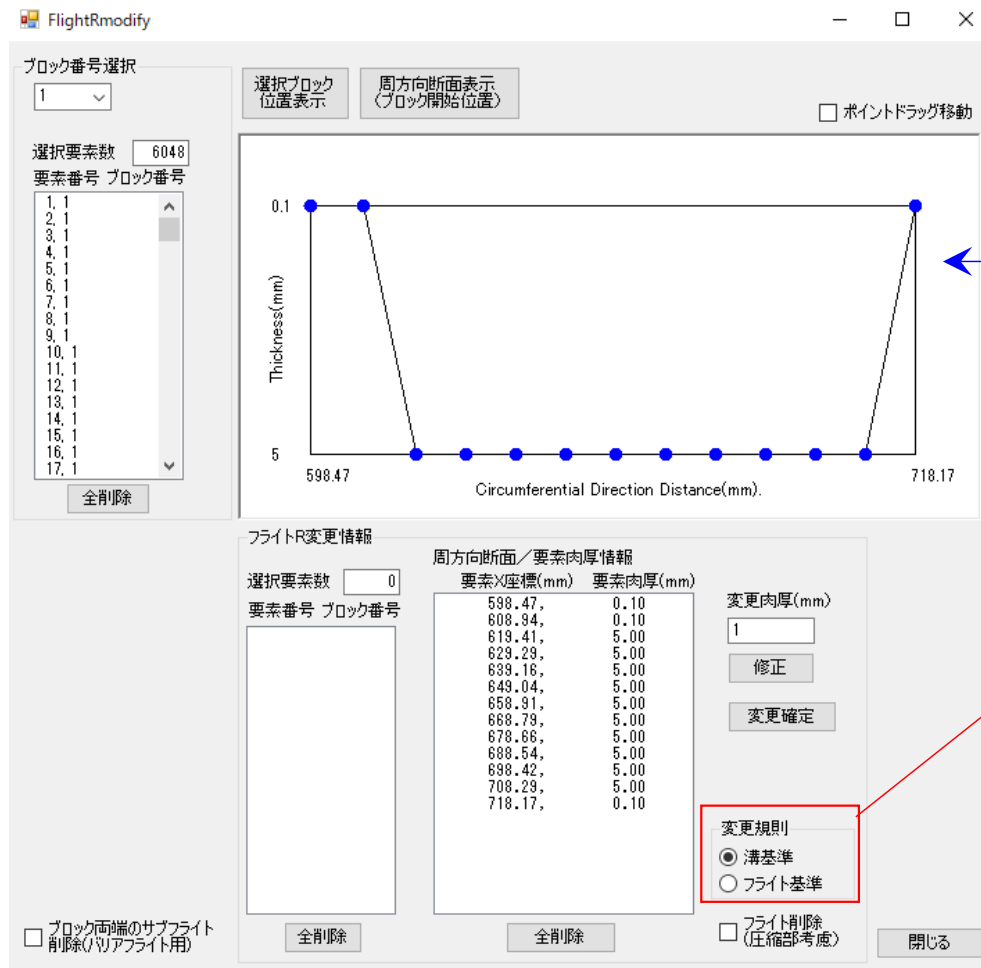


② フライト端部の一部削除: ブロック終端のフライト一部削除を一括で設定. (用途: ブロック間の境界における解析結果の不連続性を解消するモデリング上の対策)



(2) モデリング機能

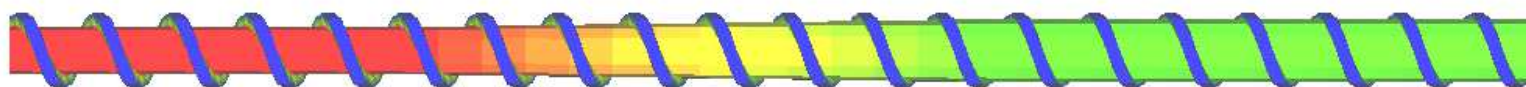
① フライト部のR付け: 選択ブロックに圧縮部(肉厚可変)が含まれる場合への対応を追加



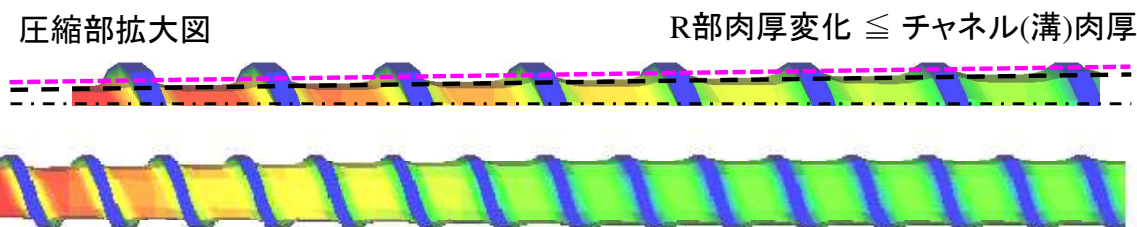
(2) モデリング機能改良

① フライト部のR付け: 利用例／肉厚変更実施後の肉厚分布

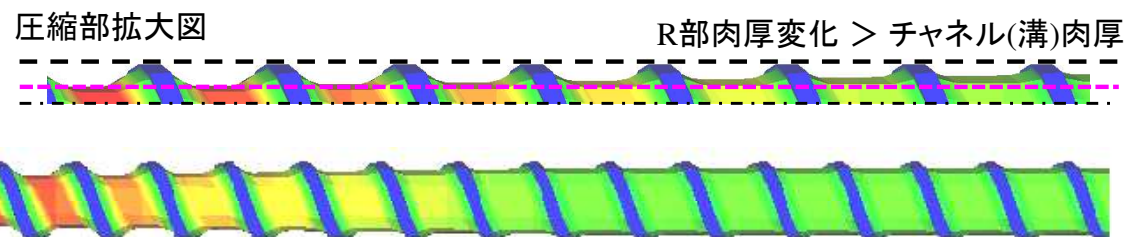
【肉厚変更なし】



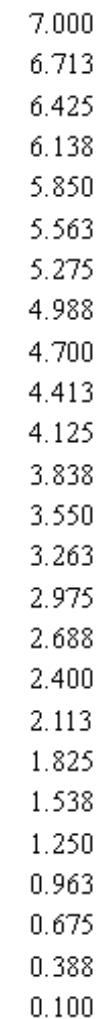
【肉厚変更例1／溝基準】



【肉厚変更例2／フライト基準】



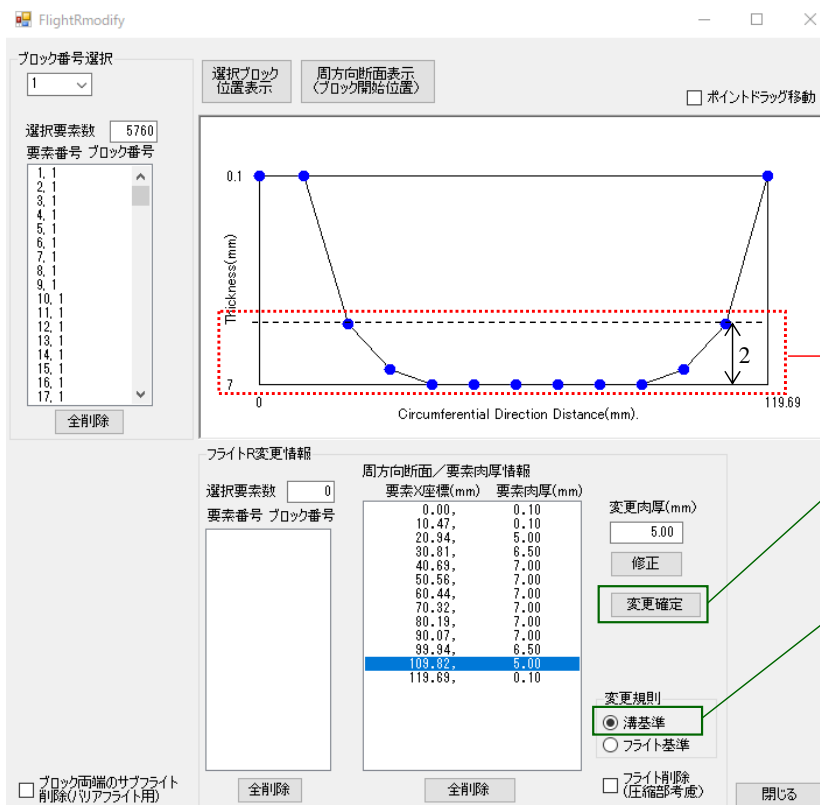
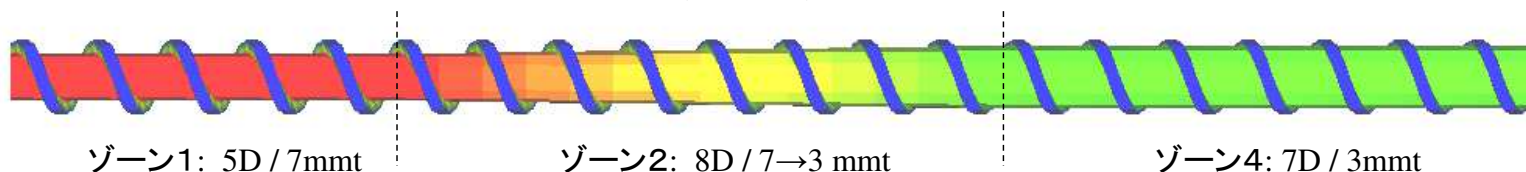
Thickness (mm)



(2) モデリング機能改良

① フライト部のR付け: 利用方法

スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=20 (762 mm), 1ブロック/3ゾーン構成



【肉厚変更例1】

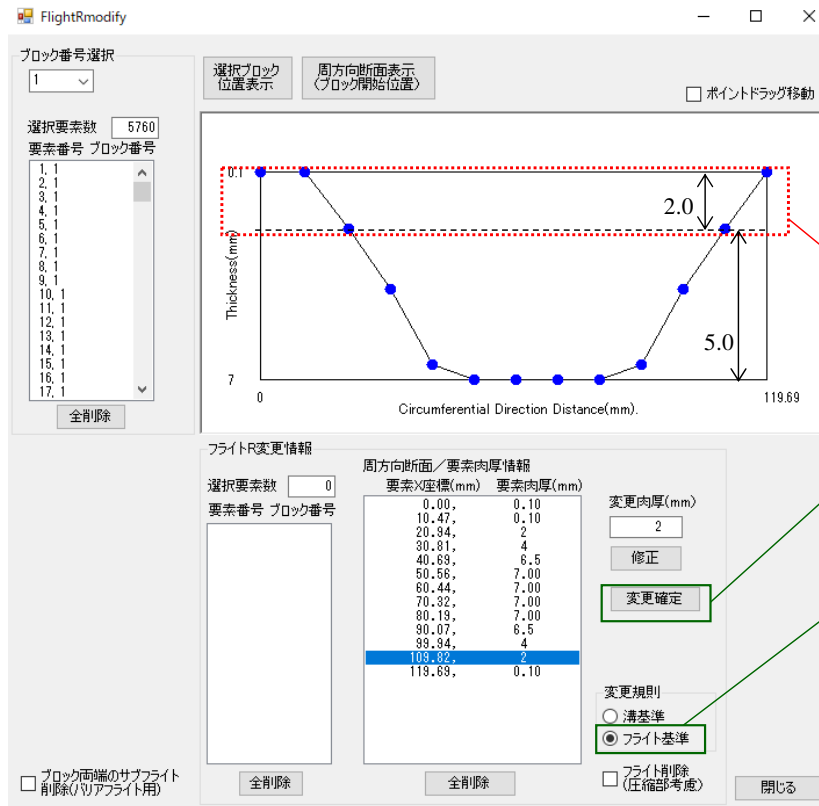
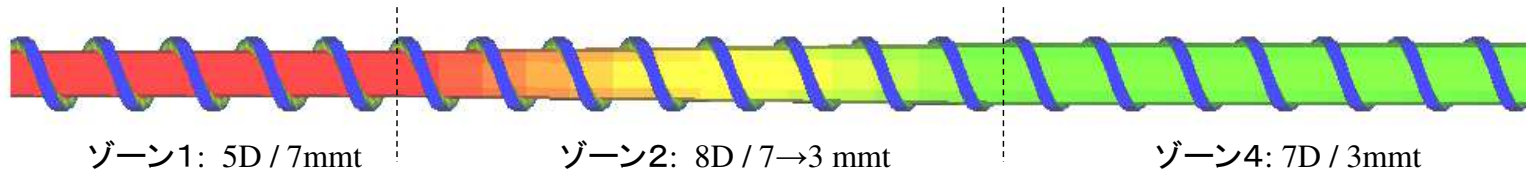
加工Rの肉厚変化 \leq スクリュ肉厚 (最薄部) のときは、溝基準にチェックして (デフォルト)、変更確定ボタンをクリックすると、チャンネル (溝) 肉厚を基準とした肉厚変更が設定されます。

上記設定後、2Dスクリュ展開要素情報加工フォームから、データセーブと3D変換を実施すると、肉厚変更されたスクリュモデルが作成されます。

(2) モデリング機能改良

① フライト部のR付け: 利用方法

スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=20 (762 mm), 1ブロック/3ゾーン構成



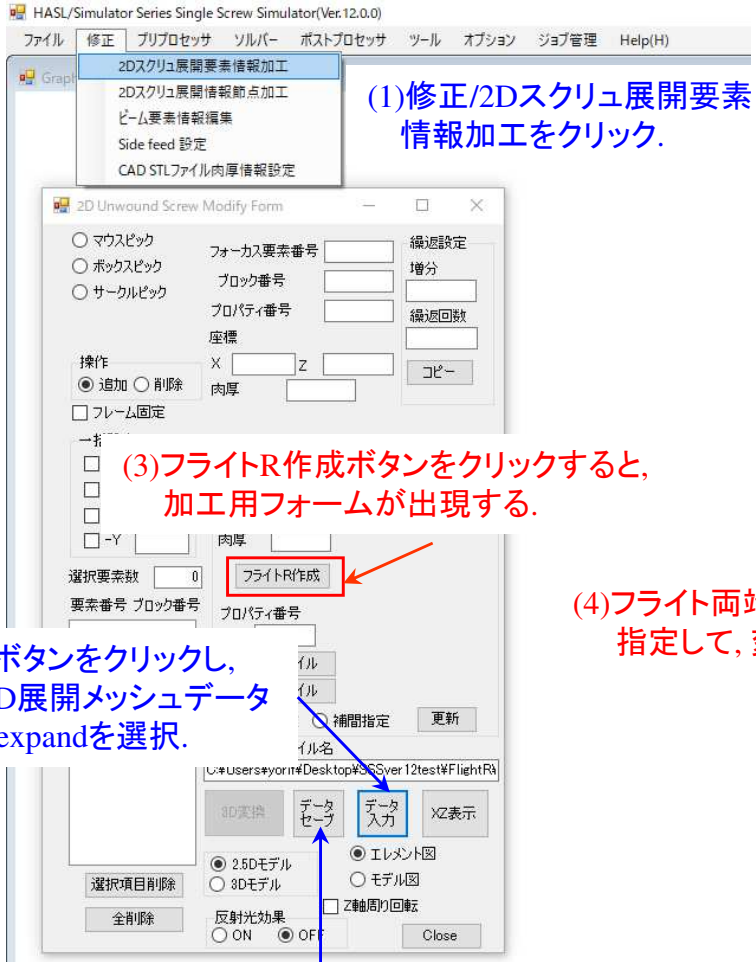
【肉厚変更例2】

加工R(テーパ)の肉厚変化 > スクリュ肉厚(最薄部)のときは、フライト基準にチェックして、変更確定ボタンをクリックすると、フライト側を基準とした肉厚変更が設定されます。(チャンネル(溝)肉厚よりも大きな肉厚変更は無視されます)

上記設定後、2Dスクリュ展開要素情報加工フォームから、データセーブと3D変換を実施すると、肉厚変更されたスクリュモデルが作成されます。

(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 操作手順



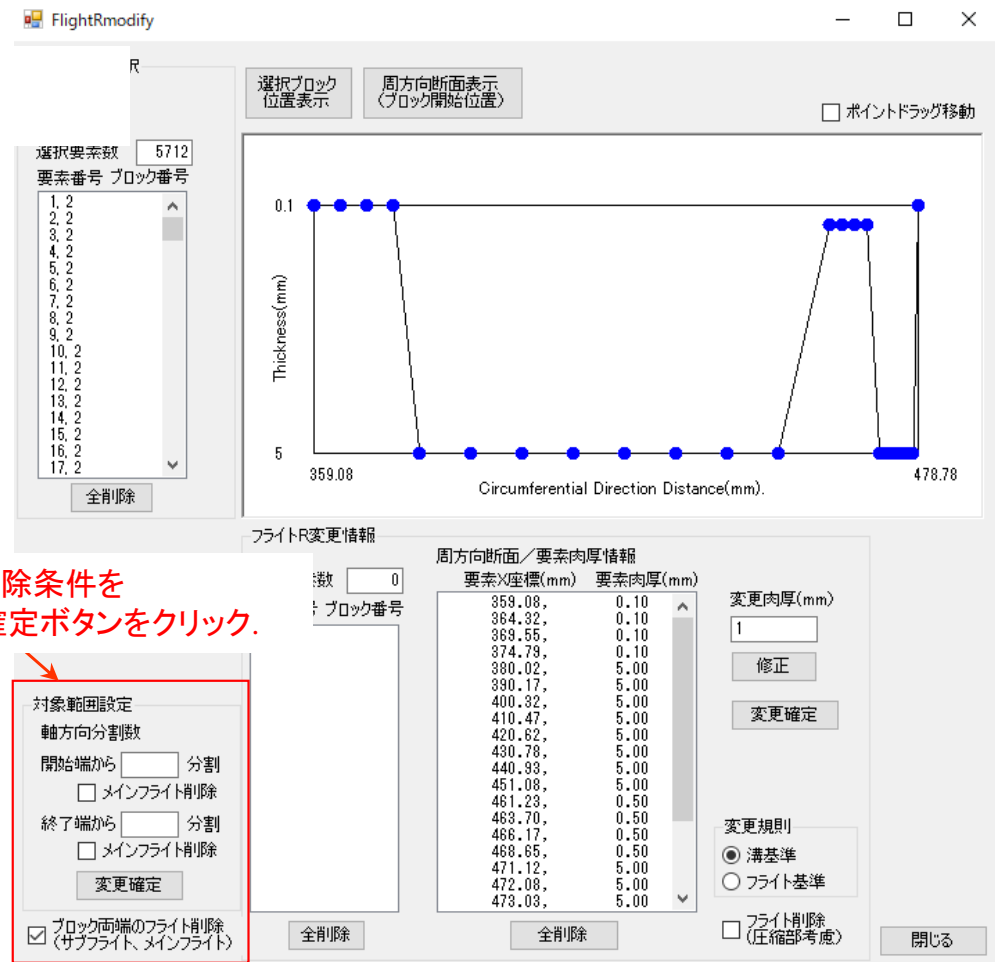
(1)修正/2Dスクリーン展開要素情報加工をクリック。

(2)データ入力ボタンをクリックし、加工前の2D展開メッシュデータファイル名.expandを選択。

(3)フライトR作成ボタンをクリックすると、加工用フォームが出現する。

(5)データセーブボタンをクリックして保存ファイル指定後、3D変換ボタンをクリックする。

フライト加工用フォーム



(4)フライト両端の削除条件を指定して、変換確定ボタンをクリック。

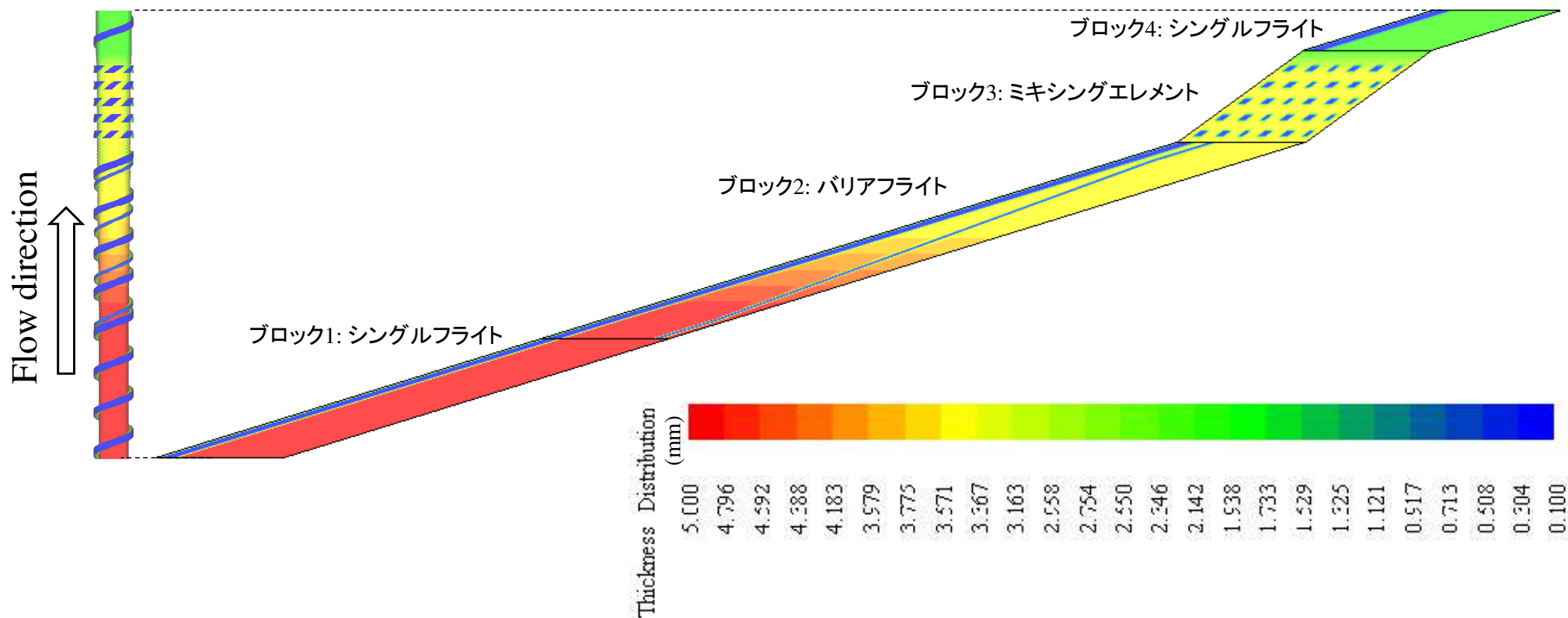
(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 利用例

【モデル1: フライト部分削除なし】

テストモデル(FlightR2): スクリュ径 38.1mm, L/D=11.25 (429 mm), 1～4ブロック構成

○肉厚分布(mm)



(2) モデリング機能改良

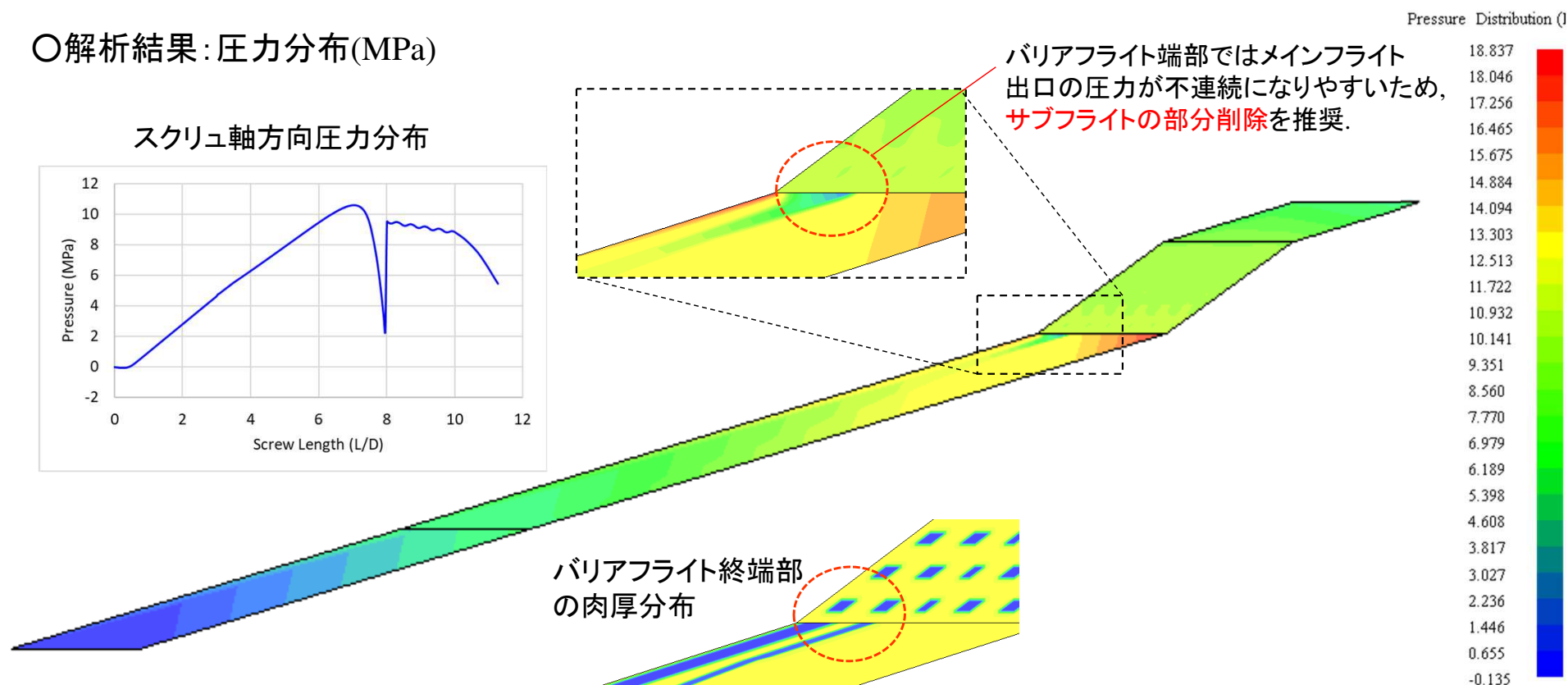
② フライト端部の一部削除: 利用例

【モデル1: フライト部分削除なし】

- ・解析条件(共通): 流量規定, 入口圧力 0.001MPa, 流量 3.8cm/sec
スクリュ回転数 60rpm,
- ・樹脂データ(共通): Newton流体 (1000Pa・s 一定)

○解析結果: 圧力分布(MPa)

スクリュ軸方向圧力分布



(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 利用例

【モデル2: サブフライト部分削除】

テストモデル(FlightR3): スクリュ径 38.1mm, L/D=11.25 (429 mm), 1~4ブロック構成, サブフライト部分削除

FlightRmodify

ブロック番号選択
2

選択ブロック
位置表示

選択要素数 5712
要素番号 ブロック番号

1, 2
2, 2
3, 2
4, 2
5, 2
6, 2
7, 2
8, 2
9, 2
10, 2
11, 2
12, 2
13, 2
14, 2
15, 2
16, 2
17, 2

全削除

フライトR変更
選択要素数
要素番号 ブロ:

対象範囲設定
軸方向分割数
開始端から 分割
☐ メインフライト削除
終了端から 5 分割
☐ メインフライト削除
変更確定

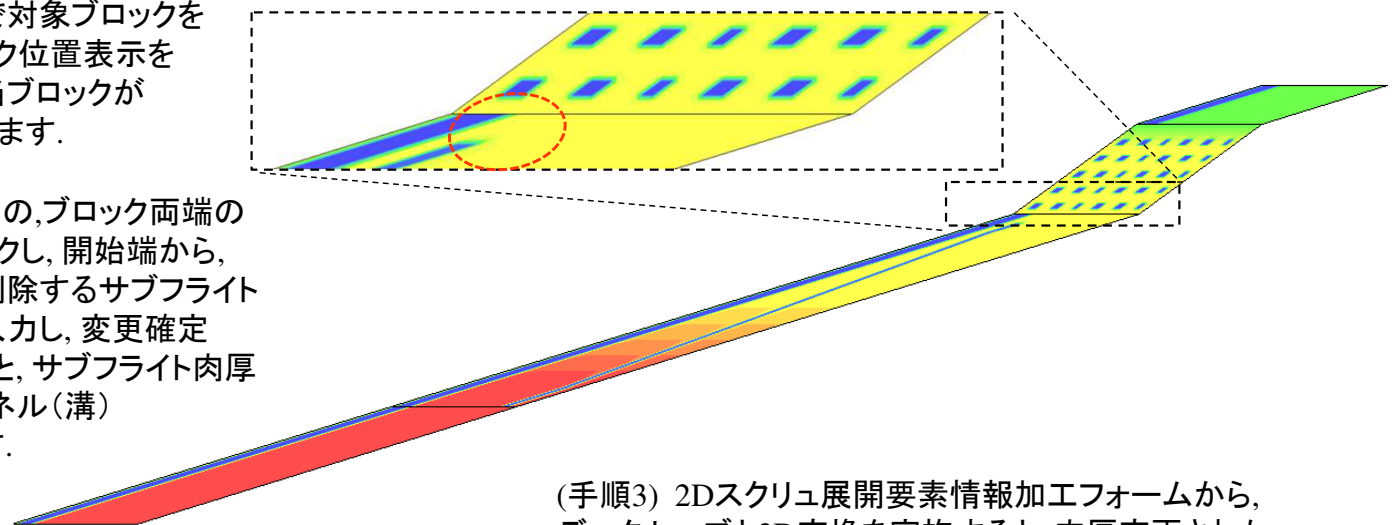
☒ ブロック両端のフライト削除
(サブフライト、メインフライト)

全削除

(手順1) フライト加工フォーム左上の
ブロック番号選択で対象ブロックを
選択し, 選択ブロック位置表示を
クリックすると, 該当ブロックが
ハイライト表示されます。

(手順2) フォーム左下の,ブロック両端の
フライト削除をチェックし, 開始端から,
または 終了端から削除するサブフライト
の軸方向分割数を入力し, 変更確定
ボタンをクリックすると, サブフライト肉厚
が, 対象領域のチャンネル(溝)
肉厚に変更されます。

○変更後の肉厚分布



(手順3) 2Dスクリュ展開要素情報加工フォームから,
データセーブと3D変換を実施すると, 肉厚変更された
スクリュモデルが作成されます。

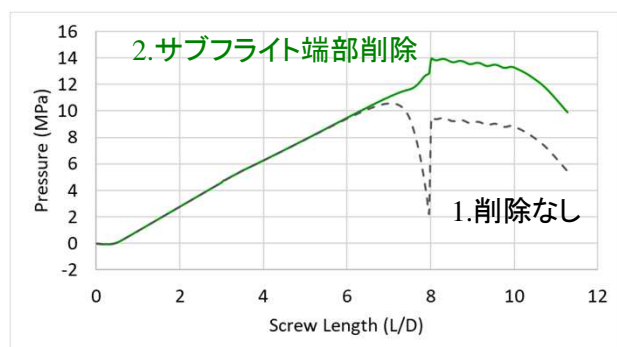
(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 利用例

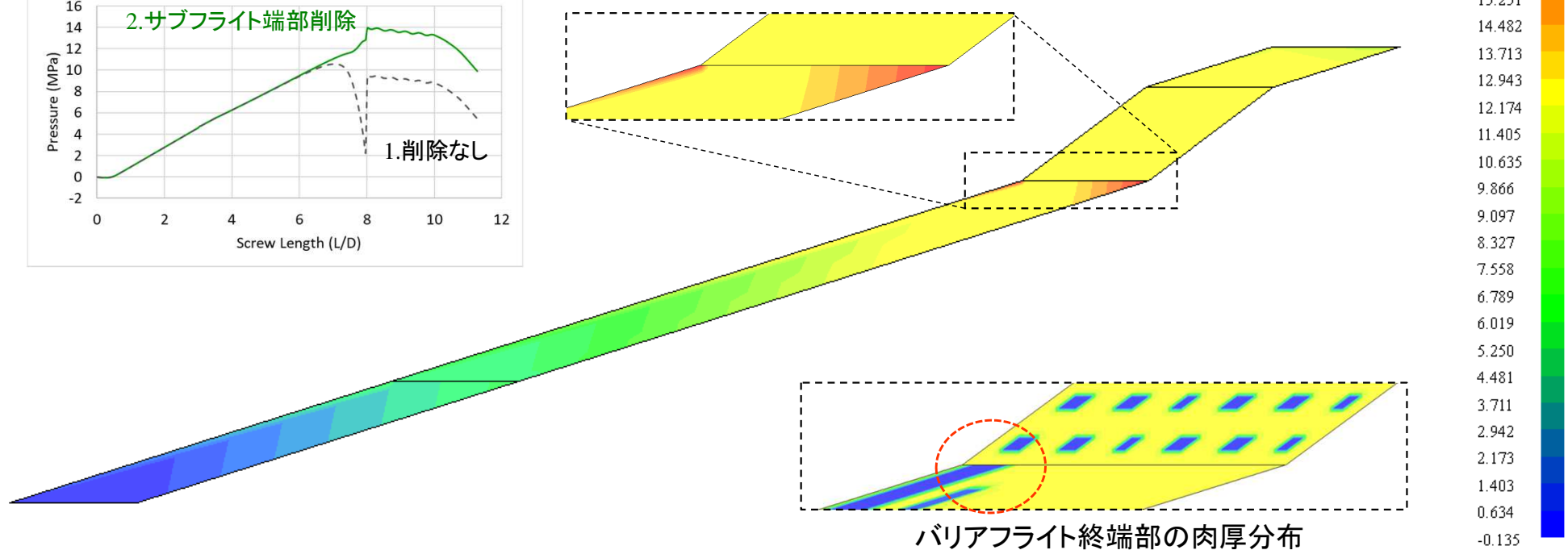
【モデル2: サブフライト部分削除】

○解析結果: 圧力分布(MPa)

スクリュ軸方向圧力分布



- ・バリアフライト端部の圧力不連続が解消された.
- ・ブロック終端において, メインフライト/ミキシング部境界での肉厚不連続の影響が見られる.
→ メインフライトの部分削除を試みた(次ページ).



(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 利用例

【モデル3: サブフライト & メインフライト 部分削除】

テストモデル(FlightR5): スクリュ径 38.1mm, L/D=11.25 (429 mm), 1~4ブロック構成, サブフライト & メインフライト部分削除

FlightRmodify

ブロック番号選択
2

選択ブロック
位置表示

選択要素数 5712
要素番号 ブロック番号

1, 2
2, 2
3, 2
4, 2
5, 2
6, 2
7, 2
8, 2
9, 2
10, 2
11, 2
12, 2
13, 2
14, 2
15, 2
16, 2
17, 2

全削除

対象範囲設定
軸方向分割数
開始端から 5 分割
☐ メインフライト削除
終了端から 5 分割
☒ メインフライト削除
変更確定

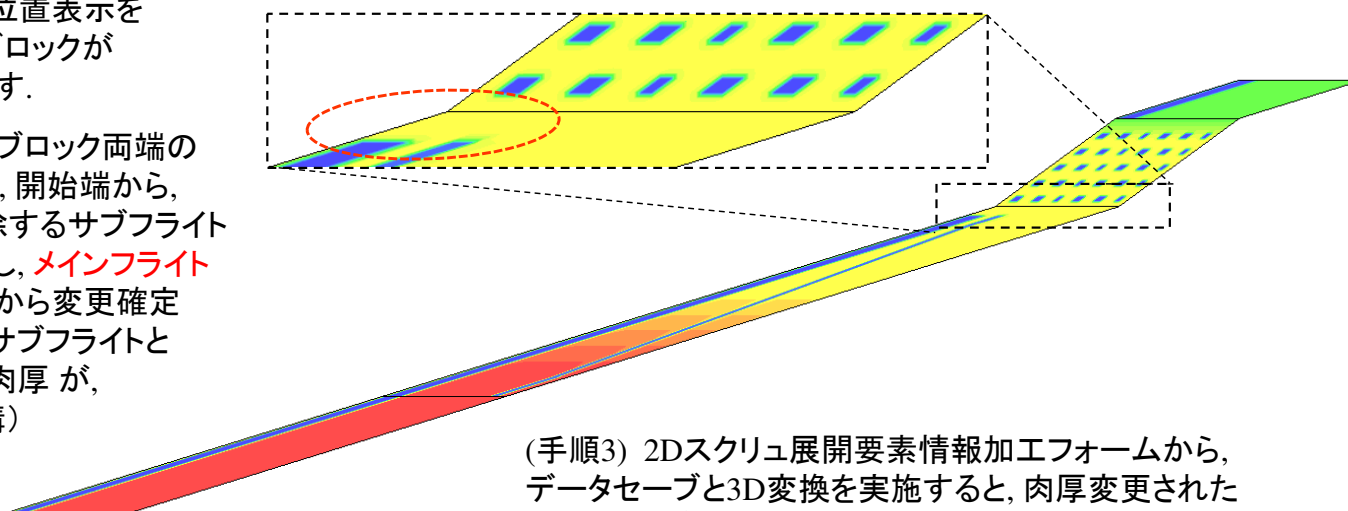
☒ ブロック両端のフライト削除
(サブフライト, メインフライト)

全削除

(手順1) フライト加工フォーム左上の
ブロック番号選択で対象ブロックを
選択し, 選択ブロック位置表示を
クリックすると, 該当ブロックが
ハイライト表示されます。

FlightR変更
手順2) フォーム左下の, ブロック両端の
フライト削除をチェックし, 開始端から,
または 終了z端から削除するサブフライト
の軸方向分割数を入力し, **メインフライト
削除にチェック**を入れてから変更確定
ボタンをクリックすると, サブフライトと
メインフライトの両方の肉厚 が,
対象領域のチャネル(溝)
肉厚に変更されます。
*** シングルフライトの
場合も使用できます。**

○変更後の肉厚分布



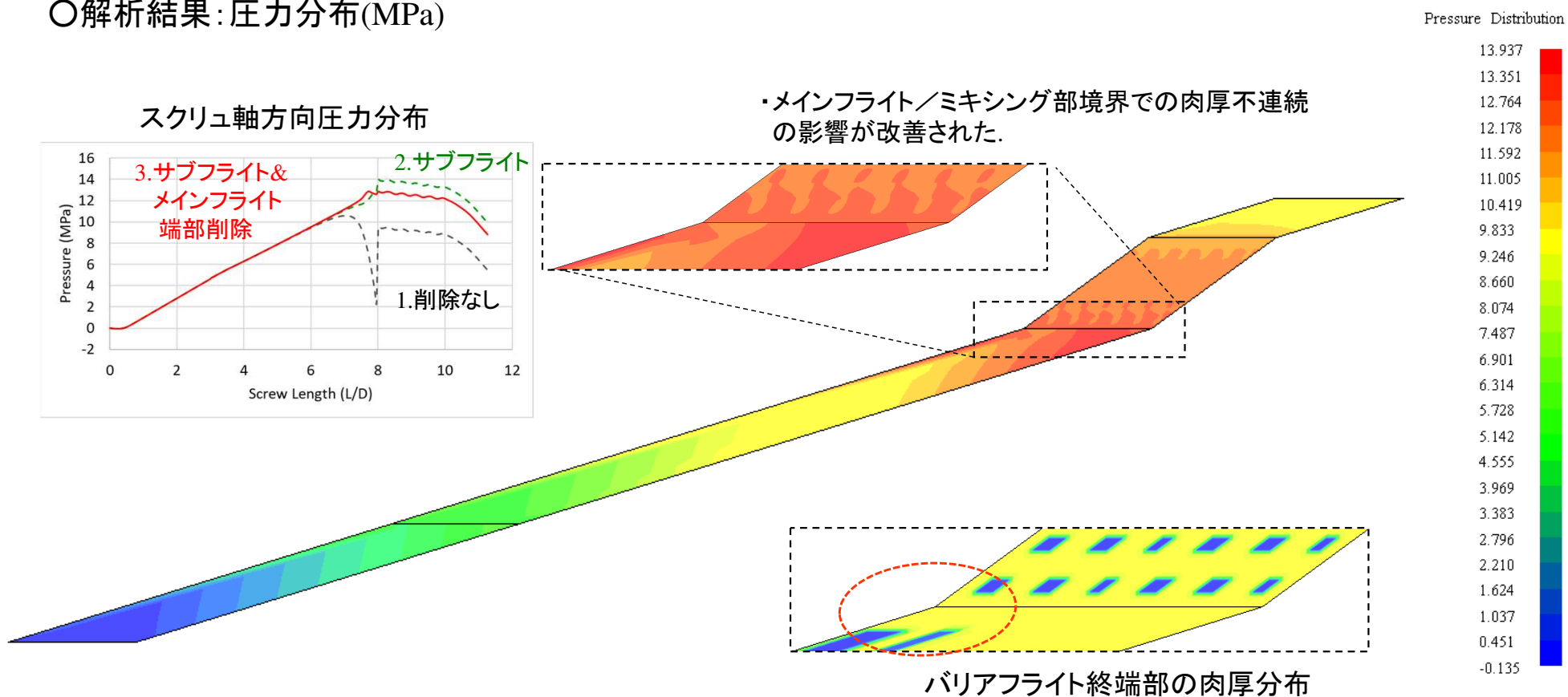
(手順3) 2Dスクリュ展開要素情報加工フォームから,
データセーブと3D変換を実施すると, 肉厚変更された
スクリュモデルが作成されます。

(2) モデリング機能改良

② フライト端部の一部削除: 利用例

【モデル3: サブフライト & メインフライト 部分削除】

○解析結果: 圧力分布(MPa)



(2) モデリング機能改良

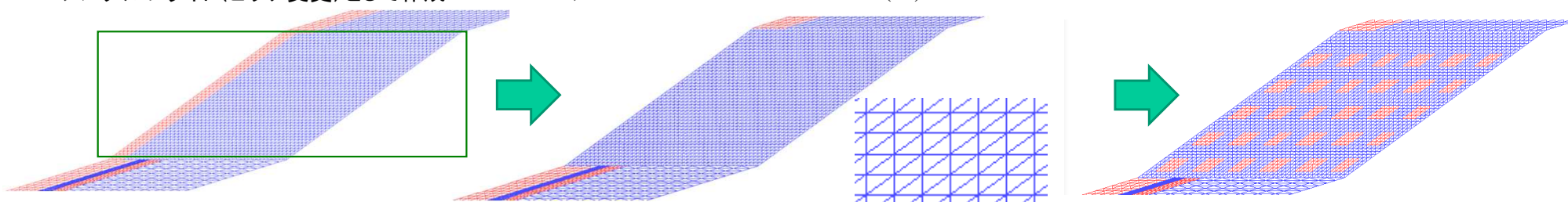
○その他の機能紹介／フライト全削除

【参考事例】今回テストモデル作成に利用した方法

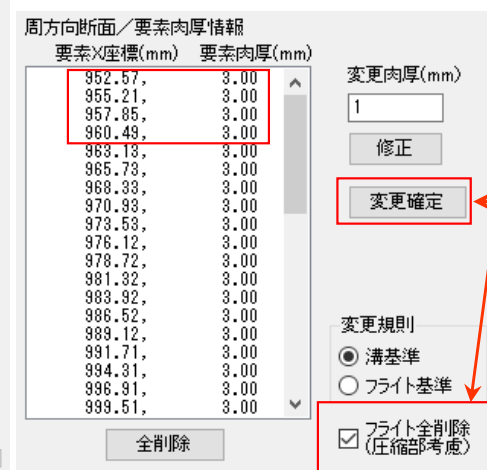
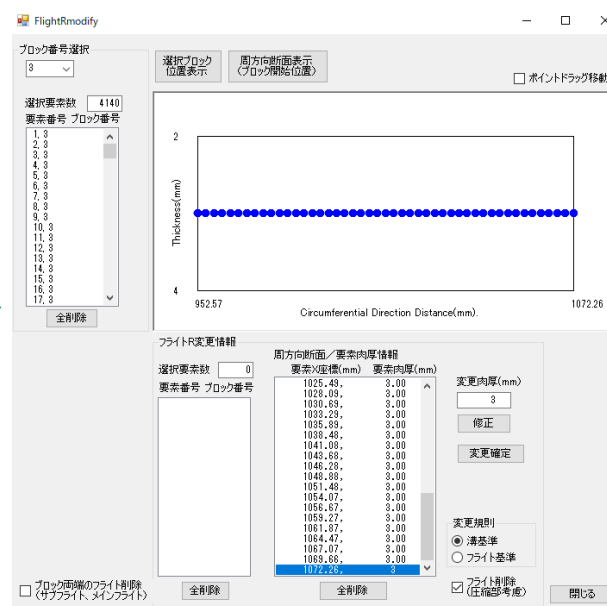
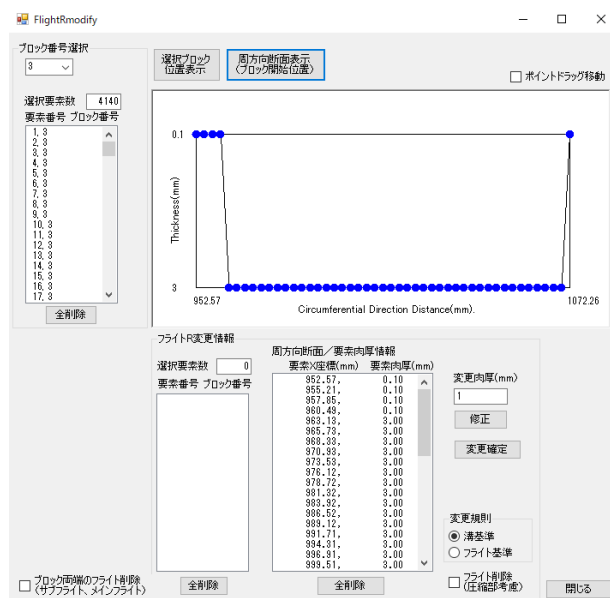
ブロック3: ミキシングエレメントを最初に
シングルフライト(ピッチ変更)として作成

フライト加工フォームで、**フライト全削除(拡張機能)**を利用
して、メインフライトの肉厚をチャンネル(溝)肉厚に変更

2Dスクリーン展開要素情報加工フォーム
からピン要素肉厚変更(従来通り)



* 従来通りに矩形領域を利用したミキシング作成も
可能です。矩形領域の場合と比べて要素位置構成
が異なるので、ピン要素の形状などに応じて
使い分けることを推奨します。



フライト肉厚変更後、
フライト全削除に
チェックを入れて
変更確定ボタンを
クリックする。

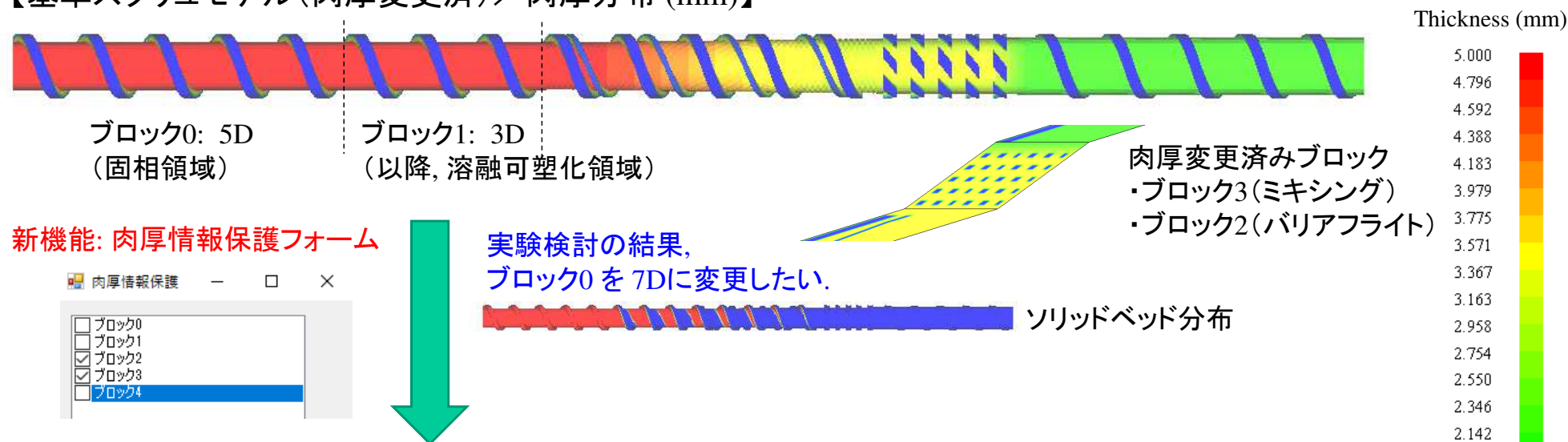
② 改良成果

(3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能

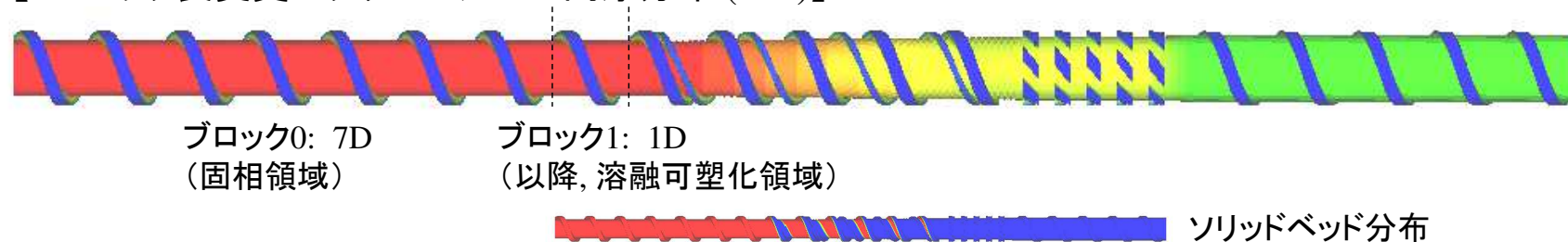
本機能を利用すると、要素肉厚変更で加工を施したスクリュモデルを、変更情報を保護したまま再メッシュ作成(リメッシュ)を実施することが可能になります。

○利用例／テストモデル(remeshtest): スクリュ径 38.1mm, L/D=20.27 (772 mm), 0~4ブロック構成

【基準スクリュモデル(肉厚変更済)／肉厚分布 (mm)】



【0ブロック長変更スクリュモデル／肉厚分布 (mm)】



(3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能

利用手順

(事前準備) 従来通りの運用でスクリュモデルを作成

0. SSS Ver.12.0.0 でスクリュモデルを作成します。

1. 必要な箇所に要素肉厚変更を行います。
2. 解析実施してスクリュモデルが正常に作成されていることを確認します。

(肉厚変更情報の保護方法)

3. スクリュ形状テンプレート下部のデータファイル読込ボタンをクリックして、リメッシュが必要なスクリュモデルを読み込みます。

4. 手順3. のモデルファイル読込後に出現する、
☐ リメッシュ時に元の肉厚変更情報を保持
にチェックを入れます。

SSS Ver.12.0.0 スクリュ形状タブ データファイル読込後

Single Screw Simulator Template

スクリュ形状 タブ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統計表 ユーザ定義解析

ブロック数 0 確定

削除対象番号

ブロック情報編集

バレル直径 38.1 mm

スクリュ形状基本パラメータ

ゾーン数 1

フライト幅方向分割数 4

☐ 矩形領域定義 ☐ 逆ねじ

パラメータ入力 コピー バリアフライト専用

スクリュ幾何形状パラメータ

ゾーン	C#	ベース幅	S長さ (L/D)	Sピッチ (Begin)	Sピッチ (End)	C長さ (Begin)	C長さ (End)	F幅 (Begin)	F幅 (End)	Fクリアランス	Tadmon model
1	0	1	5	38.1	38.1	5	5	6.35	6.35	0.1	off

熱流動境界条件

ゾーン	S熱伝達 (Begin)	S熱伝達 (End)	S温度 (Begin)	S温度 (End)	B熱伝達 (Begin)	B熱伝達 (End)	B温度 (Begin)	B温度 (End)
1	0	0	100	100	300	300	180	180

H.T. coef.(W/m2/K)

断面表示

XY XZ YZ

☐ 逆転

メッシュ生成用ベースデータファイル名

C:\Users\yorif\Desktop\SSSver12test\FlightR\reme

データファイル読込

☒ リメッシュ時に元の肉厚変更情報を保持

メッシュ生成 再描画

FEA情報

要素数最大値 50000

節点数最大値 50000

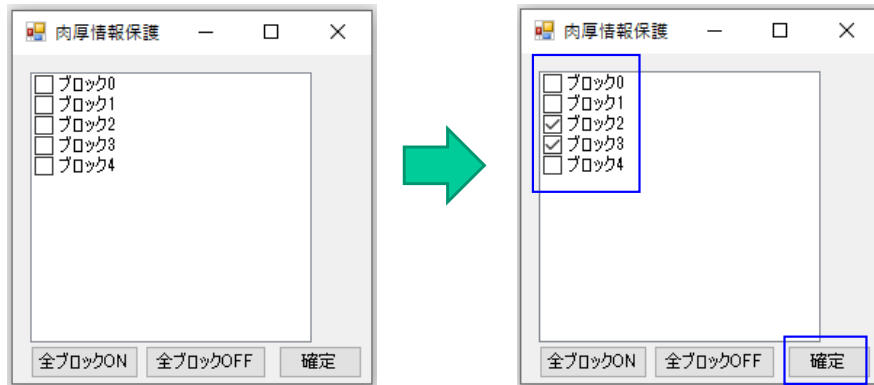
☐ Beam Screw ヘッド要素作成

3. 4.

(3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能

利用手順

- 手順4. のチェック後、肉厚情報保護フォームが出現し、手順3. で読込んだスクリュモデルのブロック構成が表示されます。
- 肉厚情報保護フォームにて、肉厚変更を保護したいブロックにチェックを入れて、確定ボタンをクリックすると、保護が必要なブロック情報が記録されて、フォームが自動で閉じます。



(参考) 肉厚変更が保護されるブロックは、メッシュ構成(要素数および節点数)が変化していないことが前提になります。

(メッシュ構成が変化した場合、肉厚情報は保護されません)

また肉厚変更がないブロックにチェックを入れてもリメッシュ後の結果は同じです。したがって、本例のように該当ブロックのみにチェックを入れても、フォーム下部の全ブロックONを利用して全ブロックにチェックを入れても同じ結果が得られます。

(反対に、保護したくないブロックがある場合には、該当ブロックのチェックを外してください)

SSS Ver.12.0.0 スクリュ形状タブ データファイル読込後

Single Screw Simulator Template

スクリュ形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統計表 ユーザ定義解析

ブロック数 0 確定

削除対象番号

ブロック情報編集

バレル直径 38.1 mm

スクリュ形状基本パラメータ

ゾーン数 1

フライト幅方向分割数 4

☐ 矩形領域定義 ☐ 逆ねじ

パラメータ入力 コピー バリアフライト専用

スクリュ幾何形状パラメータ

ゾーン	C#	バース幅	S長さ (L/D)	Sピッチ (Begin)	Sピッチ (End)	C長さ (Begin)	C長さ (End)	F幅 (Begin)	F幅 (End)	Fクリアランス	Tadmon model
1	0	1	5	38.1	38.1	5	5	6.35	6.35	0.1	off

熱流動境界条件

ゾーン	S熱伝達 (Begin)	S熱伝達 (End)	S温度 (Begin)	S温度 (End)	B熱伝達 (Begin)	B熱伝達 (End)	B温度 (Begin)	B温度 (End)
1	0	0	100	100	300	300	180	180

H.T. coef.(W/m2/K)

● エレメント図
○ モデル図
○ 反射光効果
○ ON
● OFF

メッシュ生成

再描画

FEA情報

要素数最大値 50000

節点数最大値 50000

メッシュ生成用ベースデータファイル名

C:\Users\yori\Desktop\SSSver12test\FlightR\reme

データファイル 読込

☒ リメッシュ時に元の肉厚変更情報を保持

☐ Beam Screw ヘッド要素作成

(3) リメッシュ時の肉厚変更情報の保護機能

利用手順

7. 手順6. で肉厚情報を保護するブロックを確定後、必要なブロックの情報を変更します。
(例: 0ブロック長の変更, 熱伝達係数の変更など)
8. 手順7. の情報変更後、メッシュ生成ボタンをクリックして保存するスクリュモデルファイル名を決定すると、メッシュ作成が開始され、テンプレートに入力された情報に基づきメッシュ作成後、指定したブロックについて元のスクリュモデルの肉厚情報が保護された新規スクリュモデルが表示されます。

* 以上が利用時の操作手順になります。

本機能により、従来は再作成が必要であった肉厚情報を保護することができるようになりました。また、メッシュ生成時に名前を変更することで、同じ内容のスクリュモデルを複製することが可能ですので、肉厚情報変更時の途中経過の記録などにも活用可能です。

SSS Ver.12.0.0 スクリュ形状タブ スクリュ情報変更後

Single Screw Simulator Template

スクリュ形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統括表 ユーザ定義解析

ブロック数 0 確定

削除対象番号

ブロック情報編集

パレル直径 38.1 mm

スクリュ形状基本パラメータ

ゾーン数 1

フライト幅方向分割数 4

☐ 矩形領域定義 ☐ 逆ねじ

パラメータ入力 コピー バリアフライト専用

スクリュ幾何形状パラメータ

ゾーン	C#	ベース幅	S長さ (L/D)	Stピッチ (Begin)	Stピッチ (End)	C深さ (Begin)	C深さ (End)	F幅 (Begin)	F幅 (End)	F 切アランス	Tadmon model
1	0	1	5	38.1	38.1	5	5	6.35	6.35	0.1	off

熱流動境界条件

ゾーン	S熱伝達 (Begin)	S熱伝達 (End)	S温度 (Begin)	S温度 (End)	B熱伝達 (Begin)	B熱伝達 (End)	B温度 (Begin)	B温度 (End)
1	0	0	100	100	230	230	180	180

H.T. coef (W/m2/K)

断面表示

XY XZ YZ

☐ 逆転

☐ 2.5Dモデル(解析用)

☐ 3Dモデル(確認用)

☒ 2Dモデル(加工用)

メッシュ生成

再描画

メッシュ生成用ベースデータファイル名

C:\Users\yori\Desktop\SSSver12test\FlightR\reme

データファイル 読み込み

FEA情報

要素数最大値 50000

節点数最大値 50000

☒ リメッシュ時に元の肉厚変更情報を保持

☐ Beam Screw ヘッド要素作成

反射光効果

☐ ON

☒ OFF

エレメント図

モデル図

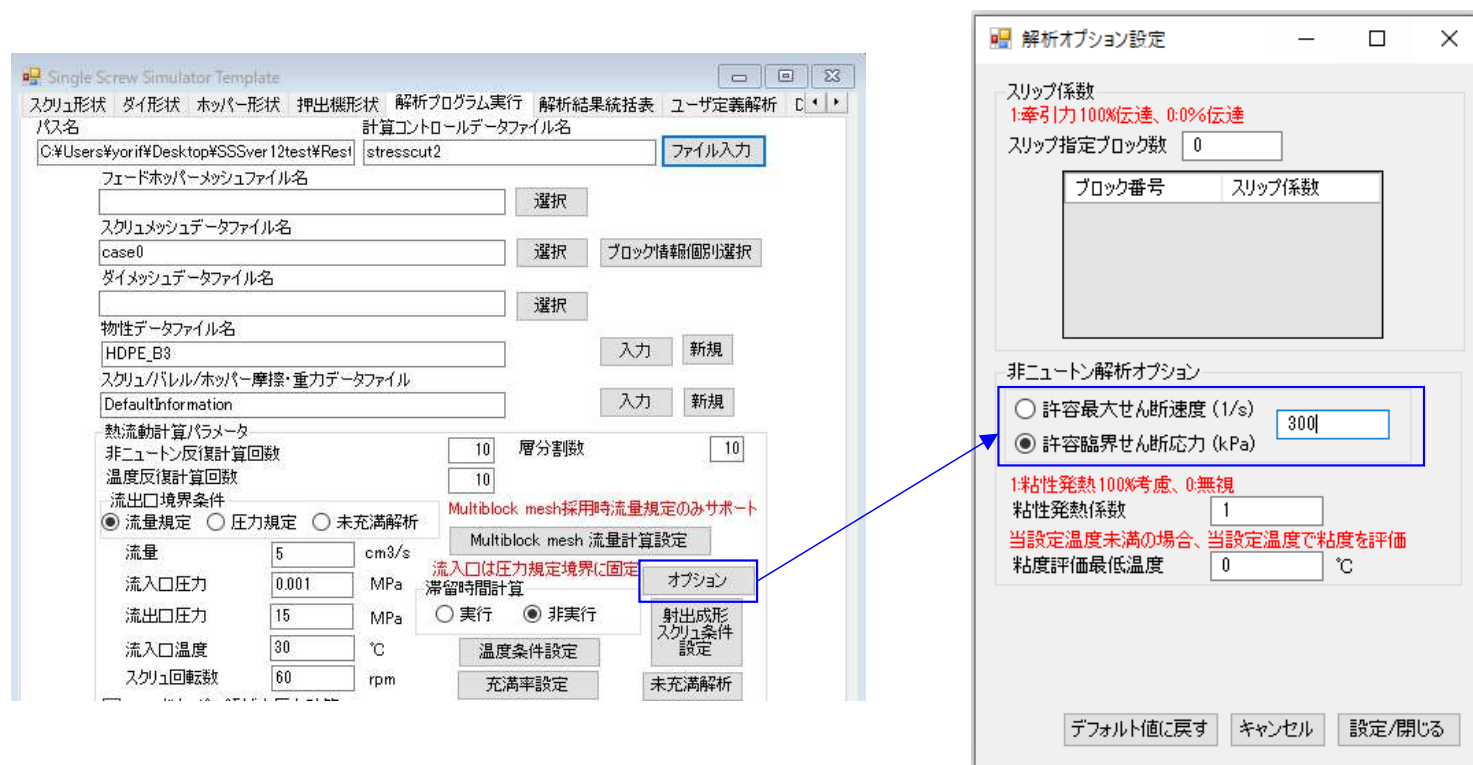
S:スクリュ
B:パレル
F:フライト
C:チャンネル

② 改良成果

(4) 臨界せん断応力の設定

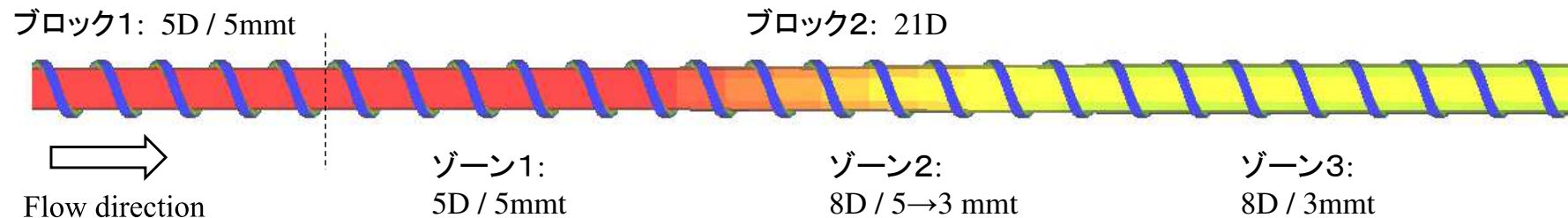
滑り効果を疑似的に表現するCut off パラメータの設定で、従来の許容最大せん断速度の最大値を設定する機能 ((1) Shear Cutoff) に加えて、許容臨界せん断応力 ((2) Stress Cutoff) を設定する機能が追加されました。

解析プログラム実行タブ内のオプションボタンをクリックして出現する、解析オプション設定フォームに追加された、(1) Shear Cutoff と (2) Stress Cutoff のラジオボタンを切り替えることで、許容最大せん断速度と許容臨界せん断応力の設定値が、解析結果に反映されます。臨界せん断応力の閾値はkPa単位で入力します。一般的な溶融樹脂の滑り臨界せん断応力は、0.2~0.3MPa程度とされていますので、滑りを考慮する場合には、設定値として200~300 KPa程度の値を採用することを推奨します。



(4) 臨界せん断応力の設定／解析事例

- ・スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=26 (990.6 mm), 2ブロック構成
- ・樹脂データ(共通): HDPE_B3 (Materialfit データベース)
- ・解析条件(共通): 流量規定 9cm³/sec, 入口圧力 0.001MPa, スクリュ回転数 60rpm
バレル温度 200°C, 入口温度 30°C



Cut off の効果確認

(条件1) Cutoff パラメータ未設定(デフォルト)

非ニュートン解析オプション

☒ 許容最大せん断速度 (1/s) 1000000

☐ 許容臨界せん断応力 (kPa)

(条件2) Cutoff パラメータ設定: 許容最大せん断速度1000 /sec

非ニュートン解析オプション

☒ 許容最大せん断速度 (1/s) 1000

☐ 許容臨界せん断応力 (kPa)

(条件3) Cutoff パラメータ設定: 許容臨界せん断応力300 kPa

非ニュートン解析オプション

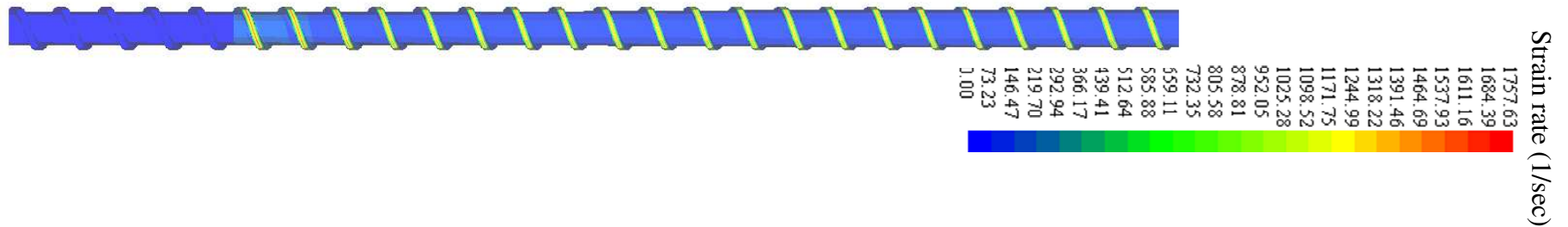
☐ 許容最大せん断速度 (1/s)

☒ 許容臨界せん断応力 (kPa) 300

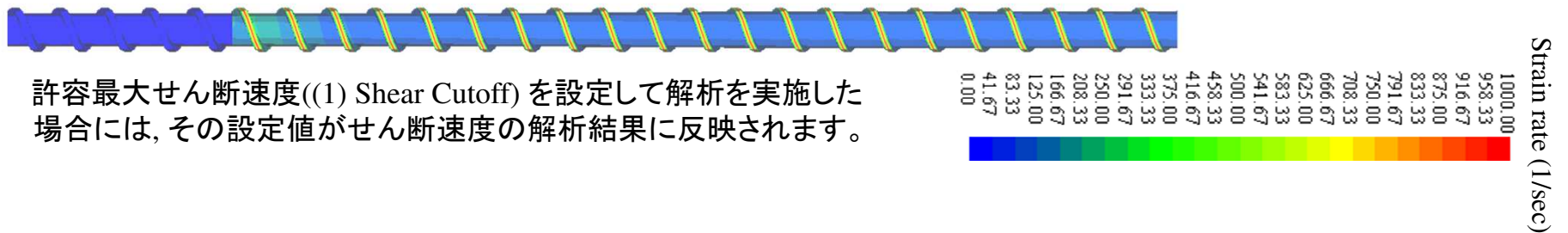
(4) 臨界せん断応力の設定／解析結果

○せん断速度分布(1/sec)

(条件1) Cutoff パラメータ未設定(デフォルト)

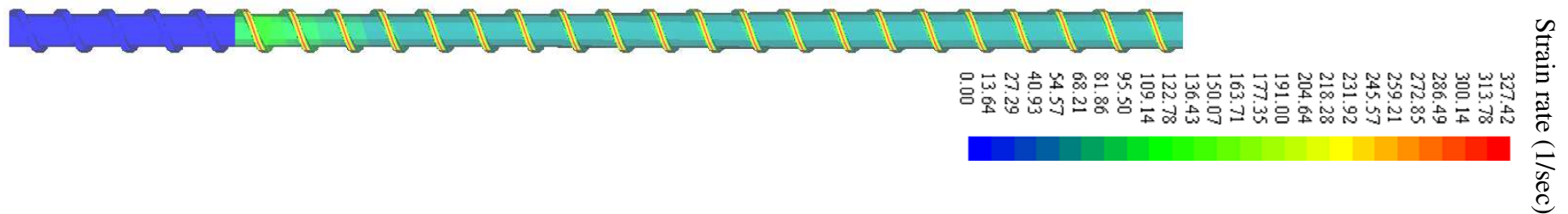


(条件2) Cutoff パラメータ設定: 許容最大せん断速度1000 /sec



許容最大せん断速度((1) Shear Cutoff) を設定して解析を実施した場合には、その設定値がせん断速度の解析結果に反映されます。

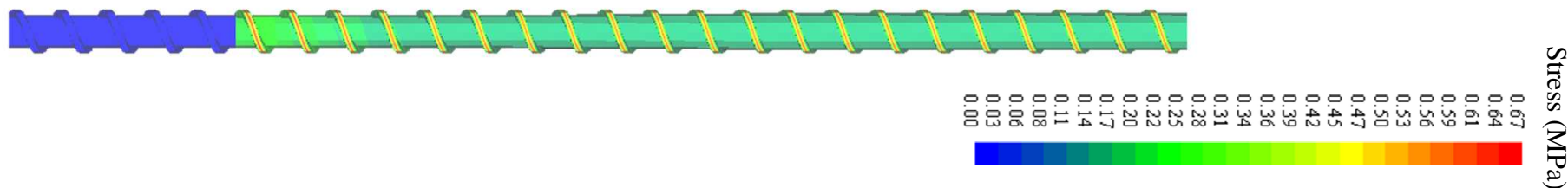
(条件3) Cutoff パラメータ設定: 許容臨界せん断応力300 kPa



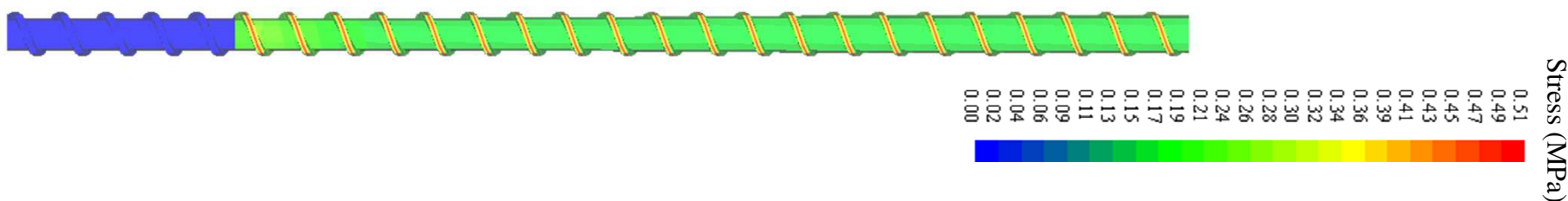
(4) 臨界せん断応力の設定／解析結果

○せん断応力分布(MPa)

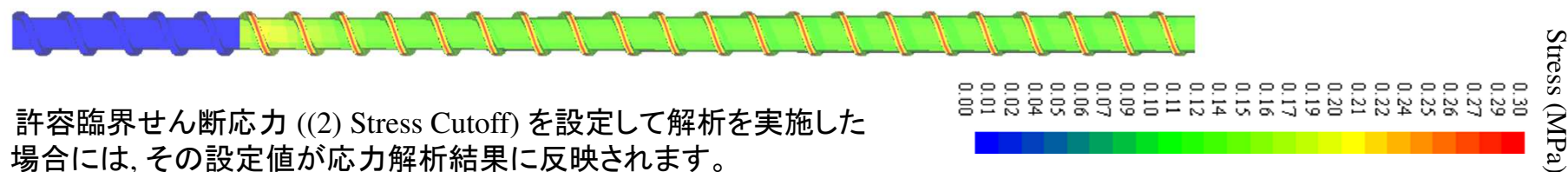
(条件1) Cutoff パラメータ未設定(デフォルト)



(条件2) Cutoff パラメータ設定: 許容最大せん断速度1000 /sec



(条件3) Cutoff パラメータ設定: 許容臨界せん断応力300 kPa



許容臨界せん断応力 ((2) Stress Cutoff) を設定して解析を実施した場合には, その設定値が応力解析結果に反映されます。

(4) 臨界せん断応力の設定／解析結果

○温度分布(°C)

(条件1) Cutoff パラメータ未設定(デフォルト)



(条件2) Cutoff パラメータ設定: 許容最大せん断速度1000 /sec



(条件3) Cutoff パラメータ設定: 許容臨界せん断応力300 kPa



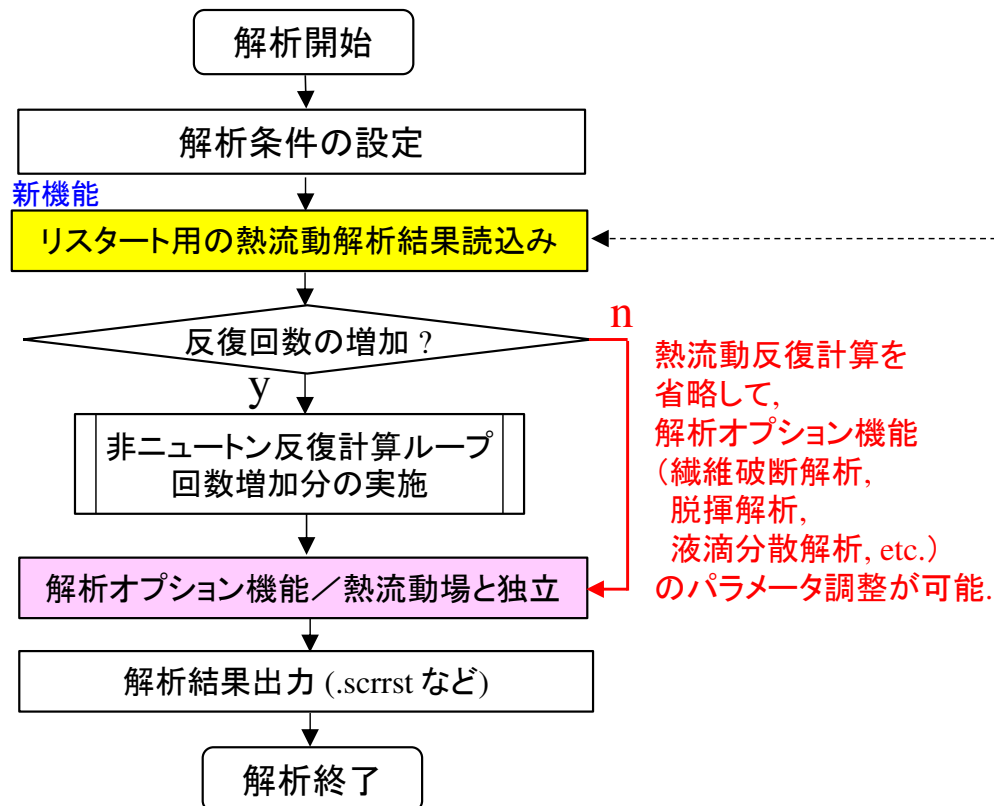
Temp. (°C)

240.000
231.250
222.500
213.750
205.000
196.250
187.500
178.750
170.000
161.250
152.500
143.750
135.000
126.250
117.500
108.750
100.000
91.250
82.500
73.750
65.000
56.250
47.500
38.750
30.000

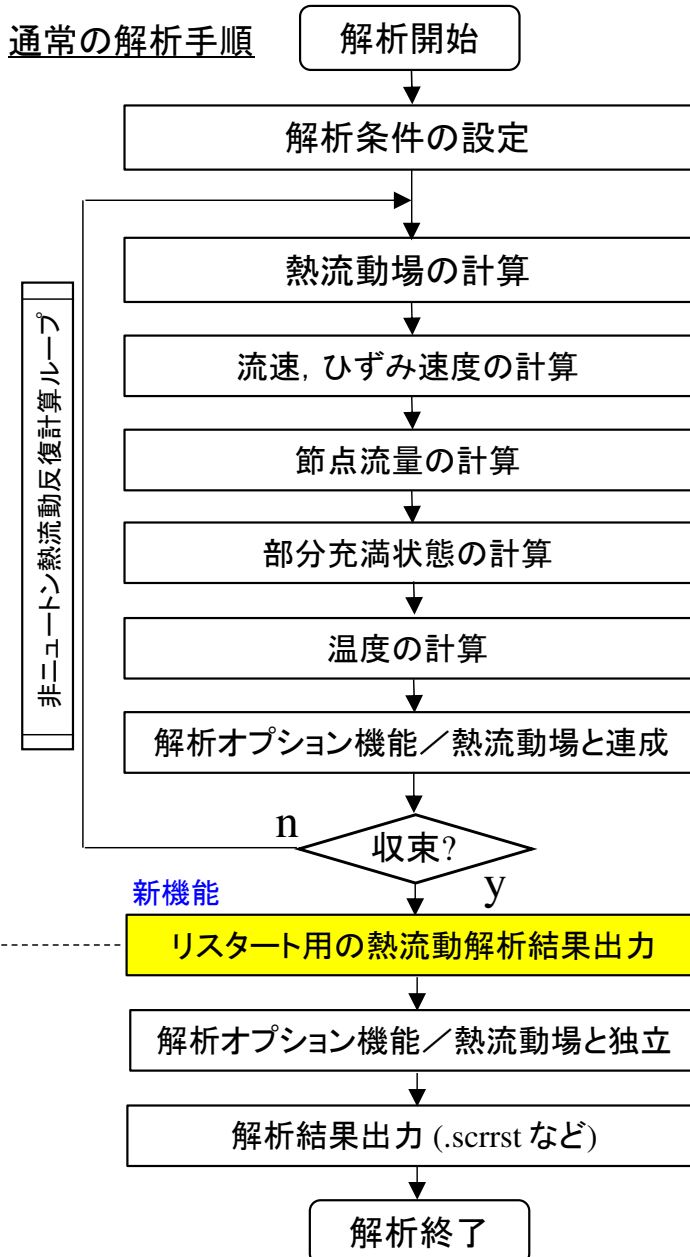
(5) 解析のリスタート機能

本機能を利用すると、熱流動反復計算ループ終了時の解析結果を再利用することで、計算時間の短縮を図ることができます。

リスタート解析手順



通常の解析手順



(5) 解析のリスタート機能

利用手順

(事前準備)

0. SSS Ver.12.0.0 で通常(従来通り)の解析を実施します。

⇒ リスタート用の熱流動解析結果を得ることが目的
計算コントロールデータファイル名 recalcalc が出力される。

(リスタート解析の条件設定方法)

1. 解析プログラム実行タブ下段に設置された Recalculation欄の
□ リスタート計算 にチェックを入れる。

⇒ 選択ボタンをクリックし, 0. で解析済みの
計算コントロールデータファイル名.ncal を選択する。

SSS Ver.12.0.0 解析プログラム実行タブ 初期画面

The screenshot displays the 'Single Screw Simulator Template' window. The '解析プログラム実行' (Run Analysis Program) tab is active. In the '計算コントロールデータファイル名' (Calculation Control Data File Name) field, 'recalcalc' is entered. The 'Recalculation / Set Original Calculation Control Parameters' section is highlighted with a blue box. It contains a checked box for 'リスタート計算' (Restart Calculation) and a '選択' (Select) button. Below this, the '計算コントロールデータファイル名' (Calculation Control Data File Name) field is also highlighted with a blue box, showing 'recalcalc'. The '計算結果ファイル名' (Calculation Result File Name) field shows 'SingleScrewSimulatorResult'. The 'Recalculation' section is also highlighted with a blue box, showing the 'リスタート計算' (Restart Calculation) checkbox.

(5) 解析のリスタート機能

利用手順

- 手順1. で解析条件ファイル(.ncal)を読込むと、該当ファイルの解析条件内容が設定されます。
- リスタート解析で得られる解析結果ファイル名(.scrrst, etc.)を別名で保存する場合は、解析結果ファイル名欄に設定された元の名前を変更します。
(変更しない場合は上書き保存されます。)
- リスタート解析で得られる計算コントロールデータファイル名(.ncal)を、3. の解析結果ファイル名と同じにする場合(推奨)には、計算コントロールデータファイル名欄 右下のコピーボタンをクリックすると、手順3. で設定した名前が反映されます。

スクリーン形状 ダイ形状 ホッパー形状 押出機形状 解析プログラム実行 解析結果統計表 ユーザ定義解析

パス名 計算コントロールデータファイル名

C:\Users\Myori\Desktop\SSSVer12test\WRe ファイル入力

4. コピー

フィードホッパーメッシュファイル名 選択

スクリーンメッシュデータファイル名 選択

case0

ダイメッシュデータファイル名 選択

物性データファイル名

HDPE_B3 入力 新規

スクリーン/バレル/ホッパー摩擦・重力データファイル 入力 新規

Default Information

熱流動計算パラメータ

非ニュートン反復計算回数 10 層分割数 10

温度反復計算回数 10

流出境界条件

☒ 流量規定 ☐ 圧力規定 ☐ 未充填解析

流量 5.4 cm³/s

流入口圧力 0.001 MPa

流出口圧力 15 MPa

流入口温度 30 °C

スクリーン回転数 60 rpm

Multiblock mesh採用時流量規定のみサポート

Multiblock mesh 流量計算設定

流入口は圧力規定境界に固定

滞留時間計算

☐ 実行 ☒ 非実行

射出成形スクリーン条件設定

温度条件設定

充填率設定

未充填解析

☐ フィードホッパー領域内圧力計算

☒ 固体輸送領域内圧力計算

☒ Tadmor溶融可塑化モデル計算

☒ 溶融体輸送領域内熱流動計算

☐ 流量連成解析

シリッドベッド流量寄与係数 0.5

☐ バリアフリー溶融可塑化モデル

☐ 先端ダイ内熱流動計算

☐ ブロック間情報補間設定

☐ Side feed流入計算

Side feed 供給材料 選択

SideFeed計算回数 100

☒ Fiber Attrition Model計算

Fiber Attrition Modelパラメータ

☐ Morphological Evolution Model 計算

☐ Foaming Model 計算

滞留時間計算パラメータ

計算時間パラメータ

☒ 自動セット ☐ 固定 0.1

計算サイクル数 800

最大計算サイクル数 2000

ファイル出力

ファイル出力間隔 100

☐ Explicit ☒ Implicit

FEA情報

要素数最大値 50000

節点数最大値 50000

フライト側壁補正

☒ OFF ☐ ON

☐ バレル熱連成解析

☐ FS3Dメッシュ利用

3. 解析結果ファイル名

test_change

保存 実行

Recalculation / Set Original Calculation Control Parameters

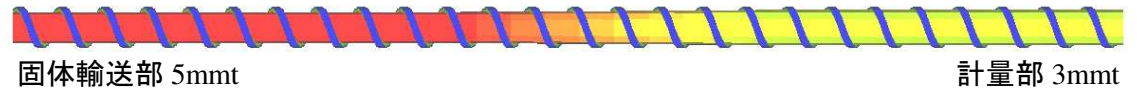
☒ リスタート計算 test 選択

(5) 解析のリスタート機能／解析事例

(A) 基準解析ケース／解析条件: fam0002

- ・樹脂データ : HDPE_B3 (Material fit データベース)
- ・スクリュモデル: スクリュ径 38.1mm, L/D=26 (990.6 mm), 0ブロック: 5D

Flow direction



- ・バレル温度: 200°C Max. (スクリュ入口30°C)
- ・解析条件: 流量規定/Multiblock反復計算回数 10回 (出口圧力規定)
入口圧力 0.001MPa, 出口圧力 15.0 MPa
スクリュ回転数 60rpm,
- ・オプション機能: 繊維破断解析(Fiber Attrition Model)

破断頻度 P_i を決定
する主要パラメータ
(詳細は手引書参照)

$$P_i = C_b \dot{\gamma} [1 - \exp(1 - \hat{\gamma})] \quad \text{for } \hat{\gamma} \geq 1,$$

$$P_i = 0 \quad \text{for } \hat{\gamma} < 1,$$

$$\hat{\gamma} = \frac{4\zeta\eta_m\dot{\gamma}_i^4}{\pi^3 E_f d_f^4}$$

解法はImplicit(陰解法)
を推奨

(5) 解析のリスタート機能／解析事例

(A) 基準解析ケース／解析結果

○熱流動解析結果の概要(fam0002.calinf)

**** Thermal Flow Calculation End ****

**** Fiber Attrition Model implicit calculation start ****
 **** Fiber Attribution Model implicit calculation end ****
 ##### Program Normal End !!! Press Any Key
 Screw outlet average pressure : 15.03481 Flowoutlet : 5.308896
 averagetemp = 219.7689

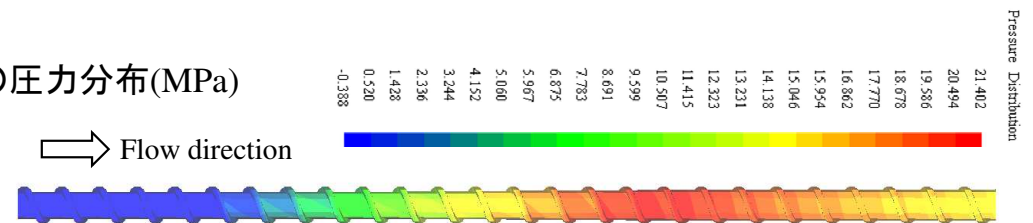
total : 47.62900 sec

計算時間 47.6 sec

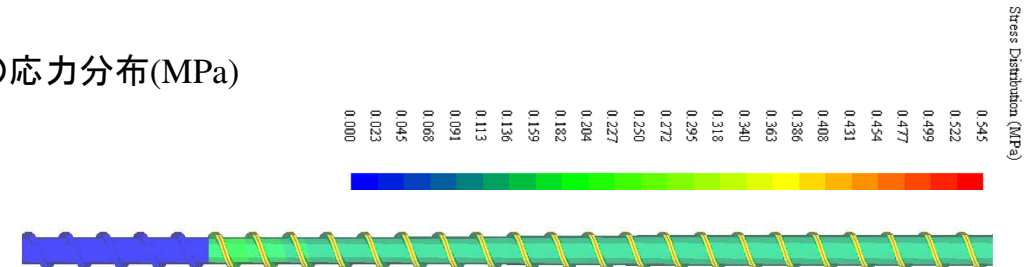
- ・出口圧力が15MPaになる場合の
押出流量は 5.3 cc/sec (14.7 kg/h)
- ・スクリュ出口の平均温度 219.7 °C

○圧力分布(MPa)

⇒ Flow direction

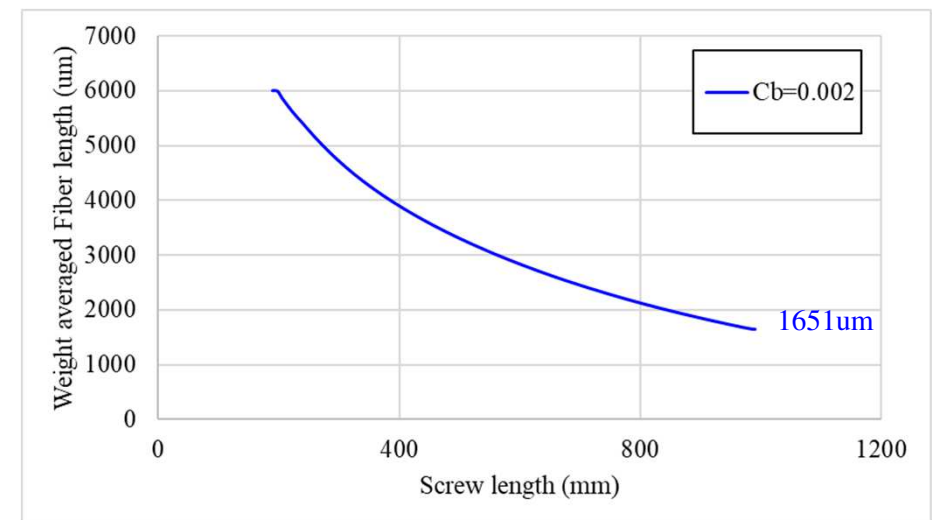
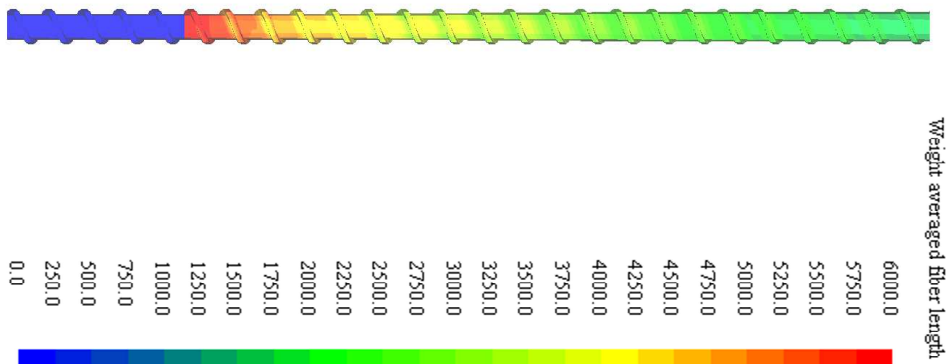


○応力分布(MPa)



○重量平均繊維長(um)

⇒ Flow direction



(5) 解析のリスタート機能／解析事例

(B) リスタート解析ケース／解析条件: fam0004

Single Screw Simulator Template

パス名: C:\Users\yori\Desktop\SSSver12test\Rest\ fam0004

フェードホッパメッシュファイル名: case0

スクリュメッシュデータファイル名: case0

ダイメッシュデータファイル名: case0

物性データファイル名: HDPE_B3

スクリュ/パレル/ホッパ・摩擦・重力データファイル: DefaultInformation

熱流動計算パラメータ: 10 層分割数 10

非ニュートン反復計算回数: 10

温度反復計算回数: 10

出口境界条件: 流量規定 (selected), 圧力規定, 未充满解析

流量: 5 cm³/s

解析結果ファイル名: fam0004

Recalculation / Set Original Calculation Control Parameters: リスタート計算 (checked), fam0002

Fiber attrition model/パラメータ設定フォーム

Dimensionless parameters: Cb = 0.004, S = 0.25, ε = 3

○熱流動解析結果の概要(fam0004.calinf)

```
***** Thermal Flow Calculation Start *****

----- Mesh Information -----
Node Number      : 3036
Element Number   : 6048

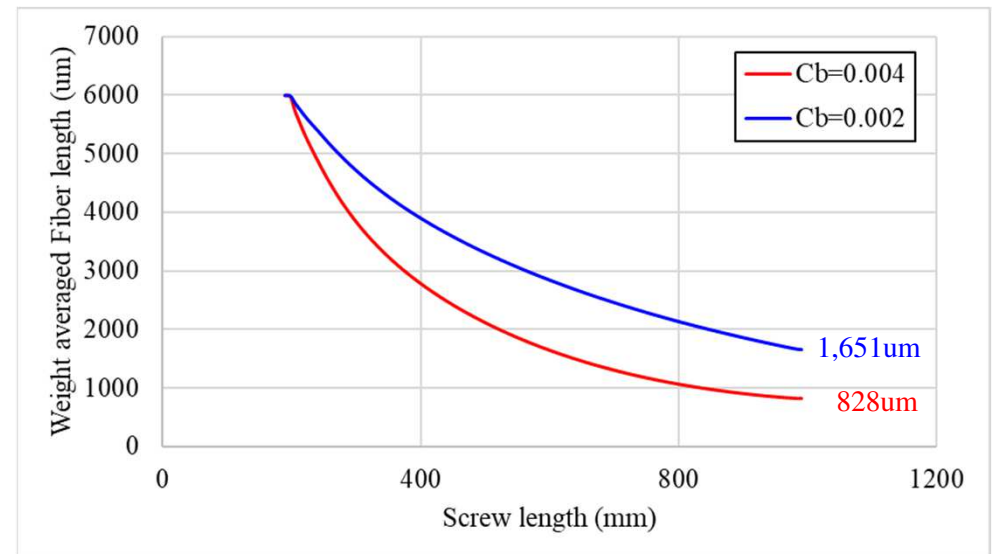
***** ReCalculation Start *****

***** Fiber Attrition Model implicit calculation start *****
***** Fiber Attribution Model implicit calculation end *****
##### Program Normal End !!! Press Any Key #####
Screw outlet average pressure : 15.03481   Flowoutlet : 5.308896
averagtemp = 219.7689
total : 8.842000 sec
```

(A)の熱流動解析結果を使用.

熱流動反復計算を省略することで, 計算時間が
47.6 ⇒ 8.8 sec に減少

○重量平均繊維長(um)



③ SSSカスタマイズ機能

ユーザ定義ルーチン / Fortran compiler の利用方法

SSS Ver.12.0.0 で利用可能な開発環境／下表2種類のいずれかを利用してください.

開発環境 (compiler)	使用PCのOS (Operating System)
① Intel Fortran	Windows
② GFortran (GNU Fortran)	Windows (MinGWを使用)

インストールおよびコンパイル方法(当社実施事例)は以下の別資料を参照ください.

- SingleScrewSimulatorVer12.0.0(2022)カスタマイズ環境設定方法.pptx

SingleScrewSimulatorVer12.0.0¥bin¥x86 内には3つのSystemフォルダが存在します.

PC > OS (C:) > SSS > SingleScrewSimulatorVer12.0.0 > bin > x86		
名前	更新日時	種類
Systemver.12.0.0	2022/11/07 10:41	ファイル フォルダー
Systemver.12.0.0_GFORT	2022/11/07 10:43	ファイル フォルダー
Systemver.12.0.0_IFORT	2022/11/07 11:09	ファイル フォルダー

フォルダの内容と対象ユーザ

Systemver.12.0.0	: 通常解析を実施されるユーザ	標準版	ユーザ定義ルーチン 利用ユーザ
Systemver.12.0.0_IFORT	: ①Intel Fortranを利用されるユーザ		
Systemver.12.0.0_GFORT	: ②GFortranを利用されるユーザ		