
Single Screw Simulator (Ver.13.0.0)

改良成果資料



2024/03/29

株式会社HASL

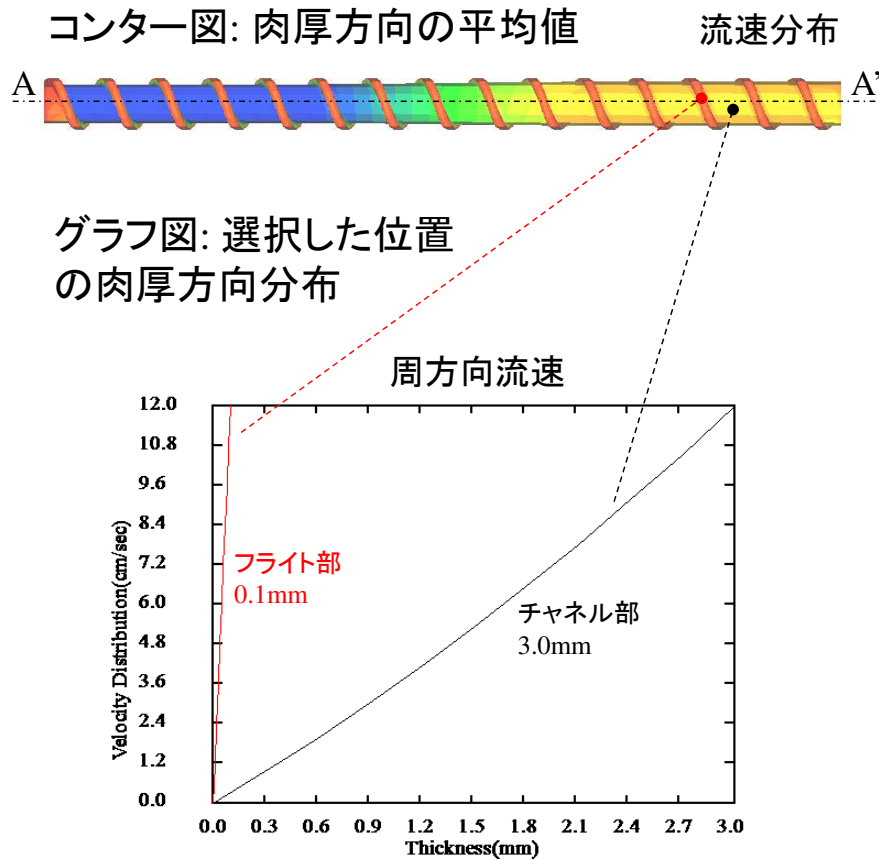
○改良成果一覧/ Single Screw Simulator (Ver.13.0.0)

- (1) 肉厚断面の新規可視化機能 (.crossconts, .crossvects) ----- p. 2
- (2) 滞留時間の新規解析機能
 - 1. 肉厚層毎の定常移流解析 ----- p.10
 - 2. 出口滞留時間分布の新規解析/ RTD Calculator ----- p.16
- (3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能 ----- p.27
- (4) 高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能 ----- p.45
/ MWD (Molecular Weight Distribution) Calculator ----- p.54
- (5) 温度解析機能の改良 (有限体積法) ----- p.62
- (6) ユーザプログラム解析機能の拡張 (移流拡散方程式) ----- p.66
/ サンプルプログラム内容説明 ----- p.75
- (7) 連続ジョブ実行機能 (ジョブ管理) ----- p.88

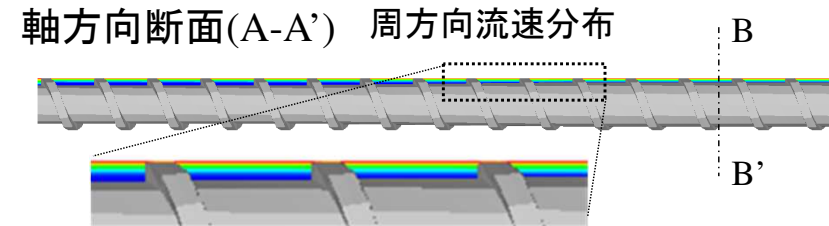
(1)肉厚断面の新規可視化機能

本機能では、従来はグラフ図でのみ抽出が可能であった肉厚方向の解析結果を簡便に可視化するため、新たに肉厚断面の可視化方法を追加しました。

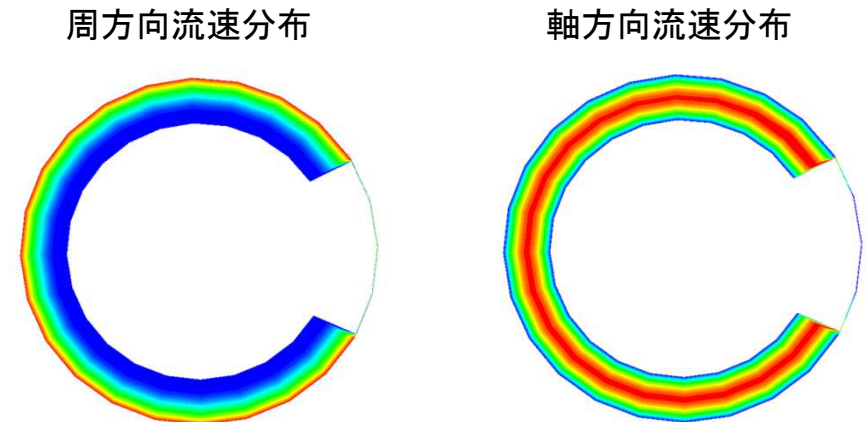
従来の結果表示 (.scrrst, .exprst)



新規の結果表示 (.crossconts, .crossvects)



軸方向垂直断面(B-B')



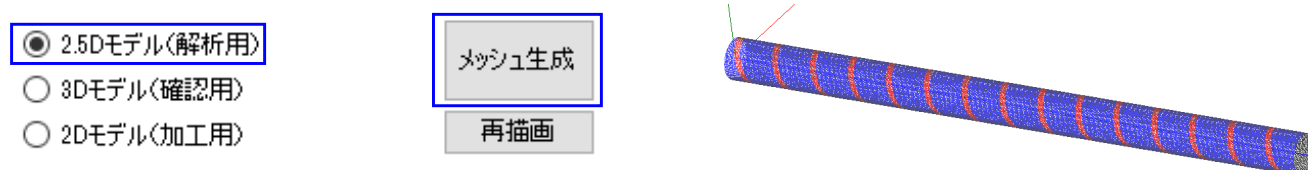
任意の肉厚断面方向の解析結果を可視化可能。

利用手順(Ver.13.0.0)

- (1): 従来通りの方法でスクリュ形状を定義し, 3Dモデル(確認用)の状態でもesh生成すると, 解析後のポスト処理で利用できる, 可視化用3Dメッシュ(.scrmsh3d)が保存されます.

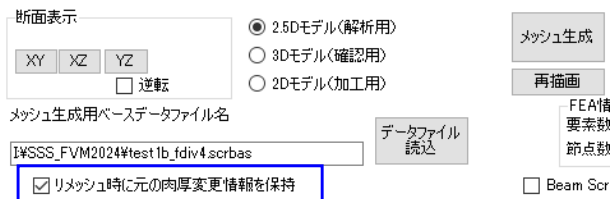


- (2): (1)で作成したモデルを, 2.5Dモデル(解析用)の状態でもesh生成し, 解析用メッシュファイル(.scrbas および .scrmsh)を保存します.



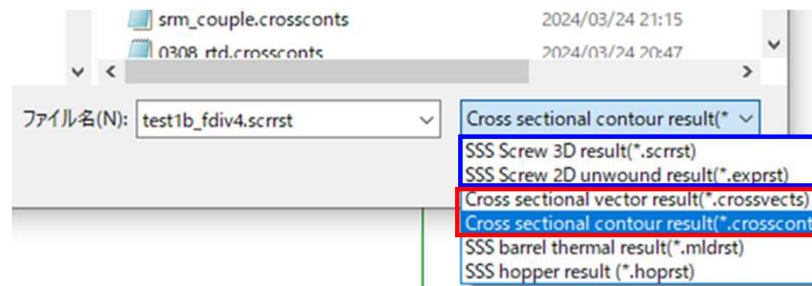
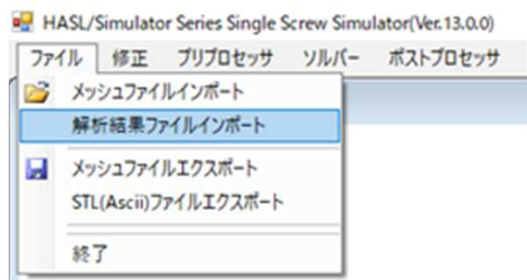
- (3): (2)で保存した2.5Dメッシュを用いて, 従来通りの方法で, 解析プログラム実行タブで解析条件を設定し, 保存ボタンをクリックして解析条件を保存後, 実行ボタンをクリックして解析実行します.

(参考) 手動で肉厚を変更したスクリュメッシュの場合, 変更情報を維持するために,
“リメッシュ時に元の肉厚変更情報を維持” にチェックしてから
メッシュ生成ボタンをクリックしてください.
(詳細は, Ver.12.0.0改良成果資料のp.78を参照ください)



利用手順

(4): 解析終了後, ファイル/解析結果ファイルインポートをクリックして結果ファイルを選択する際に, Ver.13.0.0では, .crossvects と, .crossconts の2種類の拡張子の解析結果ファイルが選択できます.

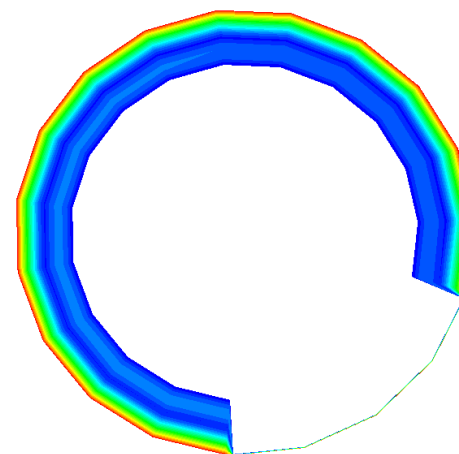
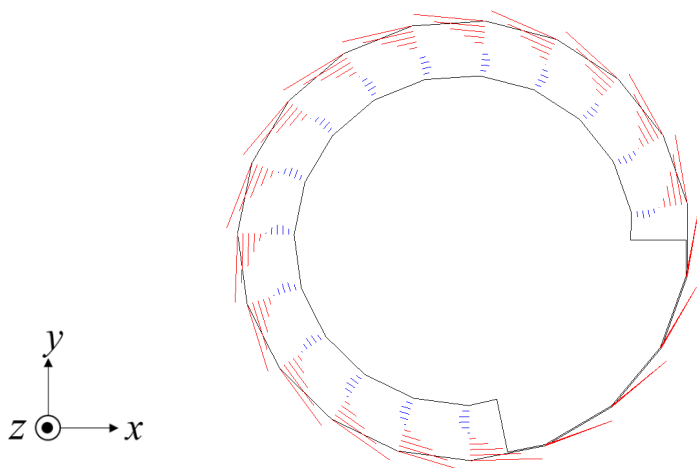


従来通り

新規解析結果ファイル

○ .crossvects: スライスベクトル表示

○ .crossconts: スライスコンター図



利用手順

- .crossvects: スライスベクトル表示
(用途)肉厚方向断面の流速ベクトル可視化

解析結果ファイル名
I:\SSS_FVM2024\test1b_fdv4_2.crossvects

Cross sectional vector plot

1周方向流速ベクトル

断面位置の選択移動

断面位置の調整

ベクトル成分の長さ調整

スライスベクトル描画

アニメーション再生(自動送り)

可視化用3Dメッシュ(.scrmsh3d)のインポート

Model import

Model surface plot

Mesh plot

可視化用3Dメッシュの表示ON/OFF

xy断面例

(スクリュ軸垂直断面)

Cross section
 xy
 thick-z

Vector scale 0.05
0.01~0.05程度

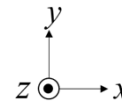
Model surface plot
 Model surface plot
 Mesh plot

View plane
 XY
 XZ
 YZ
 軸表示
 XY反転

赤ライン:
バレル相対回転
速度と同方向

青ライン:
バレル相対回転
速度と逆方向

断面流路内で循環流れを
形成している状態



thick-z断面例

(肉厚-スクリュ軸方向
断面)

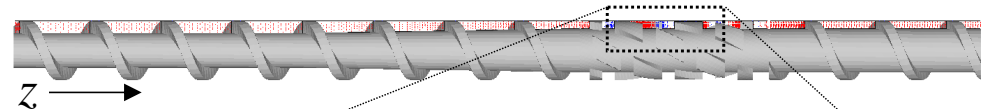
Cross section
 xy
 thick-z

Layer number 51

Vector scale 0.05
0.01~0.05程度

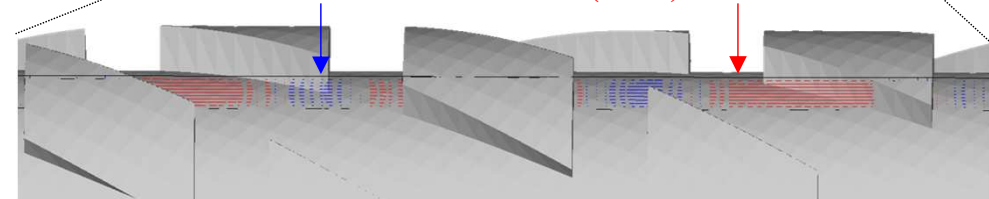
Model surface plot
 Model surface plot
 Mesh plot

View plane
 XY
 XZ
 YZ



逆流方向の流れ

順(押出)方向の流れ



利用手順

- .crossconts: スライスコンター表示
(用途) 肉厚方向断面の各種物理量可視化

描画項目の選択

- 1軸方向流速(cm/s)
- 1軸方向流速(cm/s)
- 2周方向流速(cm/s)
- 3温度(°C)
- 4ひずみ速度(1/sec)
- 5圧力(MPa)
- 6応力(kPa)
- 7粘度(Pa·sec)
- 8リッドヘッド(-)
- 9充填率(-)
- 10滞留時間(sec)

断面位置の選択移動

断面位置のコマ送り移動

可視化用3Dメッシュの透明度変更(1.0不透明, 0.0透明)

カラーバーの最大最小値設定(Fix)

断面方向

- スライスベクトル描画(任意断面)
- アニメーション再生(自動送り)
- 可視化用3Dメッシュのインポート
- 可視化用3Dメッシュの表示 ON/OFF
- メッシュラインの表示ON/OFF
- アニメーション動画作成用のファイル出力(*)
- 断面ビューの整列
(参考)キーボードのCtrl+Altでスクリュ位置の初期化

(*).アニメーション動画作成用の画像ファイル出力方法

- (A) をチェックした状態で, Startボタンをクリックすると, アニメーション再生時に, (B)に指定したフォルダ名に断面数分の静止画(.bmp) が自動保存されます。

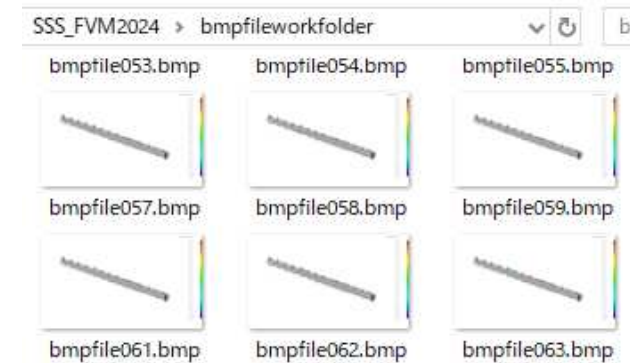
(A)

Bmp file output

Bmp file name
bmpfileworkfolder **(B)**

Output interval 1 **(C)**

断面数が300の場合,
(C) が1のときは300枚,
2のときは300/2=150枚
の画像ファイル(.bmp)が
保存されます。



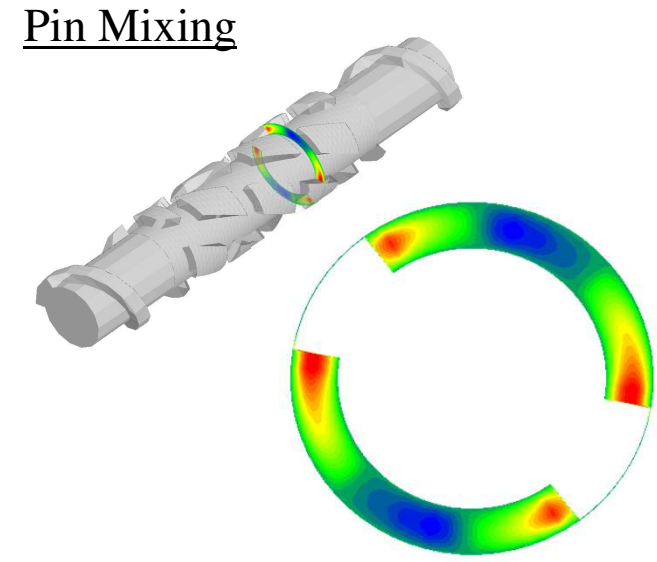
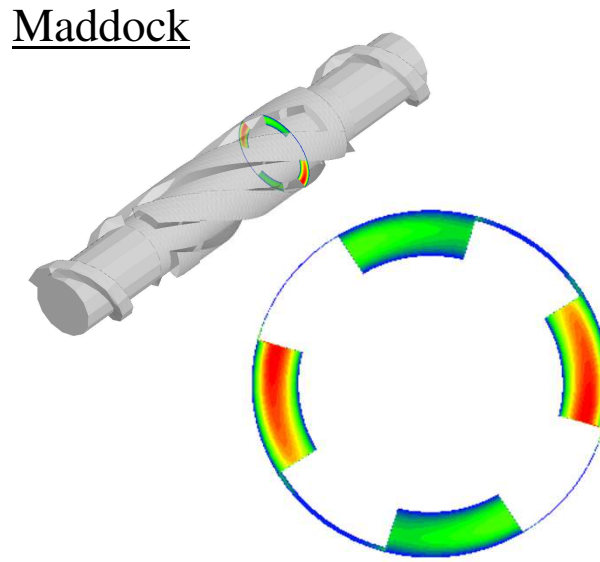
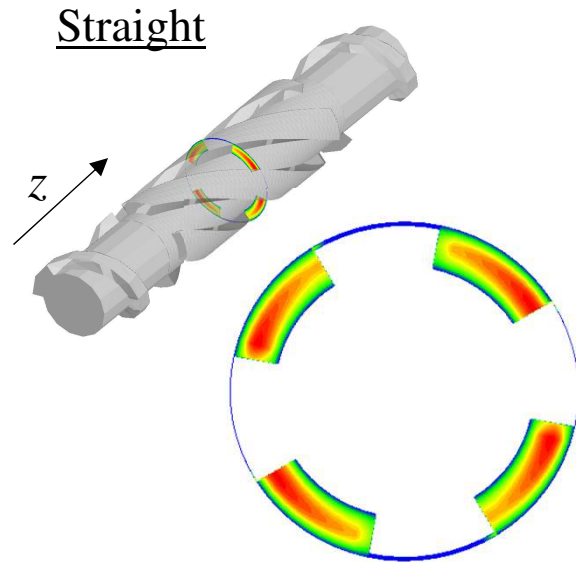
- 保存した画像ファイル群から, 動画作成アプリ (Microsoft Clipchamp, フォトレガシなど) を利用して, 動画ファイル(.mp4など) を作成することが可能です。

スライスコンター図の表示例(.crosscont)

○ 軸方向流速(cm/s)

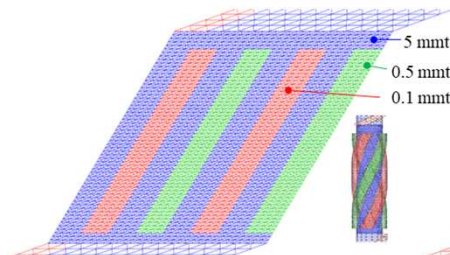
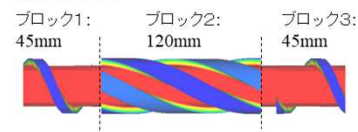


赤: 順方向流れ, 青: 逆流流れ

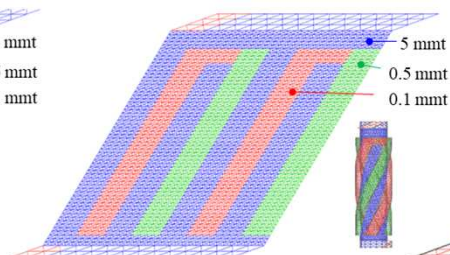


*メッシュファイル
および解析結果は、
Ver.12.0.0改良成果
資料 p.62の事例を
使用しました。

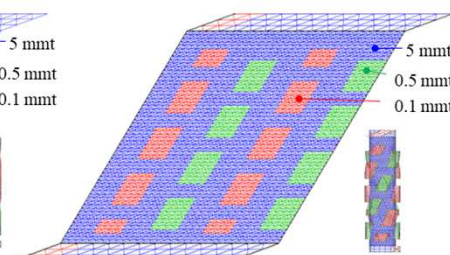
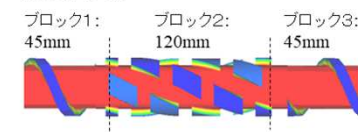
【条件2-1】



【条件2-2】



【条件2-3】



スライスコンター図の表示例

Φ38.1スクリュ

4.5cm³/s (12.5kg/h)

60rpm

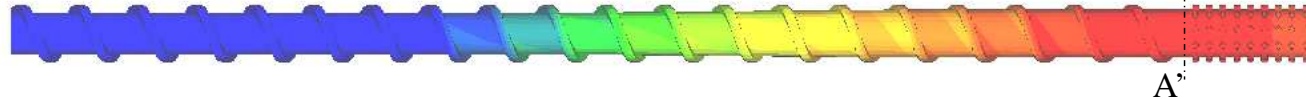
HDPE_B3.pro

(Materialfit DB)

バレル温度 180°C,

温度規定(Tfix)

○コンター図解析結果／圧力分布(MPa)



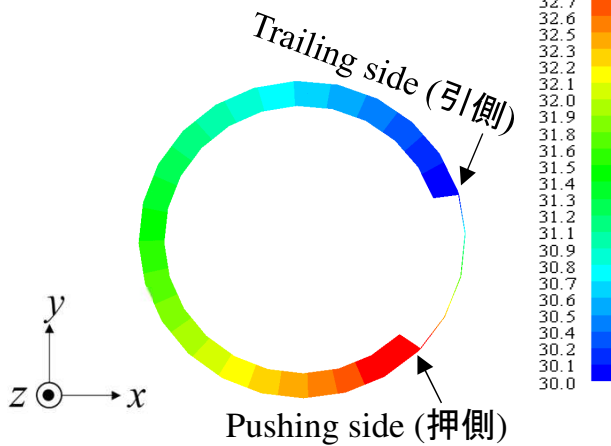
出口圧力
27.3 MPa

○コンター図解析結果／ソリッドベッド分布(-)



○ 圧力分布(MPa)

A-A'断面, 最大圧力位置



スクリュフライト押側は引側と比較して
相対的に圧力が高くなる。

○ ソリッドベッド分布

Thick_z 断面

ブロック1以降

○ 流速分布(cm/s)

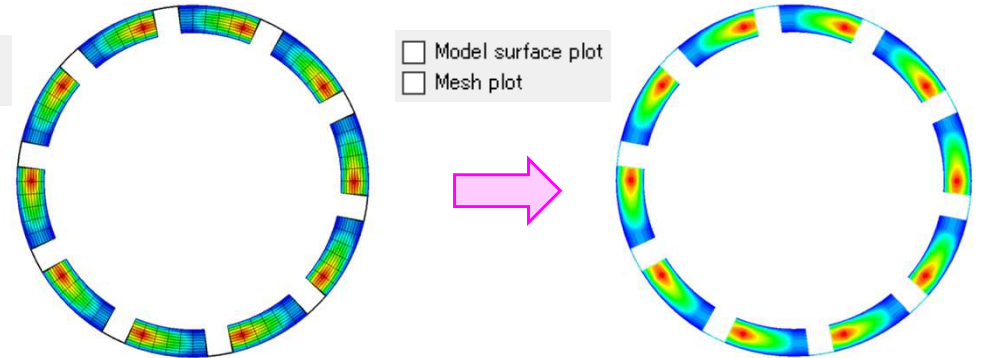
Thick_z 断面

ピンミキシング部通過断面

xy断面

Model surface plot
 Mesh plot

Model surface plot
 Mesh plot



グラフプロットの利用方法

グラフパラメータ

分割数
 X-axis: 10, 1
 Y-axis: 10, 1
 Power index: 6

最小/最大値
 X軸: 0 → 3
 Y軸: 180 → 216.0733

作画対象節点
 353, 1
 744, 1
 1135, 1
 1526, 1
 1917, 1

Focus座標x: -8.322648E
 Focus座標y: 19.04

選択方法
 マウスピック
 ボックスピック
 サークルピック
 リリース

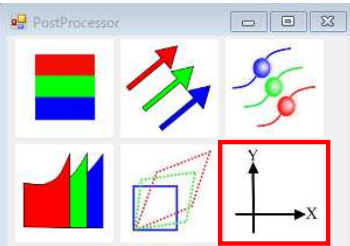
断面方向の決定
 肉厚方向 層方向

オプション
 X軸補助目盛
 Y軸補助目盛

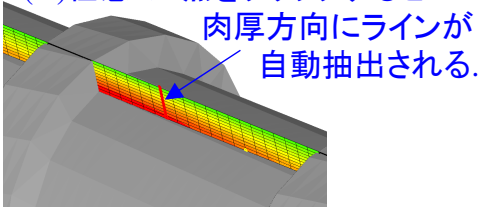
断面表示

グラフ描画

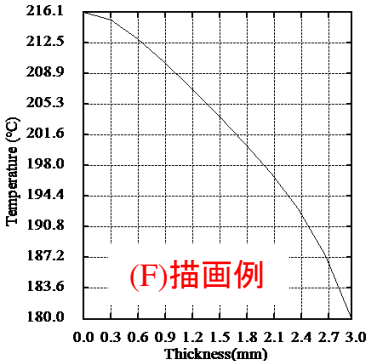
テキストファイル出力



(A)抽出したい断面を表示後にクリック



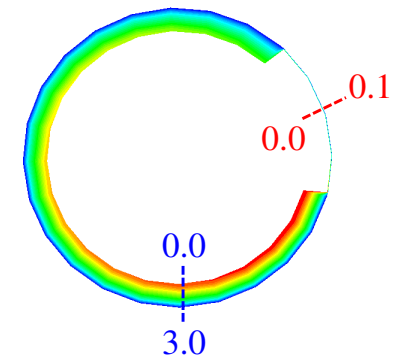
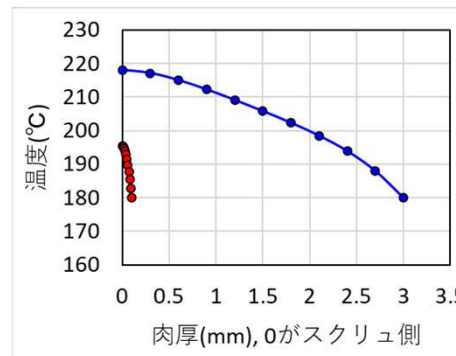
(D)任意の1点をクリックすると肉厚方向にラインが自動抽出される。



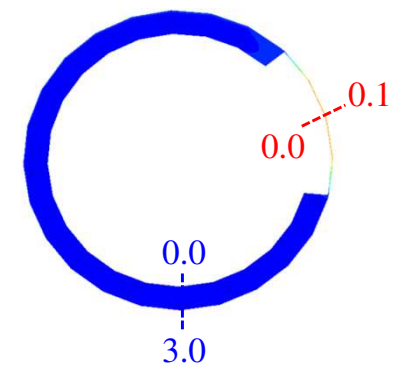
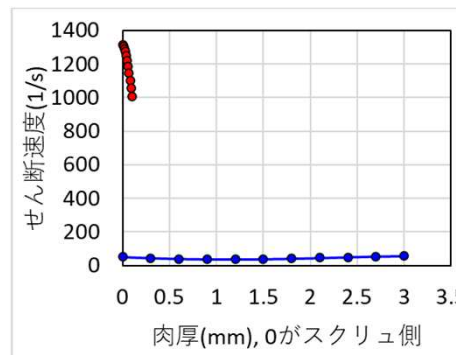
(F)描画例

(E)描画内容を選択
 作画内容選択: 3温度(°C)
 X軸タイトル: Thickness(mm)
 Y軸タイトル: Temperature (°C)

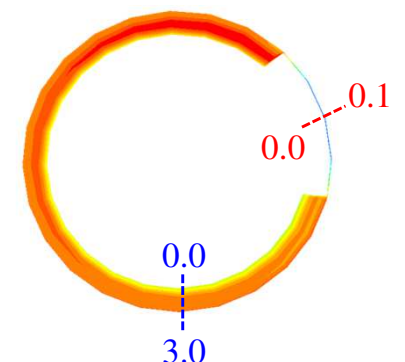
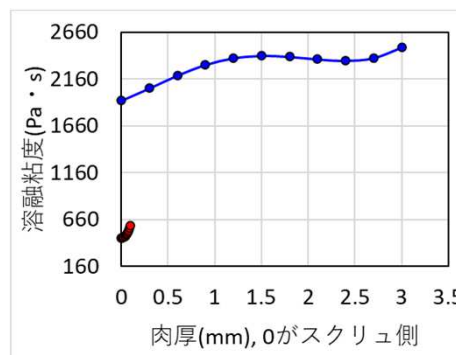
○温度分布(°C) (H)テキストファイルを利用したグラフ作成例



○せん断速度分布(1/s)



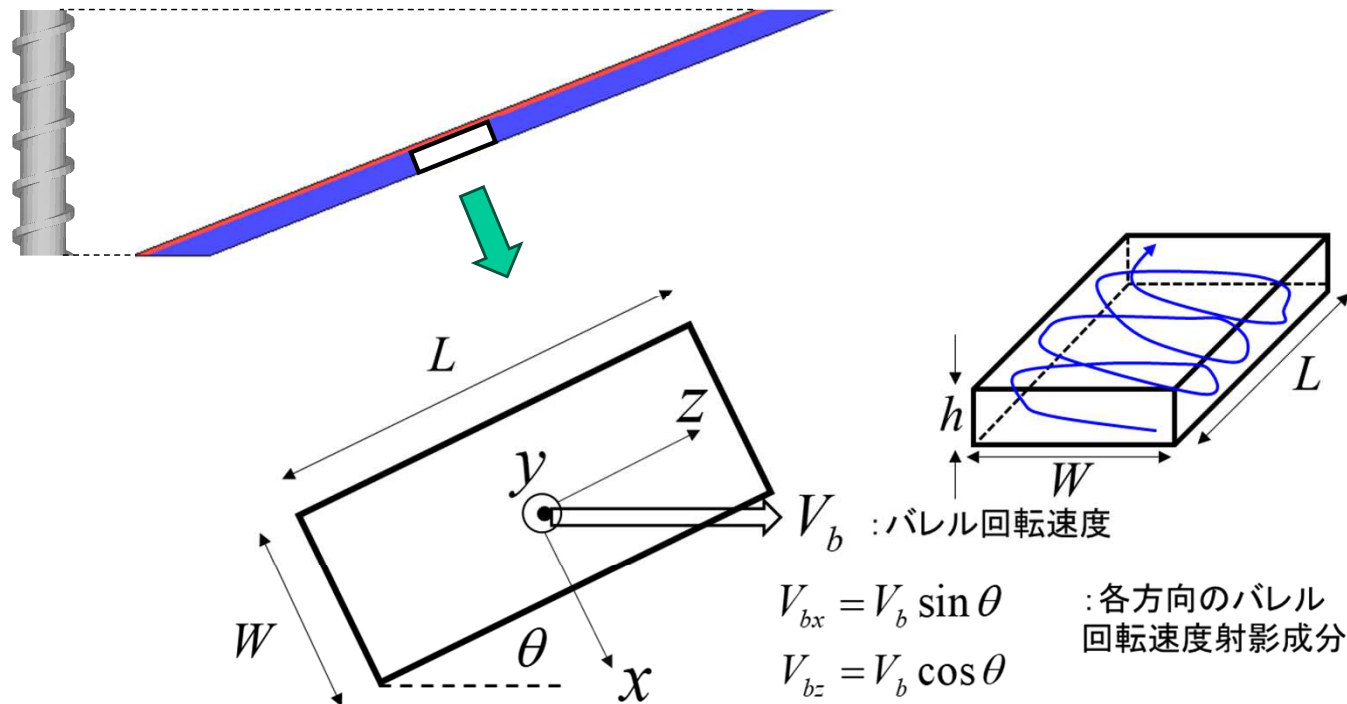
○溶融粘度分布(Pa·s)



(2) 滞留時間の新規解析機能

(新機能1) 肉厚層毎の定常移流解析

スクリュチャンネル内の局所的な循環流れの影響が滞留時間に及ぼす影響を考慮するため、単軸スクリュ内の流動状態に対して提案されている滞留時間方法を採用し(参考文献1, 2), 肉厚層毎に滞留時間を解析する機能を開発しました。

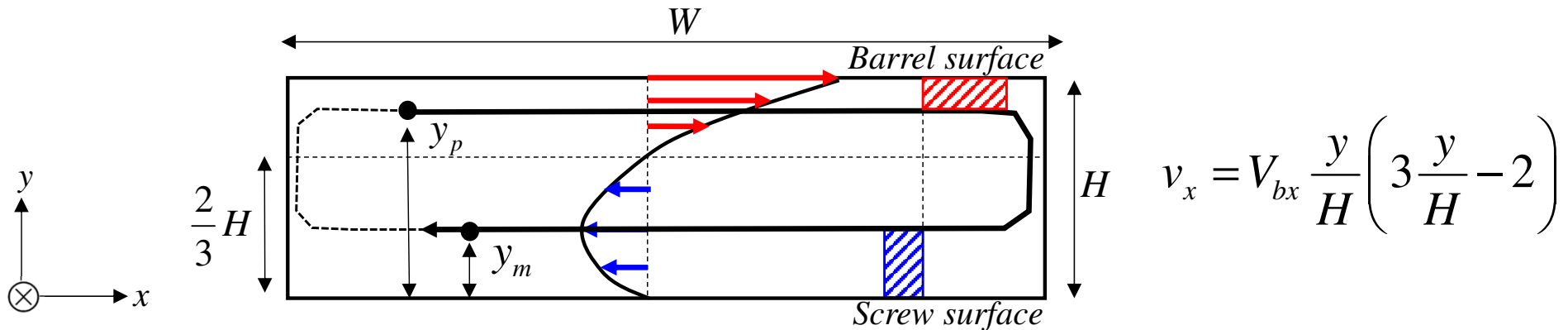


参考文献

- 1) 二軸スクリュ押出し—その技術と理論—, J.L.White 著, 酒井忠基 訳, シグマ出版(1990)
3.7 単軸スクリュ押出機の滞留時間分布(Page66-69)
- 2) Principles of Polymer Processing, Z. Tadmor, C. G. Gogos, Second edition, A John Wiley & Sons, Inc., Publication
Extensive Mixing and Residence Time Distribution in Screw Extruders (Page 463-470)

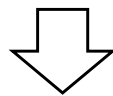
軸方向垂直断面の循環流れにおける軌跡情報の計算

ニュートン流体近似の下に、下図に示したバレルの相対回転速度と同方向の流動領域 ($y > 2H/3$) と、逆流領域 ($y < 2H/3$) に存在するトレーサ粒子の時間存在確率を計算し、その重みで軸方向の流速成分を補正します。



$$\int_0^{y_m} v_x dy + \int_{y_p}^H v_x dy = 0$$

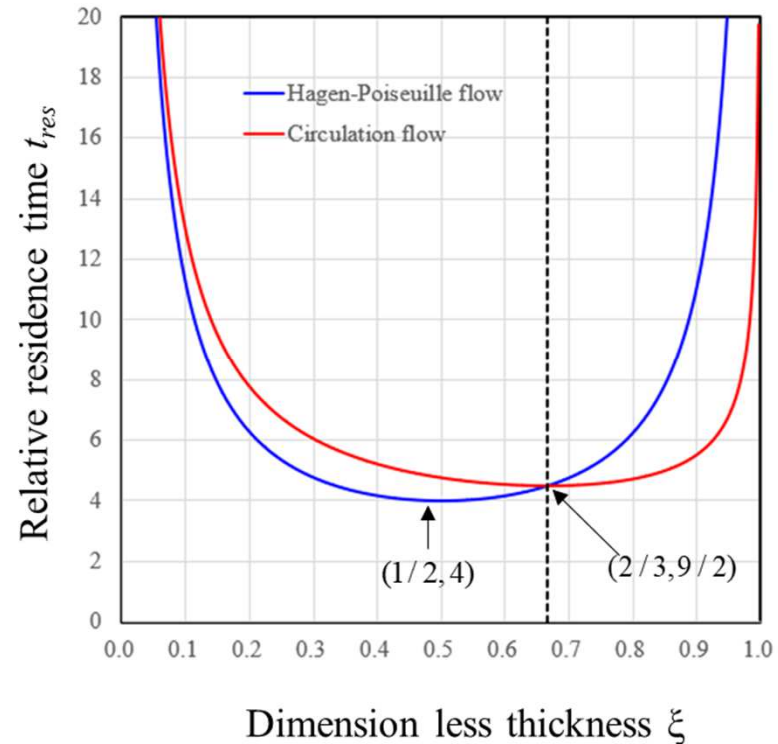
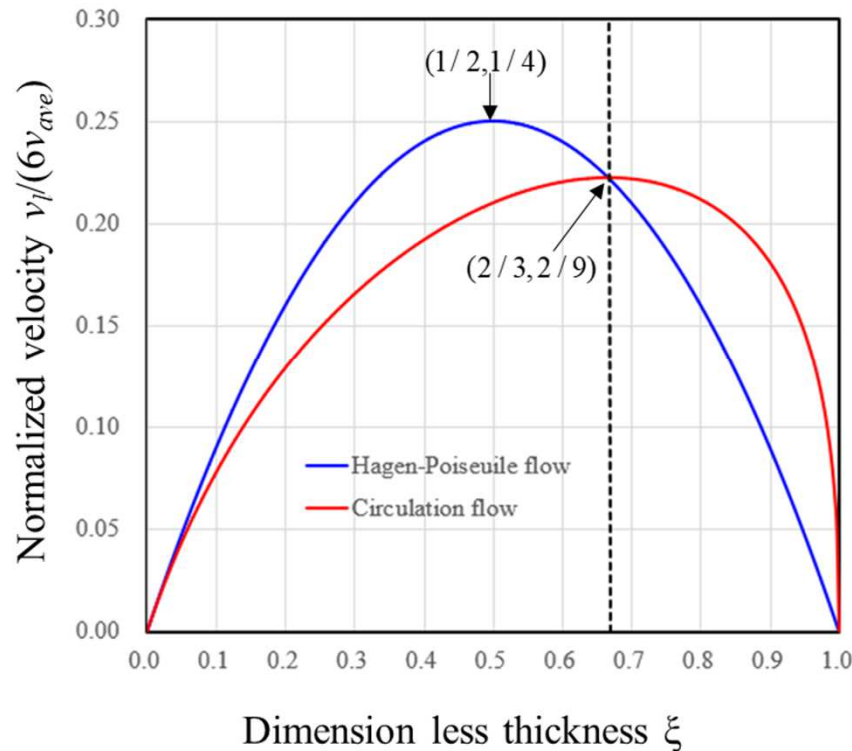
$$\text{[Blue hatched box]} + \text{[Red hatched box]} = 0$$



$$\left(\frac{y_p}{H} \right)^3 - \left(\frac{y_p}{H} \right)^2 = \left(\frac{y_m}{H} \right)^3 - \left(\frac{y_m}{H} \right)^2 \quad \begin{cases} \frac{2}{3}H \leq y_p \leq H \\ 0 \leq y_m \leq \frac{2}{3}H \end{cases}$$

循環流れの影響を反映した流速分布と滞留時間

トレーサ粒子の時間存在確率から補正される軸方向のポアズイユ流速分布は、 $\xi=y/H=1/2$ に対して対称な分布(グラフ青)から、下図に示す様に、 $\xi=y/H>2/3$ の領域が相対的に速い分布(グラフ赤)に補正されます。結果として、スクリュ表面側の滞留時間は、バレル側と比較して長く評価されます。



肉厚方向 l 層の滞留時間に対する定常輸送方程式

$$\tilde{\mathbf{v}}_l \cdot \nabla \langle t_{res} \rangle_l = 1$$

$\tilde{\mathbf{v}}_l$: l 層の流速ベクトル(循環流れ考慮)
 $\langle t_{res} \rangle_l$: l 層の滞留時間(sec)

$l = 1 \sim N$
 (N:ユーザ指定肉厚層数)

○計算手順

(1) 熱流動解析終了後, 循環流れによる影響を, 以下の式を用いて流速分布に反映させる.

$$v_l(0) = \tilde{v}_l(0) = 0,$$

$$v_l(1) = \tilde{v}_l(1) = 0,$$

$$\tilde{v}_l(\xi) = M_f(\xi) v_l(\xi) \text{ for } 0 < \xi < 1.$$

循環流れ考慮
流速分布

↑
混合係数

循環流れ未考慮
流速分布

$$M_f(\xi) = \frac{X + 1 + \xi - 2\xi^2}{(X + 3X\xi + 1 + 4\xi - 3\xi^2)(1 - \xi)},$$

$$X = \sqrt{1 + 2\xi - 3\xi^2}$$

(2) Analysisタブでユーザが指定する肉厚層数 N 毎に滞留時間 $\langle t_{res} \rangle_l$ を計算する.

(3) 平均滞留時間 $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ は, 各層で得られた $\langle t_{res} \rangle_l$ を, 層流量で重み付けして算出する.

利用手順

解析プログラム実行タブ内の、(A) 滞留時間計算を実行にチェックして、解析方法として (B) FVM (有限体積法) のラジオボタンを選択すると、熱流動解析後に肉厚層毎の滞留時間計算が実施されます。

流入口は圧力規定境界に固定

流入口圧力 0.001 MPa
流出口圧力 0 MPa
流入口温度 30 °C
スクリュ回転数 60 rpm

滞留時間計算
 実行 非実行

温度条件設定
充填率設定
未充填解析

射出成形スクリュ条件設定

熱流動計算パラメータ
非ニュートン反復計算回数 10
温度反復計算回数 10
層分割数 10

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
 FVM (B)
 VOF

肉厚方向の層分割数は、熱流動計算パラメータ内の層分割数で設定します。(デフォルト: 10分割)

VOFを選択した場合は、従来通りの滞留時間計算が実施されます。

テスト解析例 (サンプルファイル: ver13test¥testsamplekukei_rtdfvm.ncal)

Φ38.1スクリュ
4.5cm³/s (12.5kg/h)
60rpm
HDPE_B3.pro
(Materialfit DB)

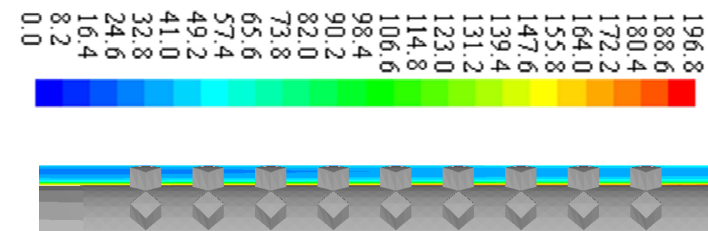
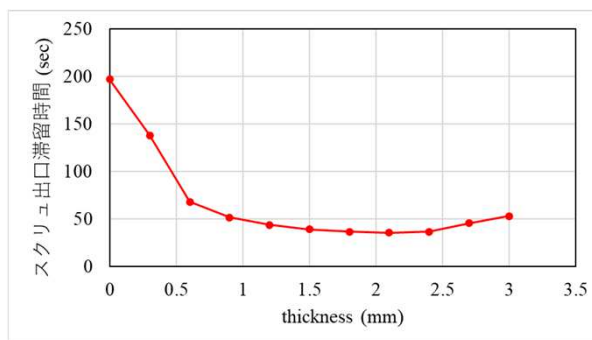
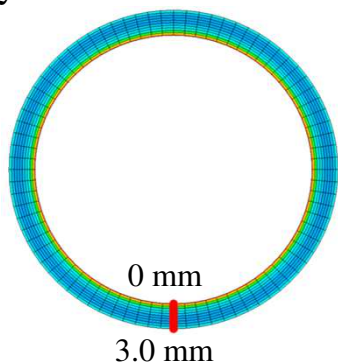
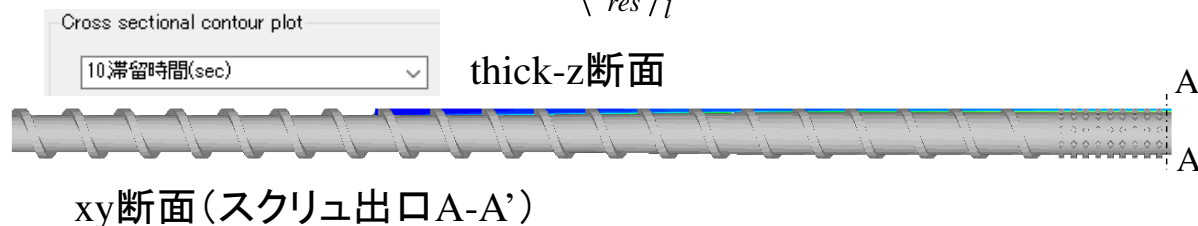
⇨ Flow direction



圧力分布等の解析結果はp.8を参照ください。

テスト解析結果

○肉厚層毎の滞留時間分布 $\langle t_{res} \rangle_l$ [sec] (.crossconts)

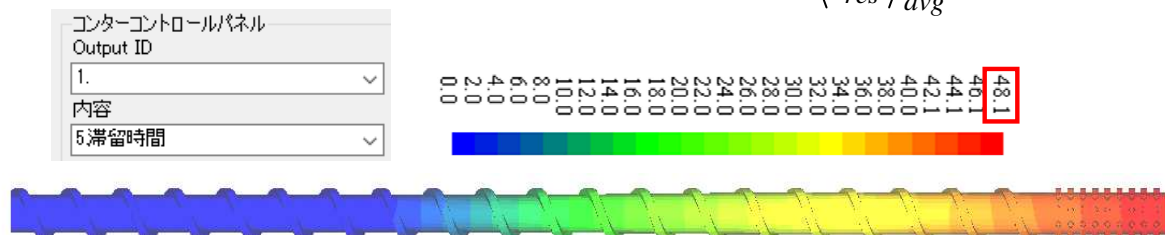


出口ピンミキシング部拡大図

(参考).suminf 平均滞留時間

	A	B	C	D	E	F
1	n	zlength	filln	voln	dtn	restime
2		mm		cc	sec	sec
3	1	266.6996	1	0.784985	0.174441	0.174441
4	2	268.287	1	0.785042	0.174454	0.348895
5	3	269.8745	1	0.785023	0.17445	0.523345
6	4	271.462	1	0.785033	0.174452	0.697796
7	5	273.0495	1	0.785023	0.17445	0.872246
350	348	840.7524	1	0.612701	0.136156	47.64741
351	349	843.0024	1	0.612701	0.136156	47.78356
352	350	845.2524	1	0.807964	0.179548	47.96311
353	351	847.5024	1	0.807992	0.179554	48.14266
354	352	849.7524	1	0.807964	0.179548	48.32221

○滞留時間分布の層流重み付け平均値 $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ [sec] (.sccrst)

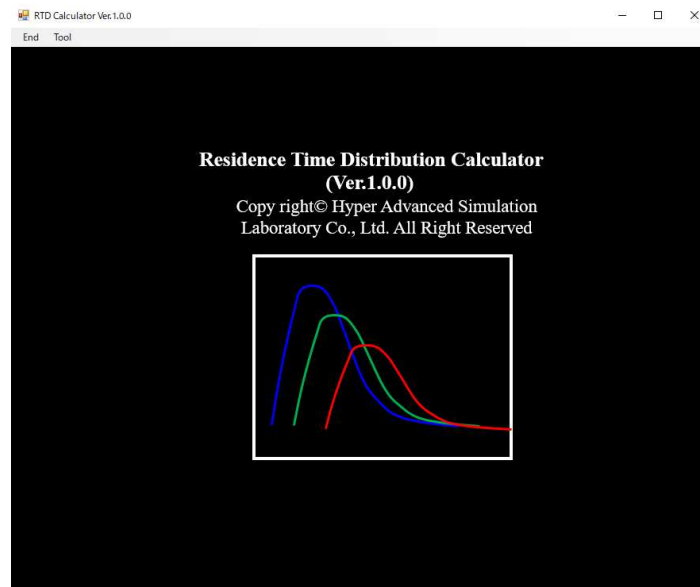


肉厚層毎の滞留時間分布は、流路中央と壁面近傍で大きな差異が生じますが(スクリュ面近傍が有意に遅くなる)、各層を通過する流量で重み付けした平均値 $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ は、流路体積を、押出流量で除して算出される、.suminf の平均滞留時間と概ね一致する傾向を示します。

(2) 滞留時間の新規解析機能

(新機能2) 出口滞留時間分布の新規解析 (ADM & CSTR)

スクリュ出口の滞留時間分布(RTD)を、トレーサ(粒子追跡)法で実測する際に影響を与える、トレーサ粒子自身の分散を考慮するため、Taylor-Arisの分散理論(参考文献1,2)に基づき、Axial Dispersion Model (ADM) を採用しました。加えて、スクリュ内の流動状態を反映させるため、Continuous Stirred Tank Reactor with back flow (CSTR, 参考文献3) モデルと併用させることで、新規のRTD予測モデルを開発し、別ソフトとして実装しました。



SSS解析で得られた流動情報を用いて、スクリュ出口のRTDを解析する機能を、別ソフト: RTDcalculator としてご提供します。

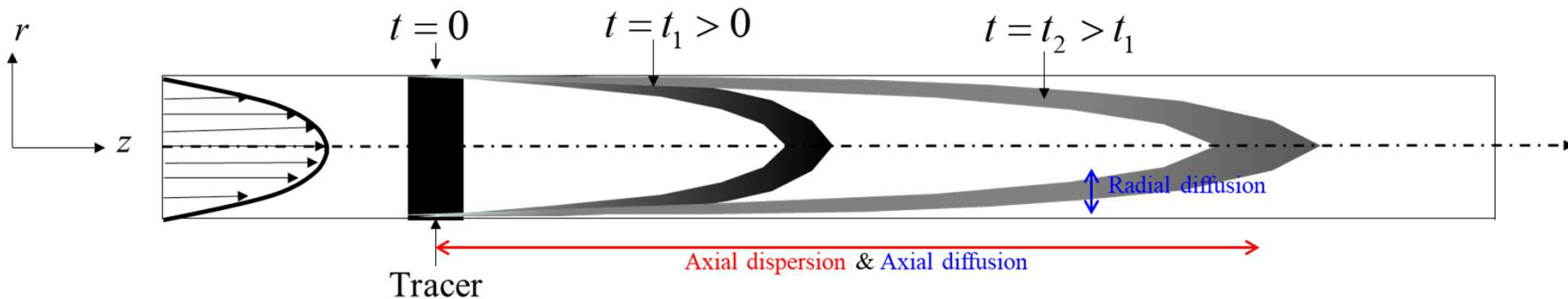
RTDcalculatorは、Materialfitと同様に、SSSと独立して運用します。
(SSSの解析結果ファイルを利用)

参考文献

- 1) Taylor, G. I. : Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube, *Proc. Roy. Soc. A.*, **219**, 186-203 (1953)
- 2) Aris, R. : On the dispersion of a solute matter in a fluid flowing through a tube, *Proc. Roy. Soc. A.*, **235**, 67-77 (1956)
- 3) Puaux, J. P., Bozga, G. and Ainsler, A. :Residence time distribution in a corotating twin screw extruder, *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 1641-1651 (2000)

軸方向分散モデル(ADM: Axial Dispersion Model)

下図で示す円管内の流れにおいて、径(r)方向の拡散が速やかに促進されると仮定すると、トレーサの垂直断面内の平均濃度 \bar{C} は、1次元の移流拡散方程式を解析することで求めることができます。



$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{v} \cdot \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = D_{Dispersion} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2}, \quad (1)$$

$$D_{Dispersion} = D_{Diffusion} + \frac{(\bar{v}R)^2}{48D_{Diffusion}} \quad (2)$$

\bar{C} : トレーサの平均濃度 [mol/m³]

\bar{v} : 軸(z)方向平均流速 [m/s]

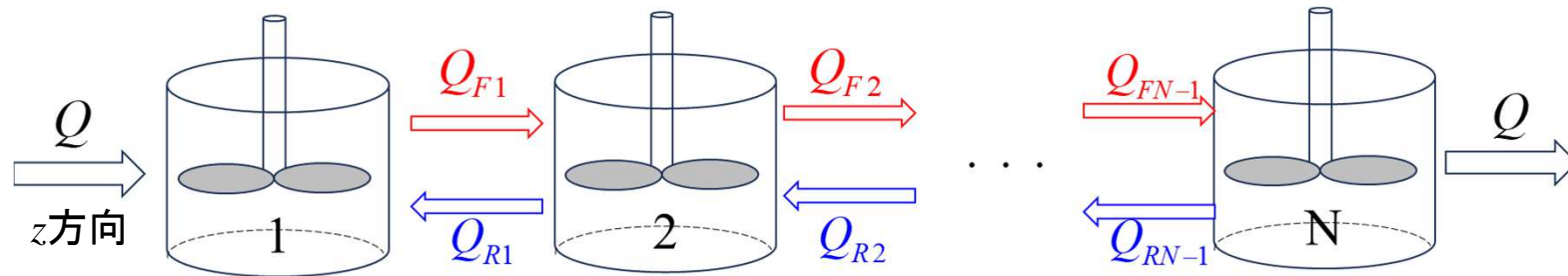
R : 円管の半径 [m]

$D_{diffusion}$: 分子拡散係数(Molecular Diffusion Coefficient) [m²/s]

$D_{Dispersion}$: 軸方向分散係数(Axial Dispersion Coefficient) [m²/s]

逆流成分を考慮したCSTRモデル CSTR : Continuous Stirred Tank Reactor with back (reverse) flow

(1)式の移流拡散方程式の離散化において、下図に示すCSTRモデルの考え方を採用しました。
SSSの単軸スクリュモデルでは、 Q が押出流量、槽1~ N がスクリュ(z)軸方向の分割数に相当します。



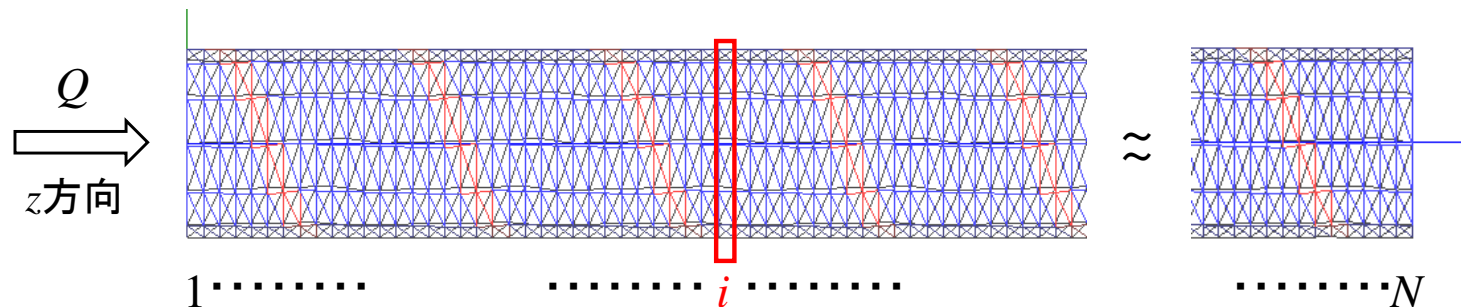
$$Q = Q_{Fi} + Q_{Ri} \text{ for } i = 1 \sim N - 1$$

Q : 押出流量 [cm³/s]

Q_{Fi} : i 番目の槽(要素群)の順方向流量[cm³/s]

Q_{Ri} : i 番目の槽(要素群)の逆方向流量[cm³/s]

SSSの単軸スクリュモデル(2.5D)



ADM およびCSTRモデルに基づく出口滞留時間分布(RTD)

(2)式のADM分散係数と, 流動状態によって決定されるスクリュ内濃度分布 $\bar{C}(z,t)$ を用いて, スクリュ出口の滞留時間分布(RTD)を, (3)式により算出します.

$$RDT(t) \equiv \frac{\bar{C}(L,t)}{\int_0^\infty \bar{C}(L,t)dt} \quad (3)$$

L : スクリュ出口位置 [m]
 t : 観測時間 [s]

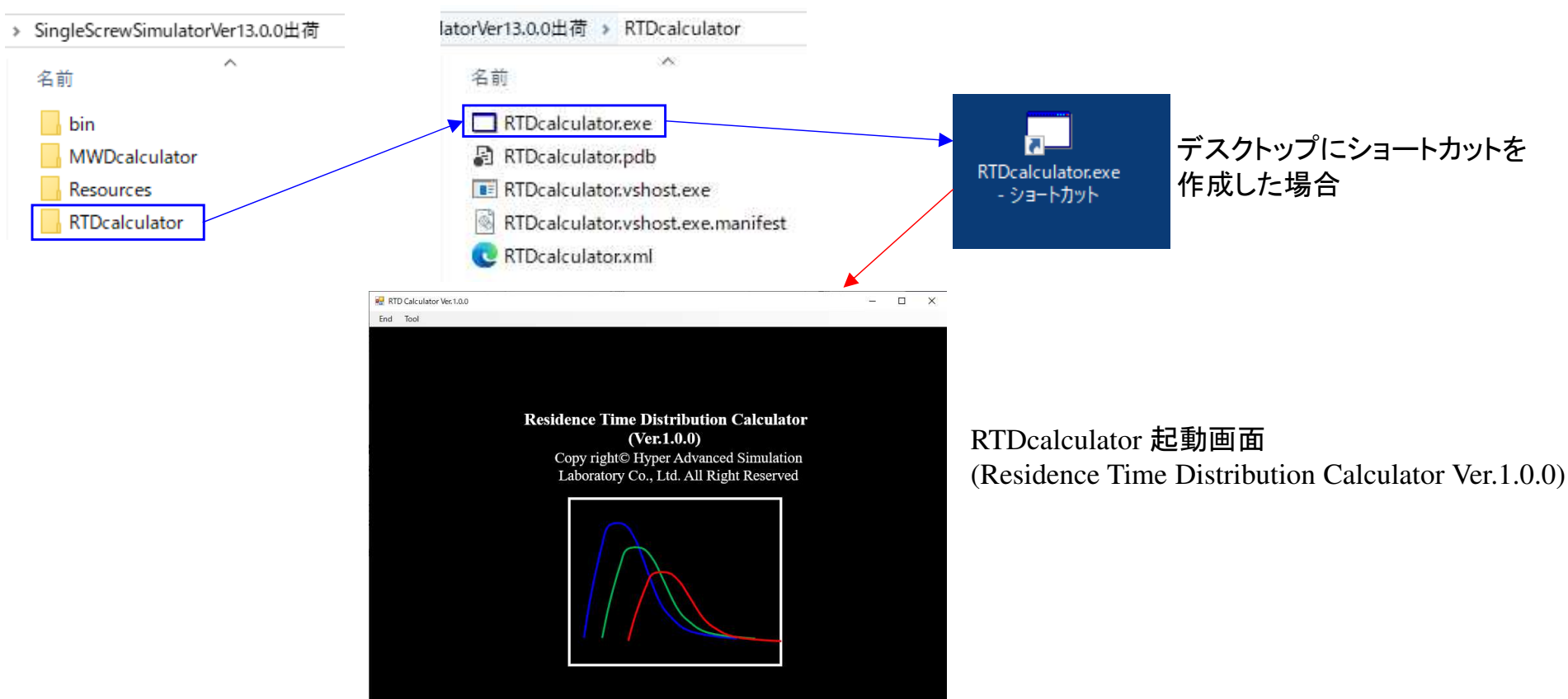
(参考) ADMでは, 以下に示す様に高ペクレ数条件下において漸近解を求めることができます. この漸近解と実測値をフィッティングすることで, 滞留時間分布や平均滞留時間, 分散などの統計情報が近似的に求められます.

$$RDT(t) \equiv \frac{\bar{C}(L,t)}{\int_0^\infty \bar{C}(L,t)dt} = \frac{1}{2t_m} \sqrt{\frac{t_m P_e}{\pi t}} \exp\left(-\frac{P_e \left(1 - \frac{t}{t_m}\right)^2}{4 \frac{t}{t_m}}\right)$$

$P_e = \frac{\bar{v}L}{D_{Dispersion}}$: Peclet number
 L : Model length
 t_m : Mean residence time
(no-diffusion, non-dispersion)
 $t_m^{ADM} = \left(1 + \frac{2}{P_e}\right)t_m$: Mean residence time of ADM
 $\sigma^2 = \left(\frac{2}{P_e} + \frac{8}{P_e^2}\right)t_m^2$: Variance of RTD

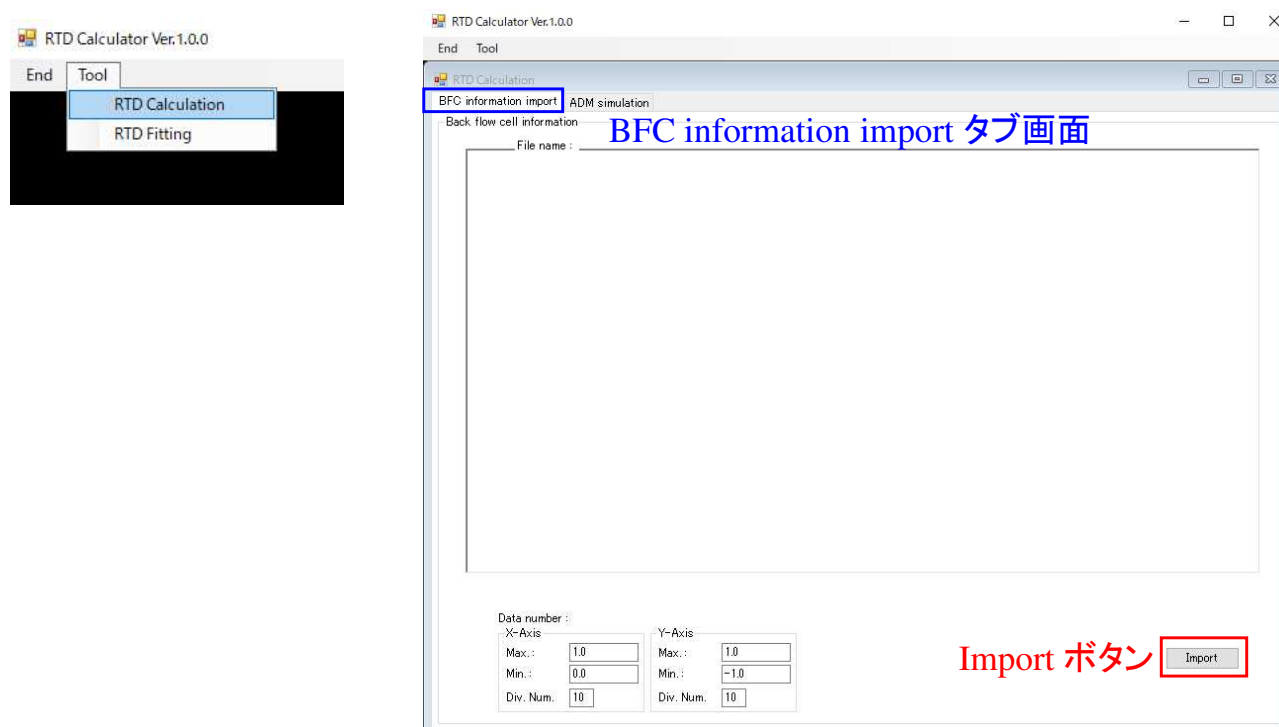
利用手順

- (1) 従来通りの方法で熱流動解析を実施すると、解析終了後に、RTDcalculatorで使用する流動情報が記載された、“解析結果ファイル名.bfcinf”が自動出力されます。
- (2) SingleScrewSimulatorVer13.0.0¥RTDcalculator フォルダ内に存在する、RTDcalculator.exe を起動します。

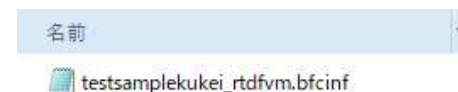


利用手順

- (3) RTDcalculator のメニューバーから、Tool/RTD Calculation をクリックすると、新規フォームが出現し、“BFC information import” タブが選択されます。

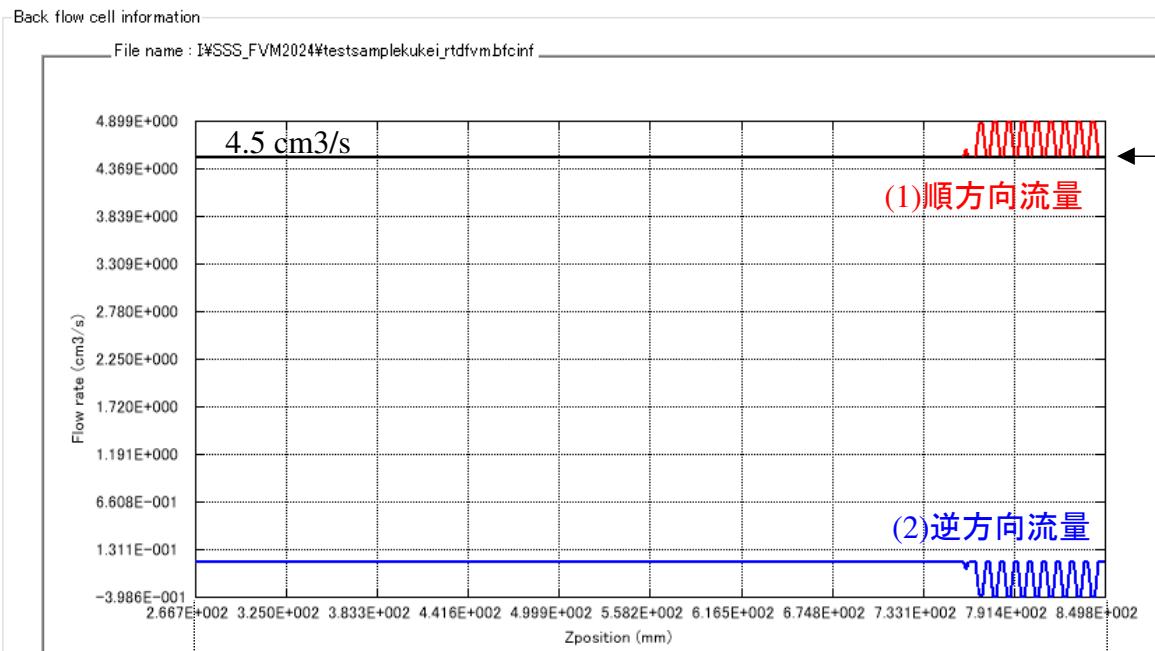


- (4) BFC information import タブ画面の右下のImportボタンをクリックして、対象の解析結果ファイル名.bfcinf を選択します。



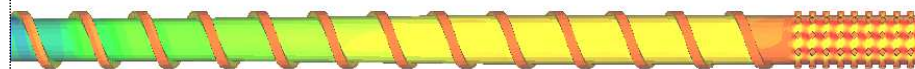
利用手順

- (5) .bfcinf を読み込むと、中央のグラフには、横軸をスクリュ(z)軸長[mm]、縦軸を押し出流量[cm³/s]とする、スクリュ軸方向の流動結果が表示されます。



← 押し出流量(=(1)+(2))
(各z軸断面において押し出流量が一定となっており、質量保存則が正確に満たされている)

本解析結果では、(2)逆方向流量が少なく押し出流量 \approx (1)順方向流量となっているが、ピンミキシング部ではフルフライト部に比べて逆方向流量が増加する傾向を示しました。

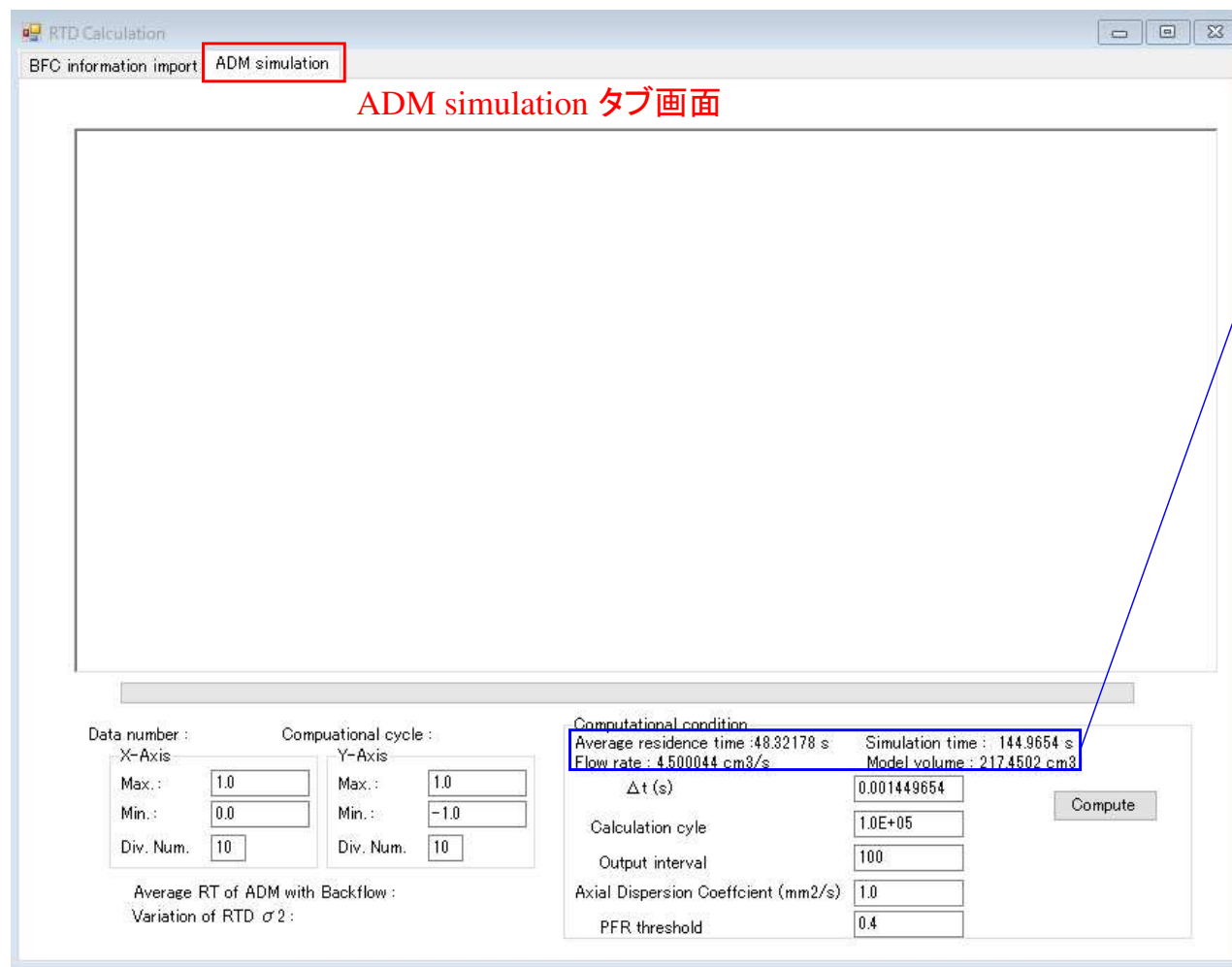


ブロック1以降の流速分布(cm³/s)

解析結果例として、p.14のテスト解析結果を使用しました。

利用手順

- (6) .bfcinf の読込内容に問題がないことを確認後，“ADM simulation” タブをクリックし、ADM simulation タブ画面に移動します。



.bfcinf から抽出された情報

- Flow rate: 押出流量 [cm³]
- Model volume: 流路体積 [cm³]
- Average residence time:
⇒平均滞留時間 [s]
(充填率を考慮した流路体積
÷ 押出流量)
- Simulation time:
⇒RTDの最大時間目安 [s]
= 平均滞留時間 × 3.0

利用手順

- (7) ADM simulation タブ画面の右下の計算条件を設定後、Computeボタンをクリックすると、RTD解析が実施されます。解析終了後（解析時間：数分程度）、中央のグラフ図に結果が表示されます。

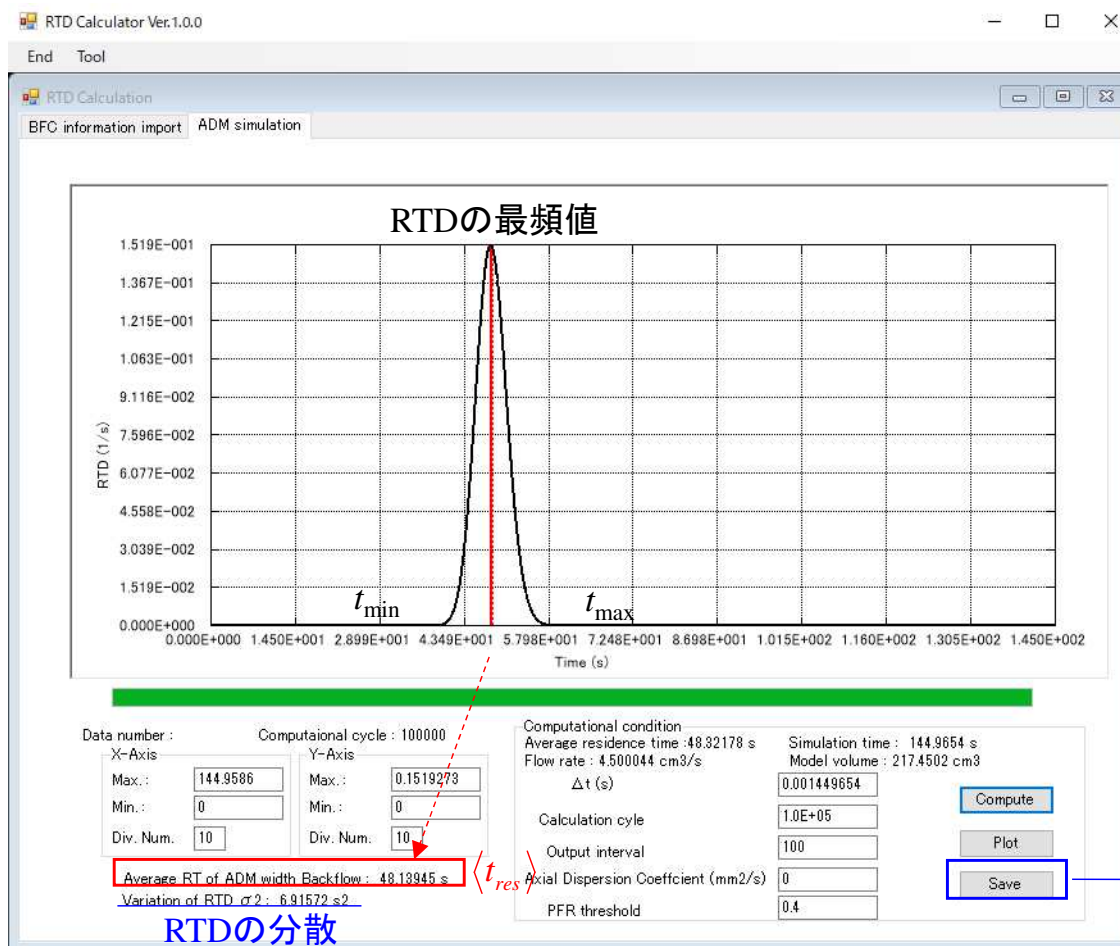
Computational condition	
Average residence time : 48.32178 s	Simulation time : 144.9654 s
Flow rate : 4.500044 cm ³ /s	Model volume : 217.4502 cm ³
Δt (s)	0.001449654
Calculation cycle	1.0E+05
Output interval	100
Axial Dispersion Coefficient (mm ² /s)	1.0
PFR threshold	0.4

Compute
解析実行

- Δt : 解析時間刻み[s]
- Calculation cycle: 計算サイクル数[回]
- Output interval: デフォルトの100の場合、Calculation cycle ÷ 100回毎に、計算過程の出力情報が更新される。
- Axial Dispersion Coefficient (ADC): 軸方向分散係数 $D_{Dispersion}$ - (2)式 (p.18)
- PFR threshold: CSTRモデル計算の閾値。デフォルトの0.4の場合、充填率が0.4未満のスクリュ位置では逆流成分を考慮しない。

利用手順

- (8) グラフ図(横軸: 時間[s], 縦軸: RTD [1/s])において, 黒実線がRTD解析結果, 赤実線がRTD分布から得られる平均滞留時間 $\langle t_{res} \rangle$ になります(*). 必要に応じて, SaveボタンをクリックしてRTD解析結果をテキストファイルに保存します.



(*) $\langle t_{res} \rangle$ とRTDには以下の関係があります.

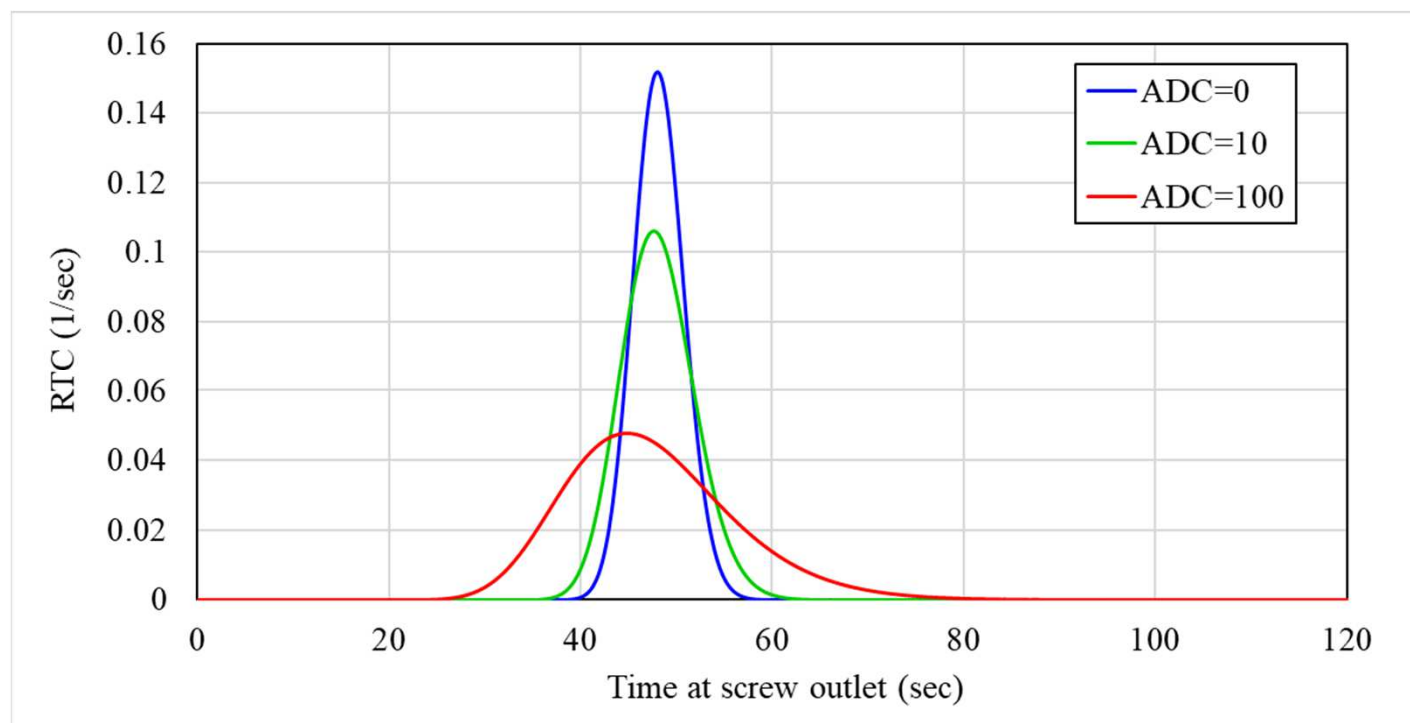
$$\langle t_{res} \rangle = \int_{t_{min}}^{t_{max}} t \times RTD(t) dt$$

したがって, RTDの最頻値は, RTDが長時間側に裾を引く分布ほど, $\langle t_{res} \rangle$ よりも短時間側になります.

テキストファイル出力

Axial Dispersion Coefficient (ADC) がRTD解析結果に及ぼす影響

下図には、分散係数ADC: $D_{Dispersion}$ を変更して解析した結果を示します。
トレーサ粒子自身の分散を考慮していない ADC=0 と比較して、ADC=10, ADC=100では、
ADCが大きいほど、RTC解析結果の分布が広がる傾向を示します。
したがって、実測結果と比較して適切なADCを設定することが重要と考えます。



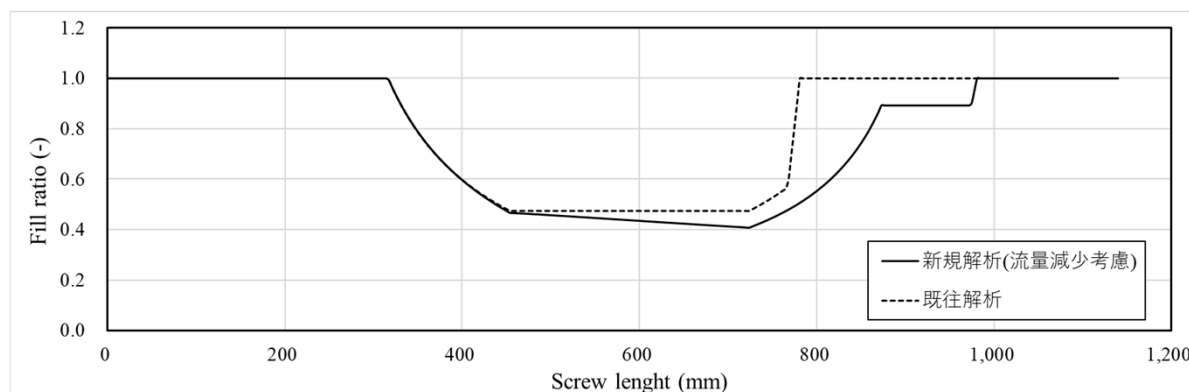
(3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能

本機能では、既往の脱揮解析では考慮できなかった、揮発成分が高濃度の場合に、脱揮による揮発成分の流量減少が、押出流量、充填率、流体粘度などに与える影響を考慮した解析が可能になりました。

○ 脱揮成分濃度 (g/cm³)



○ 充填率分布 (-) 赤色: 樹脂充填領域, 青色: 樹脂未充填領域



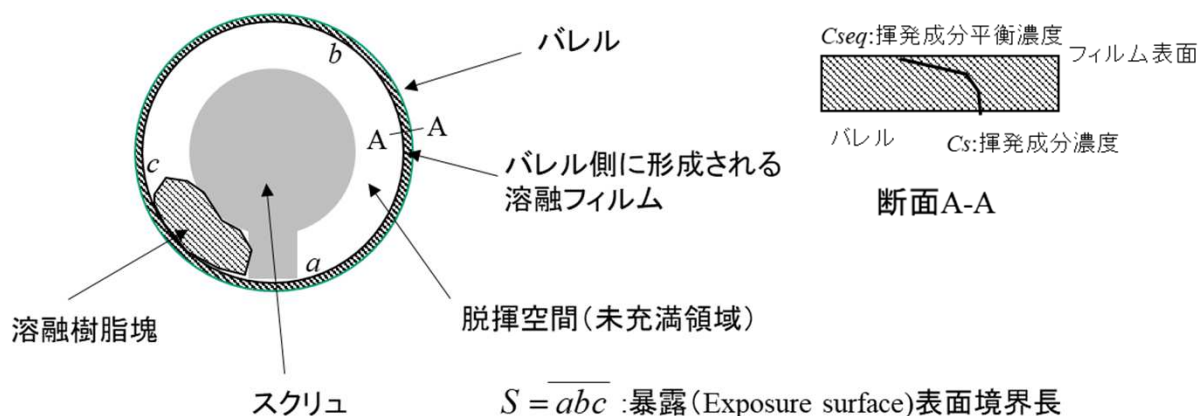
左図: 充填率のスクリュ長依存性
(既往解析結果との比較)

参考文献: “高分子希薄溶液における脱揮押出の基礎検討”, 千葉高充 他, E-214, プラスチック成形加工学会秋季大会(2023)

新機能では, 既往Ver. で実装した脱揮解析モデル(Latinenモデル, 下図)を拡張し, 高分子(溶質)が溶媒(揮発成分)に溶解した高分子希薄溶液から, スクリュ内で溶媒が揮発する状態を定式化しました. 次ページ以降で詳細を説明します.

Latinen モデルを用いた表面更新型脱揮(Surface renewal devolatilization)の基本式

$$\frac{dC_s}{dz} = -\frac{2k(D_b D_m NS)^{1/2}}{Q} \rho (C_s - C_{seq})$$



- C_s : 揮発成分濃度[kg/m³]
- C_{seq} : 揮発成分濃度平衡値[kg/m³]
- Q : 溶融樹脂押出量[kg/s]
- k : モデルパラメータ[-]
- D_b : バレル直径 [m]
- D_m : 揮発成分拡散係数[m²/s]
- N : スクリュ回転数[1/s]
- S : 暴露表面境界長[m]
- ρ : 溶融樹脂密度[kg/m³]

参考文献: “Experimental and Numerical Simulation Study of Devolatilization in a Self-Wiping Corotating Parallel Twin-Screw Extruder”, M. Ohara, Y. Sasai, S. Umemoto, Y. Obata, T. Sugiyama, S. Tanifuji, S. Kihara, K. Taki, *Polymers*. **12**, 11, 2728 (2020)

Latinen モデルの高分子溶液への拡張式(新機能)

$$\frac{dC_s}{dz} = -\frac{2k(D_b D_m NS)^{1/2}}{Q_w} \rho_{mix} (C_s - C_{seq}) \quad (1)$$

高分子溶液(溶質+溶媒)の密度 ρ_{mix} を, 以下で定義される
高分子(溶質)と揮発成分(溶媒)の平均密度として評価します.

$$\rho_{mix} = \rho_s \phi_s + \rho_p \phi_p \quad (2)$$

$$\phi_s + \phi_p = 1 \quad (3)$$

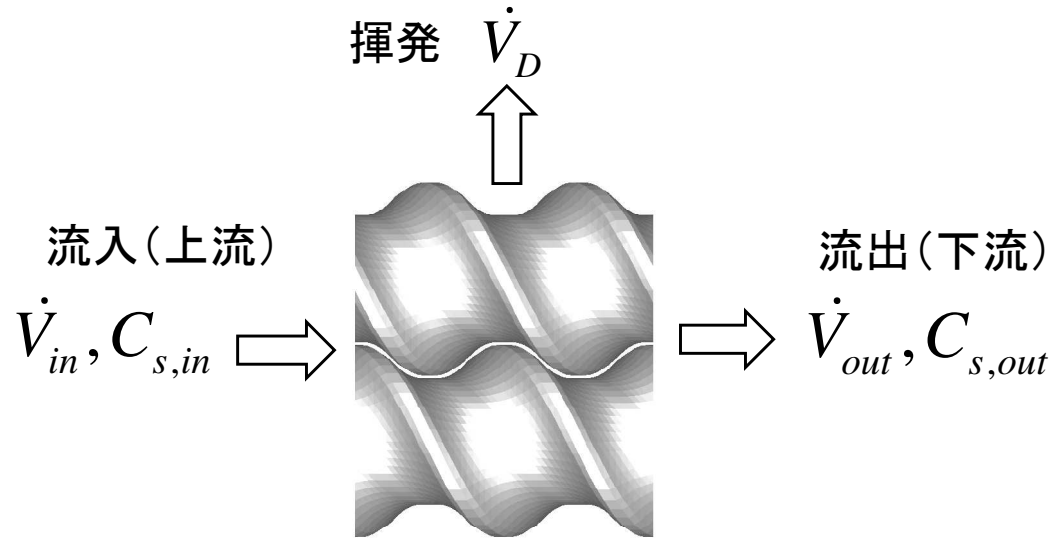
$$Q_w = Q_{sw} + Q_{pw} = \rho_s \dot{V}_s + \rho_p \dot{V}_p \quad (4)$$

$$C_s = \rho_s \phi_s, \quad C_p = \rho_p \phi_p \quad (5)$$

$$\phi_s = \frac{\dot{V}_s}{\dot{V}_s + \dot{V}_p}, \quad \phi_p = \frac{\dot{V}_p}{\dot{V}_s + \dot{V}_p} \quad (6)$$

C_s	: 揮発成分(溶媒)の濃度[kg/m ³]
C_{seq}	: 揮発成分(溶媒)の濃度平衡値[kg/m ³]
ρ_{mix}	: 高分子溶液の平均密度[kg/m ³]
ρ_s	: 揮発成分(溶媒)の密度[kg/m ³]
ρ_p	: 高分子(溶質)の密度[kg/m ³]
ϕ_s	: 揮発成分(溶媒)の体積分率[-]
ϕ_p	: 高分子(溶質)の体積分率[-]
Q_w	: 高分子溶液の押出量[kg/s]
Q_{sw}	: 揮発成分(溶媒)の押出量[kg/s]
Q_{pw}	: 高分子(溶質)の押出量[kg/s]
\dot{V}_s	: 揮発成分の体積流量[m ³ /s]
\dot{V}_p	: 高分子の体積流量[m ³ /s]

脱揮に伴う揮発成分の濃度および流量変化を以下で定義します。



揮発成分濃度の変化

$$C_{s,in} = \rho_s \frac{\dot{V}_{s,in}}{\dot{V}_{s,in} + \dot{V}_p} \quad (11)$$

$$C_{s,out} = \rho_s \frac{\dot{V}_{s,in} - \dot{V}_D}{\dot{V}_{s,in} - \dot{V}_D + \dot{V}_p} \quad (12)$$

$$\dot{V}_{in} = \dot{V}_{s,in} + \dot{V}_{p,in} \quad (7)$$

$$\dot{V}_{out} = \dot{V}_{s,out} + \dot{V}_{p,out} \quad (8)$$

$$\dot{V}_{s,in} = \dot{V}_{s,out} + \dot{V}_D \quad (9)$$

$$\dot{V}_{p,in} = \dot{V}_{p,out} = \frac{Q_{pw}}{\rho_p} = \dot{V}_p \quad (10)$$

脱揮に伴う揮発成分の体積流量変化: \dot{V}_D

高分子溶融体の体積流量/押出量は変化なし

(11)式, (12)式より, 揮発成分の揮発(減少分)体積流量 \dot{V}_D は(13)式で表現されます.

$$\dot{V}_D = \frac{\rho_s \dot{V}_p (C_{s,in} - C_{s,out})}{(\rho_s - C_{s,in})(\rho_s - C_{s,out})} \quad (13)$$

Latinenモデルで評価される揮発成分濃度 C_s と揮発体積(全体的な体積流量の減少分)を表現する関係式

ここで, 充満領域では, 暴露表面境界長 $S=0$ のため, (1)式より $C_{s,in}=C_{s,out}$ が成立し, (13)式より 揮発成分の体積流量の減少分 $\dot{V}_D = 0$ となります.

一方, 非充満領域では, $S>0$ のため, (1)式より $C_{s,in}>C_{s,out}$ が成立し, (13)より $\dot{V}_D > 0$ となります. このとき, (9)式より $\dot{V}_{s,in} > \dot{V}_{s,out}$ となるため, 高分子溶液中の揮発成分(溶媒)は減少します. 溶媒の減少は, (6)式を通じて, 高分子及び溶媒の体積分率にも影響を及ぼします.

揮発成分の脱揮に伴う溶融体の粘度変化を、以下の式で定義します。

$$\eta = \frac{\eta_0 c_p^{*\alpha} a_T}{1 + C_1 (c_p^{*\beta} a_T \dot{\gamma})^{C_2}} \quad (14)$$

高分子(溶質)の体積分率 c_p^* の増加に伴う増粘を表現する関係式

η	:	粘度 [Pa·s]
η_0	:	ゼロせん断粘度 [Pa·s]
C_1, C_2, α, β	:	モデルパラメータ[-]
$c_p^* = \phi_p$:	高分子の体積分率[-]
$a_T = \exp\left[\frac{\Delta E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r}\right)\right]$:	温度シフトファクター [-]
ΔE	:	活性化エネルギー[J/mol], モデルパラメータ
R	:	気体定数[J/(mol·K)]
T_r	:	基準温度[K], モデルパラメータ

(参考) Cross model (Materialfit)

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau^*}\right)^{(1-n)}, \eta_0 = a \exp\left(\frac{T_b}{T + 273.15}\right)}$$

$\dot{\gamma}$:	せん断速度 [1/s]
T	:	温度 [K]
a, τ^*, T_b	:	モデルパラメータ[-]
n	:	指数 [-]

揮発成分の蒸発潜熱を考慮したエネルギー方程式を以下の式で定義します。

$$\left(\rho_s C_{ps} \phi_s + \rho_p C_{pp} \phi_p\right) \frac{DT}{Dt} = \frac{Sh}{V} (T_b - T) + \eta \dot{\gamma}^2 - \rho_s \frac{\dot{V}_D}{V} \Delta H \quad (15)$$

- ρ_s : 揮発成分(溶媒)密度[kg/m³]
- ρ_p : 高分子(溶質)密度[kg/m³]
- C_{ps} : 揮発成分比熱[J/kg/K]
- C_{pp} : 高分子比熱[J/kg/K]
- ϕ_s : 揮発成分体積分率[-]
- ϕ_p : 高分子体積分率[-]
- T : 温度[K]
- T_b : バレル温度[K]
- S : 温度計算用試験体積のバレル接触面積[m²]
- V : 温度計算用試験体積 [m³]
- \dot{V}_D : 揮発成分の体積 [m³]
- h : 熱伝達係数[W/m²/K]
- η : 粘度[Pa·s]
- $\dot{\gamma}$: ひずみ速度[1/s]
- ΔH : 蒸発潜熱[J/kg]

脱揮成分(溶媒)平衡濃度 C_{seq} を, 以下の式で定義します.

$$C_{seq} = \frac{\rho_s}{1000} \phi_{seq} \quad (16)$$

$$\phi_{seq} = \frac{P_0}{P_s} \frac{1}{\exp(1 + \chi)} \quad (17)$$

$$P_s = \frac{101325}{760} \times 10^{A - \frac{B}{(T+C)}} \quad (18)^*$$

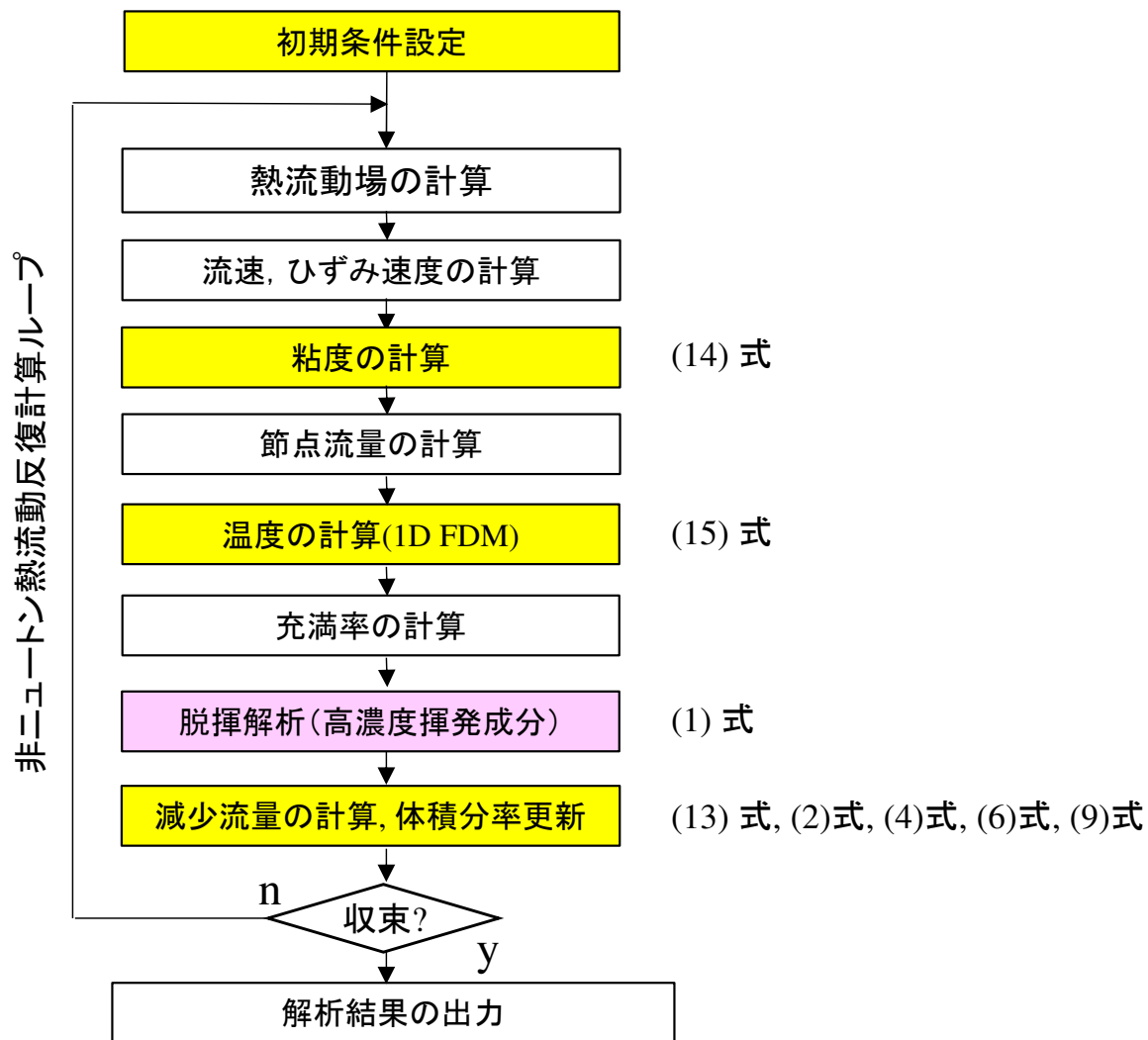
(18)* アントワン式(Antoine equation): $\log_{10} P = A - \frac{B}{(T+C)}$

から算出される, 蒸気圧 P の単位 mmHg を Pa に換算.

C_{seq}	: 脱揮成分(溶媒)平衡濃度[g/cm ³]
ϕ_{seq}	: 溶媒平衡体積分率[-]
P_s	: 溶媒の蒸気圧[Pa]
P_0	: 未充満領域の圧力[Pa] (大気圧の場合は101,325 Pa)
$\chi = C_1 + \frac{C_2}{T}$: 相互作用パラメータ[-]
C_1, C_2	: χ を決定するモデルパラメータ
T	: 温度[K]
A, B, C	: アントワン式のモデルパラメータ
$C_{seq\lim} = C_3$: C_{seq} の上限値[g/cm ³]
C_3	: $C_{seq\lim}$ を決定するパラメータ

以上の定式化を用いて、熱流動場との連成解析を行います。

○高濃度揮発成分の脱揮解析／計算手順



利用手順 Surface Renewal Model パラメータボタンをクリックし、熱流動連成をチェック状態にすると、新規脱揮解析の入力フォームに切替ります。

Surface Renewal Devolatilization Model 計算
 Surface Renewal Model パラメータ — 未充填解析を選択すると出現。

Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム

熱流動連成(脱揮成分の流量減少を考慮)

Surface Renewal Model パラメータ

揮発成分濃度 [ppm]
 揮発成分平衡濃度 [ppm]
 揮発成分拡散係数 [m2/s] 定数 関数
 モデルフィッティング係数 [-]
 揮発開始位置(軸方向) [mm]

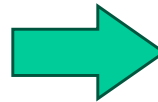
モデルパラメータα
 モデルパラメータβ
 基準拡散係数Dr(m2/s)
 基準温度(℃)

$$D = a_T D_r \exp\left(\beta \frac{\phi}{\phi_m}\right)$$

$$a_T = \exp(\alpha(T - T_r))$$

Result display considered with unfill 設定/閉じる

既往脱揮解析の入力フォーム



Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム

熱流動連成(脱揮成分の流量減少を考慮)

Surface Renewal Model パラメータ / 熱流動連成

高分子体積分率 [-]
 粘度モデル係数α [-]
 粘度モデル係数β [-]
 活性化エネルギー [J/mol]
 ×モデル係数C1 [-]
 ×モデル係数C2 [K]
 溶媒平衡濃度 [g/cm3]
 溶媒密度 [kg/m3]
 溶媒比熱 [J/kg/K]
 アントワニ係数A [-]
 アントワニ係数B [-]
 アントワニ係数C [-]
 蒸発潜熱 [J/Kg]
 未充填領域の圧力 [Pa]
 溶媒拡散係数 [m2/s] 定数 関数
 モデルフィッティング係数 [-]

モデルパラメータα
 モデルパラメータβ
 基準拡散係数Dr(m2/s)
 基準温度(℃)

$$D = a_T D_r \exp\left(\beta \frac{\phi}{\phi_m}\right)$$

$$a_T = \exp(\alpha(T - T_r))$$

Result display considered with unfill 設定/閉じる

新規脱揮解析の入力フォーム

(参考) 既往脱揮解析について、
 脱揮開始位置の指定が
 できるようになりました。

入力情報の説明1

Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム

熱流動速成(脱揮成分の流量減少を考慮)

新規脱揮解析の入力フォーム

流出口境界条件

流量規定 圧力規定 未充满解析

流量 cm³/s

Surface Renewal Model パラメータ / 熱流動速成

高分子体積分率	<input type="text" value="0.15"/>	[-]
粘度モデル係数 α	<input type="text" value="8"/>	[-]
粘度モデル係数 β	<input type="text" value="6.4"/>	[-]
活性化エネルギー ΔE	<input type="text" value="28600"/>	[J/mol]
χ モデル係数C1	<input type="text" value="77.65"/>	[-]
χ モデル係数C2	<input type="text" value="-29626"/>	[K]
溶媒平衡濃度	<input type="text" value="0.97"/>	[g/cm ³]

— 流入口に設定する高分子体積分率(例, 本項に0.15を入力し, 解析プログラム実行タブで10.0 cm³/sを指定した場合, 10.0×0.15=1.5 cm³/sが高分子の押出量になります.)

粘度式(14)内の $\alpha, \beta, \Delta E$

$$\eta = \frac{\eta_0 c_p^{\alpha} a_T}{1 + C_1 (c_p^{\beta} a_T \dot{\gamma})^{C_2}}$$

$$a_T = \exp\left[\frac{\Delta E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r}\right)\right]$$

溶媒平衡濃度の
モデルパラメータ (p.34)

$$C_{seq} = \frac{\rho_s}{1000} \phi_{seq}, \quad \phi_{seq} = \frac{P_0}{P_s} \frac{1}{\exp(1 + \chi)}, \quad \chi = C_1 + \frac{C_2}{T}$$

$$C_{seq\ lim} = C_3$$

入力情報の説明2

溶媒平衡濃度	0.97	[g/cm ³]
溶媒密度	1000.0	[kg/m ³]
溶媒比熱	4200.0	[J/kg/K]
アントワン係数A	8.02754	[-]
アントワン係数B	1705.616	[-]
アントワン係数C	231.405	[-]
蒸発潜熱	2264.0E+3	[J/kg]
未充填領域の圧力	101325.0	[Pa]
溶媒拡散係数	1.0E-8	[m ² /s]
モデルフィッティング係数	1.0	[-]

— 揮発成分(溶媒)密度 ρ_s

— 揮発成分(溶媒)比熱 C_{ps}

式(18)内のモデルパラメータ A, B, C
(アントワン係数)

式(15)内の蒸発潜熱 ΔH

未充填領域の圧力 P_0 (p.34)

$$\phi_{seq} = \frac{P_0}{P_s} \frac{1}{\exp(1 + \chi)}$$

式(1)内の k (モデルパラメータ)

式(1)内

揮発成分(溶媒)拡散係数

- 定数の場合は, “定数” をチェックする.

- 関数(温度依存性, 脱揮成分濃度依存性)の場合は,
“関数” をチェックして, 下記フォーム内に入力する.

- 定数
 関数

$$D = a_T D_r \exp\left(\beta \frac{\phi}{\phi_m}\right),$$

$$a_T = \exp(\alpha(T - T_r))$$

モデルパラメータ α

0.1

モデルパラメータ β

2

基準拡散係数 D_r (m²/s)

5.0E-10

基準温度(°C)

180.0

α : モデルパラメータ

β : モデルパラメータ

T_r : 基準温度

D_r : 基準温度における拡散係数

ϕ : 揮発成分濃度

ϕ_m : 揮発成分濃度最大(初期)値

入力情報の説明3／粘度式(14)の定義方法

粘度式(14)の各パラメータは、解析実行プログラムタブの物性データ設定フォームから、Crossモデルの入力欄を利用して入力します。具体例を下図に示します。

物性定義フォーム

パス名: [\$\$\$SSS_FVM2024] 計算コントロールデータファイル名: [srmcouple 100rpm] [ファイル入力]

フィードホッパーメッシュファイル名: [] [選択]

スクリュメッシュデータファイル名: [srm_couple] [選択] [ブロック情報個別選択]

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: [Sample] [入力] [新規]

(1) 設定フォーム呼出し

(2) Crossモデルを選択

モデル	モデル値	
指数n	0.9	C_2
モデル係数B(Pa·s)	2300000	η_0
係数 τ^*	7	C_1
温度係数Tb(°C)	200	T_r

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \left(\frac{\eta_0 \dot{\gamma}}{\tau^*}\right)^{(1-n)}}$$

$$\eta_0 = B e^{(T_b/T_r)}$$

熱物性(溶融体)

密度	1190	【kg/m ³ 】
比熱	2512	【J/kg/K】
熱伝導率	0.18200001	【W/m/K】

Tadmorモデルパラメータセット

Tadmorモデルパラメータ

固体密度	960	【kg/m ³ 】
固体比熱	2303	【J/kg/K】
溶融温度	130	【°C】
潜熱	201189	【J/kg】

高分子の密度、比熱、熱伝導率を設定する。

(3) 下の変換表に基づいてパラメータを設定する。

Cross入力項目 脱揮解析用粘度パラメータ

Index n → C_2

Model coeff. B → η_0

Coeff. τ^* → C_1

Temp. Coeff. Tb → T_r

$\alpha, \beta, \Delta E$ は、脱揮解析入力フォーム(p.37) で設定する。

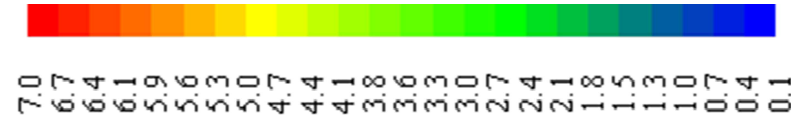
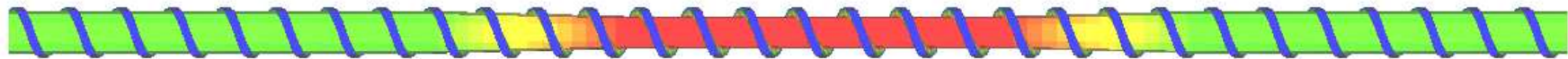
$$\eta = \frac{\eta_0 c_p^{\alpha} a_T}{1 + C_1 (c_p^{\beta} a_T \dot{\gamma}) C_2} \quad (14) \quad a_T = \exp \left[\frac{\Delta E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r} \right) \right]$$

テスト解析例 (サンプルファイル: ver13test¥srmcouple100rpm.ncal)

・スクリュモデル: バレル径38.1mm, スクリュ長 1143mm

⇒ Flow direction

【モデル肉厚分布】



・解析方法: 未充填解析, 脱揮解析/熱流動連成

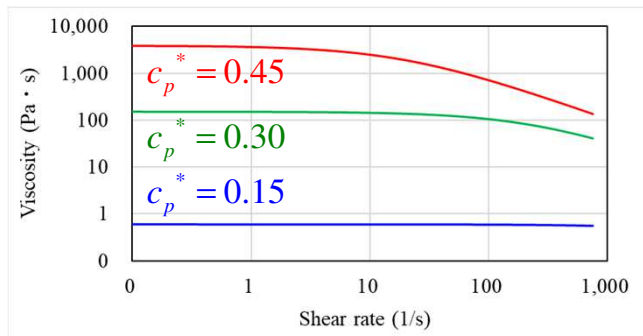
・成形条件: 押出量/ 高分子溶液 7.0 cm³/s,
 (高分子 5.95 cm³/s,
 溶媒(水) 1.05 cm³/s)

出口圧力/ 0.1 MPa

スクリュ回転数/ (A) 85rpm, (B)100rpm

・バレル温度: 150°C Max.

・樹脂データ: 粘度式(14)を利用 (下図), sample.pro



流出口境界条件	
<input type="radio"/> 流量規定	<input type="radio"/> 圧力規定
<input checked="" type="radio"/> 未充填解析	
流量	7 cm ³ /s
流入口圧力	0.001 MPa
流出口圧力	0.1 MPa
流入口温度	100 °C
スクリュ回転数	100 rpm

Surface Renewal Devolatilization Model 計算
 Surface Renewal Model パラメータ

Surface Renewal Model パラメータ設定フォーム

熱流動連成(脱揮成分の流量減少を考慮)

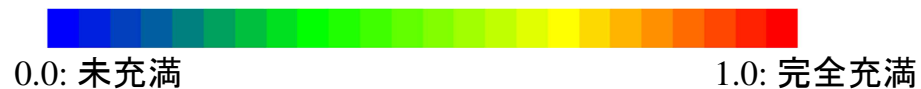
Surface Renewal Model パラメータ / 熱流動連成
 高分子体積分率 0.15 [-]

他のパラメータはデフォルトの設定値を使用しました。

(左図) 粘度の高分子体積分率(C_p^*)
 依存性 @ 150°C

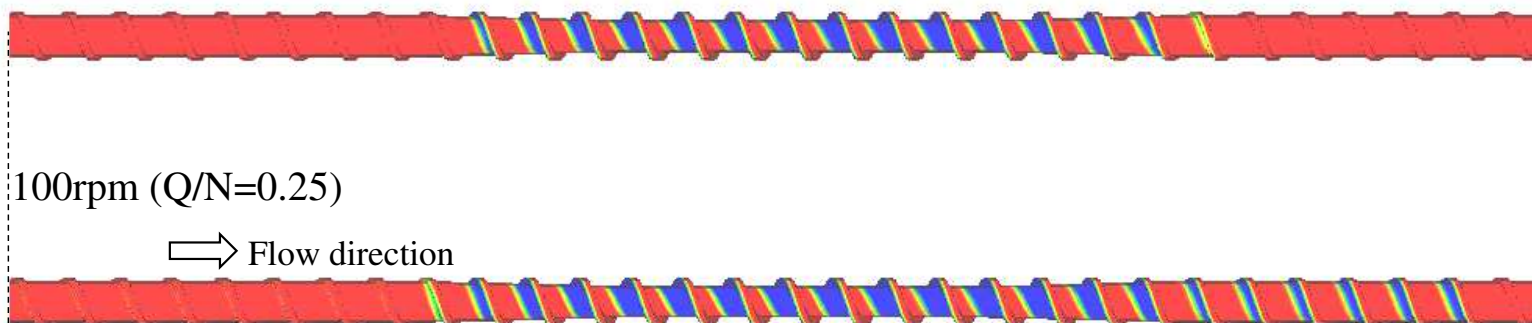
解析結果

○スクリュウ内充填率分布 (.suminf)



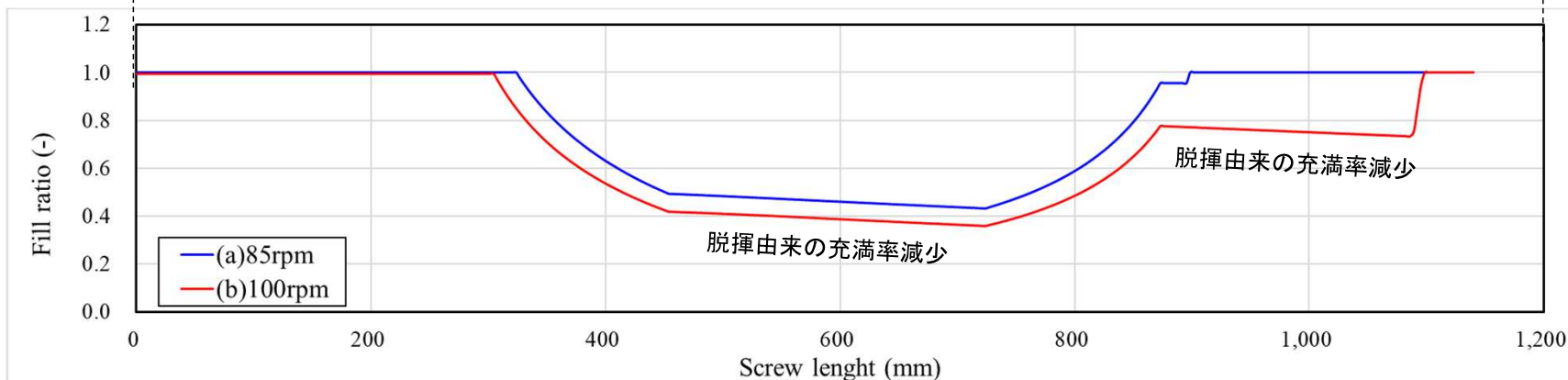
(A) 85rpm (Q/N=0.3)

⇒ Flow direction



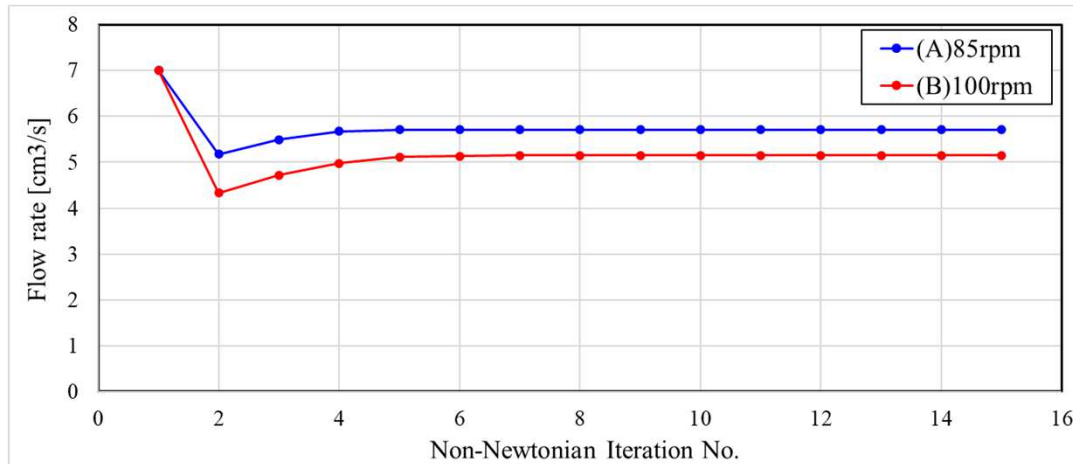
(B) 100rpm (Q/N=0.25)

⇒ Flow direction



解析結果／押出流量の収束性

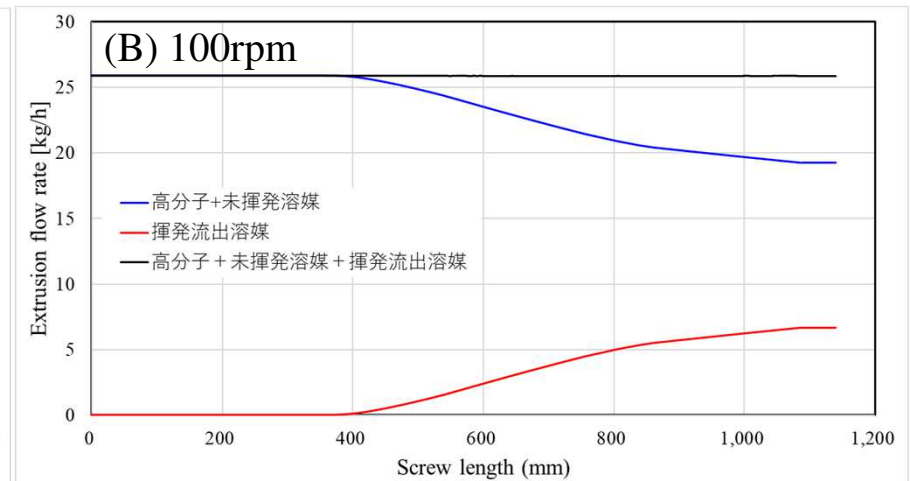
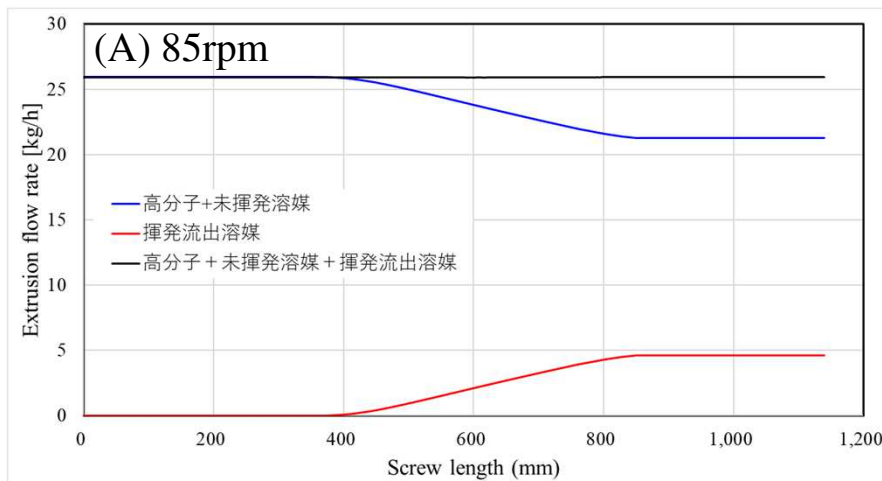
(1) 非ニュートン反復計算回数 vs. 押出流量(cm³/s) (.calinfsss)



高分子溶液の残存流量: 5.71 cm³/s
(揮発流出流量: 1.29 cm³/s)

高分子溶液の残存流量: 5.15 cm³/s
(揮発流出流量: 1.85 cm³/s)

(2) 押出量(kg/h)のスクリュ長依存性 (.srmcalcouple)



解析結果／濃度分布 [g/cm³]

・カウンター図

- カウンターコントロールパネル
Output ID
1.
- 内容
- 1
- 0 肉厚
 - 1 圧力
 - 2 温度
 - 3 ノリッドベッド
 - 4 流速
 - 5 滞留時間
 - 6 せん断ひずみ速度
 - 7 せん断応力
 - 8 せん断粘度
 - 9 層せん断ひずみ速度
 - 10 層せん断応力
 - 11 層せん断粘度
 - 12 層温度
 - 13 充填率
 - 14 揮発成分濃度
 - 15 高分子成分濃度
 - 16 伸長ひずみ速度(軸方向)
 - 17 伸長ひずみ速度(3成分)

14: 脱揮成分(溶媒)濃度

15: 高分子成分濃度

○溶媒成分濃度

(A) 85rpm

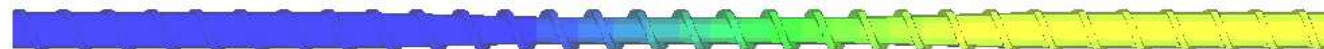


(B) 100rpm



○高分子成分濃度

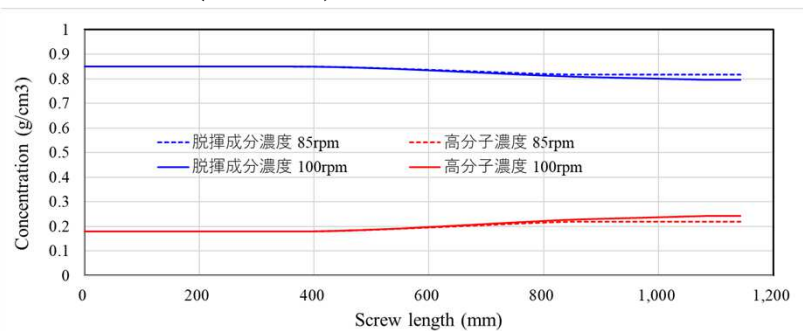
(A) 85rpm



(B) 100rpm

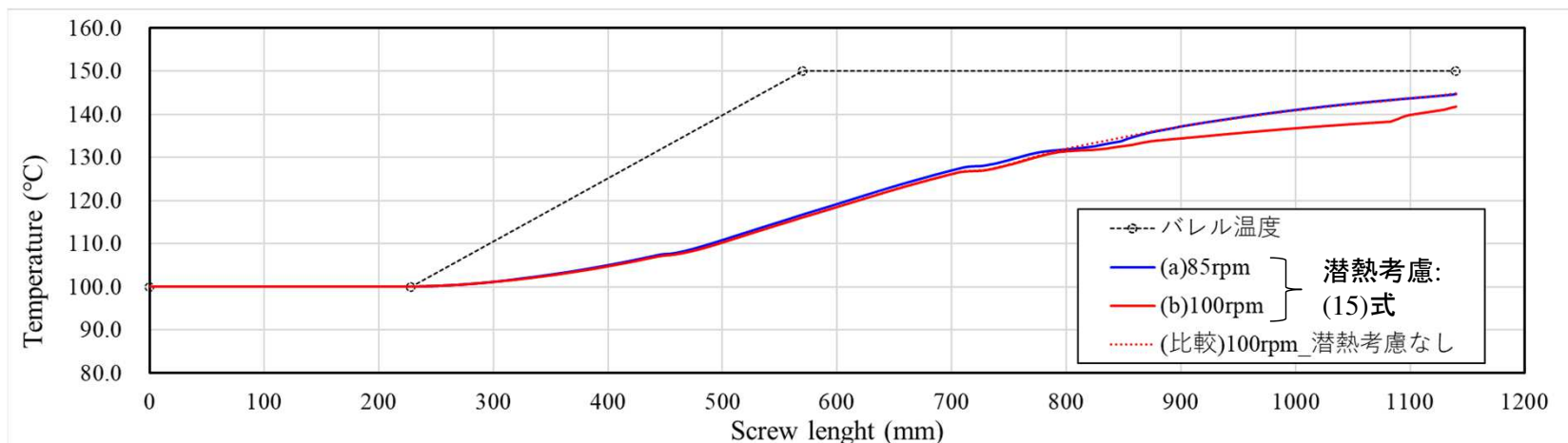


・グラフ図 (.srminf)

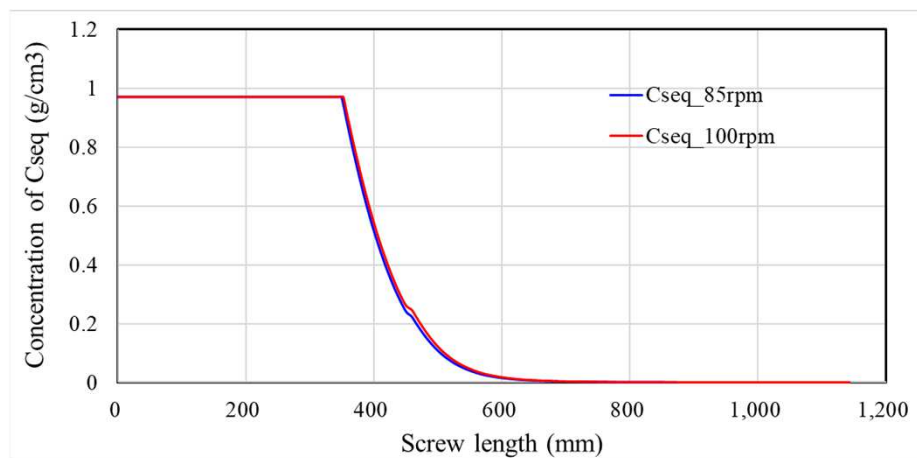


解析結果

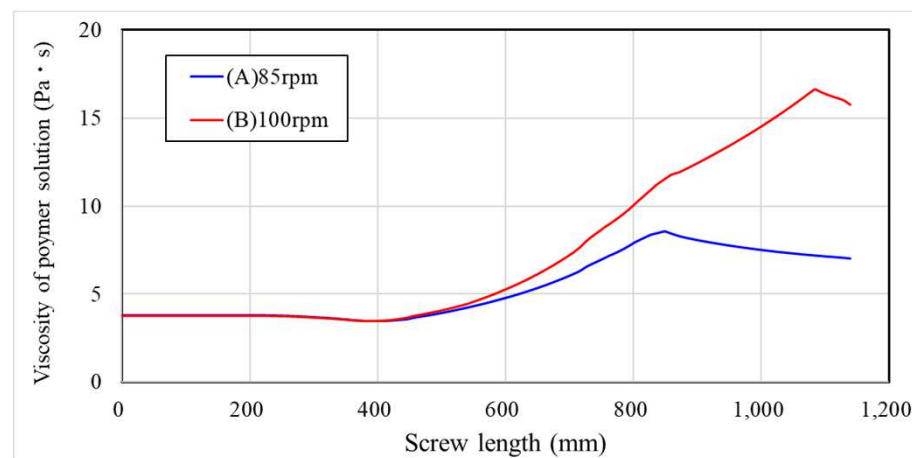
○温度分布[°C] (.suminf)



○脱揮成分(溶媒)平衡濃度[g/cm³] (.srminf)



○高分子溶液の粘度[Pa·s] (.suminf)



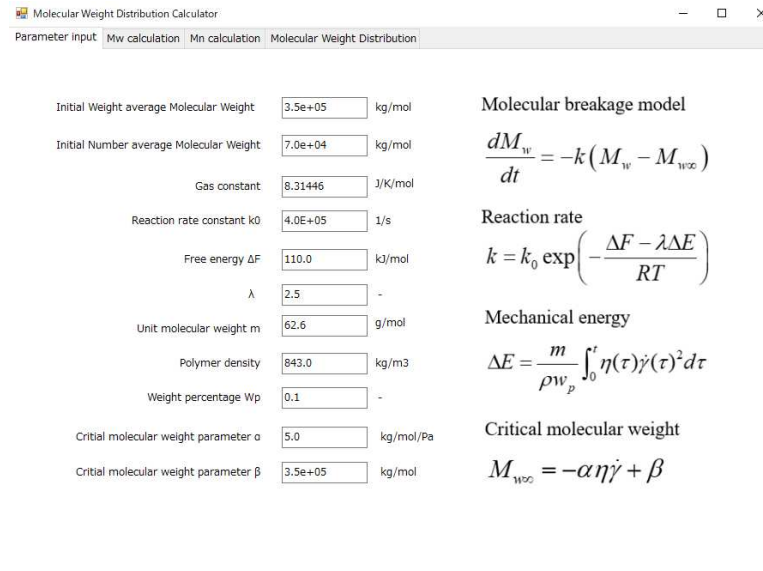
(4)高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能

本章では、スクリュ内での分子量低下に関する2つの新機能について説明します。

【機能1】 高分子(ポリマー)が流路内でせん断応力を受けて、機械的に分子鎖が切断される場合の、分子量低下傾向(参考文献1,2)を、単軸スクリュ内の履歴積分を用いて予測する解析機能(p.46-53)。

【機能2】 ランダム分解のときの重量平均分子量 M_w と数平均分子量 M_n の変化を予測する理論式(参考文献3)を用いて、シュルツ-ジム型の分子量分布を予測する解析機能(p.54-)。

⇒ 別ソフトとしてご提供(*)



(*)SSS解析で得られる M_w を用いて、分子量分布を予測する機能を、MWDcalculator としてご提供します。(Molecular Weight Distribution Calculator)

MWDcalculatorは、Materialfitと同様に、SSSと独立して運用します。

参考文献

- 1) “希薄溶液中でのポリマーの機械的切断”, 元永武 他, 高分子化学, 第27巻, 第305号 (1970)
- 2) “Mechanical Properties of Polymeric Materials”, A.Tobolsky, H. Eyring, *J. Polym. Sci*, 46, 321(1974)
- 3) “Criteria for random degradation of linear polymers”, K. W. Scott, *J. Polym. Sci*, 46, 321(1974)

高分子の機械的切断による, 重量平均分子量の分解モデルを以下で定義します.

$$\frac{dM_w}{dt} = -k(M_w - M_{w\infty}) \quad (1)$$

M_w : 重量平均分子量[kg/mol]
 $M_{w\infty}$: 臨界分子量[kg/mol]
 k : 分解速度係数[1/s]

(1)式の分解速度係数 k を, Eyring-Tobolsky理論(参考文献2)に基づき以下で定義します.

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta F - \lambda \Delta E}{RT}\right) \quad (2)$$

$$\Delta E = \frac{m}{\rho w_p} \int_0^t \eta(\tau) \dot{\gamma}(\tau)^2 d\tau \quad (3)$$

スクリュ内で高分子が受ける
せん断エネルギーの時間履歴積分
(単位モノマーユニット当たり)

k_0 : 分解速度係数定数[1/s]
 ΔF : 結合エネルギー[J/mol]
 ΔE : 機械的エネルギー(粘性散逸) [J/mol]
 λ : モデルパラメータ[-]
 R : 気体定数[J/(mol·K)]
 T : 温度[K]
 m : 平均モノマーユニット分子量[g/mol]
 ρ : 高分子の密度[g/cm³]
 w_p : 高分子の重量分率[-]
 η : 粘度[Pa·s]
 $\dot{\gamma}$: せん断速度[1/s]
 t : 反応時間[s]

(1)式の臨界分子量 $M_{w\infty}$ は, 流路内で受けるせん断応力の依存性を考慮して, 以下で定義します.

$$M_{w\infty} = -\alpha\tau + \beta \quad (4)$$

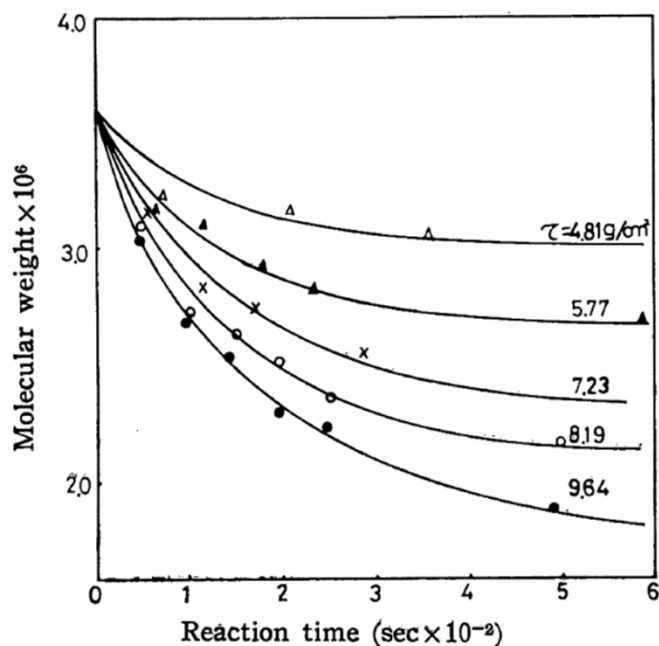
$$\tau = \eta\dot{\gamma}$$

τ : せん断応力[Pa]

α : モデルパラメータ[kg/mol/Pa]

β : モデルパラメータ[kg/mol]

(参考)分子量低下のせん断応力依存性
参考文献(1)のFig.3



毛管内でポリマーが受けるせん断応力が大きいほど, 分子量の減少率が大きく, 臨界分子量が低下する傾向を示した.

τ : せん断応力

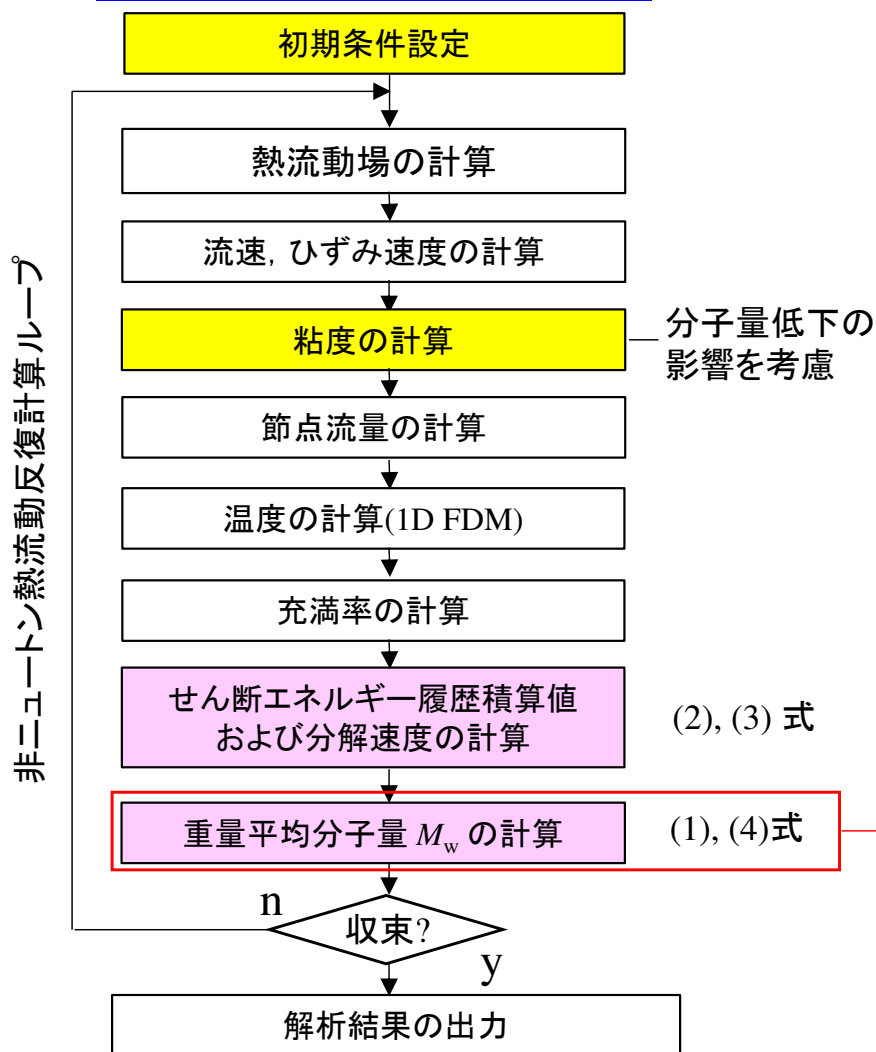
Polymer: ポリ α -メチルスチレン

Reaction time: 毛管内のポリマー滞在時間

Polymer concentration 0.05 g/100 cc toluene
 $M 3.57 \times 10^4$, Temp. 25°C

以上の定式化を用いて、スクリュ内でのせん断エネルギー履歴積算値^(*)および、重量平均分子量 M_w を算出します。

【機能1】分子量解析の計算手順

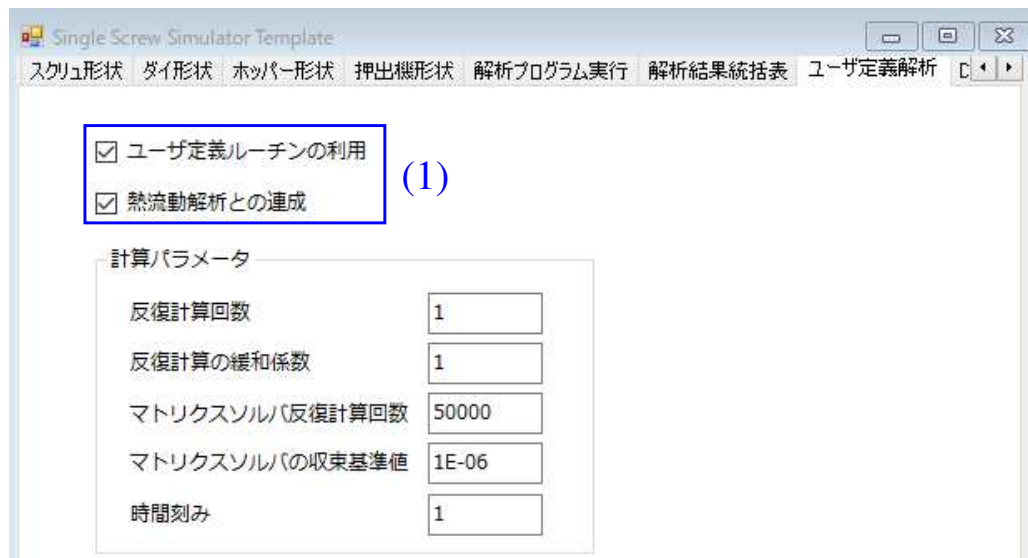


(*) せん断エネルギーの履歴積算値は、p.10の(2)滞留時間の新規解析機能に記載した、肉厚層毎に定常移流方程式を解析する方法を採用しました。これにより、重量平均分子量を、肉層毎に個別に評価します。
また、熱流動場との連成解析により、分子量の変化を粘度計算に反映させることが可能です。

【機能2】MWDcalculatorでは、本解析で得られる M_w を用いて、分子量分布を予測します。

【機能1】分子量解析の利用手順

- (1) 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”と“熱流動解析との連成”をチェック状態にします。解析に必要な各種パラメータは、以下に示すデフォルト値が自動設定されます。パラメータを変更する場合には、ユーザプログラム機能として公開されている、公開ソースプログラムを直接編集して変更します。詳細は p.81～を参照ください。



パラメータ設定のデフォルト値

M_{w0} : M_w の初期値 3.5×10^5 [kg/mol]

k_0 : 4.0×10^5 [1/s]

ΔF : 110.0 [kJ/mol]

λ : 0.5 [-]

m : 62.6 [g/mol]

ρ : 848[g/cm³]

w_p : 0.1 [-]

α : 2.4 [kg/mol/Pa]

β : 3.5×10^5 [kg/mol]

【機能1】分子量解析の利用手順

- (2) Analysisタブで、従来通りの方法で解析条件を設定し、解析を実施します。
デフォルト設定では、粘度の分子量依存性を、以下の式で決定します。

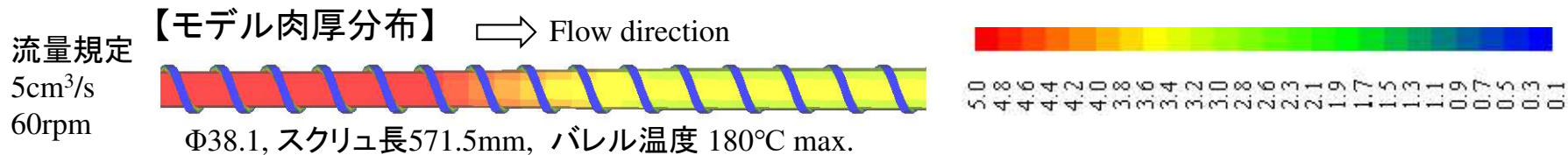
$$\eta = \eta_0 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

M_w : 重量平均分子量の解析値 [kg/mol]
 M_{w0} : 重量平均分子量の初期設定値 [kg/mol]
 η_0 : ゼロせん断粘度 [Pa·s]

スクリュ内での
分子鎖の切断により、
 $M_{w0} \geq M_w$

*上記以外の粘度式を利用する場合には、ユーザプログラムの変更が必要になります。

テスト解析例 (サンプルファイル: ver13test¥test1b_molcut1000.ncal)



材料データ: (A) vis1000 (粘度1000Pa·sのニュートン流体)
 (B) vis2000 (粘度2000Pa·sのニュートン流体)

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

パス名 I\SSSS_FVM2024 計算コントロールデータファイル名 molcut1000 ファイル入力

フェードホッパーメッシュファイル名 選択

スクリュメッシュデータファイル名 test1b 選択 ブロック情報個別選択

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 vis1000 入力 新規

物性定義フォーム

粘度

モデル選択 Newtonian model

モデル	モデル値
一定粘度 η_0 [Pa·s]	1000
参照温度 Tr [°C]	180
温度依存係数 b [1/°C]	0

vis1000の粘度式

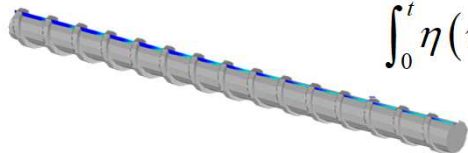
$$\eta = 1000 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

テスト解析結果

○肉厚層毎のせん断エネルギー履歴分布 [J/m³] (.crossconts)

$$\int_0^t \eta(\tau) \dot{\gamma}(\tau)^2 d\tau$$

軸方向断面

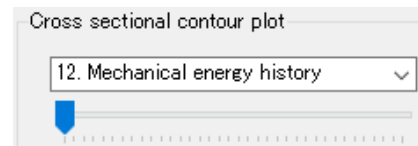


(A) vis1000

⇒ Flow direction



(B) vis2000

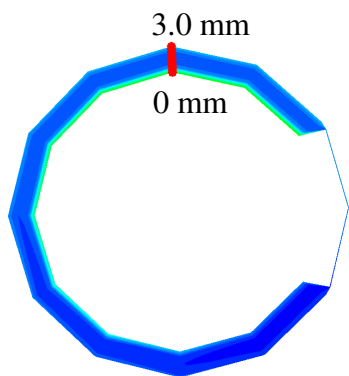


3.000E+009
2.875E+009
2.750E+009
2.625E+009
2.500E+009
2.375E+009
2.250E+009
2.125E+009
2.000E+009
1.875E+009
1.750E+009
1.625E+009
1.500E+009
1.375E+009
1.250E+009
1.125E+009
1.000E+009
8.750E+008
7.500E+008
6.250E+008
5.000E+008
3.750E+008
2.500E+008
1.250E+008
0.000E+000

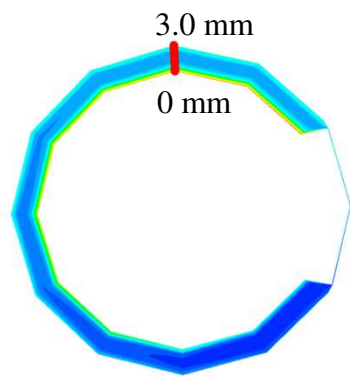


スクリュウ出口のxy断面

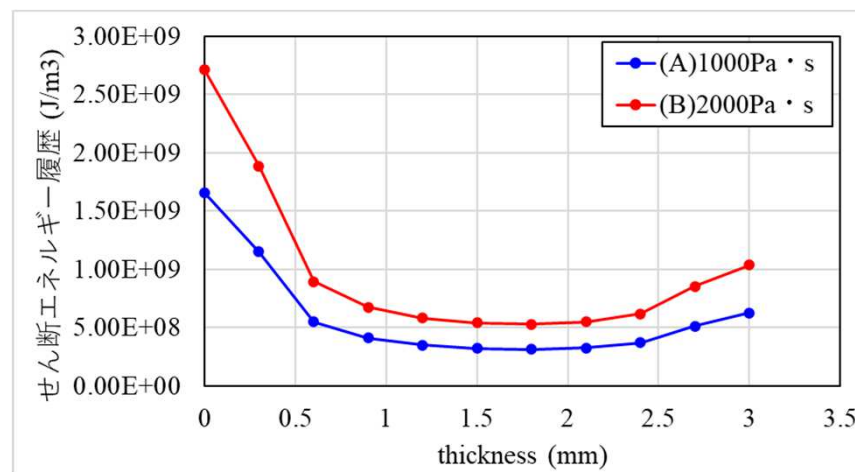
(A) vis1000



(B) vis2000

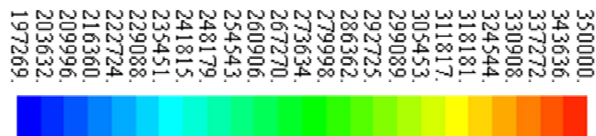


滞留時間が長く(p.15参照), せん断速度が大きいスクリュウ面およびバレル面近傍のせん断エネルギー履歴が大きくなる傾向を示しました。



テスト解析結果

○重量平均分子量 M_w [kg/mol]

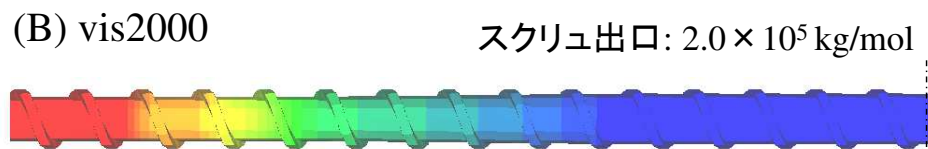


37: Layer- 1 Mw
38: Layer- 2 Mw
39: Layer- 3 Mw
40: Layer- 4 Mw
41: Layer- 5 Mw
42: Layer- 6 Mw
43: Layer- 7 Mw
44: Layer- 8 Mw
45: Layer- 9 Mw
46: Layer- 10 Mw
47: Average Residence Time
48: Average Mw

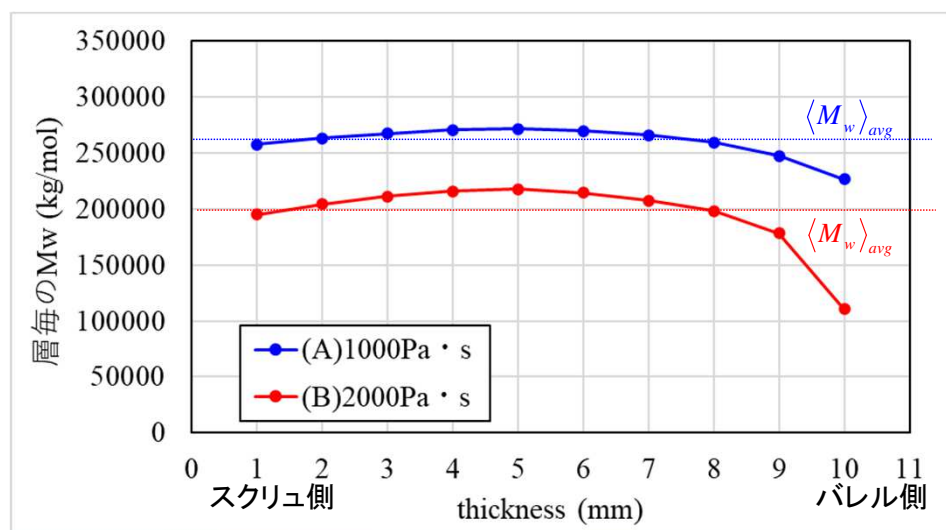
$\langle M_w \rangle_l$
(Layer-1: スクリュ側
Layer-10: バレル側)

$\langle M_w \rangle_{avg}$

* 層流量重み付け平均値 $\langle M_w \rangle_{avg}$ (.sccrst)



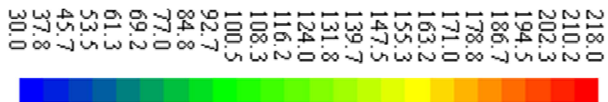
* スクリュ出口の肉厚層毎の分子量 $\langle M_w \rangle_l$ (.mwcaling)



- せん断エネルギーの小さな流路中心層では分子量低下傾向が小さく、スクリュ表面およびバレル表面に近い層ほど大きな分子量低下を示しました。
- 樹脂の粘性が高い(B)vis2000の方が、せん断エネルギーが大きいため(前ページ)、各層において(A)vis1000よりも大きな分子量低下を示しました。
- バレル表層は、スクリュ表層よりもせん断エネルギー履歴は小さいものの、せん断応力(せん断速度×粘度)が大きいために、(4)式の臨界せん断応力 $M_{w\infty}$ が小さくなり、スクリュ表層よりも分子量の低下が進行する傾向を示しました。

テスト解析結果

○ 温度分布 [°C]



(A) vis1000

スクリュ出口: 198 °C

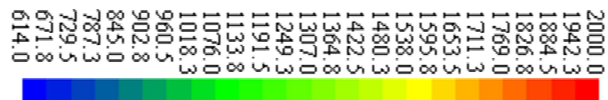


(B) vis2000

スクリュ出口: 210 °C



○ 粘度分布 [Pa·s]



(A) vis1000

スクリュ出口: 680 Pa·s

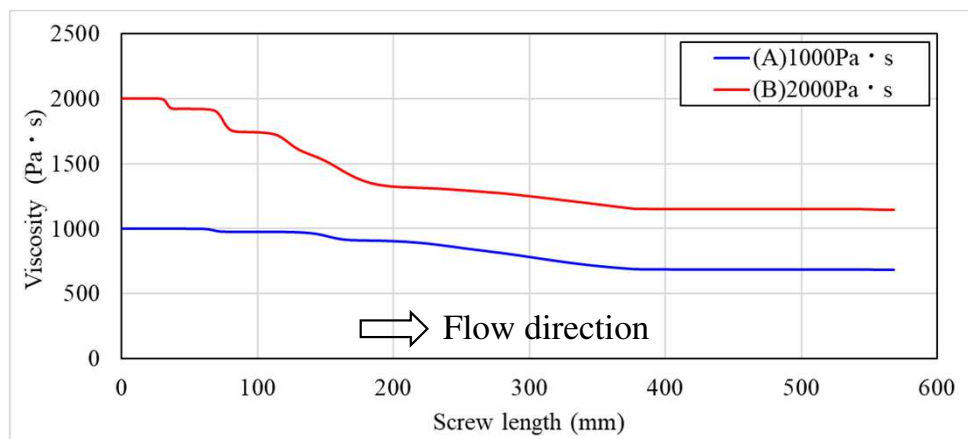


(B) vis2000

スクリュ出口: 1143 Pa·s



グラフ図: スクリュ軸長 vs. 粘度 [Pa·s]



$$\eta = 2000 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

$$\eta = 1000 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

分子量分布の予測

分子量分布がシュルツ-ジム型に従うとすると、重量分布関数 $w(M)$ は重量平均分子量 M_w と数平均分子量 M_n の比を用いて、以下の式で決定されます。

$$w(M) dM = \frac{h}{\Gamma(h+1)} \left(h \frac{M}{M_n} \right)^h \exp \left(-h \frac{M}{M_n} \right) \frac{dM}{M_n}, \quad \frac{1}{h} = \frac{M_w}{M_n} - 1. \quad (5)$$

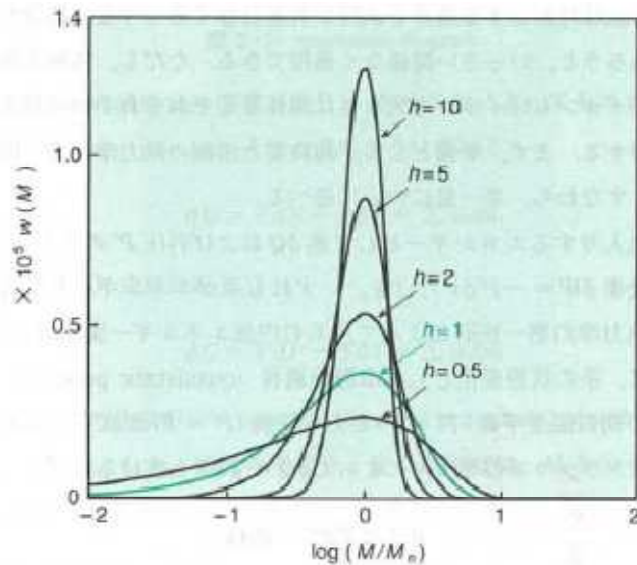


図 2-1 シュルツ-ジムの重量分布関数の形。
 $h=1$: 最も確からしい分布

$$\Gamma(h+1) = \int x^h e^{-x} dx = h\Gamma(h) : \text{ガンマ関数}$$

参考文献(4): 高分子化学の基礎(第2版), 高分子学会編(1994), p31-34.

ランダム分解モデル

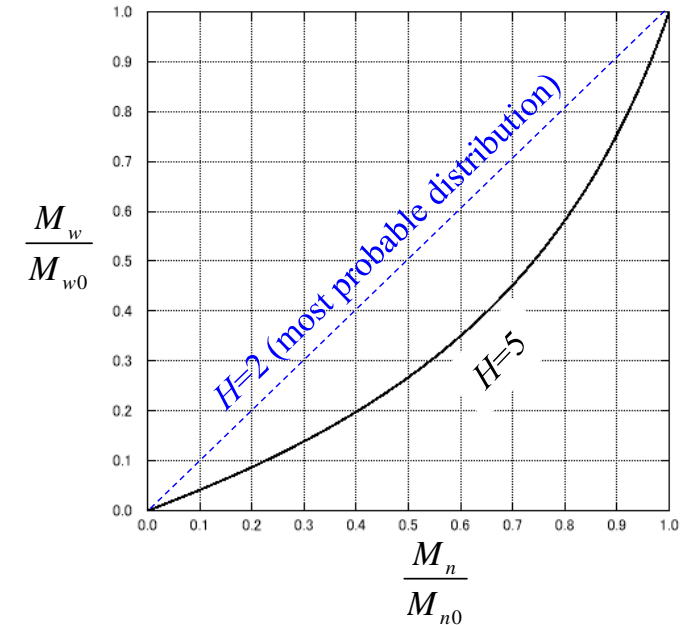
主鎖がランダムに分解する場合, 参考文献3(p.47)において, 以下の関係式(6)-(8)が提案されています.

$$\frac{M_n}{M_{n0}} = \frac{1}{1 + \chi} \quad (6)$$

$$\frac{M_w}{M_{w0}} = \frac{1}{\chi H} \left\{ 1 + \frac{1}{\chi} \left[\left(1 + \frac{\chi}{b} \right)^{-b} - 1 \right] \right\} \quad (7)$$

$$H = \frac{M_{w0}}{M_{n0}}, \quad b = \frac{1}{H-1}. \quad (8)$$

M_{n0} : M_n の初期値 [kg/mol]
 M_{w0} : M_w の初期値 [kg/mol]



本式によると, 初期の分子量 M_{n0} と M_{w0} が既知で, 分解により減少した M_w が測定できた場合, そのときの M_n を推定することができます.

したがって, (5)式から, シュルツ-ジム型の分子量分布作成が可能になります.

分子量分布計算: MWDcalculator (Molecular Weight Distribution Calculator)

MWDcalculator は, SSSの分子量解析で得られた重量平均分子量 M_w を用いて, 分子量分布を作成する解析ソフトです. 以下に利用手順を説明します.

【機能2】分子量分布計算の利用手順

- (1) p.49-50 の手順で分子量解析を実施すると, 解析終了後に, スクリュ出口の M_w に関する結果情報が記載された, “ 解析結果ファイル名.mwexitinf ” が自動出力されます.

(参考) p.50 のテスト解析例: test1b_molcut1000.mwexitinf

M_{w0} — 350000.0			
肉厚層毎の分子量 $\langle M_w \rangle_l$	1 ,	257669.6	, 2.5936151E-02
	2 ,	263203.8	, 6.2837221E-02
	3 ,	267524.7	, 8.8365540E-02
	4 ,	270816.3	, 0.1068230
	5 ,	271476.4	, 0.1199482
	6 ,	269674.5	, 0.1283674
	7 ,	265876.5	, 0.1319712
	8 ,	259626.8	, 0.1297738
	9 ,	247602.6	, 0.1188363
	10 ,	226791.3	, 8.7141149E-02
$\langle M_w \rangle_{avg}$ — 260939.692240324			

流量重み付け関数

$$\sum_{l=1}^{ndiv} \langle W_q \rangle_l = 1$$
$$\langle M_w \rangle_{avg} = \sum_{l=1}^{ndiv} \langle W_q \rangle_l \langle M_w \rangle_l$$

利用手順

(2) SingleScrewSimulatorVer13.0.0¥RTDcalculator フォルダ内に存在する, MWDcalculator.exe を起動します。

SingleScrewSimulatorVer13.0.0出荷

rVer13.0.0出荷 > MWDcalculator

名前

- bin
- MWDcalculator
- Resources
- RTDcalculator

名前

- MWDcalculator.exe
- MWDcalculator.pdb
- MWDcalculator.vshost.exe
- MWDcalculator.vshost.exe.manifest
- MWDcalculator.xml

MWDcalculator... - ショートカット

デスクトップにショートカットを作成した場合

Molecular Weight Distribution Calculator

Parameter input Mw calculation Mn calculation Molecular Weight Distribution

Initial Weight average Molecular Weight	3.5e+05	kg/mol
Initial Number average Molecular Weight	7.0e+04	kg/mol
Gas constant	8.31446	J/K/mol
Reaction rate constant k0	4.0E+05	1/s
Free energy ΔF	110.0	kJ/mol
λ	2.5	-
Unit molecular weight m	62.6	g/mol
Polymer density	843.0	kg/m3
Weight percentage Wp	0.1	-
Critical molecular weight parameter α	5.0	kg/mol/Pa
Critical molecular weight parameter β	3.5e+05	kg/mol

Molecular breakage model

$$\frac{dM_w}{dt} = -k(M_w - M_{w\infty})$$

Reaction rate

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta F - \lambda \Delta E}{RT}\right)$$

Mechanical energy

$$\Delta E = \frac{m}{\rho w_p} \int_0^t \eta(\tau) \dot{\gamma}(\tau)^2 d\tau$$

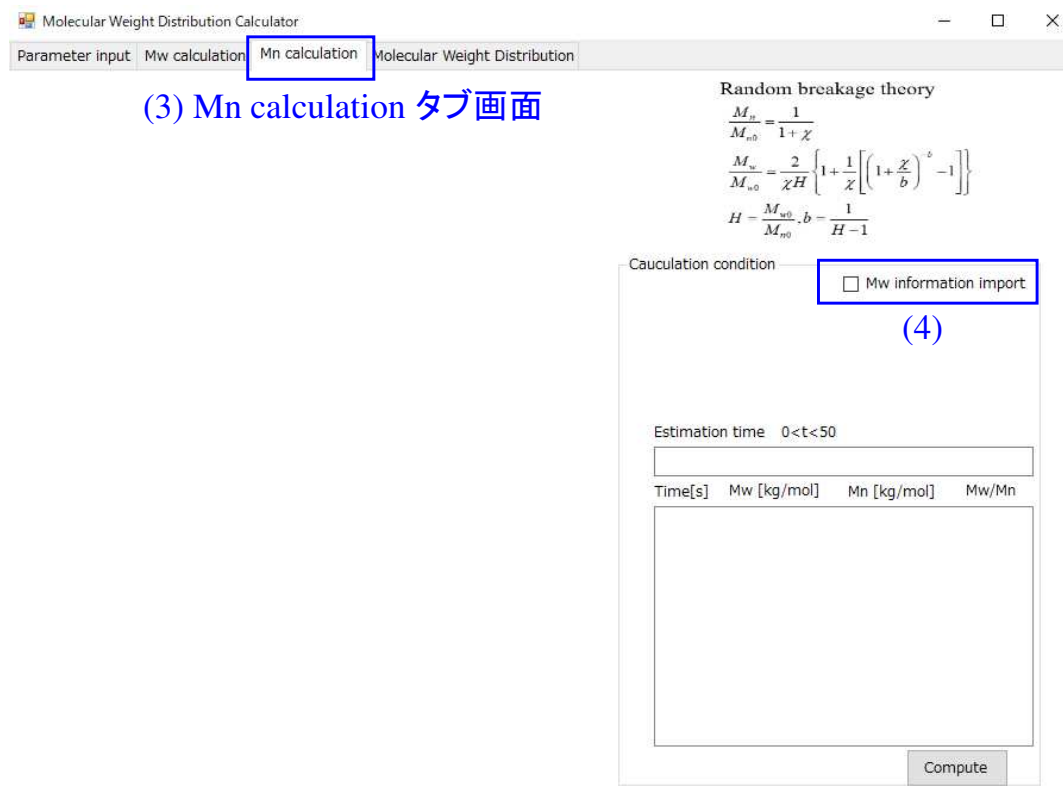
Critical molecular weight

$$M_{w\infty} = -\alpha \eta \dot{\gamma} + \beta$$

MWDcalculator 起動画面
(Molecular Weight Distribution Calculator)

利用手順

- (3) タブメニューバーの、Mn calculation をクリックすると、ランダム分解モデル(p.55)の計算フォームが出現します。



- (4) フォーム右側の、Mw information import ボタンをクリックして、対象の .mwexitinf ファイルを読み込みます。

Mw information import

名前

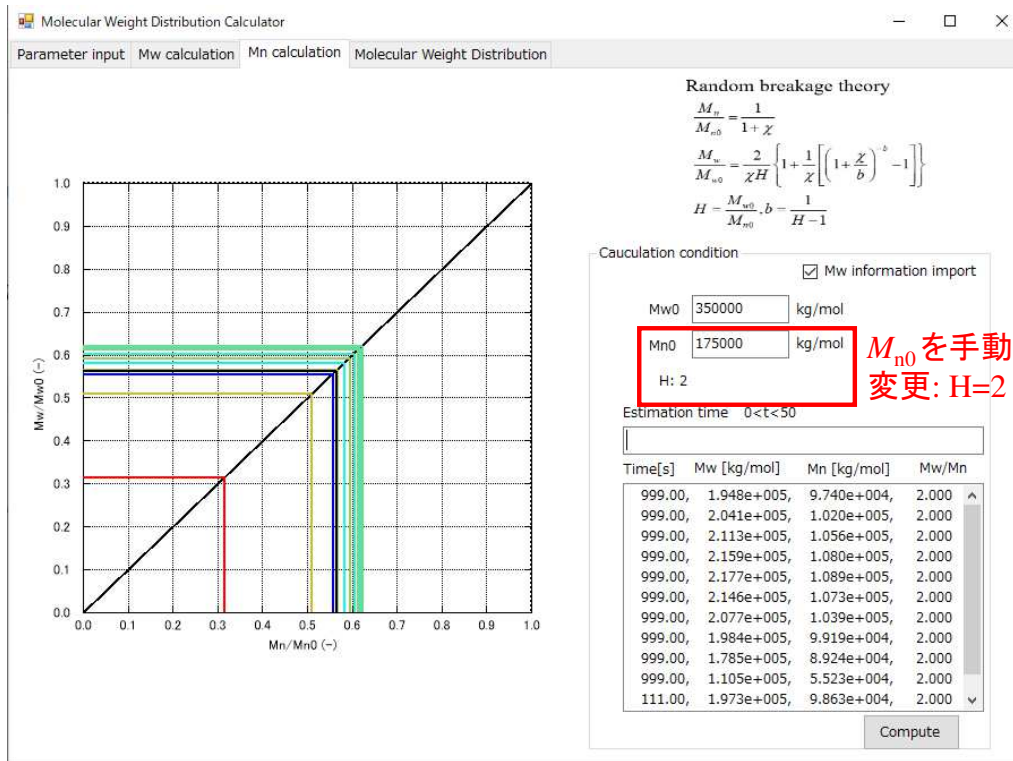
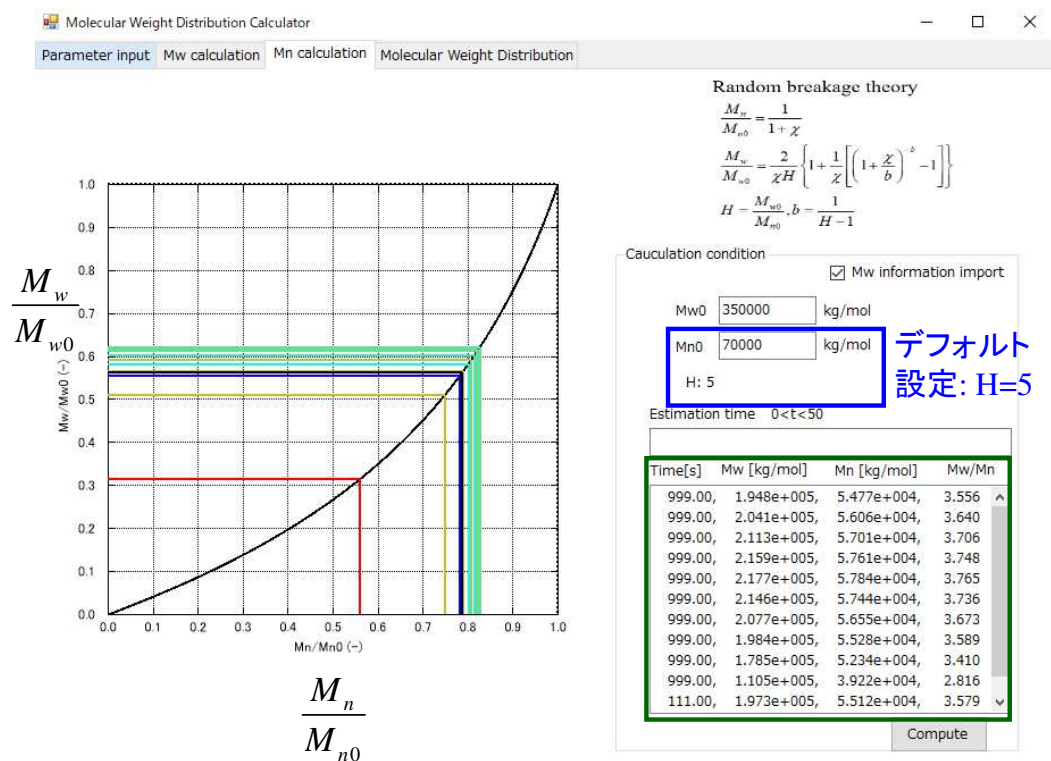
test1b_molcut1000.mwexitinf

test1b_molcut2000.mwexitinf

使用例: (B)vis2000

利用手順

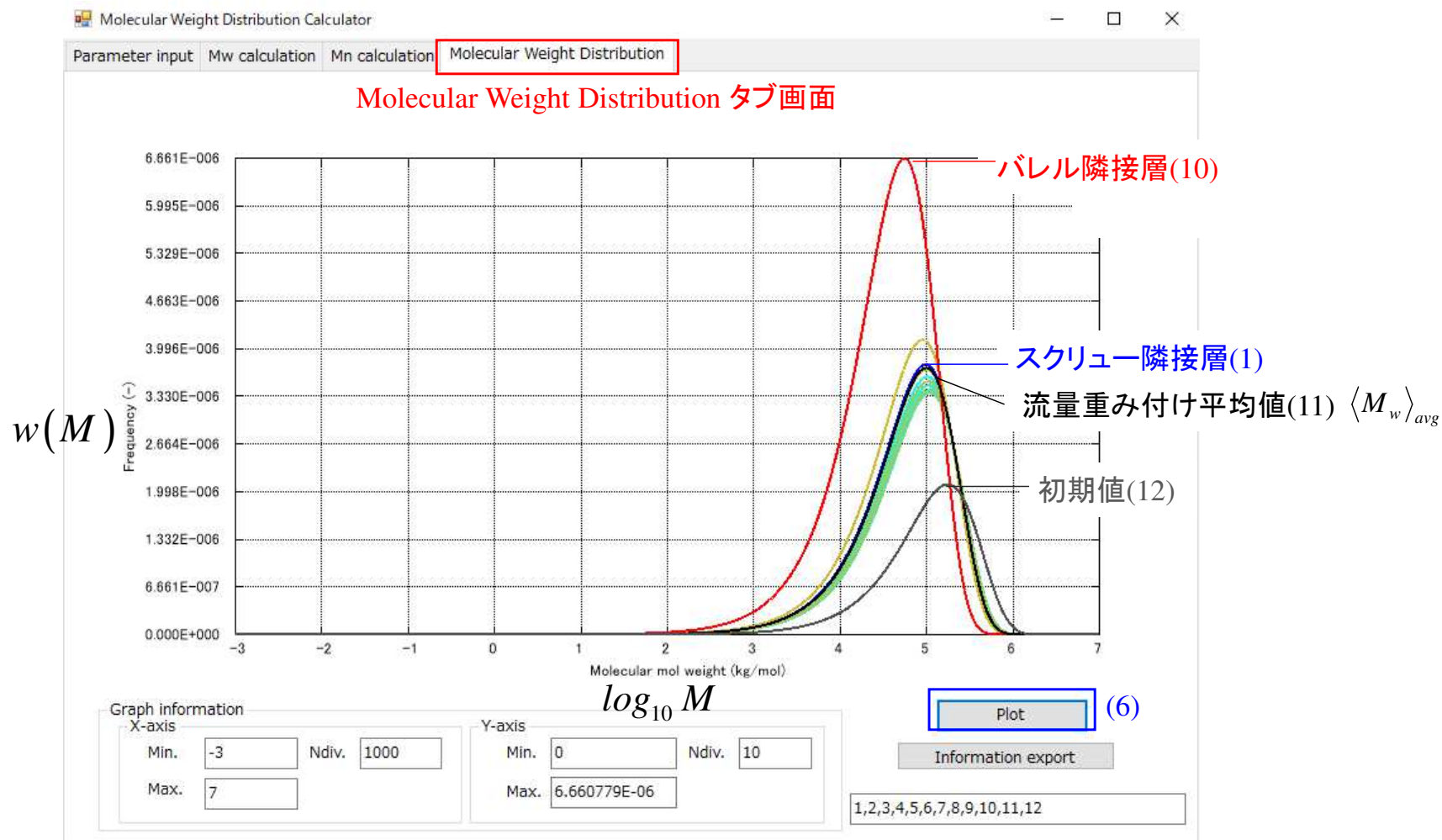
(5) .mwexitinf を読み込むと、中央のグラフには、肉厚層毎の解析結果 $\langle M_w \rangle_l$ と $H (= M_{w0}/M_{n0})$ に基づく M_n の予測曲線がプロットされます。Calculation condition 内の M_{n0} の値を変更すると、自動的に変更が反映されます。



時刻999.00: 各層の M_w 情報 $\langle M_w \rangle_l$
 時刻111.00: $\langle M_w \rangle_l$ の流量重み付け平均値 $\langle M_w \rangle_{avg}$
 時刻0.00 : 初期値

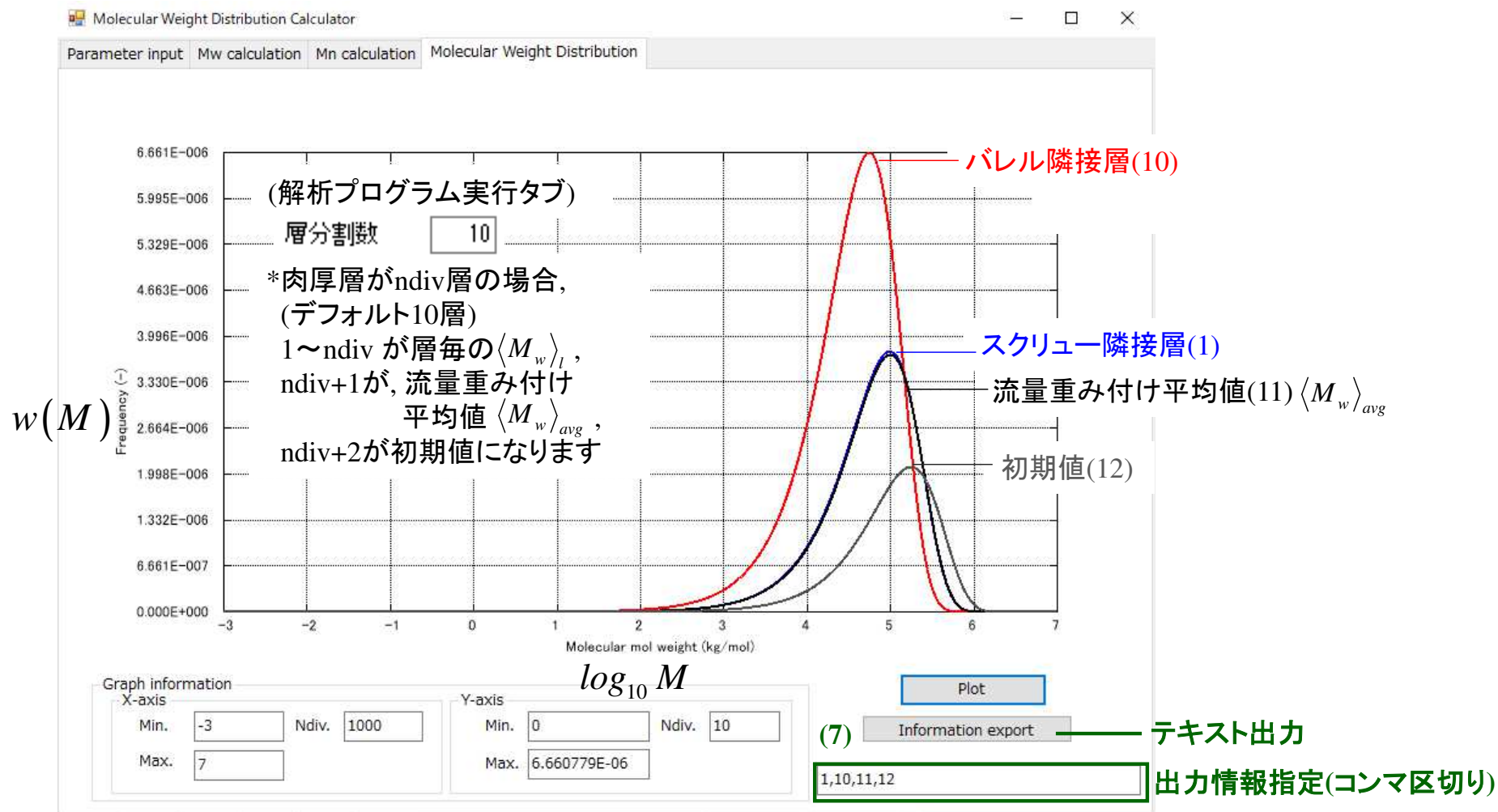
利用手順

- (6) M_n の予測曲線を決定後, “Molecular Weight Distribution” タブをクリックし, Plotボタンをクリックすると, シュルツ-ジム型に基づく分子量分布が作成されます. 分子鎖の切断が進行し, M_w が低下するほど, 最頻値のピークが先鋭化します.



利用手順

- (7) グラフに出力される情報は、フォーム右下の出力情報指定テキストボックスで指定することができます。描画結果は、Information export ボタンを押すことで、任意名のテキストファイルにエクスポート可能です。



(5) 温度解析機能の改良

本機能では、既往の2.5D FEM(有限要素法)温度解析の収束性改善を目的に、エネルギー方程式を3D FVM(有限体積法)で解析する方法を、オプション機能として実装しました。

エネルギー方程式／定常移流拡散方程式

$$\rho C_p \mathbf{u} \nabla T = \kappa \Delta T + \eta \dot{\gamma}^2$$

移流項 拡散項 ソース項

u : 流速ベクトル(3次元)
 ρ : 密度, C_p : 比熱, κ : 熱伝導率
 η : 粘度, $\dot{\gamma}$: ひずみ速度

現行の温度解析(2.5D FEM)

三重対角行列で離散化
移流項をSOR反復計算で処理

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		

少ないメモリ容量で離散化および解析可能だが、収束状況に応じて反復回数を増やす必要がある。

新規の温度解析(3D FVM)

全体マトリクスとして離散化
定常計算(1回)で収束

温度解析方法
<input checked="" type="checkbox"/> 3D FVM (有限体積法)

離散化に要するメモリ容量は大きくなるが、1回で収束解が求まる。

3D FVM (有限体積法) 温度解析の利用手順

解析プログラム実行タブ画面中央のオプションボタンをクリックし、フォーム内の温度解析方法で 3D FVM をチェック状態にします。

解析オプション設定フォーム内

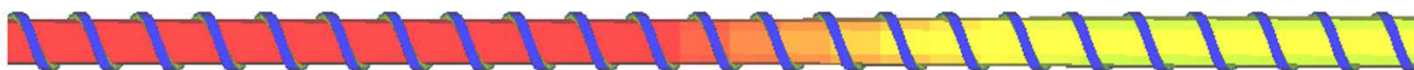
3D FVM の場合、解析プログラム実行タブの温度反復計算回数は使用されません。(ダミーパラメータ)

テスト解析例 (サンプルファイル: ver13test¥test0h300_1h3000_fvm)

Φ38.1, スクリュ長876.3mm (L/D=23).

流量規定 \Rightarrow Flow direction
5.5cm³/s
60rpm

バレル温度 200°C max.



樹脂データ: HDPE_B3.pro (Materialfit DB)

バレル温度境界条件: 熱伝達規定 HTC=3000 W/m²/K

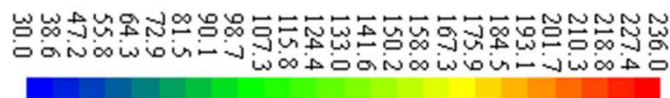
○解析内容: 温度解析方法の比較

(A) 2.5D FEM: SOR 反復計算: 5, 10, 100回

(B) 3D FVM

テスト解析結果／温度分布 [°C]

- 2.5D FEMの収束性



*SOR 5回

⇒ Flow direction

スクリュ出口: 224°C



*SOR 10回

スクリュ出口: 233°C

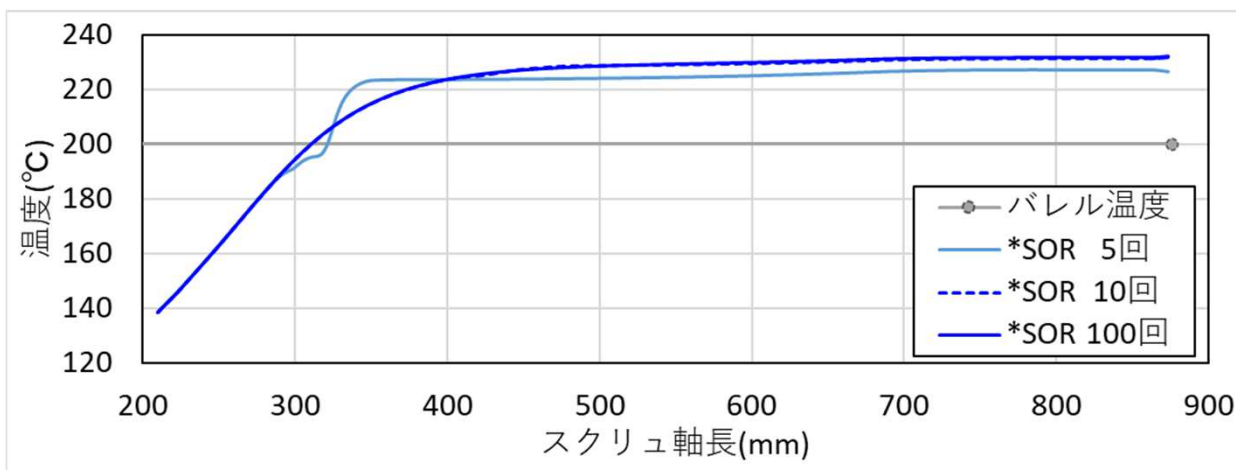


*SOR 100回

スクリュ出口: 234°C



グラフ図: .suminf の軸方向平均温度(ブロック1以降)



- ・現行の2.5D FEM温度解析では、SOR反復計算回数を増加させることで、熱エネルギーのスクリュ下流側への移流が進行します。本結果では、SOR 5回では移流効果が不十分で、上流側で温度が不連続になっていますが、デフォルトの10回では良好な分布が得られました。
- ・さらに回数を増やすと温度分布の変化がほぼなくなり、100回で十分に収束した状態が得られました。最終的に、バレル温度200°Cに対して、スクリュ出口温度は234°Cになる分布を示しました。

テスト解析結果／温度分布 [°C]

3D FVM (定常計算 1回), 計算時間 33sec



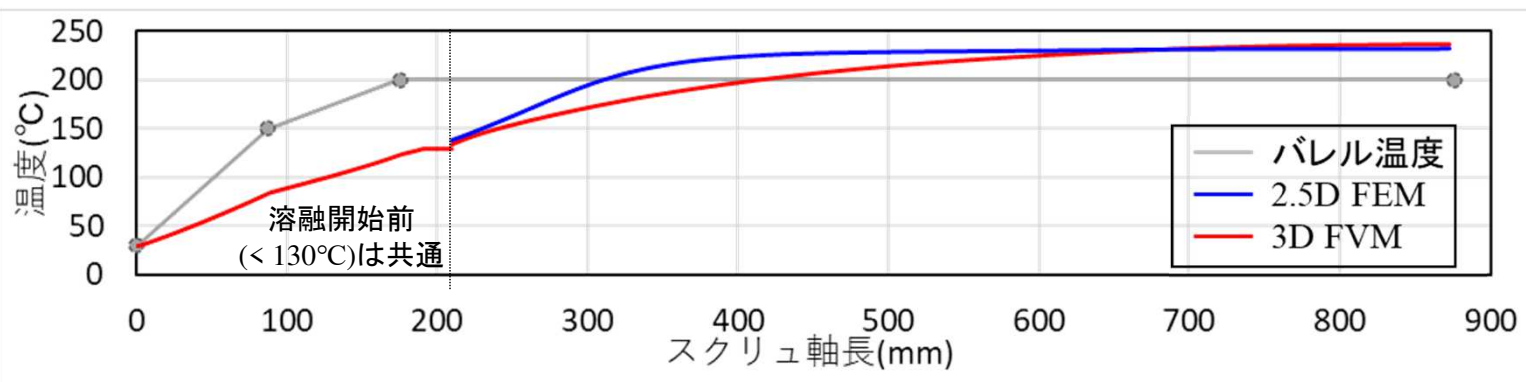
スクリュ出口: 236°C

2.5D FEM (SOR反復計算 100回), 計算時間 31sec



スクリュ出口: 234°C

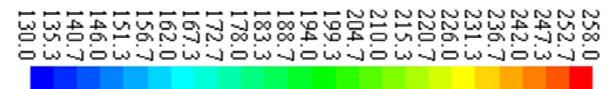
エネルギー方程式のように、移流項を含む方程式の解析精度に優れる有限体積法を採用した、3D FVM の解析結果は、スクリュ上流側では現行 2.5D FEM に比べて低温となり、下流側ではほぼ同等の温度に漸近する傾向を示しました。



本解析結果を参考に、実際の実験結果を考慮して、適切な解析方法を選択されることを推奨致します。

z-r 肉厚方向断面(.crossconts, ブロック1以降)

3D FVM



↑ 移流項の影響強い

2.5D FEM

(6) ユーザプログラム機能の拡張

本機能では、Ver.12.0.0で実装されたユーザプログラム機能(*1)を拡張し、汎用定常移流拡散方程式をユーザ自身で定義して解析することが可能になりました。以降では、本機能の利用方法について説明します。

- Ver.12.0.0 : 汎用定常移流方程式の解析機能。

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

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(肉厚平均)
 ∇ : ナブラ演算子

- Ver.13.0.0 : 汎用定常移流拡散方程式の解析機能。

$$(A_{i,iv} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + C_{i,iv} \Delta) f_{i,iv} = B_{i,iv}$$

$A_{i,iv}, B_{i,iv}, C_{i,iv}$: ユーザ定義任意関数 ($i=1 \sim n, iv=1 \sim ndiv$)
 $f_{i,iv}$: ユーザ定義未知関数 ($i=1 \sim n, iv=1 \sim ndiv$)
 $ndiv$: 肉厚層数
 \mathbf{u}_{iv} : 肉厚層毎の流速ベクトル ($iv=1 \sim ndiv$)
 Δ : ラプラス演算子

(*1) 方程式の定義に必要なプログラムを部分公開し、ユーザ自身がプログラムを編集しコンパイルすることで、ユーザ自身が定義した方程式を解析することができる機能。

○公開されるユーザ定義ルーチン(プログラム)

ユーザ定義ルーチン名	機能
1) initialsetforchem	初期設定および解析条件の設定
2) viscal	粘度計算
3) tempcal	温度計算(2.5 FEM)
4) chemfscal	化学反応式の設定
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

- ユーザ定義ルーチンの構成はVer.12.0.0と同じですが、初期設定を行なう
1) initialsetforchem 内で、解析する方程式を選択します。
- 具体的には、方程式を識別する定数 “ichem3d” に 0 を設定した場合には、従来通りに、
移流方程式の計算ルーチン(chemical)が実行されますが、“ichem3d” に 1 を設定した場合には、
新規実装された移流拡散方程式の計算ルーチン(chemical3d)が実行されます。

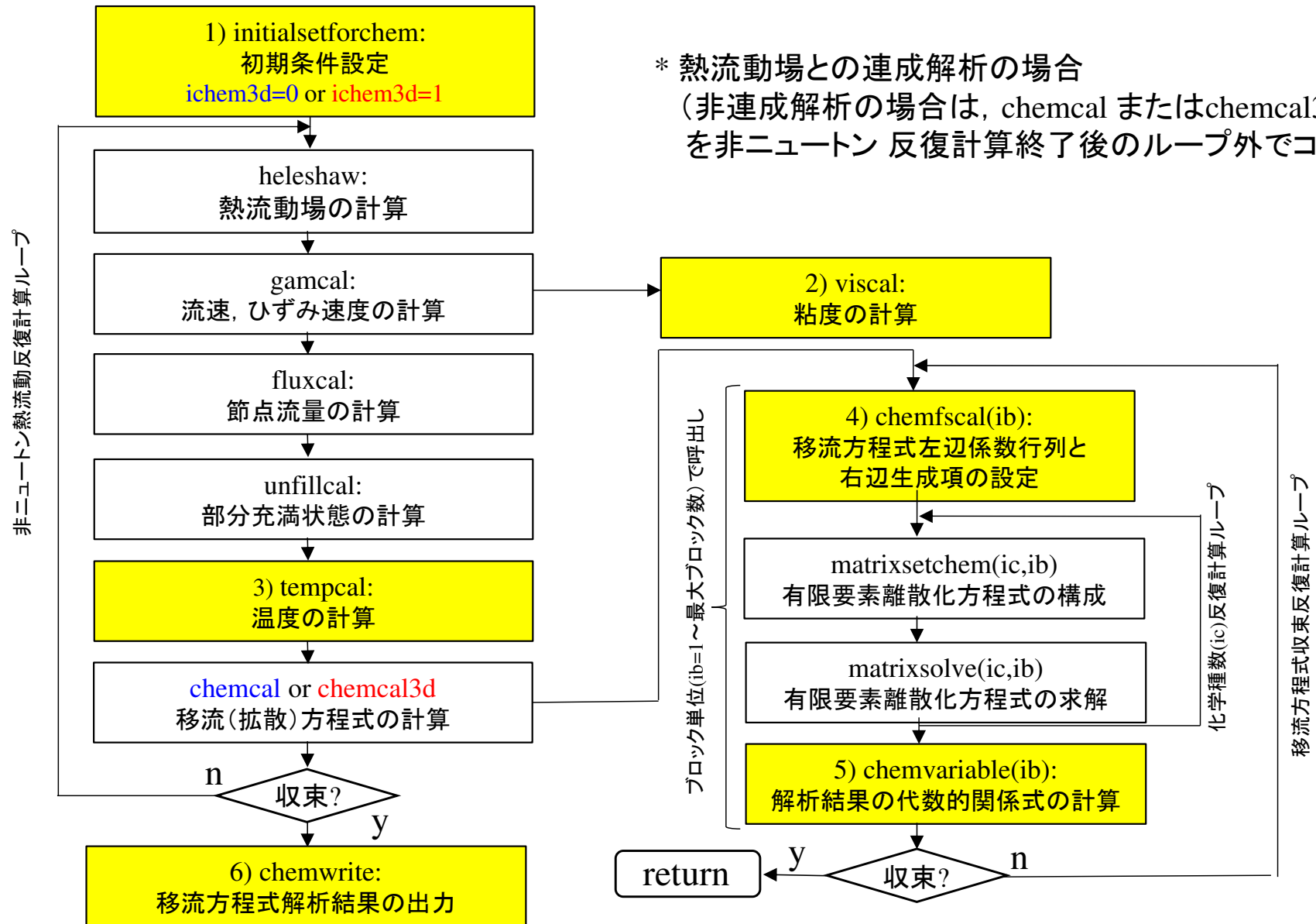
1) initialsetforchem:
ichem3d=0
...

移流方程式の解析実行 (chemical)

1) initialsetforchem:
ichem3d=1
...

移流拡散方程式の解析実行 (chemical3d)

○コーリングシーケンス

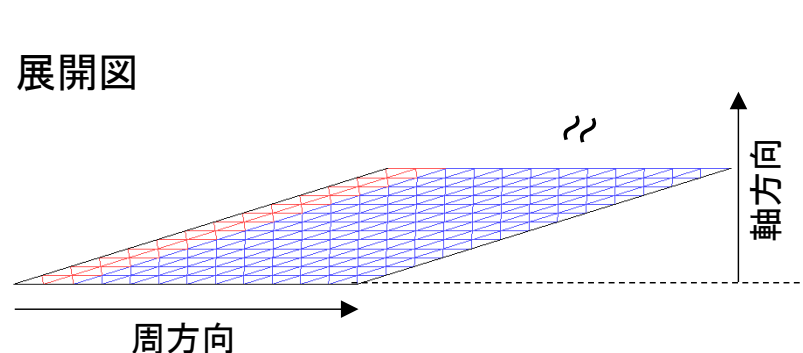


* 熱流動場との連成解析の場合
 (非連成解析の場合は, chemical または chemical3d
 を非ニュートン 反復計算終了後のループ外でコール)

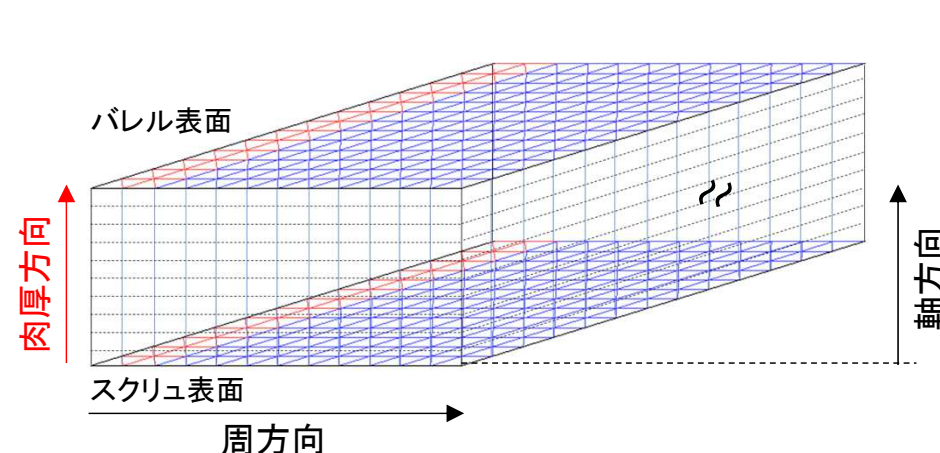
○公開情報／マトリクス(要素)構成

- 旧Ver.12.0.0では、単軸スクリュの周方向および軸方向のマトリクス構成に関する変数情報が公開されましたが(肉厚方向の物理量は非公開ルーチンで計算)、本Ver.13.0.0では、肉厚方向の変数情報も公開されます。これにより、肉厚方向への拡散項を、ユーザールーチン内で定義し、肉厚方向を含めた3次元マトリクスを解析することが可能になりました。

Ver.12.0.0 : 移流方程式の公開情報



Ver.13.0.0 : 移流拡散方程式の公開情報



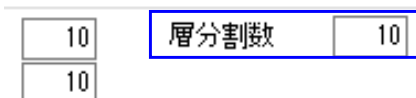
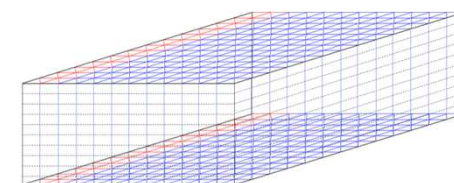
* 周方向と軸方向の構成は従来と同じです。

詳細は、SingleScrewSimulatorVer12.0.0(2022)カスタマイズ環境設定方法出荷.pptx を参照ください。

* 以降では、Ver.12.0.0で移流拡散方程式の定義に必要な新規公開の変数情報を中心に記載します。

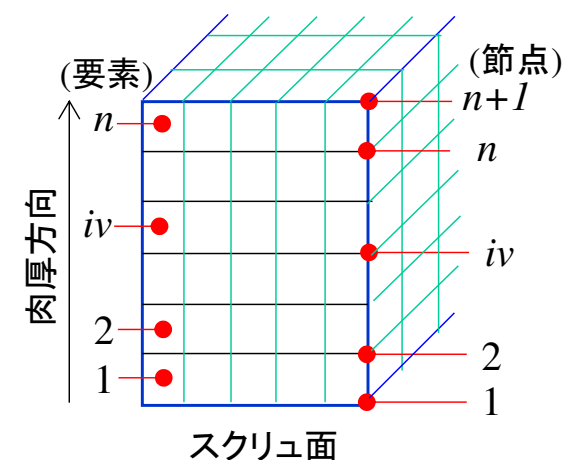
○公開情報／ユーザ定義変数

変数名	内容
ichem3d	1) ichem3d=0 の場合は chemical (Ver.12.0.0の移流方程式), 2) ichem3d=1 の場合は chemical3d (Ver.13.0.0の移流拡散方程式) が実行される.
ndiv	肉厚方向の要素分割数 (デフォルトはndiv=10). このときの肉厚方向の節点分割数はndiv+1になる.
chemcnumber	解析対象とする移流方程式の本数(化学種数) 1) ichem3d=0 の場合は, chemcnumber の数だけ 初期値および境界条件を設定する. 2) ichem3d=1 の場合は, chemcnumber × (ndiv+1) の数だけ 初期値および境界条件を設定する.
chemvnumber	解析で考慮する配列変数の数. ichem3d=1の場合は, chemical3d で 解析された, 肉厚要素毎の物理量の平均値算出などに使用する.
commonvnumber	ルーチン間で共用するスカラー変数の数.
chemcname(i)	方程式で解析した物理量(化学種)の名称 (i=1~chemcnumber), 解析結果の項目名に利用される. ichem3d=1の場合は, i=1~chemcnumber × (ndiv+1) の数 だけ定義すると, 肉厚層毎の物理量を表示できる.
chemvname(i)	配列変数の名称 (i=1~chemvnumber). 解析結果の項目名に利用される.
chemnamecross(i)	方程式で解析した物理量(化学種)の名称 (i=1~chemcnumber), ichem3d=1の断面スライスコンター図の項目名に利用される.



解析プログラム実行タブ

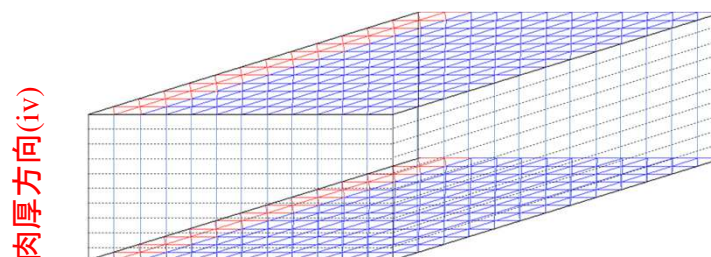
肉厚方向 ndiv(要素), ndiv+1(節点)



○公開情報／ユーザ定義変数, iche3d=1 (3次元マトリクス) の場合

変数名	内容
ndivl(ib)	周方向要素分割数
ndivzs(ib)	軸方向要素分割数
nelem(ib)	周方向×軸方向の全要素数. 3次元マトリクスの全要素数は, nelem(ib) × ndiv となる
nnode(ib)	周方向×軸方向の全節点数. 3次元マトリクスの全要素数は, nnode(ib) × (ndiv+1) となる
chemc3d(ic, ie, iv, ib)	方程式で解析した物理量(化学種)の要素解析値/ 未知関数 $f_{ic,iv}$ に相当する. (ic=1~chemcnumber, ie=1~nelem(ib), iv=1~ndiv)
chemcn3d(ic, in, iv, ib)	方程式で解析した物理量(化学種)の節点解析値 (ic=1~chemcnumber, in=1~nnode(ib), iv=1~ndiv+1)
chempar(i, ie, ib)	解析で考慮する(化学種依存の)要素変数(i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(ib))
chemparn(i, in, ib)	解析で考慮する(化学種依存の)節点変数(i=1~chemvnumber, in=1~nnode(ib))
commonvpar(i)	ルーチン間で共用するスカラー変数(i=1~commonvnumber)

ib: ブロック数 (1~iblock)



○公開情報／ユーザ定義変数, iche3d=1 (3次元マトリクス) の場合

解析対象とする移流拡散方程式:

$$\left(A_{ic,iv} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + C_{ic,iv} \Delta \right) f_{ic,iv} = B_{ic,iv}$$



対応するユーザ定義関数の変数:

$$\left(chemf3d(ic, ie, iv, ib) + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + chemd3d(ic, ie, iv, ib) \Delta \right) f_{ic,iv} = chems3d(ic, ie, iv, ib)$$

\downarrow
 $chemc3d(ic, ie, iv, ib)$

$A_{ic,iv}, B_{ic,iv}, C_{ic,iv}$: ユーザ定義任意関数($ic=1\sim n, iv=1\sim ndiv$)
 $f_{ic,iv}$: ユーザ定義未知関数($ic=1\sim n, iv=1\sim ndiv$)
 n : ユーザ定義方程式数
 $ndiv$: 肉厚層数
 \mathbf{u}_{iv} : 肉厚層毎の流速ベクトル($iv=1\sim ndiv$)
 ∇ : ナブラ演算子
 Δ : ラプラス演算子

変数名	内容
chemf3d(ic, ie, iv, ib)	関数形 A の定数値を設定する。 (ic=1~chemcnumber, ie=1~nelem(1), iv=1~ndiv, ib=1~iblock)
chems3d(ic, ie, iv, ib)	関数形 B (ソース項) の定数値を設定する。 (ic=1~chemcnumber, ie=1~nelem(1), iv=1~ndiv, ib=1~iblock)
chemd3d(ic, ie, iv, ib)	関数形 C (拡散項) の定数値を設定する。 (ic=1~chemcnumber, ie=1~nelem(1), iv=1~ndiv, ib=1~iblock)

利用手順/Ver13.0.0

- (1) SSSを使用されるPCに、変更したユーザプログラムをコンパイルするための開発環境をインストールします。⇒ 設定方法は、SingleScrewSimulatorVer12.0.0(2022) カスタマイズ環境設定方法.pptx を参照ください。①Intel Fortran が推奨環境です。
- (2) SSSフォルダ内のSystemver.13.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSolverver1300oneAPI_user内に存在するソースコードを用途向きに書き直します。
(任意のエディタを使用)
- (3) ソースコードを編集後、コマンドプロンプト上で nmake と入力してキーボードのEnterキーを押すと、makefile を利用したコンパイルが実行されます。

```
Intel(r) oneAPI Tools
C:\SSS¥SingleScrewSimulatorVer13.0.0出荷¥bin¥x86¥Systemver.13.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSol\verver1300oneAPI_user>
C:\SSS¥SingleScrewSimulatorVer13.0.0出荷¥bin¥x86¥Systemver.13.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSol\verver1300oneAPI_user>
C:\SSS¥SingleScrewSimulatorVer13.0.0出荷¥bin¥x86¥Systemver.13.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSol\verver1300oneAPI_user>
C:\SSS¥SingleScrewSimulatorVer13.0.0出荷¥bin¥x86¥Systemver.13.0.0_IFORT¥SingleScrewSimulatorSol\verver1300oneAPI_user>nmake

Microsoft(R) Program Maintenance Utility Version 14.16.27039.0
Copyright (C) Microsoft Corporation. All rights reserved.

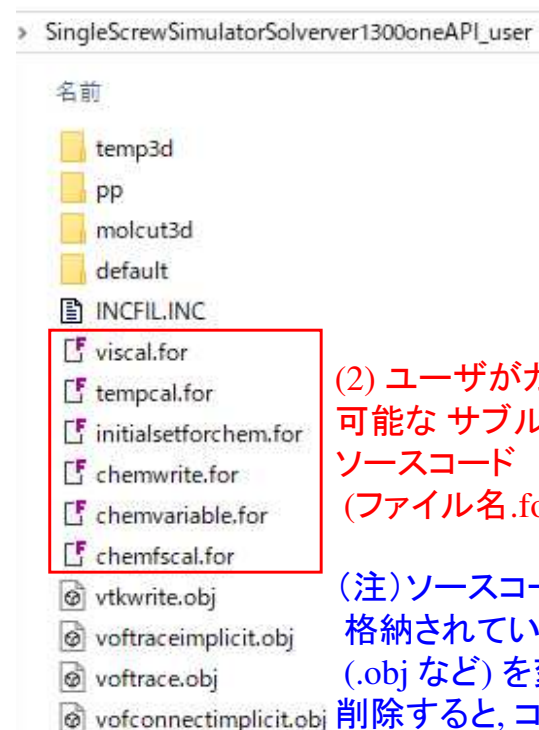
    ifort -O3 -C /check:uninit /I:INCFIL.INC /c chemfscal.for
Intel(R) Fortran Intel(R) 64 Compiler Classic for applications running on Intel(R) 64, Version 2021.6.0 Build 20220226_000000
Copyright (C) 1985-2022 Intel Corporation. All rights reserved.

    ifort -O3 -C /check:uninit /I:INCFIL.INC *.obj -o ./SingleScrewSimulator.exe
Intel(R) Fortran Intel(R) 64 Compiler Classic for applications running on Intel(R) 64, Version 2021.6.0 Build 20220226_000000
Copyright (C) 1985-2022 Intel Corporation. All rights reserved.

Microsoft (R) Incremental Linker Version 14.16.27039.0
Copyright (C) Microsoft Corporation. All rights reserved.

-out:.\¥SingleScrewSimulator.exe
```

(3) nmakeを入力



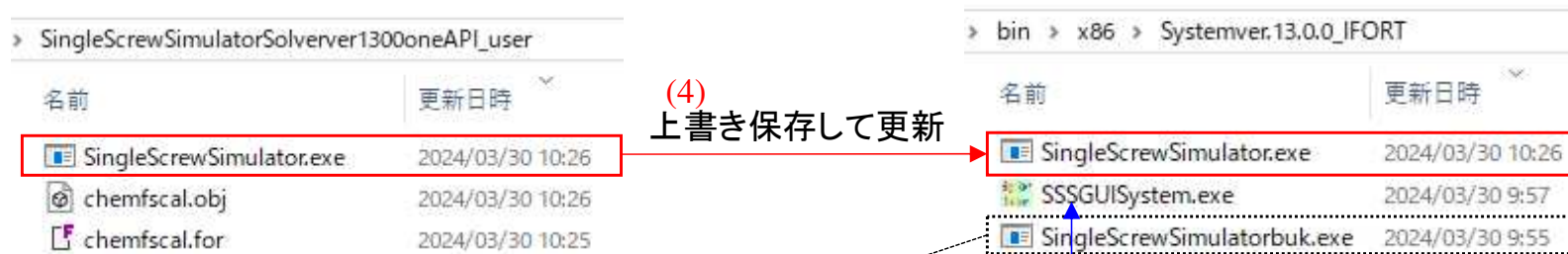
(2) ユーザがカスタマイズ可能な サブルーチンのソースコード (ファイル名.for)

(注)ソースコード以外に格納されているファイル(.obj など)を変更したり削除すると、コンパイルができなくなりますので注意して使用ください。

コンパイルに成功すると、フォルダ内に実行プログラムSingleScrewSimulator.exeが作成される。

利用手順/Ver13.0.0

- (4) ¥SingleScrewSimulatorver1300oneAPI_user フォルダ内の SingleScrewSimulator.exe の更新日時がコンパイルした日時に変更されていることを確認後, Systemver.13.0.0_IFORTフォルダ内に存在する SingleScrewSimulator.exe を上書き保存(コピー)して更新します.

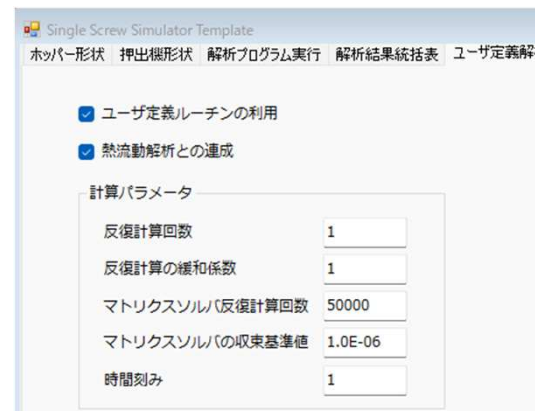


(参考) 更新前のSingleScrewSimulator.exeを別名でコピーしておくと, 更新前の実行プログラムを残しておくことができます.

- (5) SSS(GUI)から解析実行すると, Systemver.13.0.0_IFORT内の SingleScrewSimulator.exe が実行されます.

- (5) SSSのGUIを起動し, ユーザ定義関数タブ画面にて, “ユーザ定義ルーチンの利用”をチェック状態にすると, 解析実行時に, p.68のコーリングシーケンスに沿って, 定義したユーザプログラムが実施されます.

ユーザプログラムの変更をせずにデフォルトの状態では, “ユーザ定義ルーチンの利用”を利用した場合には, p.49 の, (4)高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能が実施されます.



サンプルプログラムの内容説明

Systemver.13.0.0 ¥ SingleScrewSimulator1300oneAPI_user フォルダ内のサンプルフォルダの構成を下図に示します。

SingleScrewSimulatorSolverver1300

名前

default ————— 初期出荷状態

molcut3d ————— 分子鎖切断モデル解析: (4)高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能 (p.45-) において、設定パラメータの変更や粘度モデル変更に利用可能です。

pp ————— PPの分解反応解析(ver12.0.0と同内容)

temp3d ————— 従来通りの運用で利用可能

3D FVM 温度解析: (5)温度解析の改良機能/3D FVM (有限体積法) 温度解析において、エネルギー方程式の変更や拡張に利用可能です。

本項では、Ver13.0.0で新規実装された、汎用定常移流拡散方程式(chemcal3d) の利用方法について、以下2つのサンプルプログラムを通じて説明します。

【サンプルプログラム1】 3D FVM 温度解析 : 定常移流拡散方程式(エネルギー方程式)
(temp3d) pp.76-80

【サンプルプログラム2】 分子鎖切断モデル解析: 定常移流方程式(滞留時間, せん断エネルギー履歴, 分子量の計算)
(molecularcut3d) pp81-87

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析



initialsetforchem.for の内容1

```
subroutine initialsetforchem
  use flow
  use chemic
  use elem
  use nodeinf
  use cord
  use tadomor
  include 'incfil.inc'
cccccccccccccccccc
  character(2) num
cccccccccccccccccc
c+++++
c+ User define variable number
c+++++
c
c   Number of chemical species
c
corg   chemnumber=1
      chemnumber=1 方程式数: 1(エネルギー方程式)
c
c   Number of chemical variable
c
c      chemvnumber=1 変数: 1(層毎の温度の平均値出力)
c
c   Number of common variable
c
corg   commonvnumber=2
      commonvnumber=0
c
cccc New user program_Version.13.0.0
      ichem3d=1
cccc Old user program_Version.12.0.0/
cver12 ichem3d=0
cccc
```

移流拡散方程式
を利用する場合

```
if(chemcnumber.gt.0) then
if(ichem3d.eq.0) then
  allocate(chemc(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(chemco(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(chemcn(chemcnumber,nodem,0:iblock))
  allocate(chemf(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(chems(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(tschemc(0:1,chemcnumber,maxnode))
  allocate(chemcname(chemcnumber))
elseif(ichem3d.eq.1) then
  allocate(chemc3d(chemcnumber,nelemm,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemco3d(chemcnumber,nelemm,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemcn3d(chemcnumber,nodem,ndiv+1,0:iblock))
  allocate(chemf3d(chemcnumber,nelemm,ndiv,0:iblock))
  allocate(chems3d(chemcnumber,nelemm,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemd3d(chemcnumber,nelemm,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemcname(chemcnumber*ndiv+1))
  allocate(chemcnamecross(chemcnumber))
  allocate(chemcross(chemcnumber,ndiv+1,nelemm,0:iblock))
  allocate(ibbc(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(isbc(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(vbdir(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(vsdir(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(vbneu(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
  allocate(vsneu(chemcnumber,nelemm,0:iblock))
```

配列の3列目に、
肉厚層ndiv分
の配列を確保
する。
(節点情報の
場合はndiv+1)

バレル側境界条件の種類
スクリュ側境界条件の種類
バレル側のディリクレ条件
スクリュ側のディリクレ条件
バレル側のノイマン条件
スクリュ側のノイマン条件
を設定する配列

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析



initialsetforchem.for の内容2

```

c+++++
c User define initial/boundary condition
c+++++
corg chemname(1)='test sample 1'
c
do i=1,chemnumber*(ndiv+1)
write(num,(i2)) i
chemname(i)='Layer-'//num//' Temperature 3D'
end do
c
chemvname(1)='Average Temperature 3D'
chemnamecross(1)='Temperature 3D'
c
cccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c
c if(ib.eq.1) then
tinit=0.0
if(ibsta.eq.0) then
tinit=temp(1,1)
else
tinit=tempinlet
end if
write(*,*) tinit,ibsta,temp(1,ib)
pause
do ib=1,iblock
do iv=1,ndiv
do ie=1,nelem(ib)
do i=1,chemnumber
chemc3d(i,ie,iv,ib)=tinit
end do
end do
end do
do iv=1,ndiv
do in=1,nnode(ib)
do i=1,chemnumber
chemcn3d(i,in,iv,ib)=tinit
end do
end do
end do

```

コンター図に表示される
層毎の解析結果の項目名

コンター図の温度平均値の項目名
スライスコンター図の
温度平均値の項目名

解析結果が格納される配列への
初期値設定
tempinlet は、解析条件で設定した
流入口温度を意味します。

流入口温度 °C

境界条件の設定

スクリュ 温 度条件	バレル 温 度条件
Hfix	Tfix

```

cccccc スクリュ表面の境界条件
do ie=1,nelem(ib)
do i=1,chemnumber
isbc(i,ie,ib)=iebound(1,ie,ib) ①
vsdir(i,ie,ib)=tbound(1,ie,ib) ②
vsneu(i,ie,ib)=href(1,ie,ib)/(rhoa*cpa) ③
end do
end do
c
cccccc バレル表面の境界条件
do ie=1,nelem(ib)
do i=1,chemnumber
ibbc(i,ie,ib)=iebound(2,ie,ib) ④
vbdir(i,ie,ib)=tbound(2,ie,ib) ⑤
vbneu(i,ie,ib)=href(2,ie,ib)/(rhoa*cpa) ⑥
end do
end do

```

- ①: スクリュ表面の境界条件の種類
iebound(1,ie,ib)には、温度規定(Tfix)の場合1,
熱伝達規定(Hfix)の場合0が設定されている
- ②: スクリュ表面の設定温度値
- ③: スクリュ表面の設定熱伝達係数
÷ (溶融密度 × 溶融比熱) の値
- ④: バレル表面の境界条件の種類
iebound(2,ie,ib)には、温度規定(Tfix)の場合1,
熱伝達規定(Hfix)の場合0が設定されている
- ⑤: バレル表面の設定温度値
- ⑥: バレル表面の設定熱伝達係数
÷ (溶融密度 × 溶融比熱) の値

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析



chemfscal.for の内容

```

c+++++
c+  User define left hand side coefficient & right hand source
c+++++
cccc 熱物性/定数 rheoin
ct    write(*,*) rhoa,cpa,rama
ct    rhoa: 溶融体密度
ct    cpa: 溶融体比熱
ct    rama: 溶融体熱伝導率
c
c    do ie=1,nelem(ib)
c
c    dh=height(ie,ib)/ndiv
c    se=vol(ie,ib)/height(ie,ib)
c    djc=powerratio*1.0e-06
c
c    do i=1,chemcnumber
c    do iv=1,ndiv
c    chemf3d(i,ie,iv,ib)=0.0
c    chemd3d(i,ie,iv,ib)=-rama/(rhoa*cpa)
c
c    gammv=0.5*(gam(iv,ie,ib)+gam(iv+1,ie,ib))
c    if(gammv.gt.cutoffshear) gammv=cutoffshear
c    visv=0.5*(vish(iv,ie,ib)+vish(iv+1,ie,ib))
c
c    chems3d(i,ie,iv,ib)=djc*gammv*gammv*visv/(rhoa*cpa)
c    end do
c    end do          *djcは粘性発熱係数(解析オプション)
c
c    1:粘性発熱100%考慮、0:無視
c    粘性発熱係数      1
c
c    end do
c+++++
return
stop
end
    
```

解析対象とする移流拡散方程式:

$$(\boxed{A_{iv}} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + \boxed{C_{iv}} \Delta) f_{iv} = \boxed{B_{iv}}$$

$$\left(\mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla - \frac{\kappa}{\rho C_p} \Delta \right) T_{iv} = \frac{\eta_{iv} \dot{\gamma}_{iv}^2}{\rho C_p}$$

↑

$$\rho C_p \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla T_{iv} = \kappa \Delta T_{iv} + \eta_{iv} \dot{\gamma}_{iv}^2$$

肉厚 iv 層目のエネルギー方程式

* \mathbf{u}_{iv} には, p.12-13で示した, 断面内循環流れを考慮した層毎の流速ベクトルが自動設定されます.

$chemc3d(ic,ie,iv,ib)$

$$(\boxed{chemf3d(ic,ie,iv,ib)} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + \boxed{chemd3d(ic,ie,iv,ib)} \Delta) f_{ic,iv} = \boxed{chems3d(ic,ie,iv,ib)}$$

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析



chemvariable.for の内容

```
do ic=1,chemvnumber
do ie=1,nelem(ib)
chempar(ic,ie,ib)=0.0
do iv=1,ndiv
chempar(ic,ie,ib)=chempar(ic,ie,ib)
& +chemc3d(ic,ie,iv,ib)
end do
chempar(ic,ie,ib)=chempar(ic,ie,ib)/ndiv
end do
end do
```

層毎の温度解析結果 chemc3d(ic,ie,iv,ib)
の平均値を, chempar(ic,ie,ib)に代入

tempcal.for: デフォルトから変更なし

viscal.for: デフォルトから変更なし

chemwrite.for の内容

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
open(111,File='CHEMPAR',access='sequential',status='unknown',
& recl=220)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

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

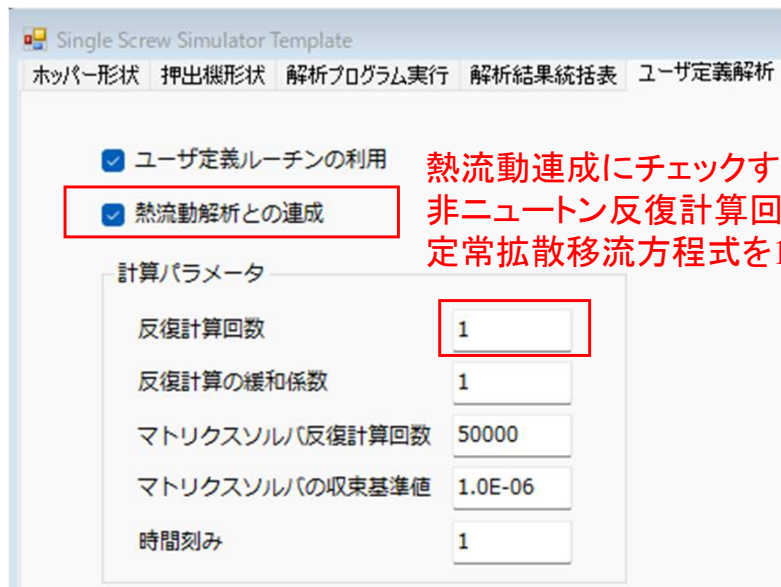
do ic=1,chemvnumber
chemparameter(ic,ib)=0.0
end do
do ic=1,chemvnumber
countn=0.0
do in=ntops,ntope
countn=countn+1.0
chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)+chemparn(ic,in,ib)
end do
chemparameter(ic,ib)=chemparameter(ic,ib)/countn
end do
write(111,*) znode(ntops,ib)*10.0,' ',chemparameter(1,ib)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

テキストファイル 'CHEMPAR'に、
スクリュ軸方向の平均温度を
出力させるための記述。
詳細は、ver.12.0.0改良成果資料の
p.48-, PP分解反応のchemwrite.for
の項目を参照ください。

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析

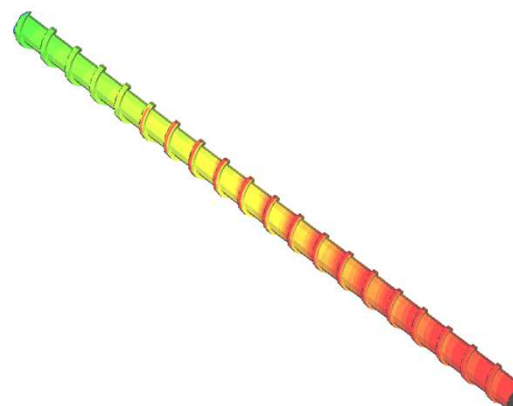
temp3d

○User define modelタブの設定例



熱流動連成にチェックする。
非ニュートン反復計算回数毎に、
定常拡散移流方程式を1回解析する。

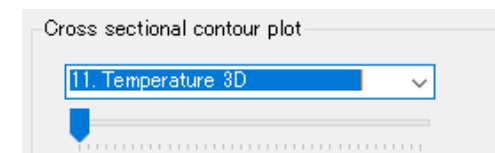
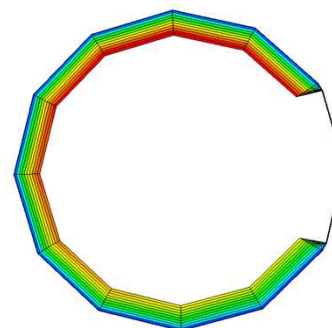
○コンター図の出力例(.scrrst)



```
15:Layer- 1 Temperature 3D
16:Layer- 2 Temperature 3D
17:Layer- 3 Temperature 3D
18:Layer- 4 Temperature 3D
19:Layer- 5 Temperature 3D
20:Layer- 6 Temperature 3D
21:Layer- 7 Temperature 3D
22:Layer- 8 Temperature 3D
23:Layer- 9 Temperature 3D
24:Layer-10 Temperature 3D
25:Layer-11 Temperature 3D
26:Average Temperature 3D
```

15-25(ndiv+1): 層毎の温度
26: 平均温度

○スライスコンター図の出力例(.crossconts)



(6) ユーザプログラム機能の拡張

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析



initialsetforchem.for の内容1

```
c+++++
c+   User define variable number
c+++++
c
cccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccc Program for molecular cut
      imolcut=1
cccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c   Number of chemical species
c
c   chemnumber=2 方程式数: 2 (滞留時間計算, および
                  せん断エネルギー履歴計算)
c
c   Number of chemical variable
c
c   chemvnumber=ndiv+2 変数: 1~ndiv+1: 層毎の分子量
                       ndiv+2: 層流量重み付け
                       平均分子量
c
c   Number of common variable
c
c   commonvnumber=9 設定パラメータ用の変数: 9
c
cccc New_user_program_Version.13.0.0
      ichem3d=1
cccc Old_user_program_Version.12.0.0/
cver12 ichem3d=0
cccc
```

*今回の方程式には移流項は含まれませんが、肉厚層毎の物理量を算出するため、`ichem3d=1` を利用しました。

```
if(chemnumber.gt.0) then
if(ichem3d.eq.0) then
  allocate(chemc(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(chemco(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(chemcn(chemnumber,nnodem,0:iblock))
  allocate(chemf(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(chems(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(tschemc(0:1,chemnumber,maxnode))
  allocate(chemname(chemnumber))
elseif(ichem3d.eq.1) then
  allocate(chemc3d(chemnumber,nelem,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemco3d(chemnumber,nelem,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemcn3d(chemnumber,nnodem,ndiv+1,0:iblock))
  allocate(chemf3d(chemnumber,nelem,ndiv,0:iblock))
  allocate(chems3d(chemnumber,nelem,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemd3d(chemnumber,nelem,ndiv,0:iblock))
  allocate(chemname(chemnumber*ndiv+1))
  allocate(chemnamecross(chemnumber))
  allocate(chemcross(chemnumber,ndiv+1,nelem,0:iblock))
  allocate(ibbc(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(isbc(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(vbdir(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(vmdir(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(vbneu(chemnumber,nelem,0:iblock))
  allocate(vsneu(chemnumber,nelem,0:iblock))
```

配列の3列目に、肉厚層ndiv分の配列を確保する。
(節点情報の場合はndiv+1)

バレル側境界条件の種類
スクリュ側境界条件の種類
バレル側のディリクレ条件
スクリュ側のディリクレ条件
バレル側のノイマン条件
スクリュ側のノイマン条件
を設定する配列

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析



initialsetforchem.for の内容2

モデルパラメータ用の設定値

```
c
c   Definition of common number variable
c
c Mw0
c   commonvpar(1)=3.5e+05
c dk0
c   commonvpar(2)=4.0e+05
c ramd
c   commonvpar(3)=0.5
c df
c   commonvpar(4)=110.0e+03
c dm
c   commonvpar(5)=62.6e-03
c rho
c   commonvpar(6)=848.0
c wp
c   commonvpar(7)=0.1
c calpha
c   commonvpar(8)=2.4
c cbeta
c   commonvpar(9)=3.5e+05
c
```

* デフォルト値を変更して解析する場合、
本項目の数値を変更します。

(4)高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能
(p.45-) の方程式(1)-(4)式に使用されるパラメータに対応

パラメータ設定のデフォルト値 (p.49)

M_{w0} : M_w の初期値 3.5×10^5 [kg/mol]

k_0 : 4.0×10^5 [1/s]

ΔF : 110.0 [kJ/mol]

λ : 0.5 [-]

m : 62.6 [g/mol]

ρ : 848[g/cm³]

w_p : 0.1 [-]

α : 2.4 [kg/mol/Pa]

β : 3.5×10^5 [kg/mol]

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molcut3d

initialsetforchem.for の内容3

```
c+++++
c User define initial/boundary condition
c+++++
```

```
do i=1,ndiv+1
write(num,(i2)') i
chemname(i)='Layer-'//num//'Residence Time'
end do
```

層毎の滞留時間の項目名

```
do i=1,ndiv+1
write(num,(i2)') i
chemname(i+ndiv+1)='Layer-'//num//'Mechanical energy history'
end do
```

層毎のエネルギー履歴の項目名

```
do i=1,ndiv
write(num,(i2)') i
chemname(i)='Layer-'//num//' Mw'
end do
```

層毎の分子量の項目名

```
chemvname(ndiv+1)='Average Residence Time'
chemvname(ndiv+2)='Average Mw'
```

層流量重み付け
平均値のコンター図の項目名

```
chemnamecross(1)='Residence Time'
chemnamecross(2)='Mechanical energy history'
```

スライスコンター図の項目名

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c Mixing factor calculation
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

```
c
c dg=1.0/2.0/ndiv
c
c do i=1,ndiv
  gzai=(2.0*i-1)*dg
  gzaiv(i)=gzai
  xxx=sqrt(1.0+2.0*gzai-3.0*gzai**2.0)
  d1=xxx+1.0+gzai-2.0*gzai**2.0
  d2=(xxx+3.0*xxx*gzai+1.0+4.0*gzai-3.0*gzai**2.0)*(1.0-gzai)
  dmf(i)=d1/d2
  dmf(i)=1.0
c
c velm(i)=dmf(i)*gzai*(1.0-gzai)
end do
```

層流重み付け平均に必要な
混合係数の算出

```
gzaiv(0)=0.0
gzaiv(ndiv+1)=0.0
dmf(0)=0.0
dmf(ndiv+1)=0.0
velm(0)=0.0
velm(ndiv+1)=0.0
dg=1.0/ndiv
qttotal=0.0
do i=1,ndiv
weightq(i)=dg*velm(i)
qttotal=qttotal+weightq(i)
end do
do i=1,ndiv
weightq(i)=weightq(i)/qttotal
end do
```

$$M_f(\xi) = \frac{X + 1 + \xi - 2\xi^2}{(X + 3X\xi + 1 + 4\xi - 3\xi^2)(1 - \xi)}$$

$$X = \sqrt{1 + 2\xi - 3\xi^2}$$

p.13

p.13 $\tilde{v}_l(\xi) = M_f(\xi) v_l(\xi)$ for $0 < \xi < 1$.

循環流れ考慮 混合係数 循環流れ未考慮
流速分布 流速分布

流量重み付け関数 $\langle W_{q/l} \rangle$

$$\sum_{l=1}^{ndiv} \langle W_{q/l} \rangle = 1$$

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析



chemfscal.for の内容

```
do ie=1,nelem(ib)
do iv=1,ndiv  滞留時間解析(ic=1)
chemf3d(1,ie,iv,ib)=0.0
chemd3d(1,ie,iv,ib)=0.0
chems3d(1,ie,iv,ib)=1.0
end do

do iv=1,ndiv  せん断エネルギー履歴解析(ic=2)
chemf3d(2,ie,iv,ib)=0.0
chemd3d(2,ie,iv,ib)=0.0

gammv=0.5*(gam(iv,ie,ib)+gam(iv+1,ie,ib))
if(gammv.gt.cutoffshear) gammv=cutoffshear
visv=0.5*(vish(iv,ie,ib)+vish(iv+1,ie,ib))

chems3d(2,ie,iv,ib)=gammv*gammv*visv
end do

end do
```

解析対象とする移流拡散方程式:

$$\left(A_{iv} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + C_{iv} \Delta \right) f_{iv} = B_{iv}$$

滞留時間解析(ic=1)

$$\mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla \langle t_{res} \rangle_{iv} = 1$$

せん断エネルギー履歴解析(ic=2)

$$\mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla \langle v h_{res} \rangle_{iv} = \eta_{iv} \dot{\gamma}_{iv}^2$$

* \mathbf{u}_{iv} には、p.12-13で示した、断面内循環流れを考慮した層毎の流速 \tilde{v}_l が自動設定されます。

$chemc3d(ic,ie,iv,ib)$

$$\left(chemf3d(ic,ie,iv,ib) + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + chemd3d(ic,ie,iv,ib) \Delta \right) f_{ic,iv} = chems3d(ic,ie,iv,ib)$$

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析



chemvariable.for の内容: 解析で得られたせん断エネルギー履歴を用いた分子量計算

```

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c   Mw calculation
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
      rgas=8.314462618  R
c   パラメータ設定
      dnmw0 =commonvpar(1)  Mw0
      dk0   =commonvpar(2)  k0
      ramdmw=commonvpar(3)  λ
      dfmw  =commonvpar(4)  ΔF
      dmmw  =commonvpar(5)  m
      rhomw =commonvpar(6)  ρ
      wpmw  =commonvpar(7)  wp
      calpha=commonvpar(8)  α
      cbeta =commonvpar(9)  β

```

$$C \quad \text{ecoeffmw} = \frac{dmmw}{\text{rhomw} / \text{wpmw}} \frac{m}{\rho w_p}$$

```

do ii=1,ndiv  肉厚層毎の物性計算
do iz=1,ndivzs(ib)-2  スクリュ軸方向毎の物性計算
ntops=ndivl(ib)*iz
ntope=ndivl(ib)*(iz+1)
ic=0
avenergymwd1=0.0
avtimenwd1=0.0
avvismwd1=0.0
avgammwd1=0.0
avtempmwd1=0.0
volsum=0.0
i1=ii+ndiv+1

if(ibtype(ib).eq.0) then
do i=1,2*ndivl(ib)
ie=i+2*ndivl(ib)*(iz-1)

volsum=volsum+fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)  滞留時間の解析結果
avtimenwd1=avtimenwd1
&   +fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc3d(1,ie,ii,ib)  <tres>iv
avtempmwd1=avtempmwd1+0.5*fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*
&   (temh(ii,ie,ib)+temh(ii+1,ie,ib))  せん断エネルギー履歴の解析結果
avenergymwd1=avenergymwd1
&   +fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*chemc3d(2,ie,ii,ib)  <vhres>iv
avvismwd1=avvismwd1+0.5*fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*
&   (vish(ii,ie,ib)+vish(ii+1,ie,ib))
avgammwd1=avgammwd1+0.5*fillleavb(ie,ib)*vol(ie,ib)*
&   (gam(ii,ie,ib)+gam(ii+1,ie,ib))
end do
avtempmwd(iz)=avtempmwd1/volsum
avtimenwd(iz)=avtimenwd1/volsum
avenergymwd(iz)=ecoeffmw*avenergymwd1/volsum
avvismwd(iz)=avvismwd1/volsum
avgammwd(iz)=avgammwd1/volsum

rt=rgas*(avtempmwd(iz)+273.15)  ——— RT
dind=- (dfmw-ramdmw*avenergymwd(iz))/rt  ———  $-\frac{\Delta F - \lambda \Delta E}{RT}$ 
if(dind.gt.30.0) dind=30.0
dk(iz)=dk0*exp(dind)  ———  $k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta F - \lambda \Delta E}{RT}\right)$  p.46 (2)式
end do

```

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molcut3d

chemvariable.for の内容: 解析で得られたせん断エネルギー履歴を用いた分子量計算

```
do iz=2,ndivzs(ib)
  avvisavgamm=avvismwd(iz)*avgammwd(iz) ———  $\tau = \eta \dot{\gamma}$ 
  if(icutoff.eq.2.and.avvisavgamm.gt.1.0e+03*cutoffshear) then
    avvisavgamm=1.0e+03*cutoffshear
  end if
  dmwinf(ii,iz,ib)=-alpha*avvisavgamm+cbeta ———  $M_{w\infty} = -\alpha\tau + \beta$ 
  if(dmwinf(ii,iz-1,ib).le.dmwinf(ii,iz,ib)) then
    dmw(ii,iz,ib)=dmw(ii,iz-1,ib)
  else
    dt=avtitemwd(iz)-avtitemwd(iz-1) ———  $\Delta t$ 
    if(dt.lt.0.0) then
      dt=1.0e-06
    end if
    coef1=1.0/(1.0+dt*dk(iz))
    coef2=dmwinf(ii,iz,ib)*(1.0-coef1)
    dmw(ii,iz,ib)=coef1*dmw(ii,iz-1,ib)+coef2
  end if
end if
xc end if(dmw(ii,iz-1,ib))

if(ibtype(ib).eq.0) then
  do i=1,2*ndivl(ib)
    ie=i+2*ndivl(ib)*(iz-1)
    chempar(ii,ie,ib)=dmw(ii,iz,ib)
    dmwshift(ii,ie,ib)=(dmw(ii,iz,ib)/dmw(ii,1,ib))*3.4
  end do
```

層毎の分子量

$\langle M_w \rangle_i$

$\frac{M_w(z)}{M_{w0}(0)}$ ^{3.4}

粘度更新に利用する

```
do ie=1,nelem(ib)
  chempar(ndiv+2,ie,ib)=0.0
  do ii=1,ndiv
    chempar(ndiv+2,ie,ib)=chempar(ndiv+2,ie,ib)
    & +weightq(ii)*chempar(ii,ie,ib)
  end do
end do
```

層流重み付け分子量平均値

$\langle M_w \rangle_{avg}$

```
do ie=1,nelem(ib)
  chempar(ndiv+1,ie,ib)=0.0
  do iv=1,ndiv
    chempar(ndiv+1,ie,ib)=chempar(ndiv+1,ie,ib)
    & +weightq(iv)*chemc3d(1,ie,iv,ib)
  end do
end do
```

層流重み付け滞留時間平均値

$\langle t_{res} \rangle_{avg}$

テキスト出力

```
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
  open(368,file='mwcalinf',access='sequential',status='unknown',
    & recl=300)
  open(369,file='mwinfcalinf',access='sequential',status='unknown',
    & recl=300)
  open(367,file='mwexitinf',access='sequential',status='unknown',
    & recl=300)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
  do iz=1,ndivzs(ib)
    ntops=ndivl(ib)*(iz-1)+1
    write(368,*) 10.0*znode(ntops,ib),
    & ((',',dmw(ii,iz,ib)),ii=1,ndiv)
    write(369,*) 10.0*znode(ntops,ib),
    & ((',',dmwinf(ii,iz,ib)),ii=1,ndiv)
  end do
  write(367,*) dmw0
  do ii=1,ndiv
    write(367,*) ii,',',dmw(ii,ndivzs(ib),ib),',',weightq(ii)
  end do
  write(367,*) chempar(ndiv+2,nelem(ib),ib)
```

分子量分布計算で使用する, .mwexitinf の出力(p.56)

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molcut3d

viscal.for の内容

```

cccccccc for molecular cut
  if(i.molcut.eq.1) then
    omgvis1=0.5
    if(i.eq.1) then
      dmwshift1=dmwshift(1,ie,ib)
    else if(i.eq.ndiv+1) then
      dmwshift1=dmwshift(ndiv,ie,ib)
    else
      dmwshift1=0.5*(dmwshift(i-1,ie,ib)+dmwshift(i,ie,ib))
    end if
  end if

```

当モデル適用時に通過する

反復計算の緩和係数

chemvariable.for で計算された $\left(\frac{M_w(z)}{M_{w0}(0)}\right)^{3.4}$

M_w : 重量平均分子量の解析値 [kg/mol]
 M_{w0} : 重量平均分子量の初期設定値 [kg/mol]
 η_0 : ゼロせん断粘度 [Pa·s]

```

c
& vish(i,ie,ib)=omgvis1*dmwshift1*acoef
  + (1.0-omgvis1)*vish(i,ie,ib)
end if

```

分子量低下を考慮した粘度更新。
 acoef には η_0 が設定されている。
 $\eta = \eta_0 \left(\frac{M_w}{M_{w0}}\right)^{3.4}$ (p.50)

*デフォルト設定の上記粘度式を変更する場合には、当部分の記述を変更します。

○User define modelタブの設定例 (p.49)

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

ユーザ定義ルーチンの利用

熱流動解析との連成

熱流動連成にチェックする。
 非ニュートン反復計算回数毎に、
 定常拡散移流方程式を1回解析する。

計算パラメータ

反復計算回数

反復計算の緩和係数

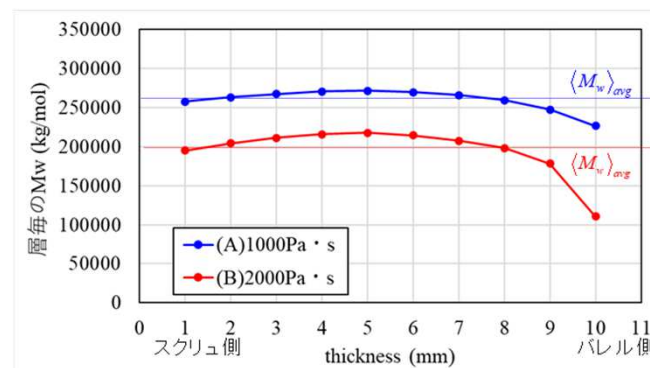
マトリクスソルバ反復計算回数

マトリクスソルバの収束基準値

時間刻み



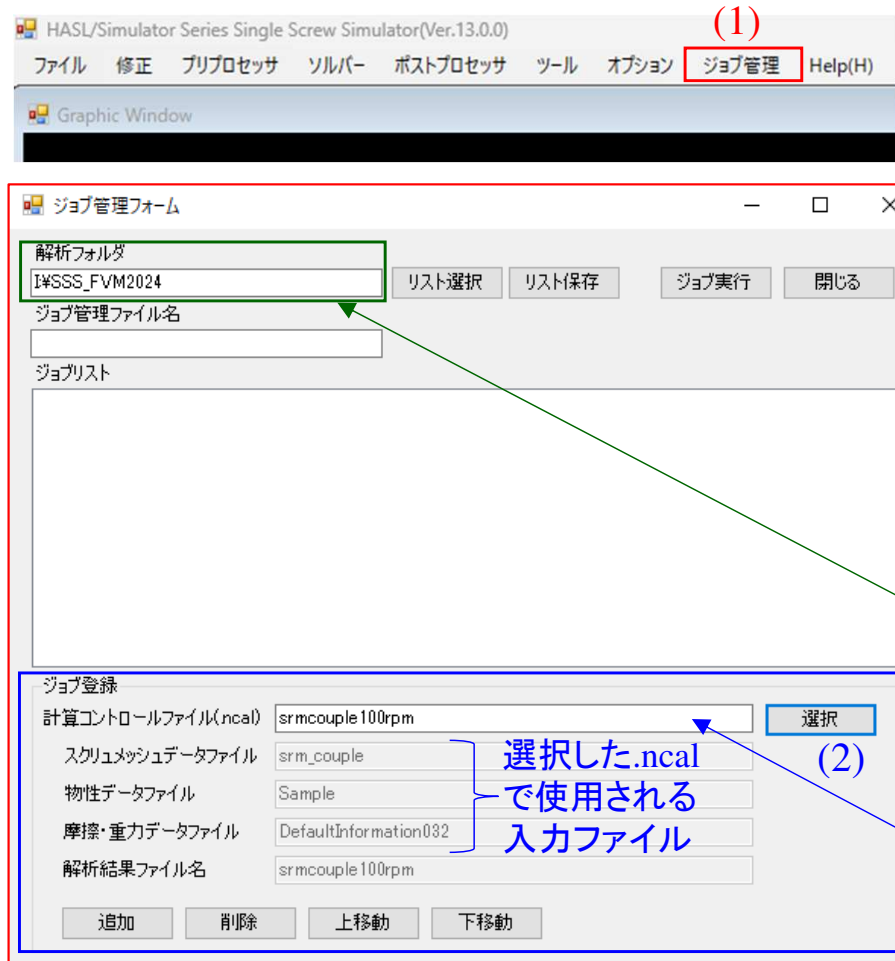
*当ユーザプログラムを使用して、(4)高分子の機械的切断モデルに基づく分子量解析機能 (p.45-) の解析結果(p.51-53) を得ることができます。



(7) 連続ジョブ実行方法

解析作業の効率化を目的に、複数の解析条件ファイル(.ncal)をジョブとして登録し、登録したジョブを連続的に自動解析する機能を追加しました。

利用手順



(事前準備): 通常の方法で、解析プログラム実行タブから、解析条件を設定し、計算コントロールファイル(.ncal)を保存します。

(1): メニューバーのジョブ管理をクリックすると、ジョブ管理フォームが出現します。

(2): フォーム下部のジョブ登録枠内の”選択”ボタンをクリックして、登録したい解析条件を設定します。設定後、選択されたファイルが含まれる解析フォルダと、使用される入力ファイルが表示されます。

*使用される入力ファイルは、解析フォルダ内に存在する必要があります。

利用手順

ジョブ管理フォーム

解析フォルダ
I:\SSS_FVM2024

ジョブ管理ファイル名
jobcontroltest

ジョブリスト

1.	srmcouple100rpm
2.	srmcouple85rpm
3.	test1b_molcut1000
4.	test1b_molcut2000
5.	test0h300_1h3000_fvm

ジョブ登録

計算コントロールファイル(ncal) test0h300_1h3000_fvm

スケジューラデータファイル test0h300_1h3000

物性データファイル hdpe_b3

摩擦・重力データファイル DefaultInformation032

解析結果ファイル名 test0h300_1h3000_fvm

追加 削除 上移動 下移動

登録したジョブの削除や、
順番を変更する際に利用します。

(3): (2)の解析条件ファイル(.ncal)を選択後、“追加”ボタンをクリックすると、フォーム中央のジョブリスト枠に登録されます。

本作業を複数回実施して、解析したいジョブを順番に登録します。

(4): 登録終了後、フォーム上部の“リスト保存”をクリックすると、登録内容を.csvファイルとして保存できます。

保存した jobcontroltest.csvの内容

	A	B
1	Work Folder	I:\SSS_FVM2024
2	1	srmcouple100rpm
3	2	srmcouple85rpm
4	3	test1b_molcut1000
5	4	test1b_molcut2000
6	5	test0h300_1h3000_fvm

*保存したジョブ管理ファイルは、“リスト選択”をクリックして読み込むことができます。またExcelでリストを編集することも可能です。

利用手順

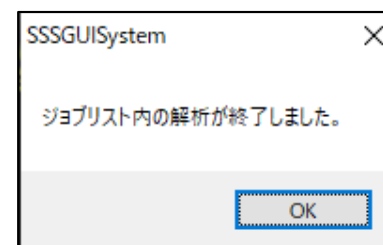
The screenshot shows the 'Job Management Form' (ジョブ管理フォーム) with the following fields and buttons:

- 解析フォルダ: I4SSS_FVM2024
- ジョブ管理ファイル名: jobcontroltest
- ジョブリスト:
 - 1. srmcouple 100rpm
 - 2. srmcouple 85rpm
 - 3. test 1b_molcut 1000
 - 4. test 1b_molcut 2000
 - 5. test 0h300_1h3000_fvm
- ジョブ登録:
 - 計算コントロールファイル(.ncal): test0h300_1h3000_fvm
 - スクリュメッシュデータファイル: test0h300_1h3000
 - 物性データファイル: hdpe_b3
 - 摩擦・重力データファイル: DefaultInformation032
 - 解析結果ファイル名: test0h300_1h3000_fvm

Buttons: リスト選択, リスト保存, ジョブ実行 (highlighted with a red box and circled with a red '5'), 閉じる, 追加, 削除, 上移動, 下移動.

(5): ジョブ登録後、“ジョブ実行”ボタンをクリックすると、リストの上から順番に解析が連続実行されます。

最後のジョブ解析が終了すると、“ジョブリスト内の解析が終了しました”のメッセージが表示されます。



OKを押した後、ジョブ管理フォームを閉じて終了します。

*解析結果は、通常の解析と同様に、.ncal内で設定された、“解析結果ファイル名.拡張子”で各種出力ファイルが保存されます。

補足資料／Ver.13.0.0で追加または変更されたテキスト出力ファイル

資料本文内で説明されていない出力ファイルについて、エクセルでコンマ区切りで開いたときの各列の意味について記載します。

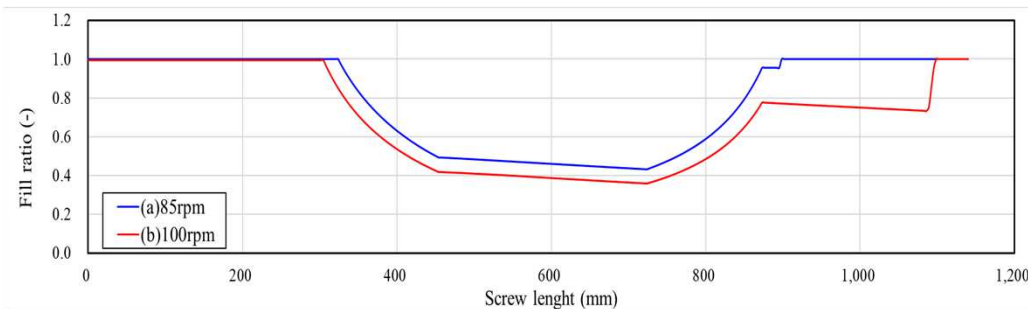
○ .suminf ファイル: 任意の解析条件において出力される。

【出力内容】スクリュ軸方向の各種平均物理量

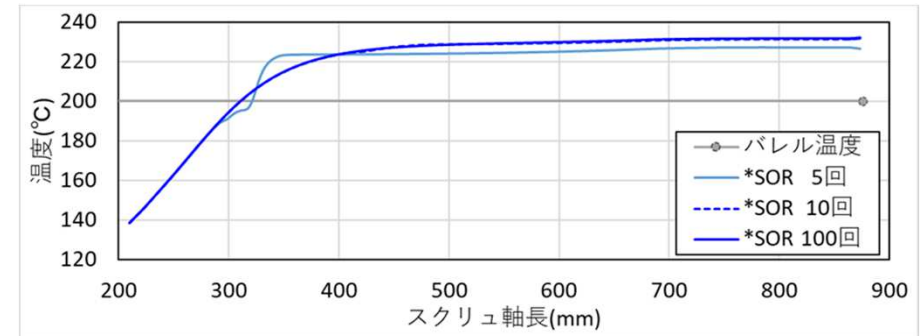
軸方向 分割数	軸方向 距離	充填率	流路 体積	区分 滞留時間	滞留時間 (区分積算)	バレル表面層のせん断速度 最小値, 平均値, 最大値	バレル表面層の熔融粘度 最小値, 平均値, 最大値	平均 温度	平均 圧力	押出 流量	平均 せん断速度	平均 熔融粘度					
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	
1	n	zlength	filln	voln	dtn	restime	gammin o	gamave or	gammax o	vismin on	visave on	vismax on	tempave	presave	fluxave	gamave	visave
2		mm		cc	sec	sec	1/sec	1/sec	1/sec	Pa*sec	Pa*sec	Pa*sec	C	MPa	cm3/sec	1/sec	Pa*sec
3	1	0.00E+00	0.994971	0.936783	0.133153	0.133153	109.8441	440.4339	2001.578	2.463569	3.666053	3.939642	100	7.03E-04	7.000006	396.7282	3.738547
4	2	3.175	0.994971	0.936783	0.133153	0.266306	113.5863	433.7369	1977.827	2.474231	3.675925	3.933921	100	5.22E-04	6.999886	394.8466	3.741225
5	3	6.35	0.994971	0.936783	0.133153	0.399459	115.8841	431.6164	1976.651	2.474762	3.679209	3.930428	100	4.96E-04	7.000472	394.5527	3.74158

- 当ファイルを用いて、スクリュ軸方向距離(mm)に対する各種物理量の状態をグラフ化し、状況確認、条件比較をすることが可能です。

(グラフ作成例, p.41) スクリュ軸方向距離 B列 vs. 充填率 C列



(グラフ作成例, p.64) スクリュ軸方向距離 B列 vs. 平均温度 M列



○ .srminf ファイル: 脱揮解析を実施した場合に出力される。

【case1】揮発による流量減少を考慮しない場合(従来通り)

熱流動連成(脱揮成分の流量減少を考慮)

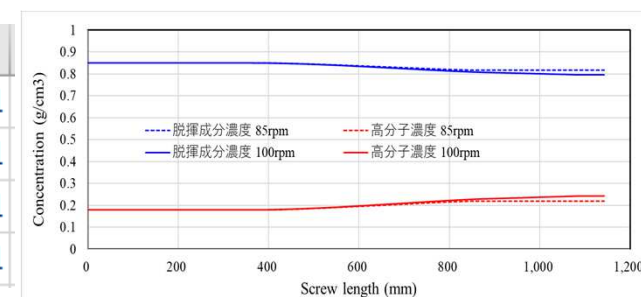
	軸方向 距離 (mm)	揮発成分 濃度(ppm)	暴露表面 境界長(cm)
	A	B	C
1	0.00E+00	5.00E-05	
2	3.175	5.00E-05	0.00E+00
3	6.35	5.00E-05	0.00E+00
4	9.525	4.98E-05	0.97657

【case2】揮発による流量減少を考慮する場合
(p.27-, 新機能)

熱流動連成(脱揮成分の流量減少を考慮)

	軸方向 距離 (mm)	脱揮成分 濃度 [g/cm ³]	未揮発&高分子 押出流量 [cc/s]	脱揮成分 平衡濃度 [g/cm ³]	高分子 濃度 [g/cm ³]	拡散係数 [cm ² /s]	温度平均 [°C]	内部 パラメータ
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	0.00E+00	0.85	7	0.97	0.1785	1.00E-08	100	1
2	3.175	0.85	6.634421	0.97	0.1785	1.00E-08	100	1
3	6.35	0.85	6.634421	0.97	0.1785	1.00E-08	100	1
4	9.525	0.85	6.634346	0.97	0.1785	1.00E-08	100	1

(グラフ作成例, p.43)
スクリュ軸長A列 vs. (B列, E列)



○ .srmcalcouple ファイル: 脱揮解析(流量減少を考慮)を実施した場合に出力される(p.27-, 新機能).

	スクリュ長 [mm]	未揮発 押出流量 [cc/s]	未揮発 &高分子 押出流量 [cc/s]	高分子 体積分率 [-]	脱揮成分 体積分率 [-]	未揮発 &高分子 密度 [g/cm ³]	未揮発 &高分子 押出量 [kg/h]	揮発溶媒 (揮発分) 押出量 [kg/h]	流入口 設定 押出量 [kg/h]	揮発溶媒 (揮発分) 押出流量 [cc/s]
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	0.00E+00	5.95	7	0.15	0.85	1.0285	25.9182	0.00E+00	25.9182	0.00E+00
2	3.175	5.95	7	0.15	0.85	1.0285	25.9182	0.00E+00	25.9182	0.00E+00
3	6.35	5.95	7	0.15	0.85	1.0285	25.9182	0.00E+00	25.9182	0.00E+00
4	9.525	5.95	7	0.15	0.85	1.0285	25.9182	0.00E+00	25.9182	0.00E+00

○ .mwcalinf ファイル: 分子量解析を実施した場合に出力される(p.45-, 新機能).

スクリュ長 [mm]	重量平均分子量 [kg/mol] ($l=1\sim\text{ndiv}$ (層分割数)) M_w										
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
94	295.275	298457.9	298860	296480.2	301029.3	325590.2	332464.8	329381.3	305275.8	247602.6	226791.3
95	298.45	297581.8	298056.2	295806.8	298724.2	323311.3	330792.1	327422.1	301391.9	247602.6	226791.3
96	301.625	296676.7	297231.8	295122.9	296649.9	320916.9	329008.9	325335.2	297434.9	247602.6	226791.3
97	304.8	295741.6	296385.2	294424.8	294802.4	318395.2	327097.4	323101.2	293420.3	247602.6	226791.3

$l=1$: スクリュ表面隣接層
 $l=\text{ndiv}$: バレル表面隣接層

○ .mwinfcalinf ファイル: 分子量解析を実施した場合に出力される(p.45-, 新機能).

スクリュ長 [mm]	臨界分子量 [kg/mol] ($l=1\sim\text{ndiv}$ (層分割数)) $M_{w\infty}$										
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
94	295.275	298457.9	298860	296398.6	291527.4	284860.9	276943.6	268043.8	258091.9	248576.5	239542.6
95	298.45	297581.8	298056.2	295737	291046.8	284557.1	276805.2	268027.1	258253.5	248901.2	239874.1
96	301.625	296676.7	297231.8	295062.4	290558.9	284252.1	276670.8	268019.6	258430	249236.4	240222.7
97	304.8	295741.6	296385.2	294372.6	290061.2	283943.5	276537.7	268019.2	258618.6	249578.3	240585.8

$l=1$: スクリュ表面隣接層
 $l=\text{ndiv}$: バレル表面隣接層