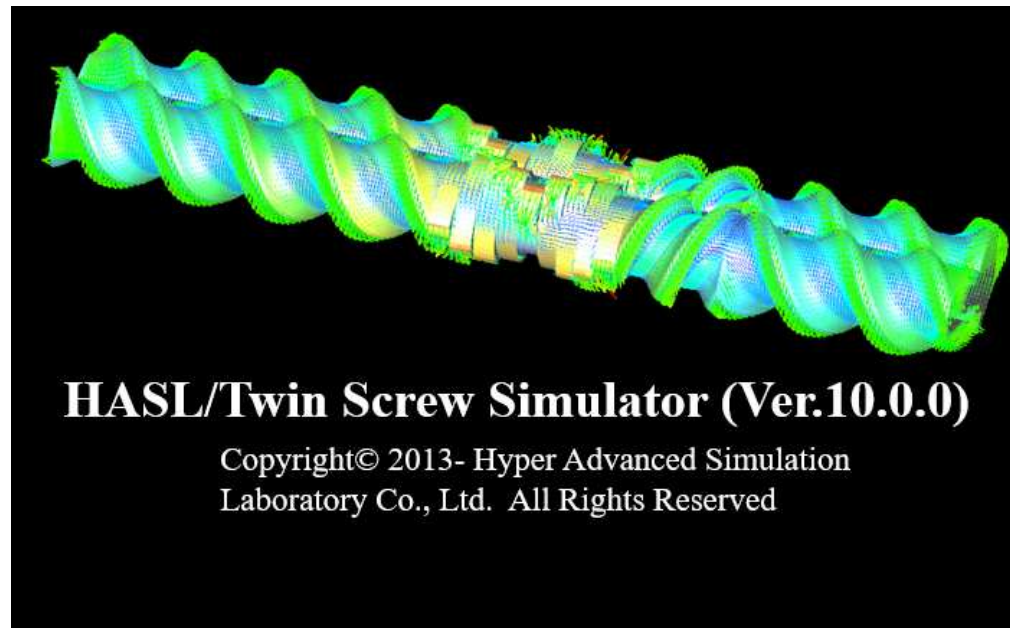

Twin Screw Simulator (Ver.10.0.0)

改良成果資料



2024/03/07

株式会社HASL

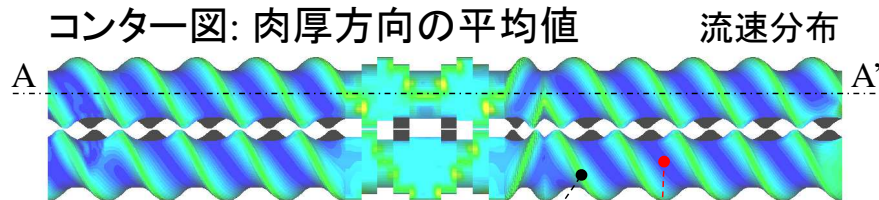
○改良成果一覧/ Twin Screw Simulator (Ver.10.0.0)

- (1) 肉厚断面の新規可視化機能 (.crosscont, .crossvect) 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.11
 - 2. 出口滞留時間分布の新規解析/ RTD Calculator p.17
- (3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能 p.28
- (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.47
/ MWD (Molecular Weight Distribution) Calculator p.56
- (5) 温度解析機能の改良
 - 1. 3D FVM (有限体積法) 温度解析 p.64
 - 2. 1D FDM/2.5D FEM 併用温度解析 p.68
- (6) ユーザプログラム解析機能の拡張 (移流拡散方程式) p.74
/ サンプルプログラム内容説明 p.83
- (7) スクリュエレメント単位の肉厚変更機能 (STLファイル利用) p.96
- (8) 言語設定の切り替え機能 (英/日) p.104

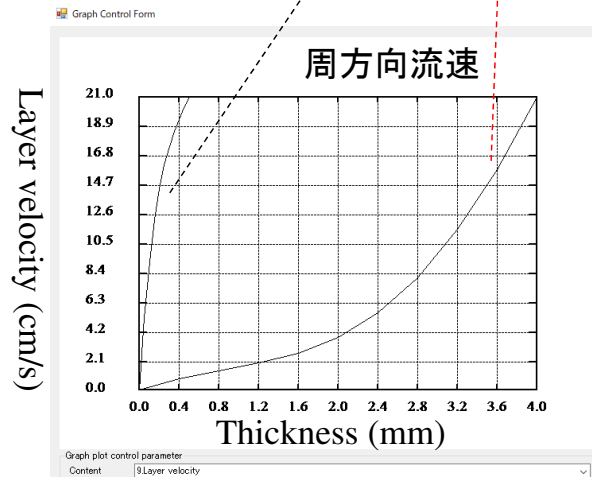
(1)肉厚断面の新規可視化機能

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。

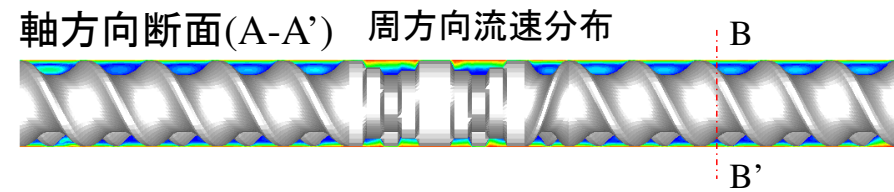
従来の結果表示 (.twinres3d, twinres2d)



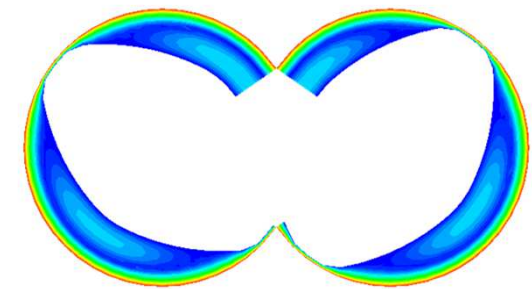
グラフ図: 選択した位置の肉厚方向分布



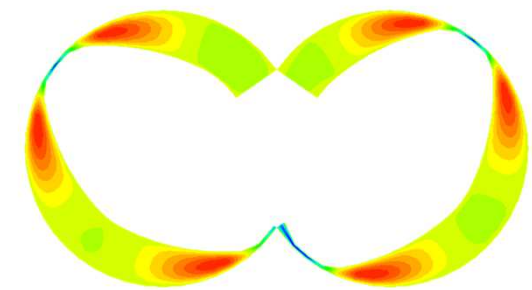
新規の結果表示 (.crosscont, .crossvect)



軸方向垂直断面(B-B') 周方向流速分布



軸方向流速分布



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.10.0.0)

(1): 従来通りの方法でスクリュモデルを作成し、解析用の2.5Dメッシュ(.twinmsh)を保存します。

名前	更新日時	種類
 normal.twinmsh	2024/02/26 15:24	TWINMSH ファイル

(2): (1)で作成したモデルを、For visualization をチェック状態にして3Dメッシュを作成します。

Model Selection

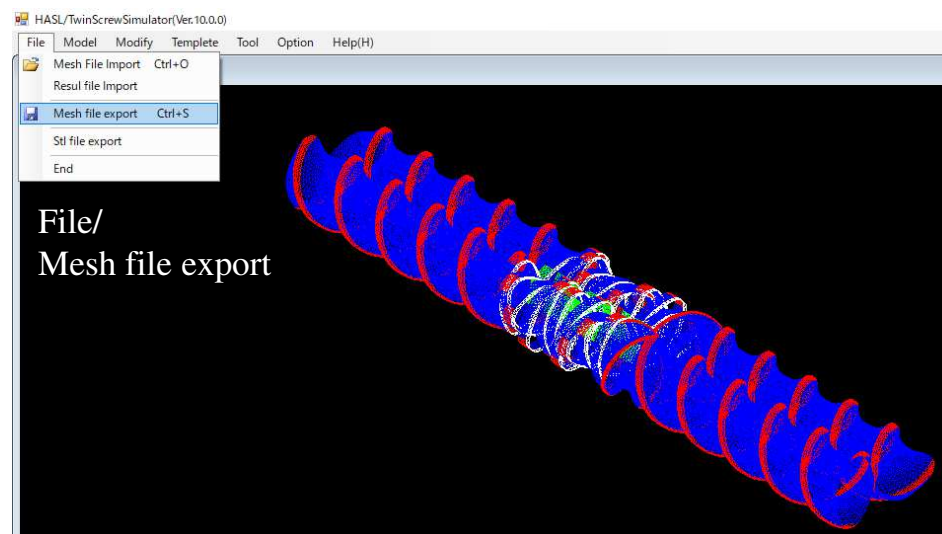
2.5D Analysis Model For analysis (1)解析用2.5D

2D Expanded Model For visualization (2)可視化用3D

(3): (2)に続いて、File/Mesh file exportをクリックしてメッシュ保存すると、拡張子が .msh になった可視化用3Dメッシュが保存されます。

名前	更新日時	種類
 normal.msh	2024/02/26 15:34	MSH ファイル

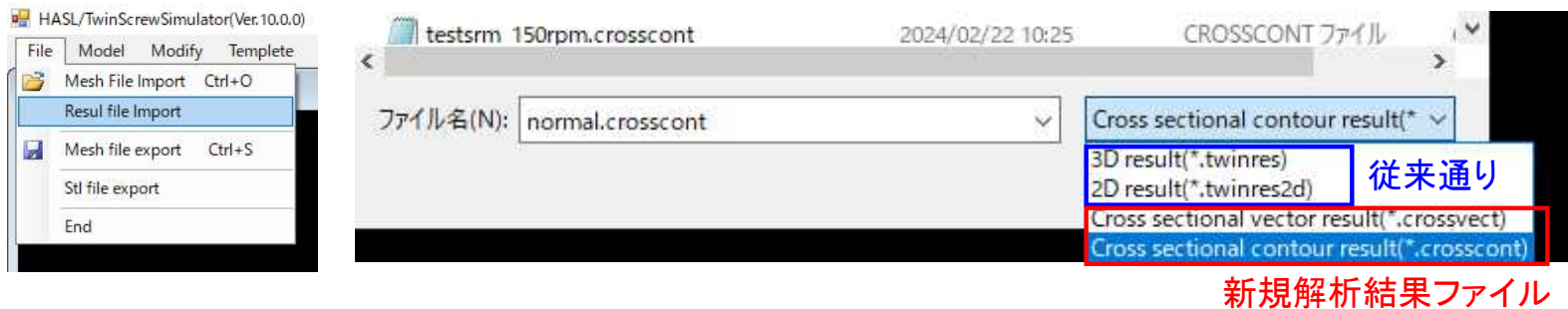
*解析には使用されませんが、解析後のポスト処理で利用します。



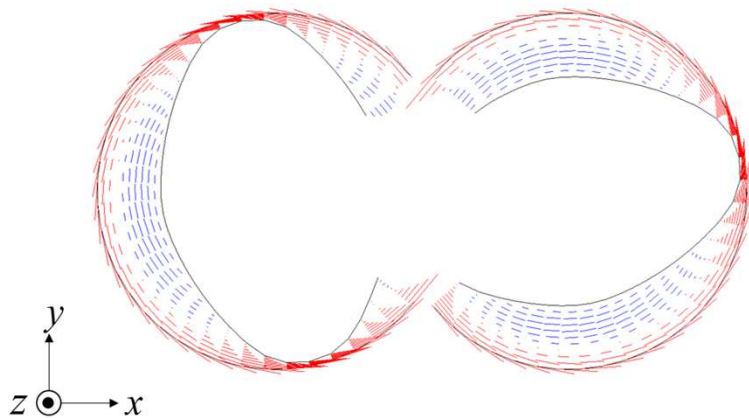
(4): (1)で保存した2.5Dメッシュを用いて、従来通りの方法で、Analysisタブで解析条件を設定し、Saveボタンをクリックして解析条件を保存後、Executeボタンをクリックして解析実行します。

利用手順

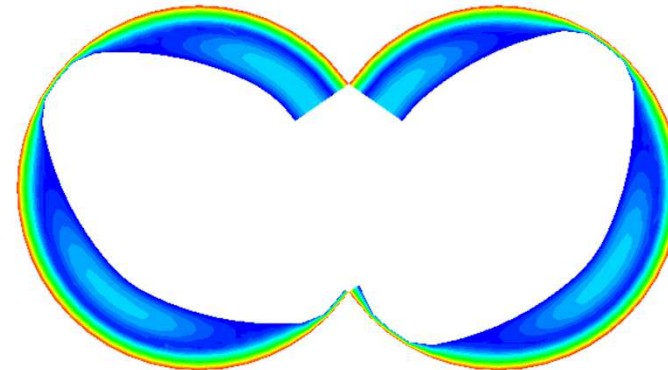
- (5): 解析終了後, File/Result file Importボタンをクリックして解析結果ファイルを選択する際に, Ver.10.0.0では, .crossvect と, .crosscont の2種類の拡張子の解析結果ファイルが選択できます.



○ .crossvect: スライスベクトル表示

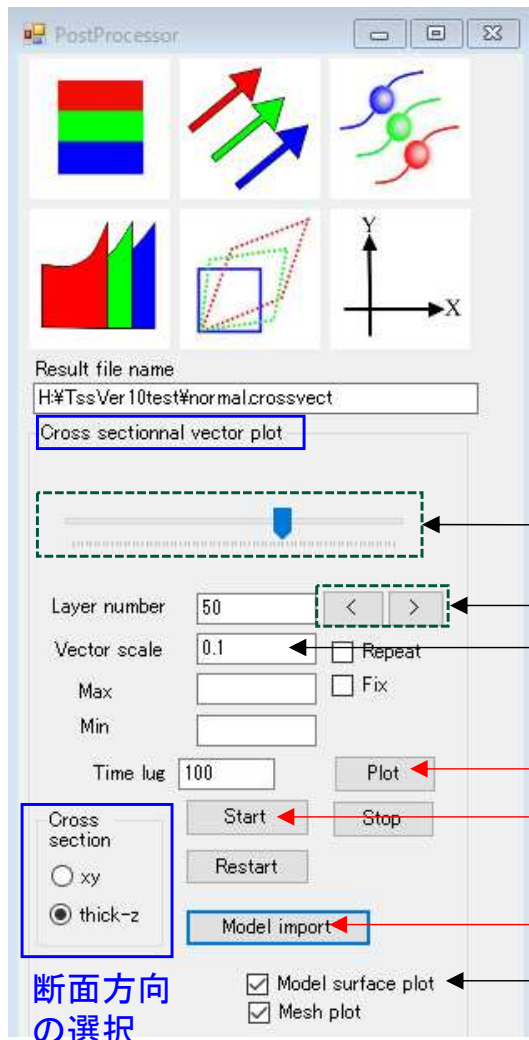


○ .crosscont: スライスコンター図



利用手順

- .crossvect: 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



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(任意断面)

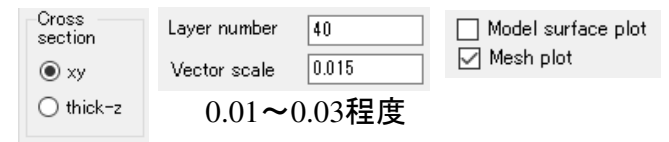
アニメーション再生(自動送り)

可視化用3Dメッシュ(.msh)のインポート

可視化用3Dメッシュの
表示 ON/OFF

断面方向
の選択

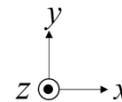
xy断面例 (スクリュ軸垂直断面)



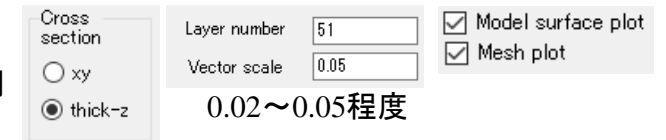
0.01~0.03程度

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が形成



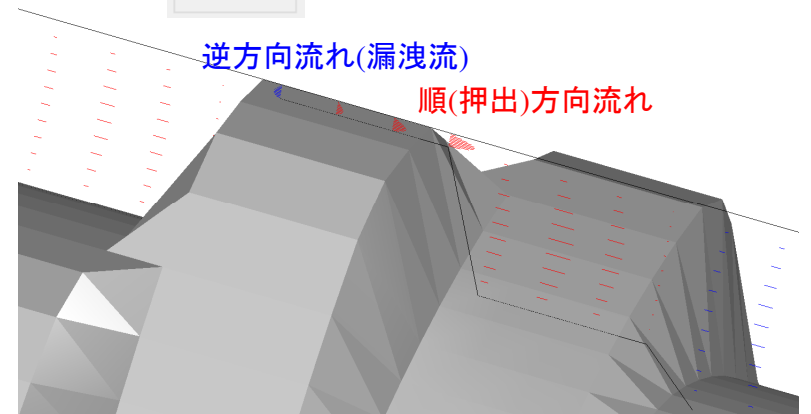
thick-z断面例 (肉厚-スクリュ軸方向 断面)



0.02~0.05程度

逆方向流れ(漏洩流)

順(押出)方向流れ



利用手順

- .crosscont: 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.Axial velocity
- 2.Circumferential velocity
- 3.Temperature
- 4.Strain rate
- 5.Viscosity
- 6.Pressure
- 7.Fill ratio
- 8.Residence time
- 9.Viscous heat
- 10.Volumetric strain rate

断面位置の選択移動

断面位置の調整

カラーバーの最大最小値設定(Fix)

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

断面方向

Result file name: H#TssVer10test#normal.crosscont

Cross sectional contour plot

1.Axial velocity

Layer number: 1

Vector scale: 0.1

Max: 8.233656

Min: -6.549069

Time lag: 100

Start, Stop, Restart, Model import buttons

Cross section: xy, thick-z

Model surface plot, Mesh plot checkboxes

Bmp file output, Bmp file name: bmpfileworkfolder, Output interval: 1

Start: 1, End: 39, Step: 1

View plane: XY, XZ, YZ

(*)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が自動保存されます.

(A) Bmp file output

Bmp file name: bmpfileworkfolder **(B)**

Output interval: 1 **(C)**

TssVer10test

名前

bmpfileworkfolder

TssVer10test > bmpfileworkfolder

bmpfile001.bmp, bmpfile002.bmp, bmpfile003.bmp, ..., bmpfile013.bmp, bmpfile014.bmp, bmpfile015.bmp

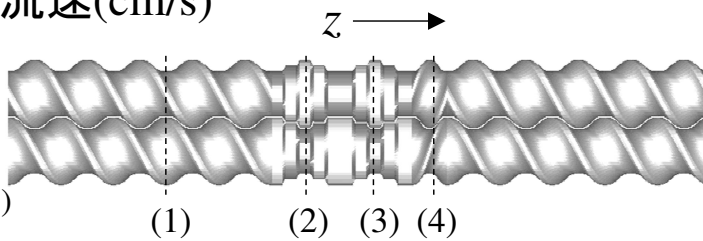
断面数が300の場合, (C) が1のときは300枚, 2のときは300/2=150枚の画像ファイル(.bmp)が保存されます.

- 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)

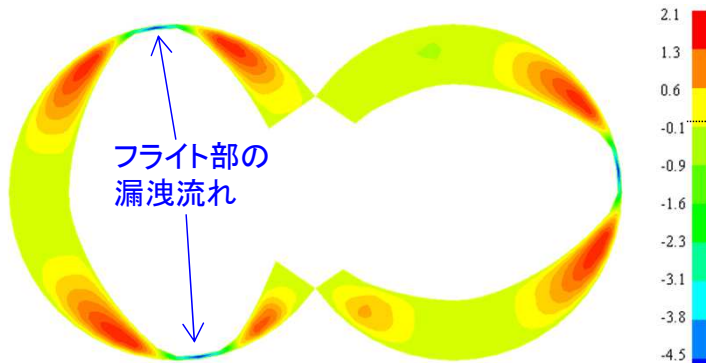
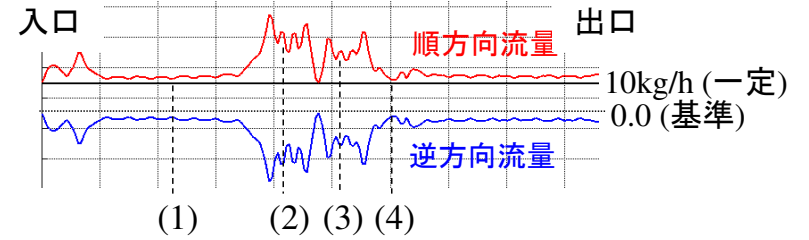
○ 軸方向流速(cm/s)

10kg/h
100rpm
HDPE_B3.pro
(Materialfit DB)

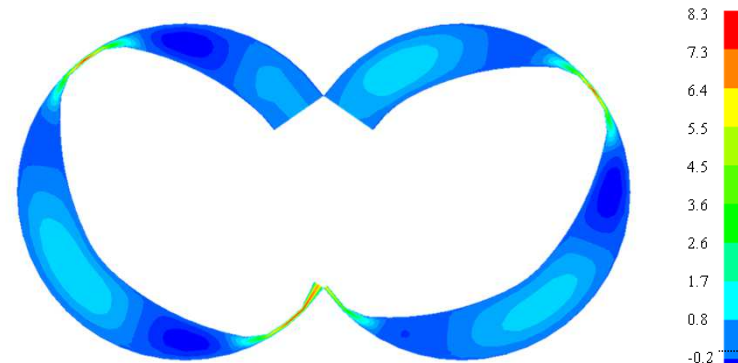


未充填解析
出口圧力
1MPa

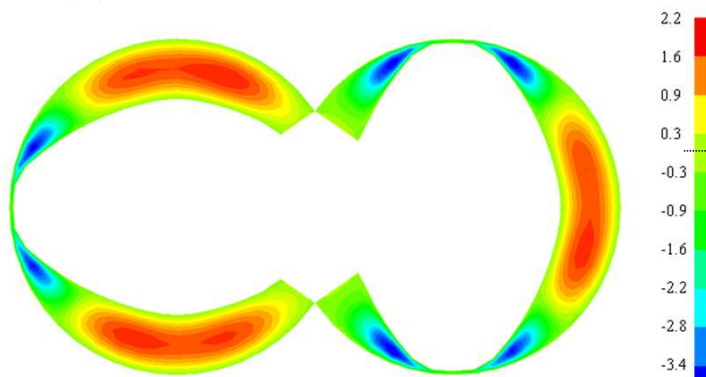
(参考)軸方向断面の通過流量イメージ



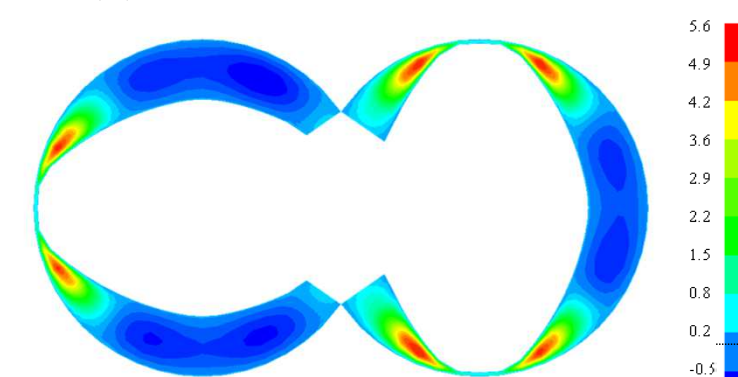
(1) 順送り標準スクリュー部



(4) 逆送り標準スクリュー部



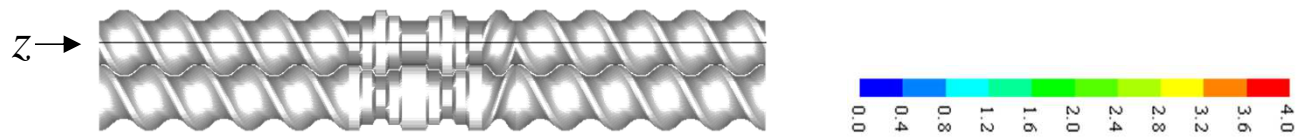
(2) 順送りニーディングディスク部



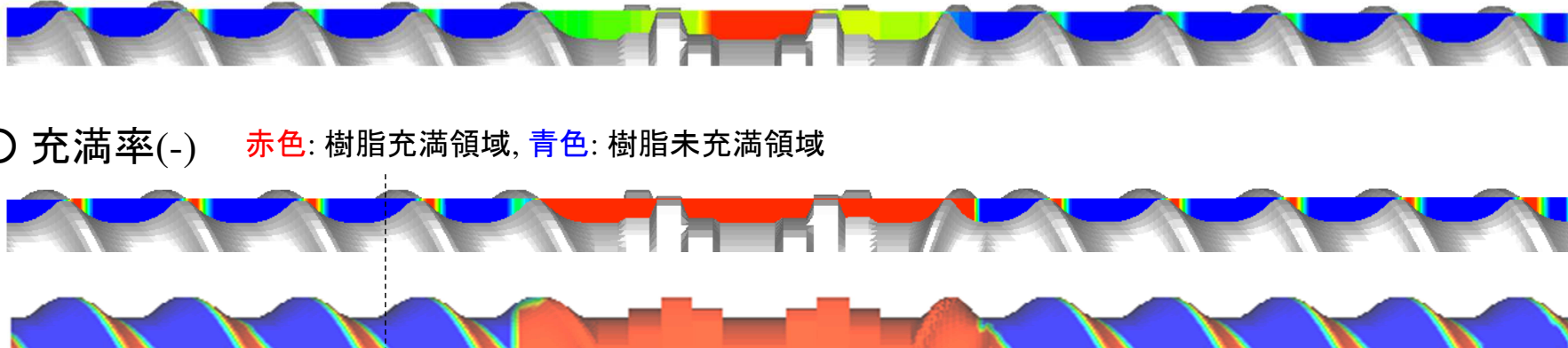
(3) 逆送りニーディングディスク部

スライスコンター図の表示例

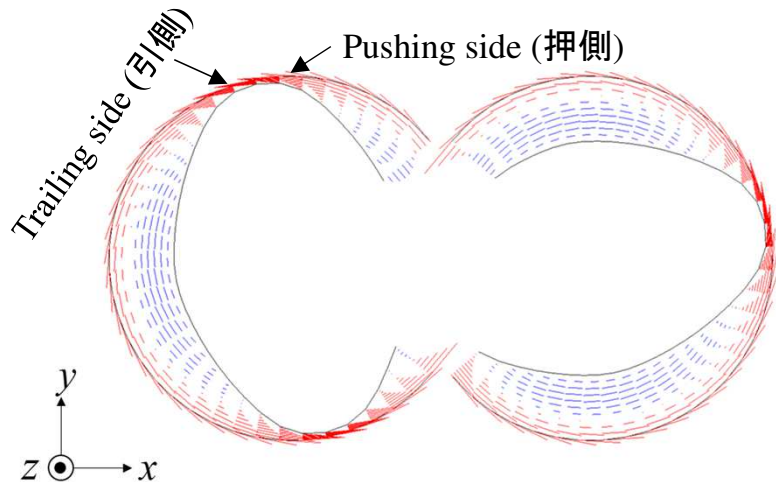
○ 圧力分布(MPa)



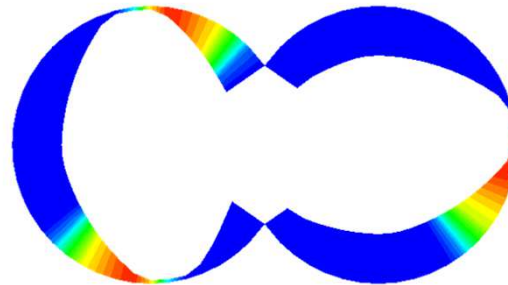
○ 充満率(-) 赤色: 樹脂充満領域, 青色: 樹脂未充満領域



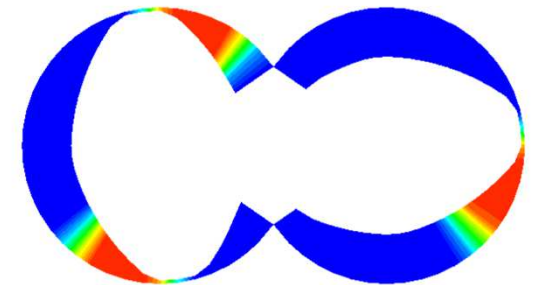
xy断面



xy断面圧力分布(MPa)

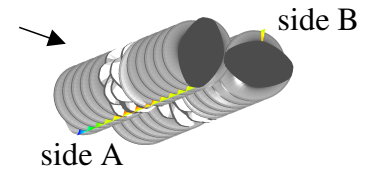


xy断面充満率分布(-)

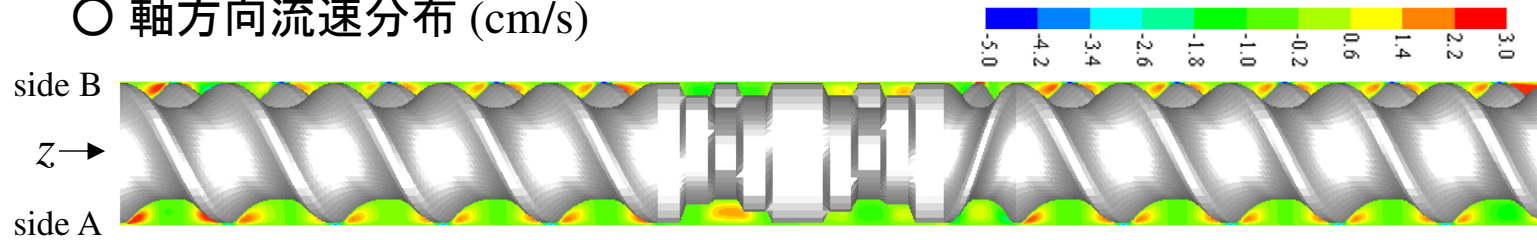


スクレフライト押側は引側と比較して相対的に圧力が高くなり、この圧力差が漏洩流れの駆動力になる。また断面内の圧力勾配情報を利用し、押側に偏在する部分充満領域を表現している。

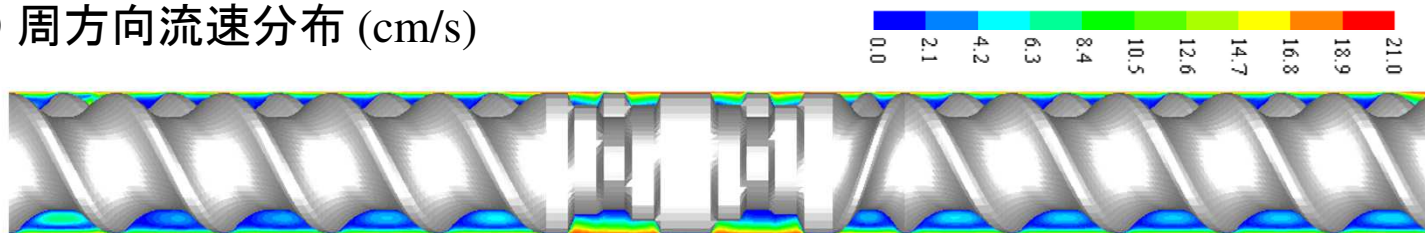
スライスコンター図の表示例



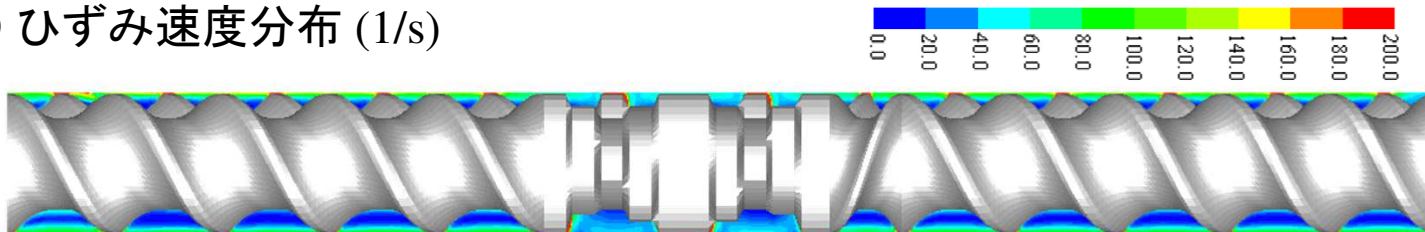
○ 軸方向流速分布 (cm/s)



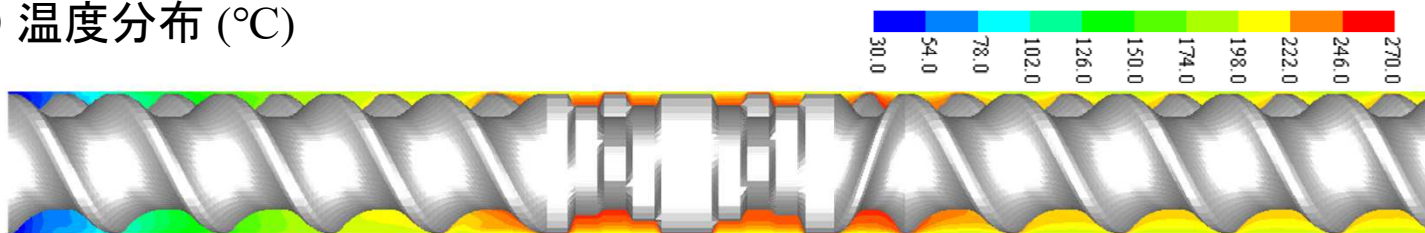
○ 周方向流速分布 (cm/s)



○ ひずみ速度分布 (1/s)



○ 温度分布 (°C)



グラフプロットの利用方法

Graph parameter

Division number scale digit

X-axis

Y-axis

Power index

Minimum/Maximum

X-axis →

Y-axis →

Graph plot node

222, 0
527, 0
832, 0
1137, 0
1442, 0

Export Import

Selection method

Mouse pick delete

Box pick All delete

Circle pick

Release

(C) Thick-dir Layer-dir

Option

X-auxiliary

Y-auxiliary

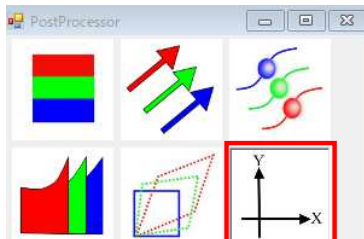
Data number plot

Cross sectional view

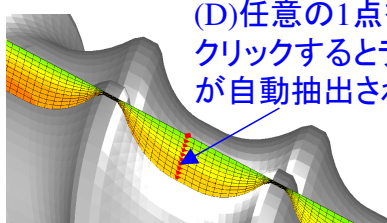
XY XZ YZ

(F) Draw Redraw

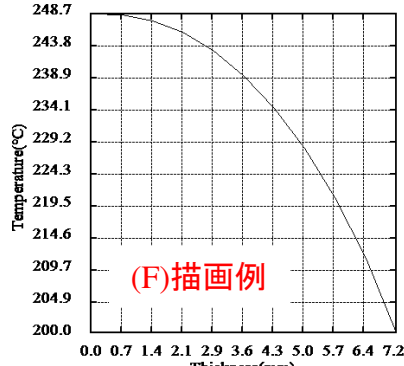
(G) File output Close



(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ラインが自動抽出される。



(F) 描画例

Graph plot control parameter

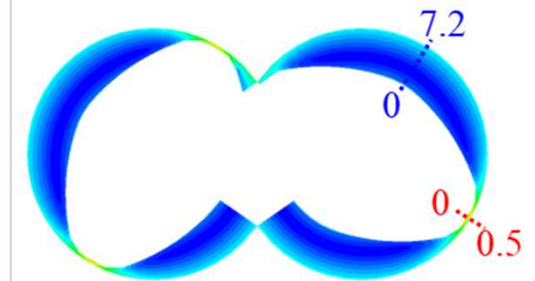
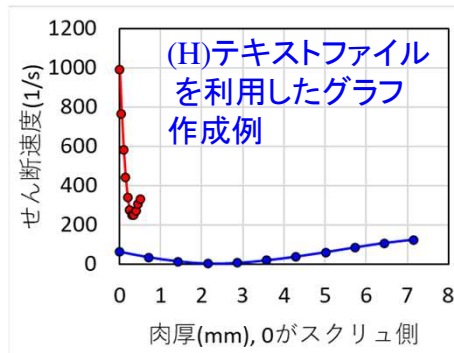
Content (E) 描画内容を選択

Axis parameter

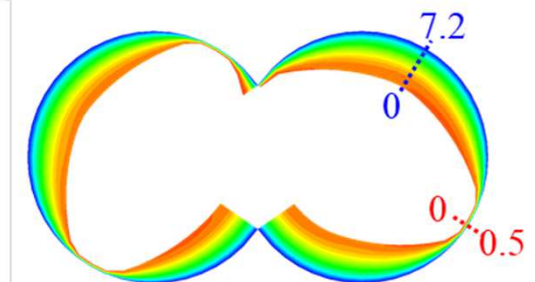
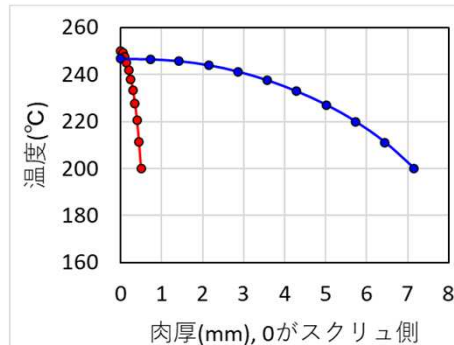
X-axis title

Y-axis title

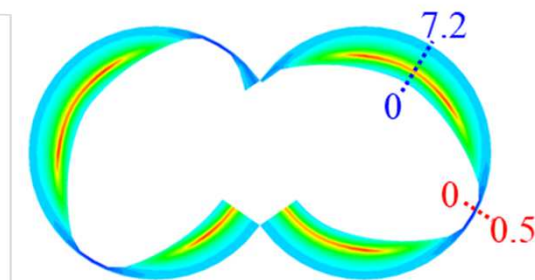
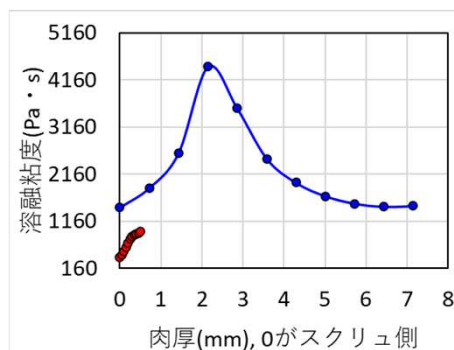
○せん断速度分布(1/s)



○温度分布(°C)



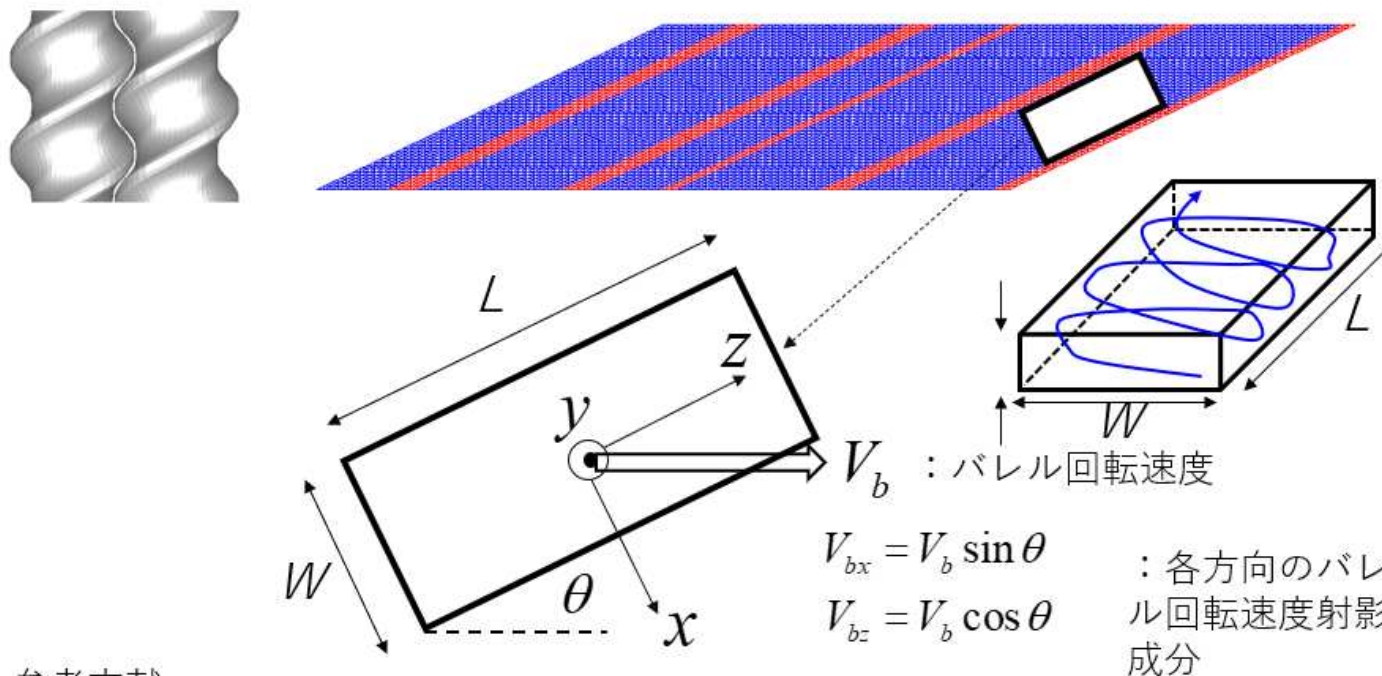
○溶融粘度分布(Pa·s)



(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。

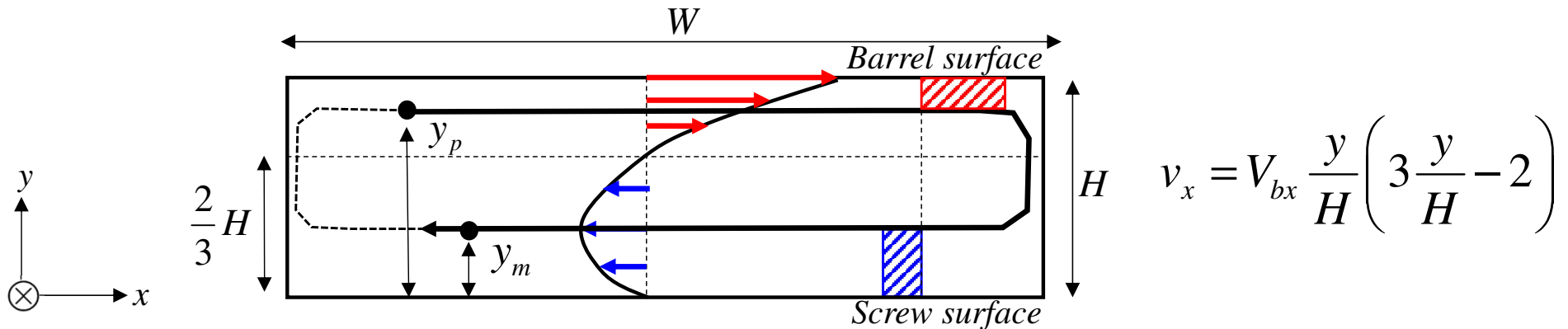


参考文献

- 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 単軸スクリュ押し機の滞留時間分布(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)

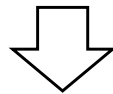
軸方向垂直断面の循環流れにおける軌跡情報の計算

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。



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

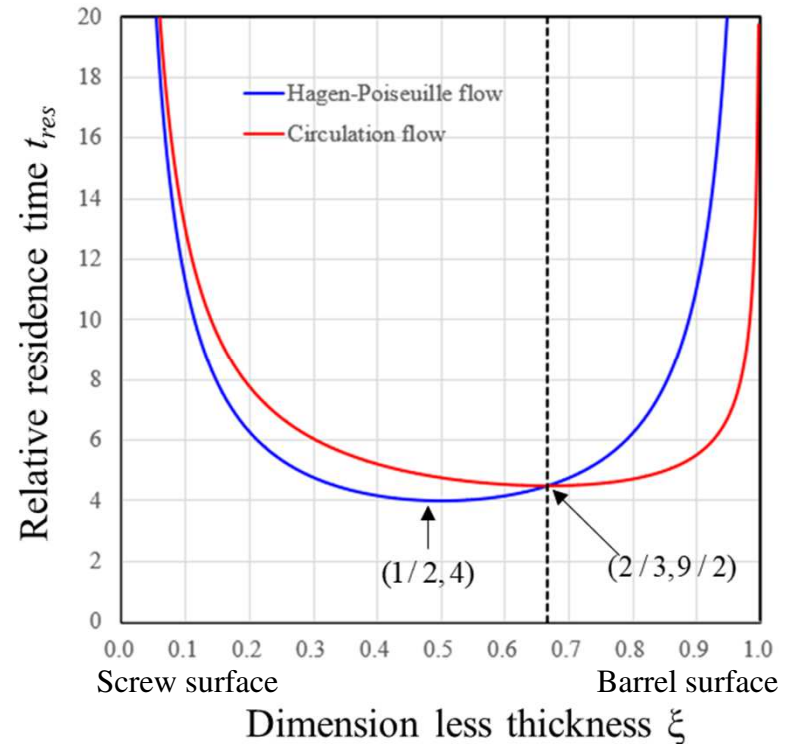
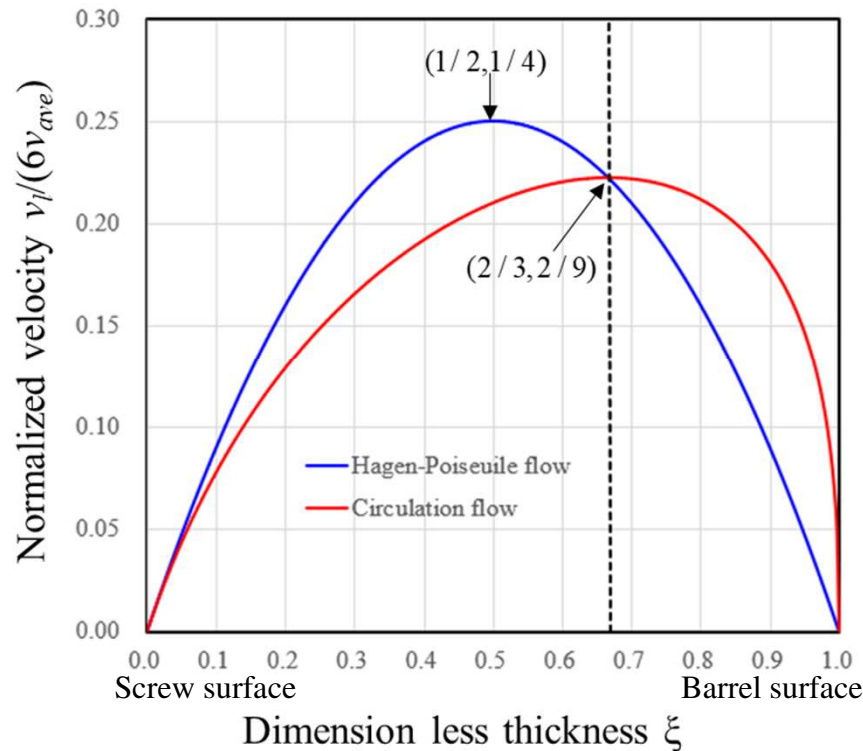
$$\text{Blue shaded area} + \text{Red shaded area} = 0$$



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

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、スクリー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

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

\tilde{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

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

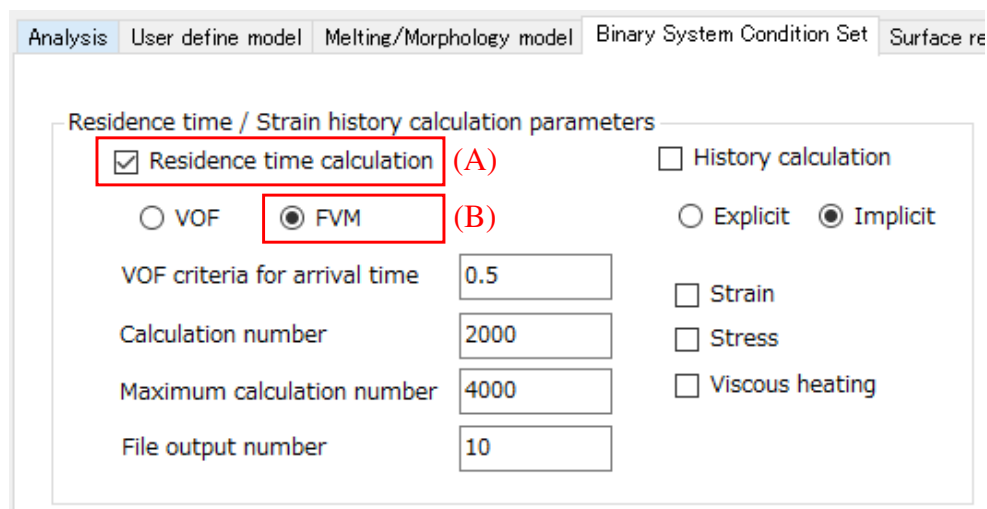
$$X = \sqrt{1 + 2\xi - 3\xi^2}$$

(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.

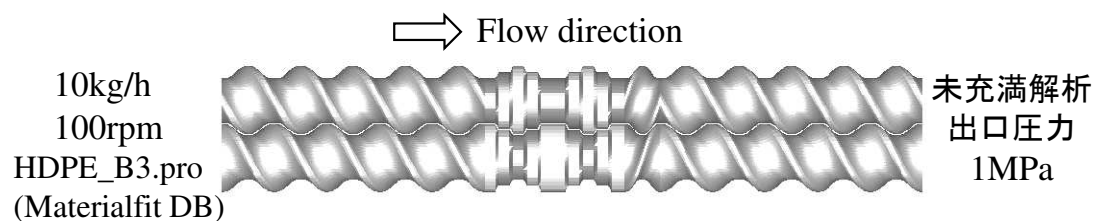
(3) 平均滞留時間 $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ は, 各層で得られた $\langle t_{res} \rangle_l$ を, 層流量で重み付けして算出する.

利用手順

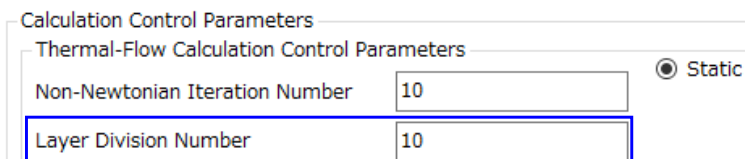
Binary System Condition Set タブ内の, (A) Residence time calculation をチェック状態にして, 解析方法として (B) FVM(有限体積法)のラジオボタンを選択すると, 熱流動解析後に肉厚層毎の滞留時間計算が実施されます.



テスト解析例 (サンプルファイル: ver10testsample¥normal_rtdfvm.tscal)



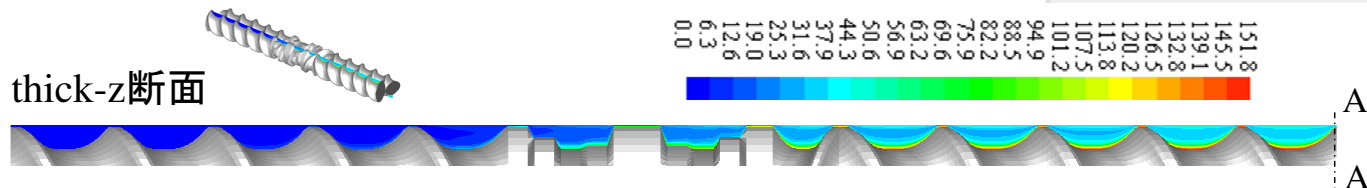
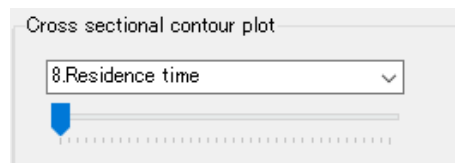
Analysis タブ



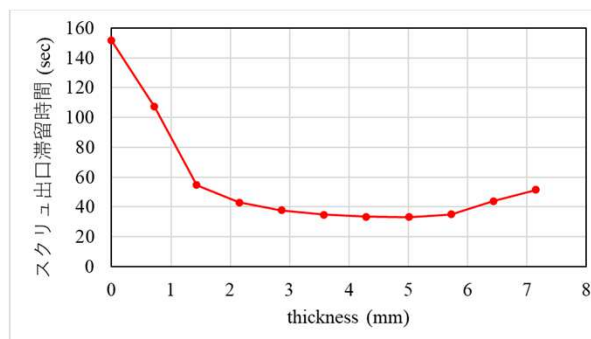
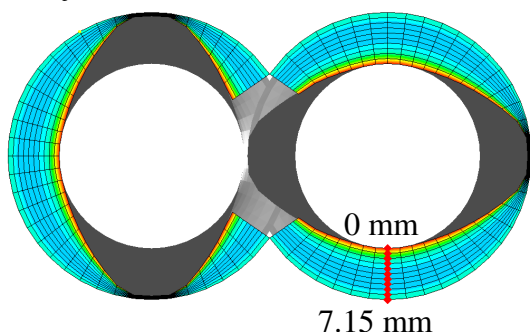
肉厚方向の層分割数: 10(デフォルト)

テスト解析結果

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



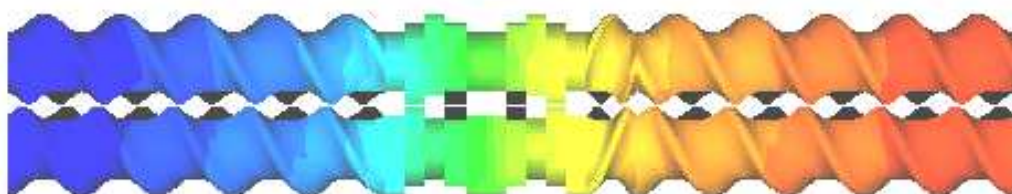
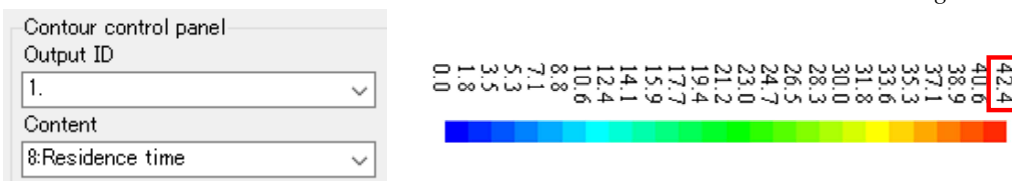
xy断面(スクリュ出口A-A')



(参考).suminf 平均滞留時間

	A	B	C	D	E	F
1	n	zlength	fillnave	voln	dtm	restime
2		mm		cc	sec	sec
3	1	0.00E+00	0.13348	1.227206	4.54E-02	4.54E-02
4	2	1.25	0.13383	1.223997	4.54E-02	9.08E-02
5	3	2.5	0.134543	1.217515	4.54E-02	0.136223
6	4	3.75	0.135536	1.208593	4.54E-02	0.18163
7	5	5	0.13646	1.200409	4.54E-02	0.227038
302	300	393.75	0.13672	1.200414	4.55E-02	42.91879
303	301	395	0.133113	1.208608	4.46E-02	42.96339
304	302	396.25	0.129785	1.21752	4.38E-02	43.00719
305	303	397.5	0.12733	1.224013	4.32E-02	43.05039
306	304	398.75	1	1.227211	0.340183	43.39057

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

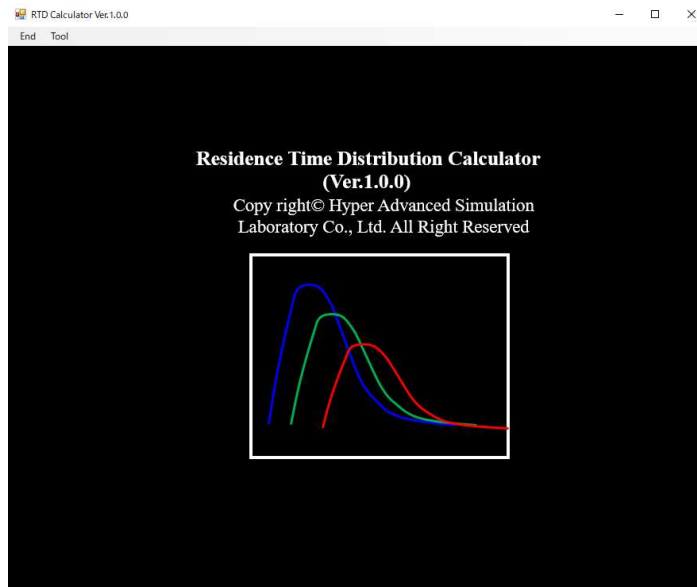


肉厚層毎の滞留時間分布は、流路中央と壁面近傍で大きな差異が生じますが(スクリュ面近傍が有意に遅くなる)、各層を通過する流量で重み付けした平均値 $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ は、充滿率を考慮した流路体積を、押出流量で除して算出される、.suminf の平均滞留時間と概ね一致する傾向を示します。

(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)

スクリュウ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、スクリュウ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。



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

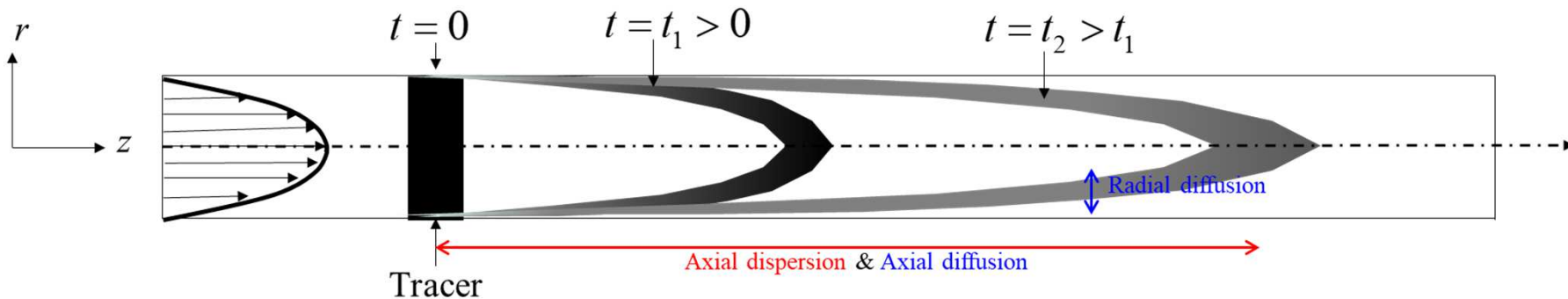
RTDcalculatorは、Materialfitと同様に、TSSと独立して運用します。
(TSSの解析結果ファイルを利用)

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]

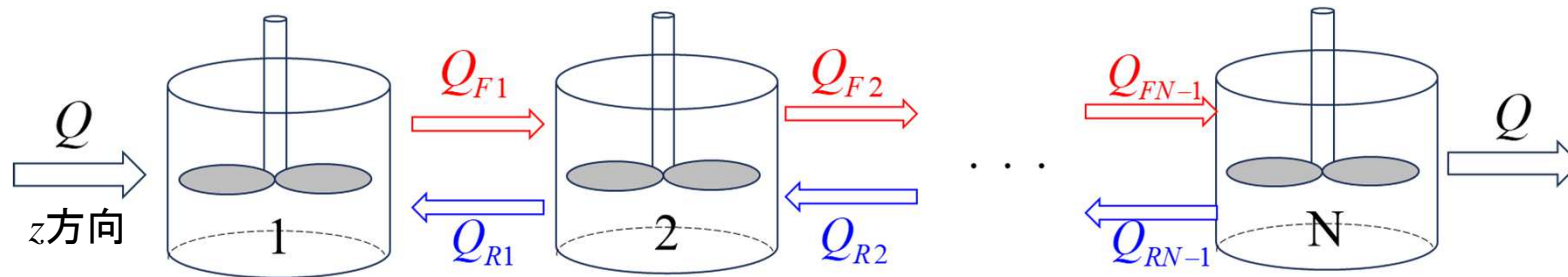
R : 円管の半径 [m]

$D_{diffusion}$: 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。
TSSの二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。



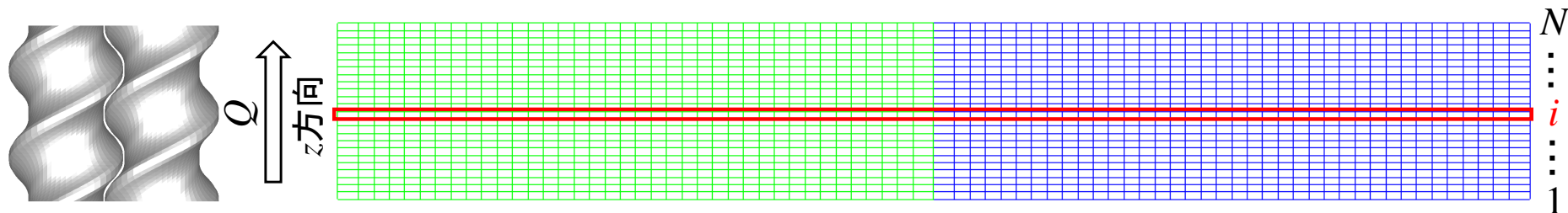
$$Q = Q_{Fi} + Q_{Ri} \text{ for } i = 1 \sim N - 1$$

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]

TSSの二軸スクリュモデル(展開図)



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]

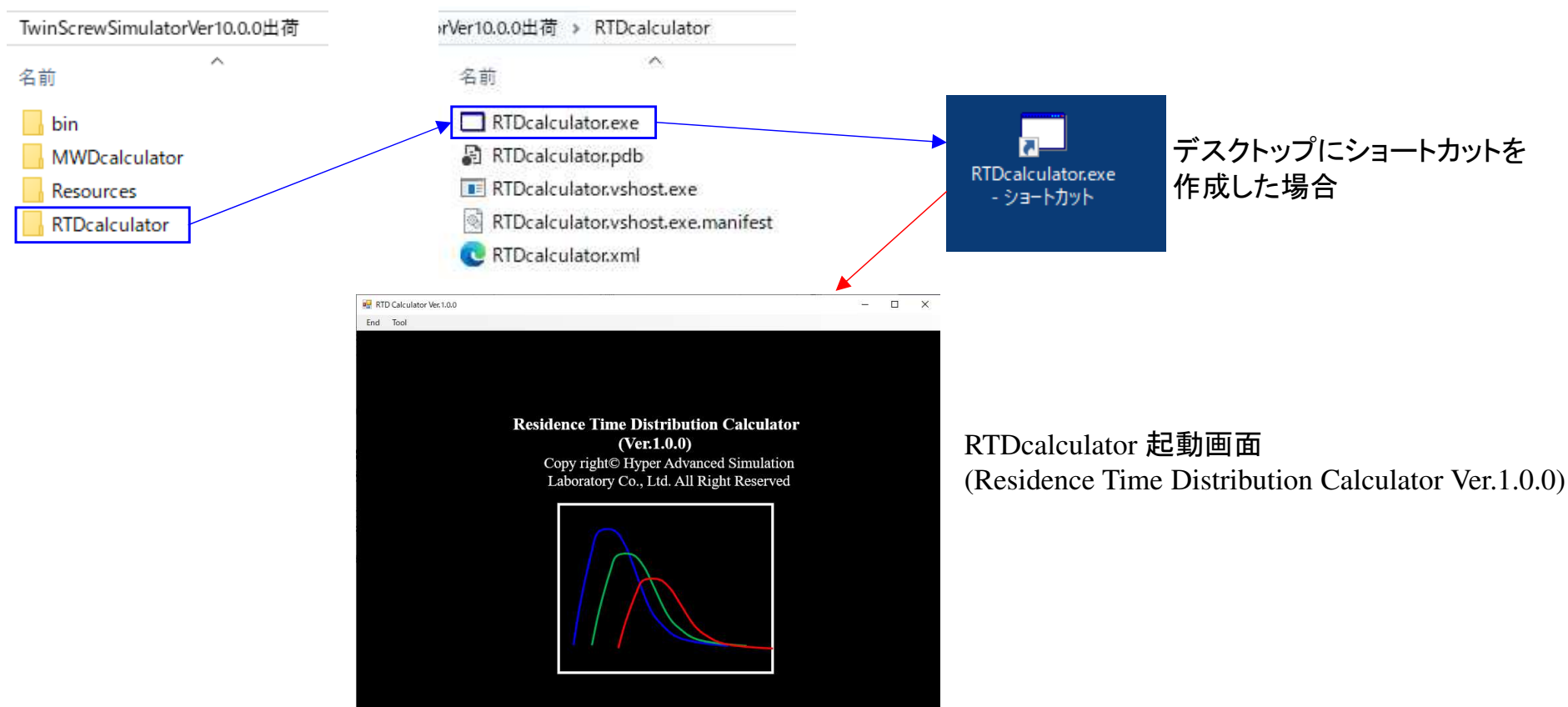
(参考) ADMでは, 以下に示す様に高ペクレ数条件下において漸近解を求めることができます. この漸近解と実測値をフィッティングすることで, 滞留時間分布や平均滞留時間, 分散などの統計情報が近似的に求められます.

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

$P_e = \frac{\bar{v}L}{D_{Dispersion}}$: 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

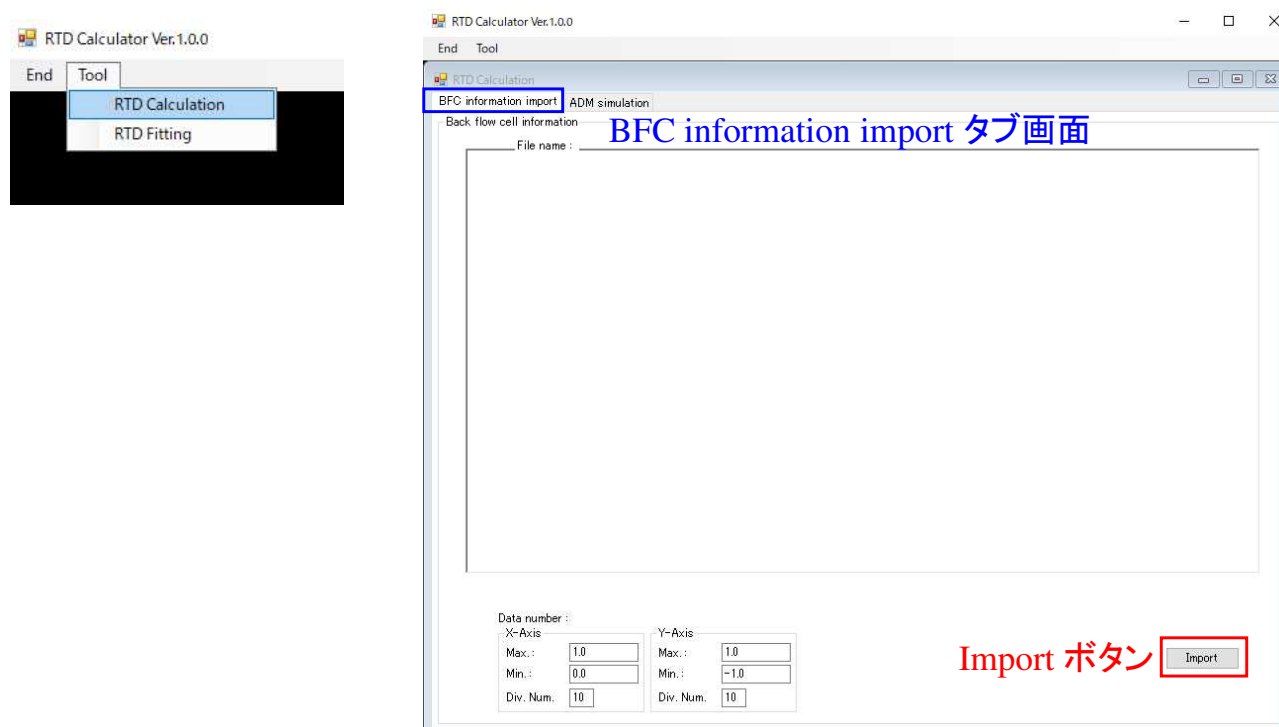
利用手順

- (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) TwinScrewSimulatorVer10.0.0¥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。

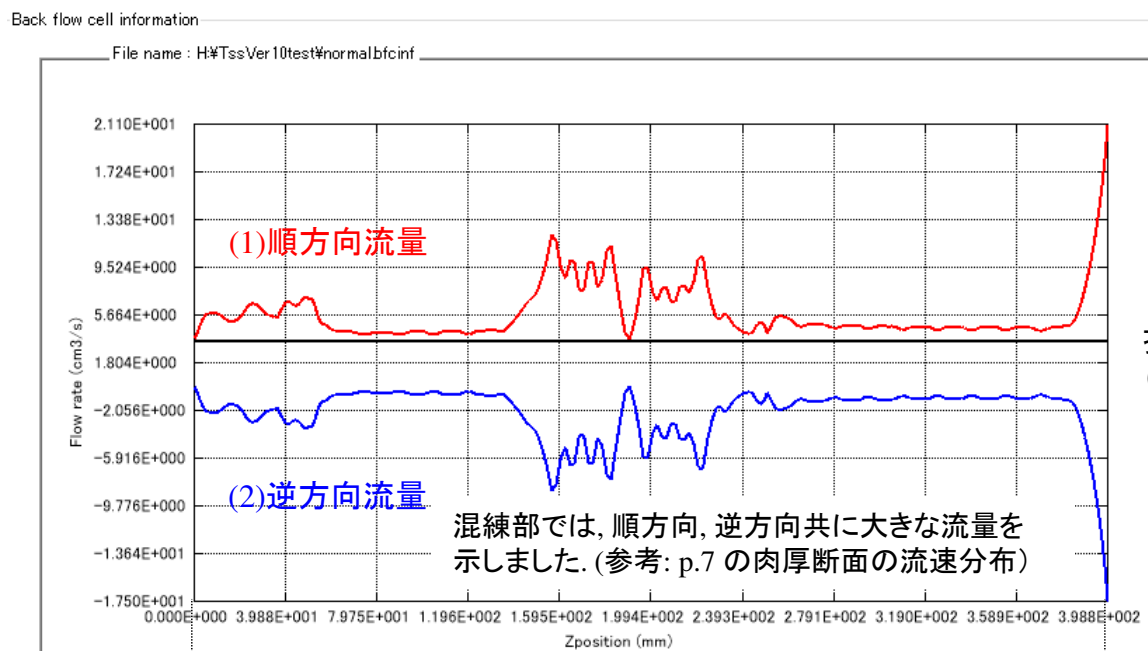


- (4) BFC information import タブ画面の右下のImportボタンをクリックして、対象の解析結果ファイル名.bfcinf を選択します。

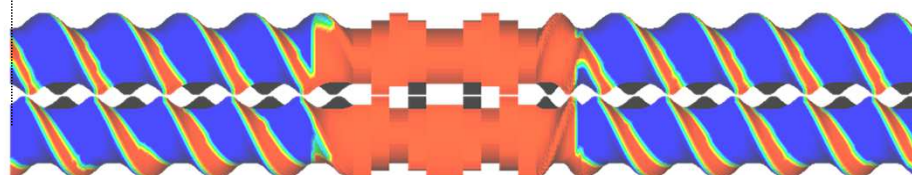
名前	更新日時
normal_vof2.bfcinf	2024/02/27 13:14
normal_rtdfvm.bfcinf	2024/02/27 10:00

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)

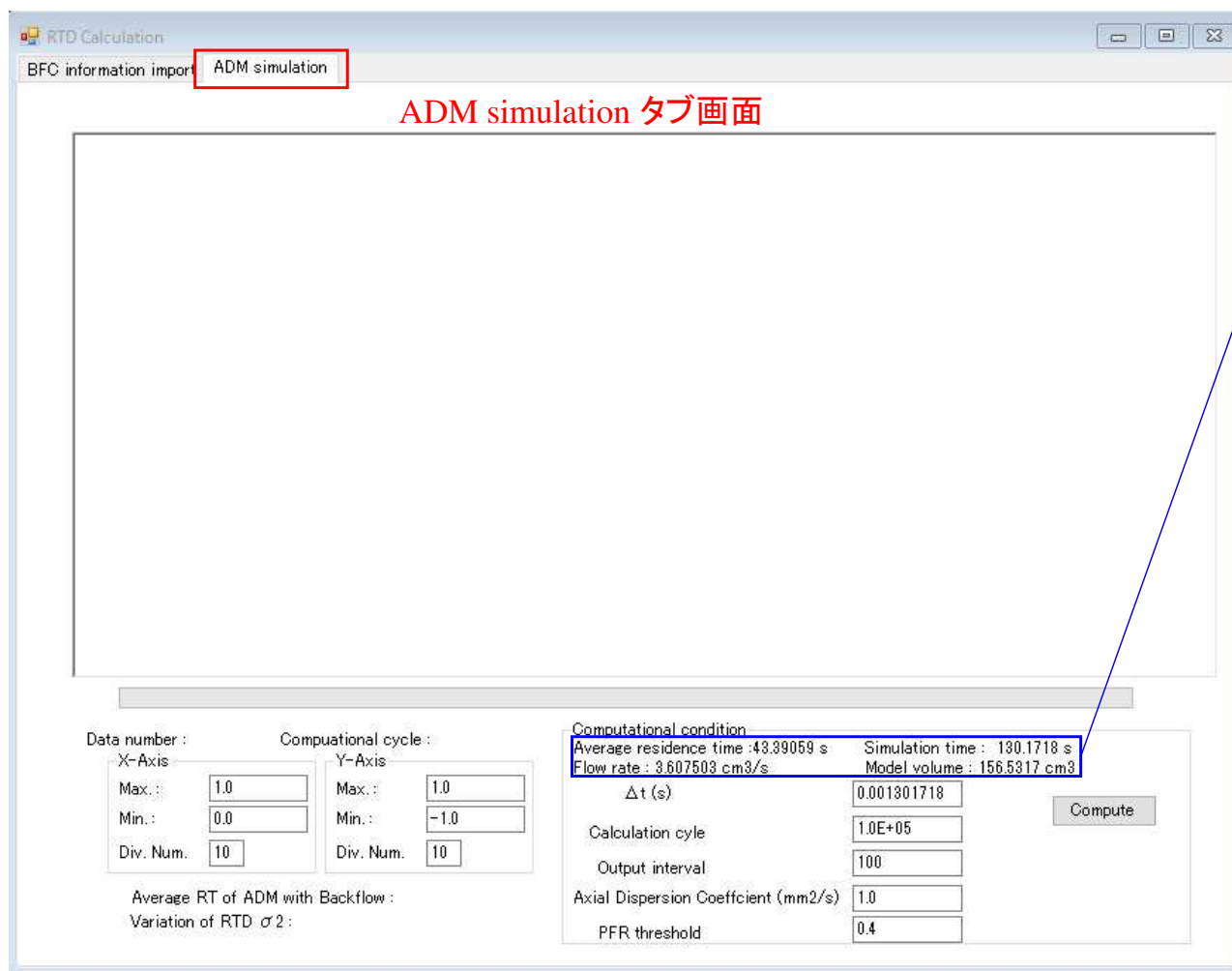


充満率分布

解析結果例として、
p.15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.

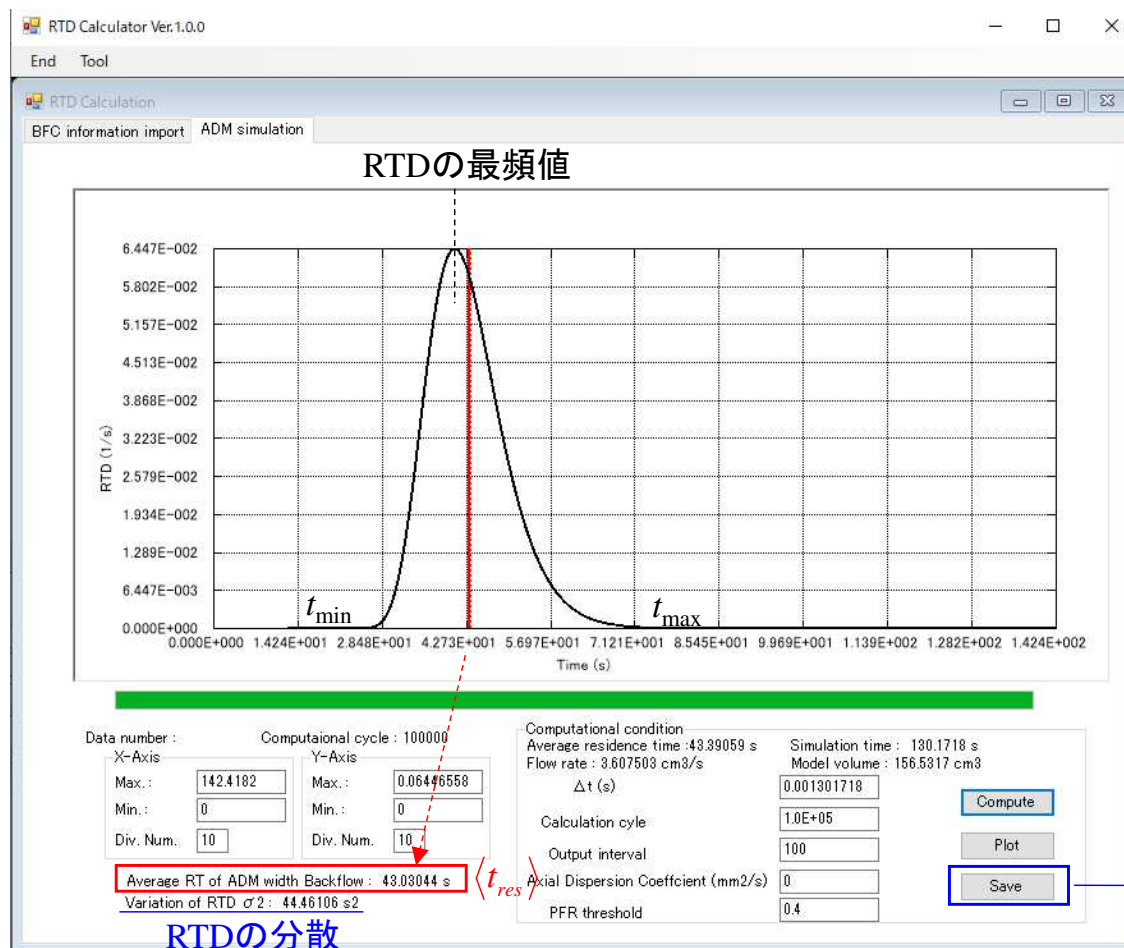
Computational condition	
Average residence time : 43.39059 s	Simulation time : 130.1718 s
Flow rate : 3.607503 cm ³ /s	Model volume : 156.5317 cm ³
Δt (s)	0.001301718
Calculation cycle	1.0E+05
Output interval	100
Axial Dispersion Coefficient (mm ² /s)	1.0
PFR threshold	0.4

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 \div 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.

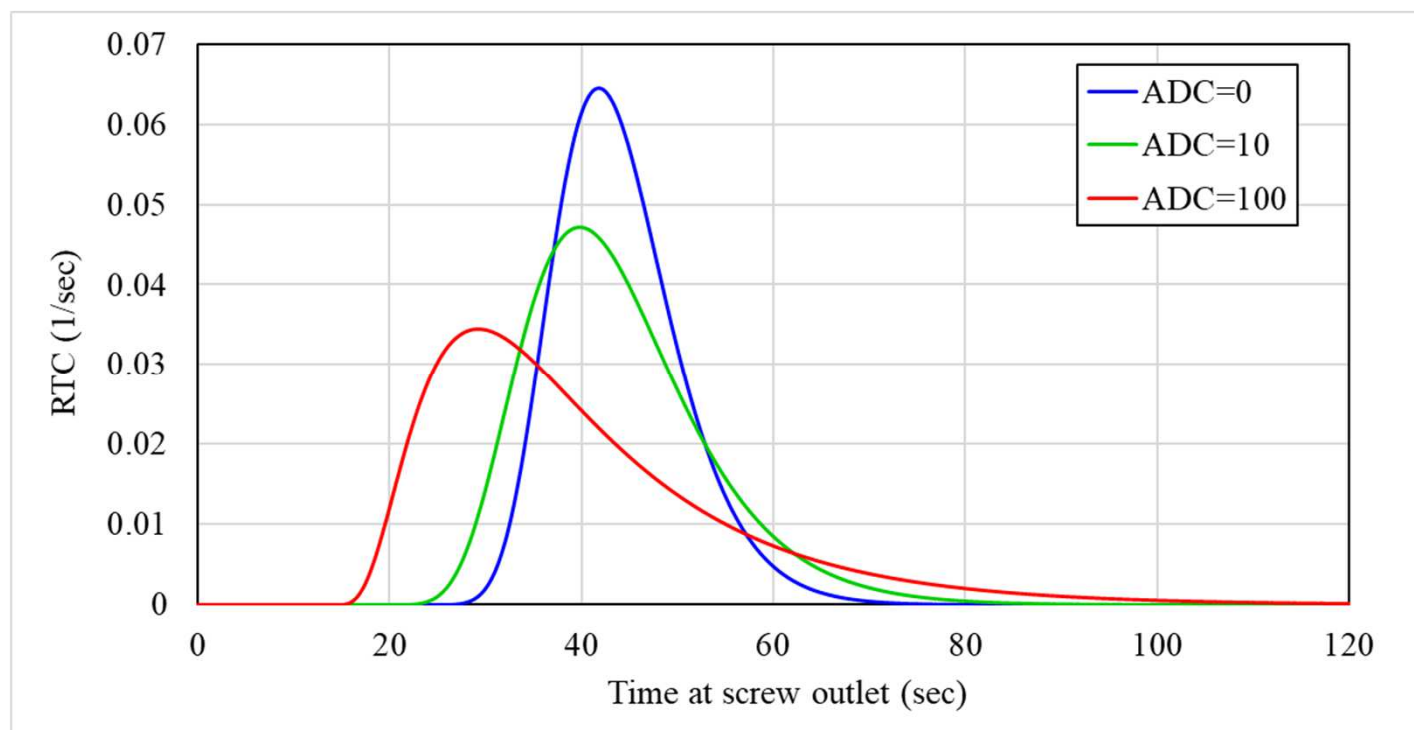
$$\langle t_{res} \rangle = \int_{t_{min}}^{t_{max}} t \times RTD(t) dt$$

したがって, RTDの最頻値は, RTDの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

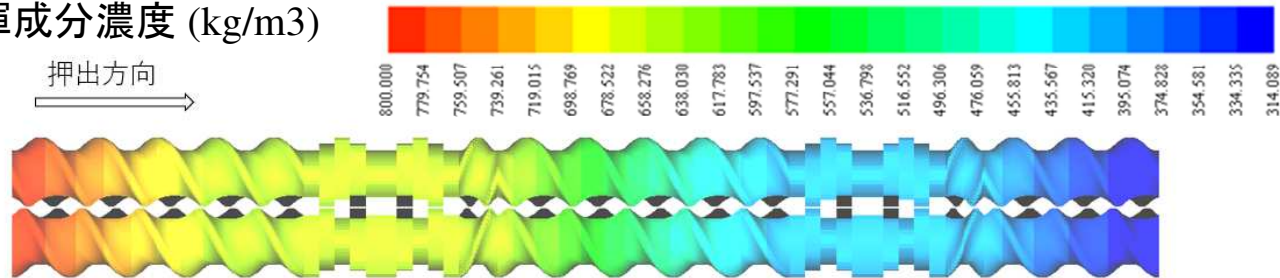
下図には、分散係数ADC: $D_{Dispersion}$ を変更して解析した結果を示します。
トレーサ粒子自身の分散を考慮していない ADC=0 と比較して、ADC=10, ADC=100では、ADCが大きいほど、RTC解析結果の分布が広がる傾向を示します。
したがって、実測結果と比較して適切なADCを設定することが重要と考えます。



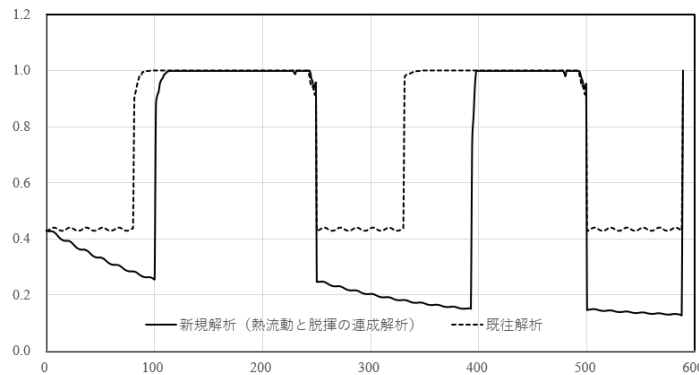
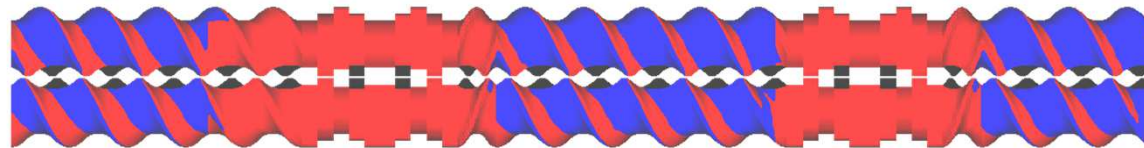
(3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能

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 (kg/m³)



○ 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)

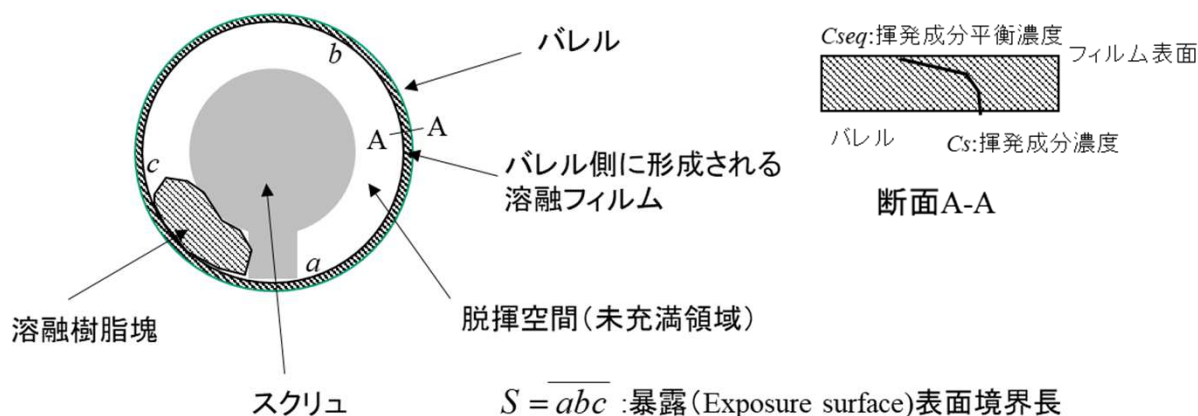
参考文献: “高分子希薄溶液における脱揮押出の基礎検討”, 千葉高充 他, E-214, プラスチック成形加工学会秋季大会(2023)

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 : 熔融樹脂押出量[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 : 熔融樹脂密度[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.

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

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

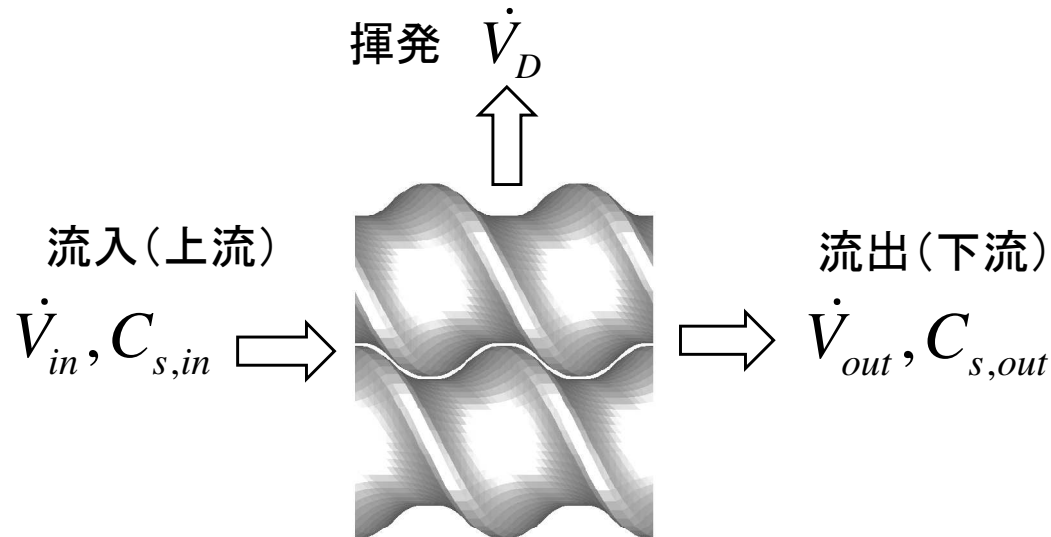
$$Q_w = Q_{sw} + Q_{pw} = \rho_s \dot{V}_s + \rho_p \dot{V}_p \quad (4)$$

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

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

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)

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

$\dot{\gamma}$:	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.

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

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

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

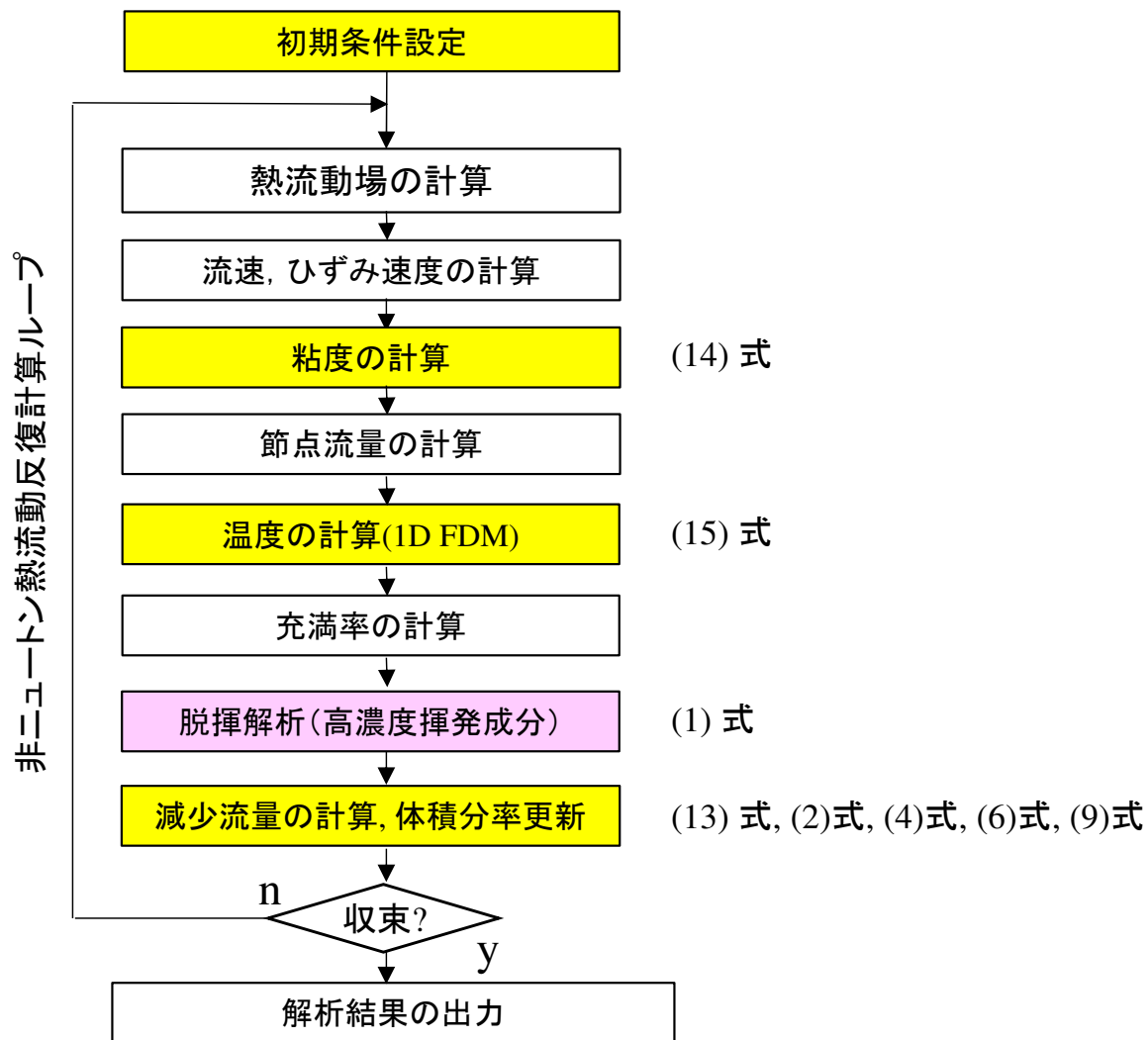
(18)* アントワン式(Antoine equation): $\log_{10} P = A - \frac{B}{(T+C)}$

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



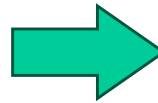
(3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能

利用手順 Surface renewal model タブに移動し、Thermal flow coupling (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。

既往脱揮解析の入力フォーム

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

(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。



新規脱揮解析の入力フォーム

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

入力情報の説明1

TwinScrewSimulator Template

Melting/Morphology model Binary System Condition Set Surface renewal model Foaming model

Surface renewal devolatilization model calculation **新規脱揮解析の入力フォーム**

Thermal flow coupling

SRM parameters for thermal flow coupling

Polymer initial weight fraction	0.1	[-]
Concentration shift parameter α	8.0	[-]
Concentration shift parameter β	6.4	[-]
Activation energy	28600	[J/mol]
χ model parameter C1	77.65	[-]
χ model parameter C2	-29626	[K]
Equilibrium concentration upper limit C3	0.97	[-]

Outlet Boundary Condition

Pressure fixed Mass Flux fixed

Un-fill analysis Old version algorithm New version algorithm

Outlet Pressure(MPa)

Output(kg/h)

Intermeshing correction

新規脱揮解析の入力フォーム

Thermal flow coupling

SRM parameters for thermal flow coupling

Polymer initial weight fraction	0.1	[-]	— 流入口に設定する高分子重量分率(例, 本項に0.1を入力し, Analysisタブで20.0 kg/hを指定した場合, 20.0×0.1=2.0 kg/hが高分子の押出量になります.)
Concentration shift parameter α	8.0	[-]	粘度式(14)内の, $\alpha, \beta, \Delta E$
Concentration shift parameter β	6.4	[-]	
Activation energy	28600	[J/mol]	
χ model parameter C1	77.65	[-]	
χ model parameter C2	-29626	[K]	
Equilibrium concentration upper limit C3	0.97	[-]	

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

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

溶媒平衡濃度のモデルパラメータ (p.35)

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

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

入力情報の説明2

Equilibrium concentration upper limit C3	0.97	[-]	
Volatile density	1000.0	[kg/m3]	揮発成分(溶媒)密度 ρ_s
Volatile heat capacity	4200.0	[J/kg/K]	揮発成分(溶媒)比熱 C_{ps}
Vapor pressure model parameter A	8.02754	[-]	式(18)内のモデルパラメータ A, B, C (アントワン係数)
Vapor pressure model parameter B	1705.616	[°C]	
Vapor pressure model parameter C	231.405	[kg/m3]	
Latent heat of vaporization	2264.0E+3	[J/kg]	<input checked="" type="radio"/> Constant <input type="radio"/> Function
Pressure of unfill region	101325.0	[Pa]	未充填領域の圧力 P_0 (p.35)
Diffusion coefficient	1.0E-9	[m2/s]	<input checked="" type="radio"/> Constant <input type="radio"/> Function
Model fitting parameter	1.0	[-]	

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 Constant 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,
Function をチェックして, 下記フォーム内に入力する.

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

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

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

Parameter α	<input type="text" value="0.1"/>	
Parameter β	<input type="text" value="1.0"/>	
Difusiion coefficient D_r	<input type="text" value="1.0E-10"/>	[m2/s]
Reference temperature	<input type="text" value="200.0"/>	[°C]

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、Analysisタブの材料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。

(1) 設定フォーム呼出し

(2) Crossモデルを選択

(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. T_b	T_r

高分子の密度, 比熱, 熱伝導率を設定する。

$\alpha, \beta, \Delta E$ は、脱揮解析入力フォーム(p.38) で設定する。

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

入力情報の説明4／スクリュ内未充填領域圧力 P_0 の設定

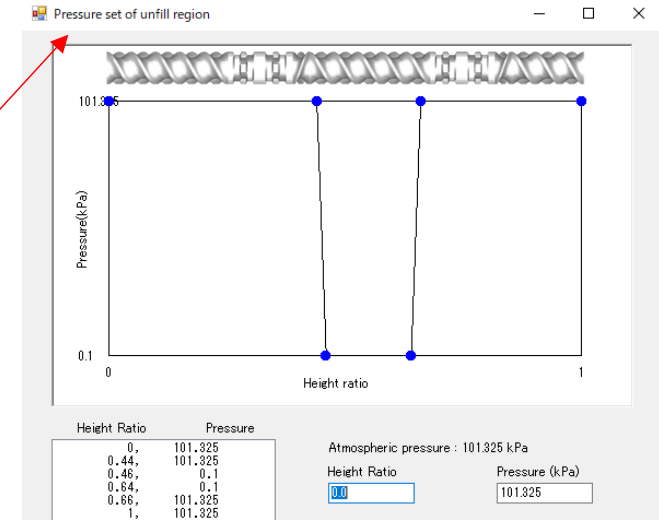
スクリュ内の未充填領域の圧力 P_0 は、脱揮解析入力フォームから一定値を設定しますが、Pressure setボタンを押すと、専用フォームが表示され、温度境界条件設定と同様の操作に従って、未充填領域の圧力 P_0 の、スクリュ長さ依存性情報の設定が可能です。

Latent heat of vaporization	2264000	[J/kg]	<input checked="" type="radio"/> Constant
Pressure of unfill region	101325.0	[Pa]	<input type="radio"/> Function
Diffusion coefficient	1E-09	[m2/s]	
Model fitting parameter	1	[-]	

未充填領域の圧力 P_0 (一定値)

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

Pressure set



(補足) 既往の脱揮解析においても、揮発成分平衡濃度 C_{seq} のスクリュ長さ依存性を考慮できるようになりました。

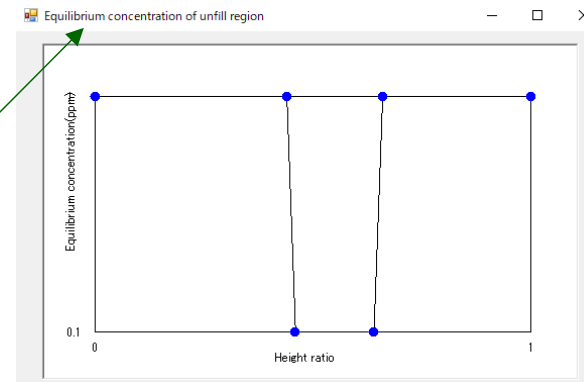
Surface renewal devolatilization model calculation
 Thermal flow coupling

SRM parameters

Volatile concentration	50	ppm
Equilibrium volatile concentration	1	ppm
Diffusion coefficient	1E-10	m2/s
Model fitting parameter	1	
Calculation start Z-position(mm)	260	

脱揮開始位置の指定

Equilibrium volatile set

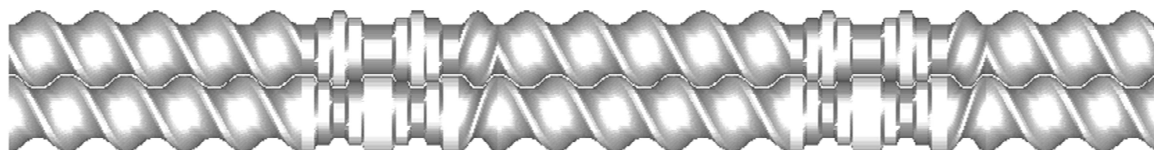


(3) 高濃度揮発成分の脱揮解析機能

テスト解析例 (サンプルファイル: ver10testsample¥testsrn_100rpm.tscal)

- ・スクリュモデル: バレル径20mm, L/D=14.75 (590mm)

⇒ Flow direction



- ・解析方法: 未充填解析, 脱揮解析/熱流動連成

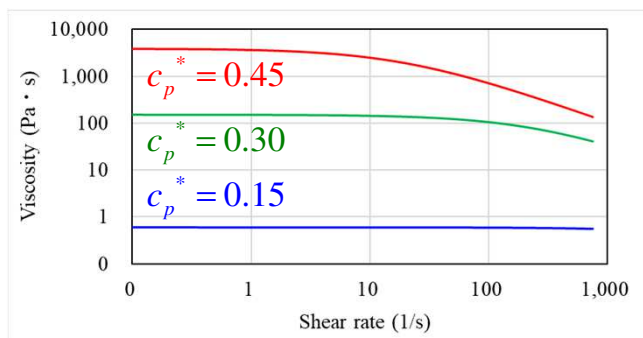
- ・成形条件: 押出量/ 高分子溶液 20 kg/h,
(高分子 2 kg/h,
溶媒(水) 18 kg/h)

出口圧力/ 0.0 MPa

スクリュ回転数/ (A) 50rpm, (B)100rpm

- ・バレル温度: 150°C Max.

- ・樹脂データ: 粘度式(14)を利用 (下図)



Surface renewal devolatilization model calculation

Thermal flow coupling SRM parameters for thermal flow coupling

Polymer initial weight fraction [-]

Outlet Boundary Condition

Pressure fixed Mass Flux fixed

Un-fill analysis Old version algorithm New version algorithm

Outlet Pressure(MPa)

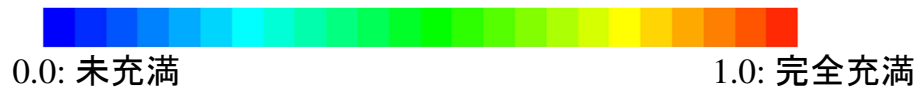
Output(kg/h)

他のパラメータはデフォルトの設定値を使用しました。

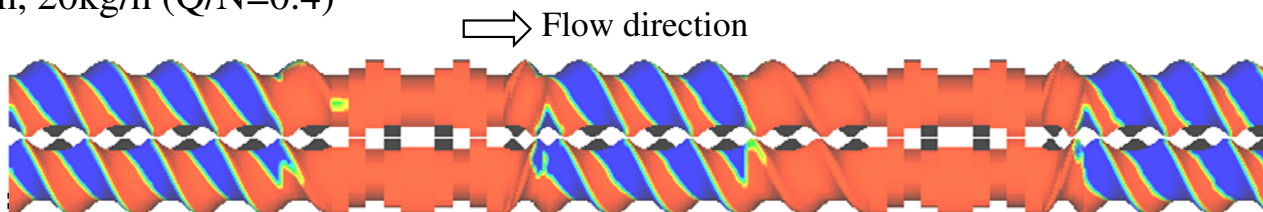
(左図) 粘度の高分子体積分率(C_p^*)依存性@150°C

解析結果

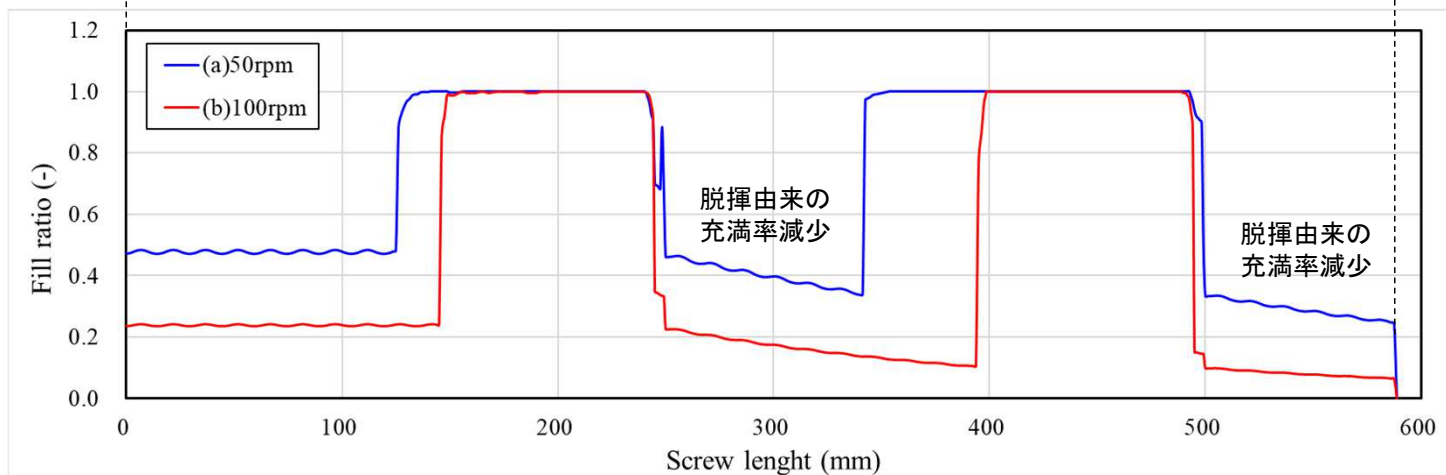
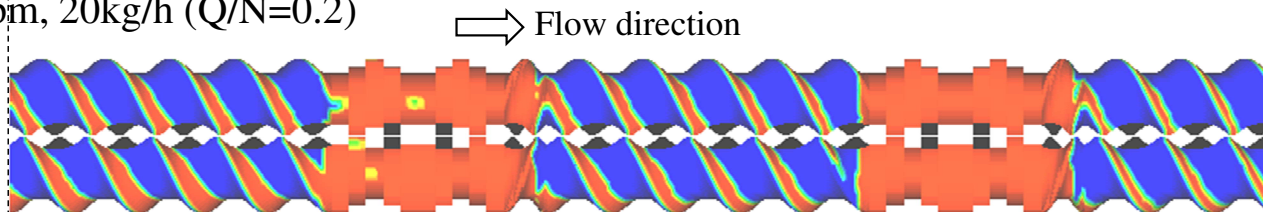
○スクリュウ内充填率分布 (.suminf)



(A) 50rpm, 20kg/h (Q/N=0.4)

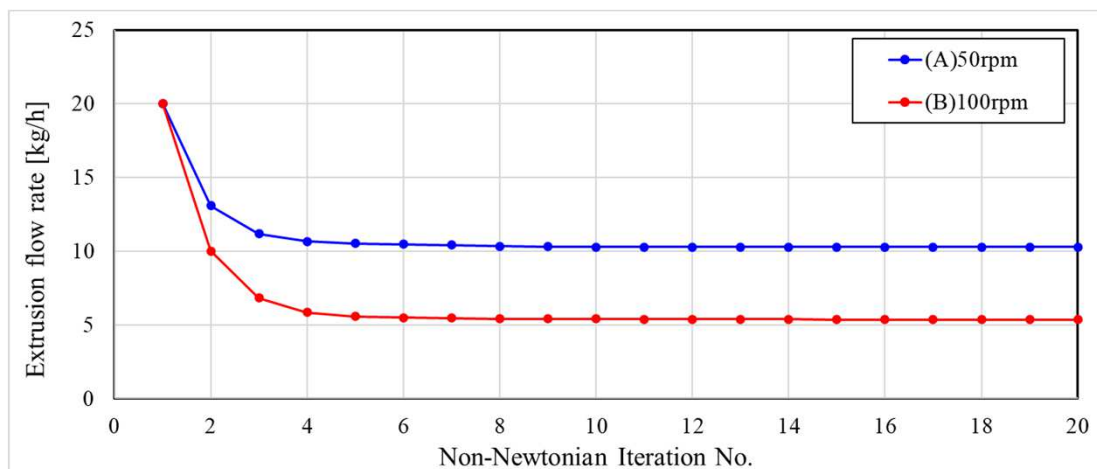


(B) 100rpm, 20kg/h (Q/N=0.2)



解析結果／押出流量の収束性

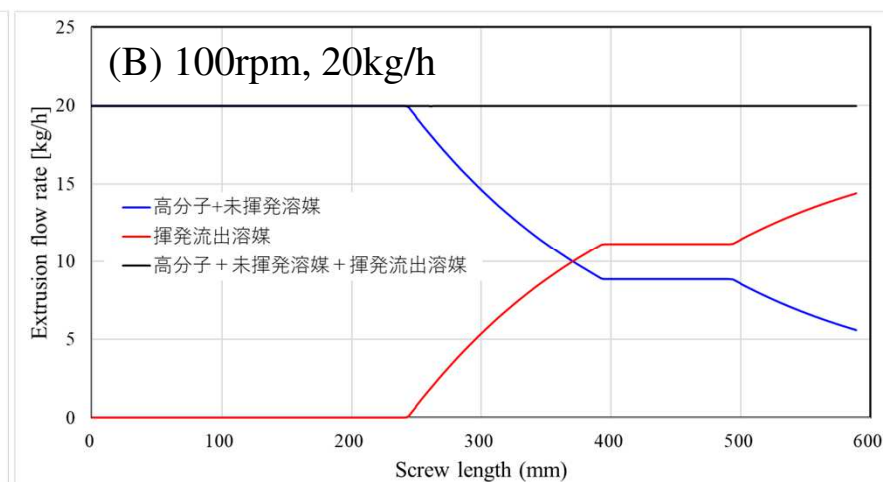
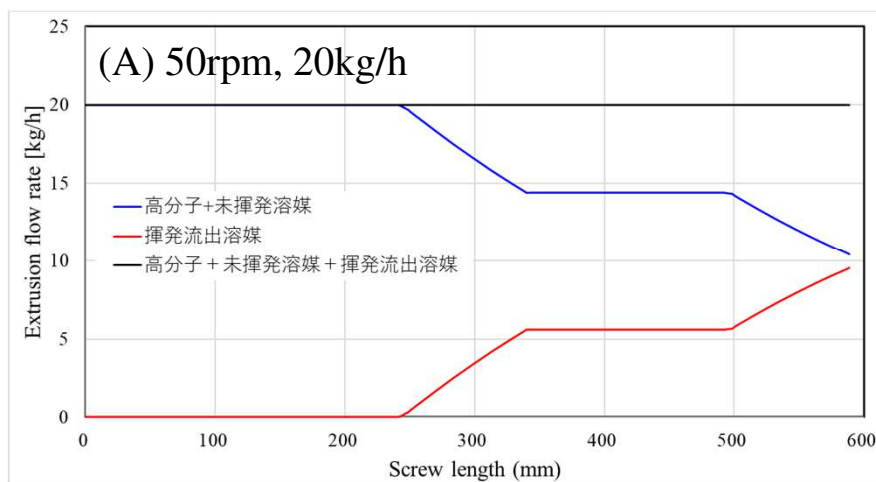
(1) 非ニュートン反復計算回数 vs. 押出流量 (.calinf)



高分子溶液の残存流量: 10.28 kg/h
(揮発流出流量: 9.72 kg/h)

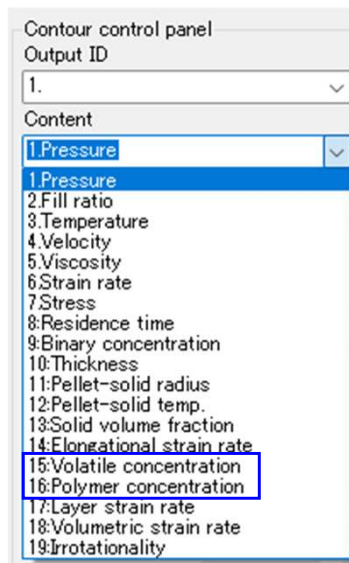
高分子溶液の残存流量: 5.35 kg/h
(揮発流出流量: 14.65 kg/h)

(2) 押出流量のスクリュ長依存性 (.srmcalcouple)



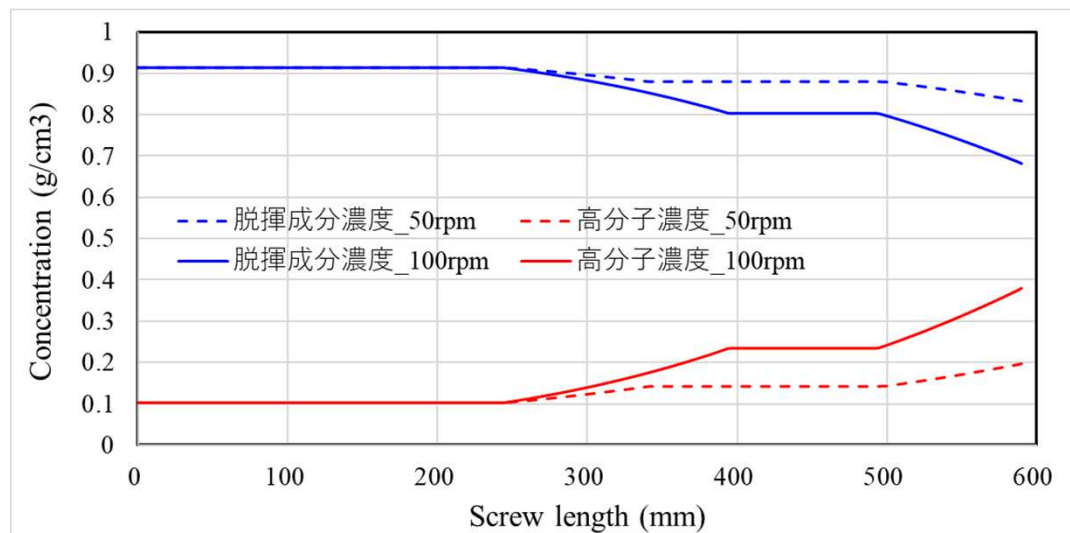
解析結果／濃度分布 [g/cm³]

・コンター図

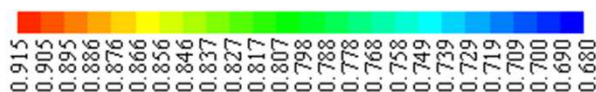


15: 脱揮成分(溶媒)濃度
16: 高分子濃度

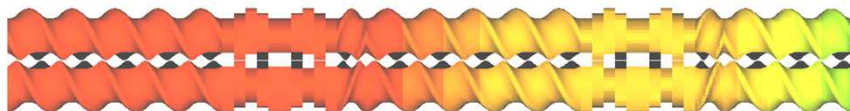
・グラフ図 (.srminf)



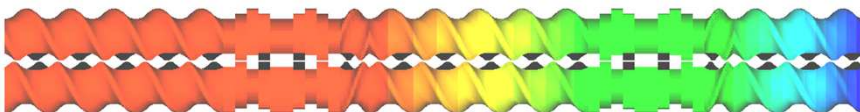
○溶媒濃度



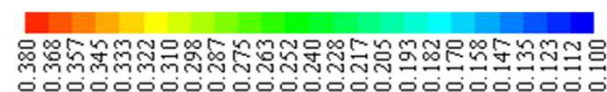
(A) 50rpm, 20kg/hz



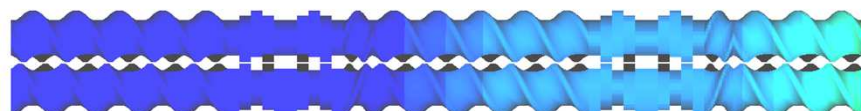
(B) 100rpm, 20kg/h



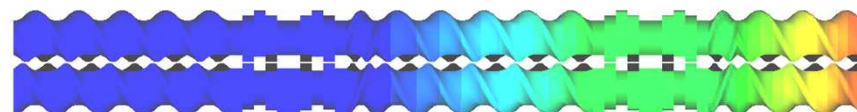
○高分子濃度



(A) 50rpm, 20kg/hz

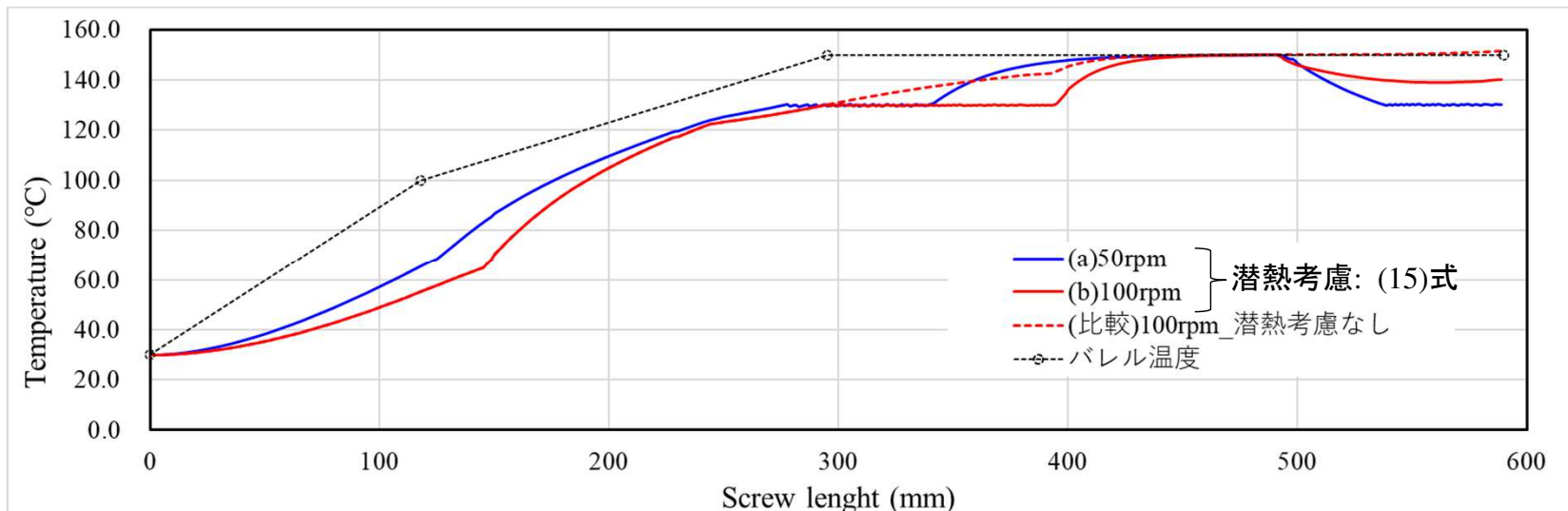


(B) 100rpm, 20kg/h

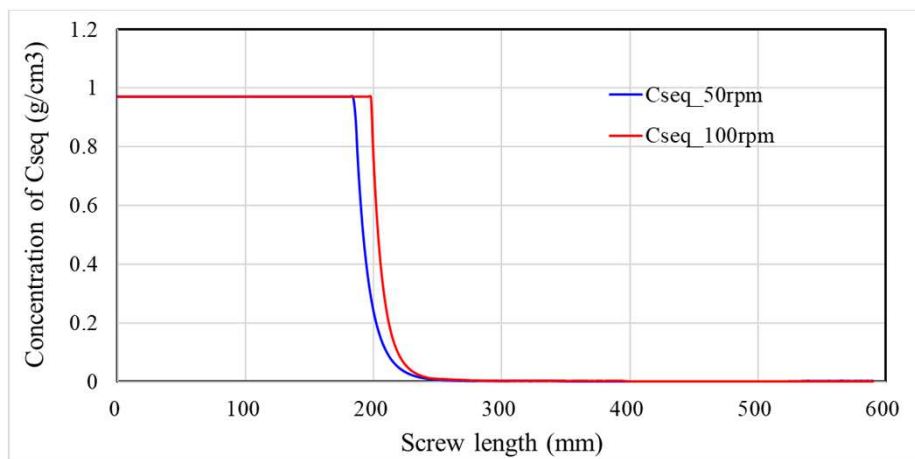


解析結果

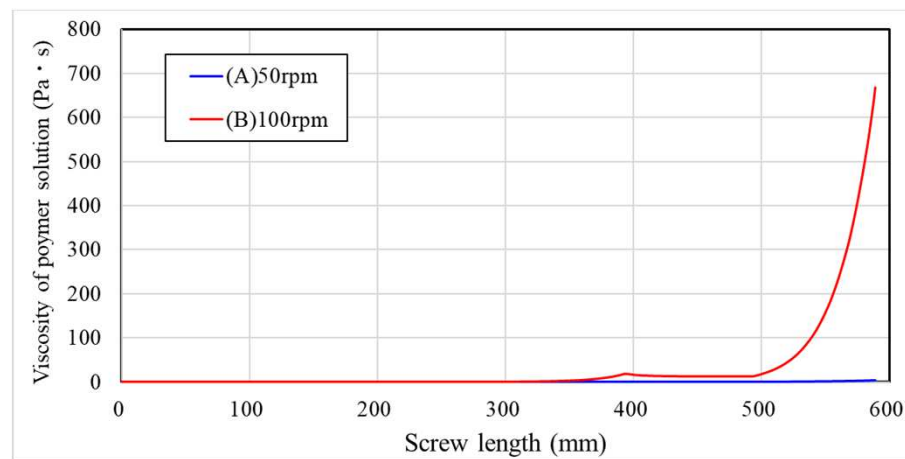
○温度分布[°C] (.suminf)



○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、二軸スクリュ内の履歴積分を用いて予測する解析機能(p.51-58)。

【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.56-)。

⇒ 別ソフトとしてご提供(*)

Parameter	Value	Unit
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
$$\frac{dM_w}{dt} = -k(M_w - M_{wsc})$$

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

(*)TSS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、TSS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.

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

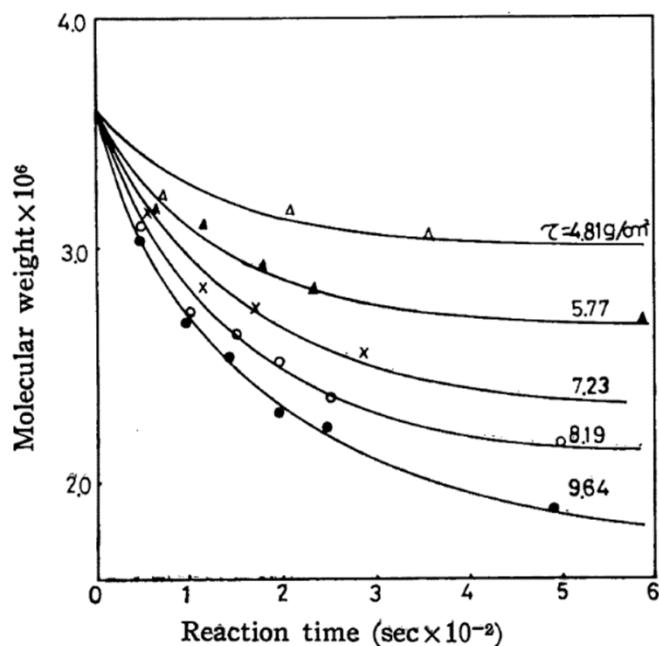
$$\tau = \eta\dot{\gamma}$$

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

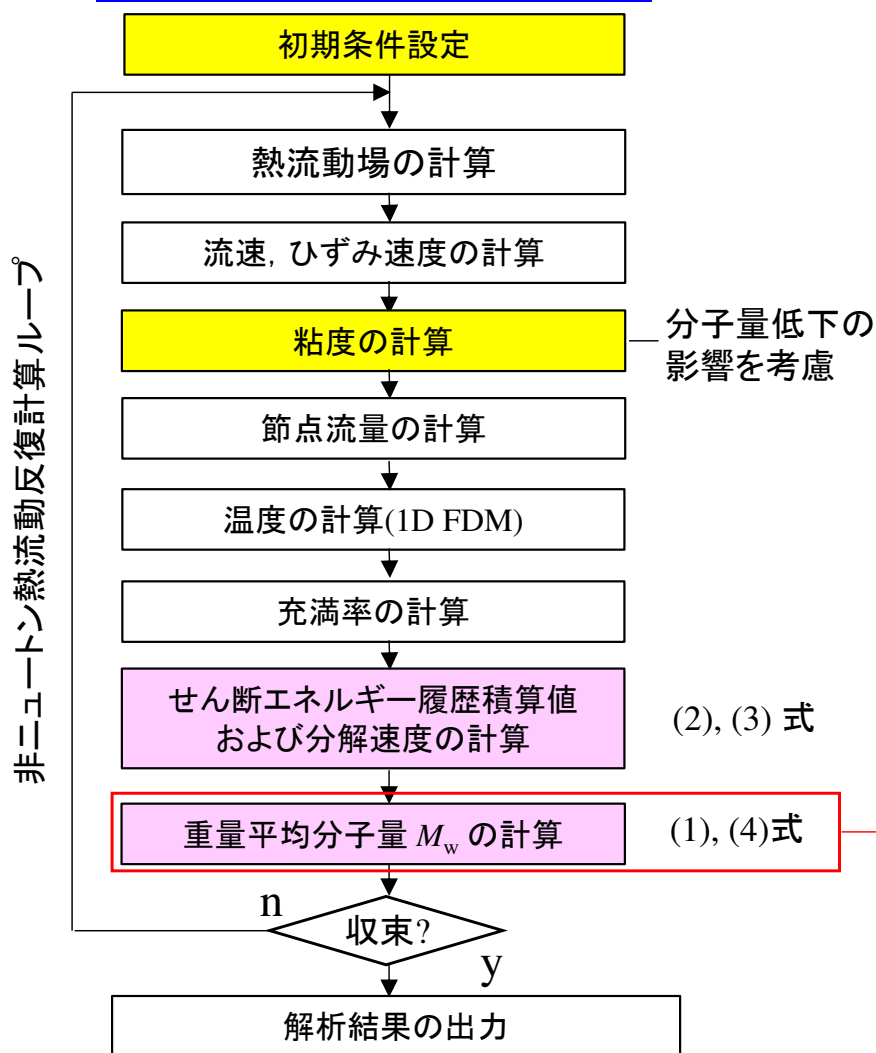
Polymer: ポリ α -メチルスチレン

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

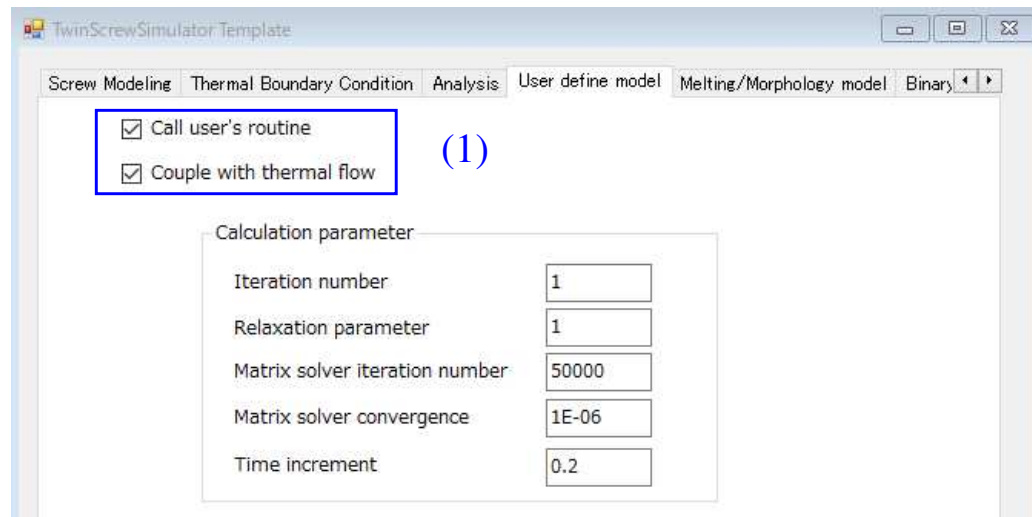


(*) せん断エネルギーの履歴積算値は、p.11の(2)滞留時間の新規解析機能に記載した、肉厚層毎に定常移流方程式を解析する方法を採用しました。これにより、重量平均分子量を、肉層毎に個別に評価します。
また、熱流動場との連成解析により、分子量の変化を粘度計算に反映させることが可能です。

【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) User define modelタブに移動し, Call user's routine と Couple with thermal flow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.89~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 : 1.2 [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。

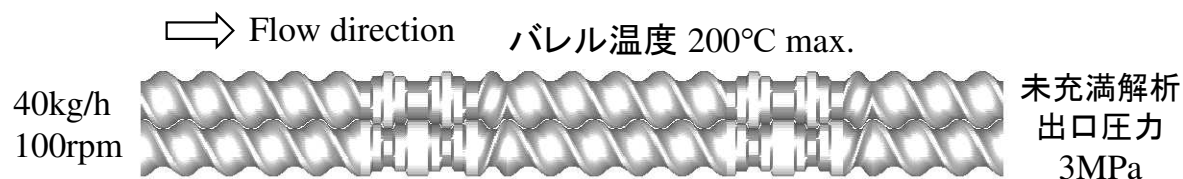
$$\eta = \eta_0 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

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]

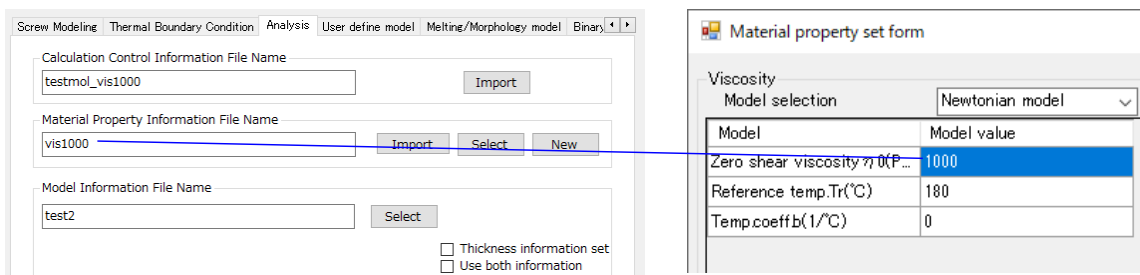
二軸スクリュ内での
分子鎖の切断により、
 $M_{w0} \geq M_w$

*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: ver10testsample¥testmol_vis1000.tscal)



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)



vis1000の粘度式

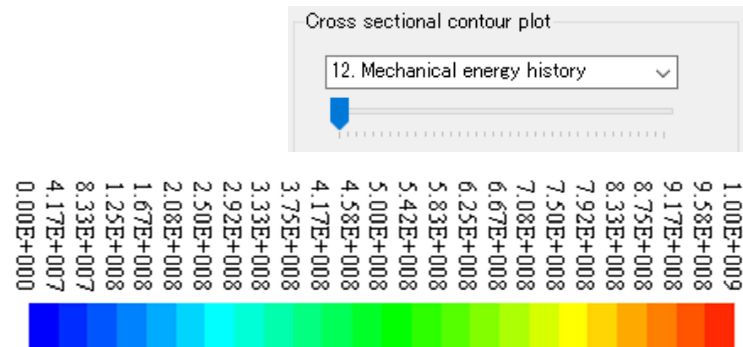
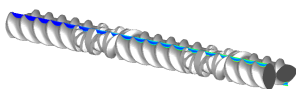
$$\eta = 1000 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4}$$

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] (.crosscont)

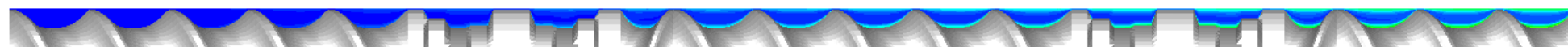
$$\int_0^t \eta(\tau) \dot{\gamma}(\tau)^2 d\tau$$

軸方向断面

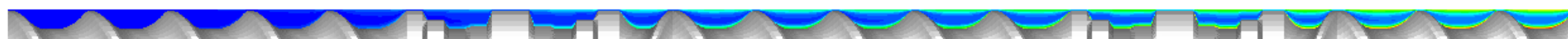


(A) vis1000

⇒ Flow direction



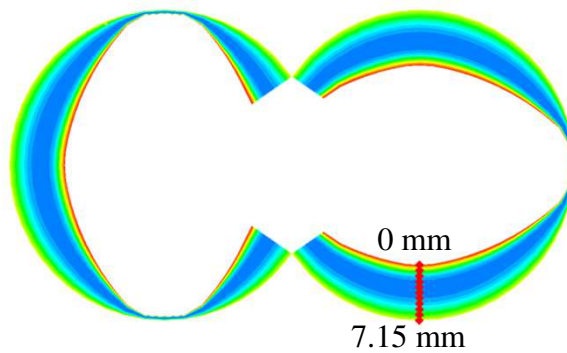
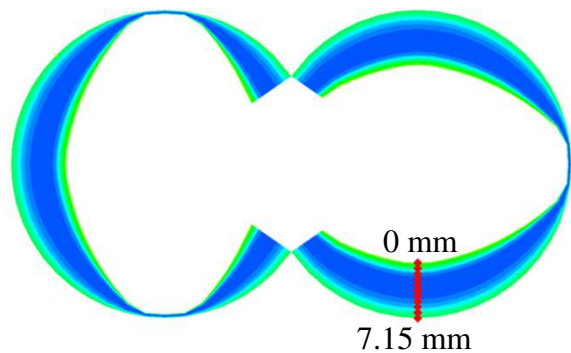
(B) vis2000



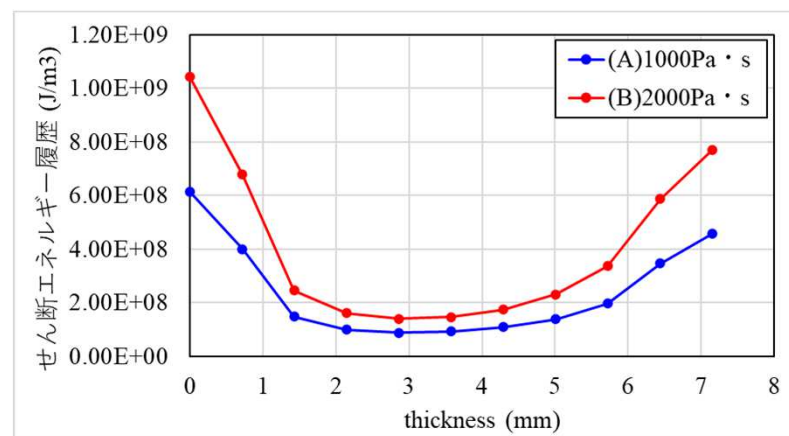
スクリュウ出口のxy断面

(A) vis1000

(B) vis2000



滞留時間が長く(p.16参照), せん断速度が大きいスクリュウ面およびバル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]

350000.0
345789.2
341578.4
337367.6
333156.8
328946.0
324735.2
320524.4
316313.6
312102.8
307892.0
303681.3
299470.4
295259.7
291048.9
286838.1
282627.3
278416.5
274205.7
269994.9
265784.1
261573.3
257362.5
253151.7
248940.9



40: Layer- 1 Mw
41: Layer- 2 Mw
42: Layer- 3 Mw
43: Layer- 4 Mw
44: Layer- 5 Mw
45: Layer- 6 Mw
46: Layer- 7 Mw
47: Layer- 8 Mw
48: Layer- 9 Mw
49: Layer- 10 Mw

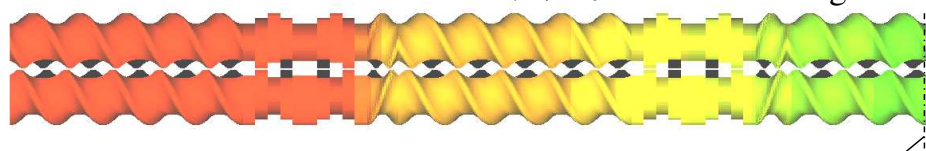
$\langle M_w \rangle_l$
(Layer-1: スクリュ側
Layer-10: バレル側)

50: Average Residence Time
51: Average Mw $\langle M_w \rangle_{avg}$

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

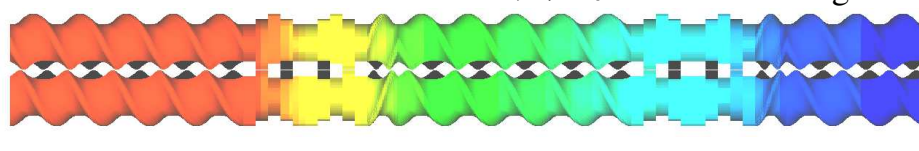
(A) vis1000

スクリュ出口: 3.1×10^5 kg/mol

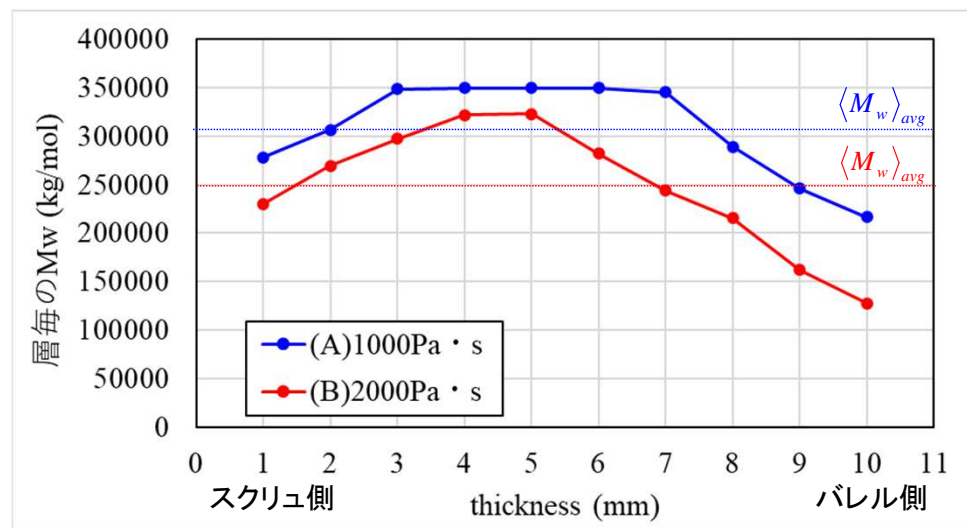


(B) vis2000

スクリュ出口: 2.5×10^5 kg/mol



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

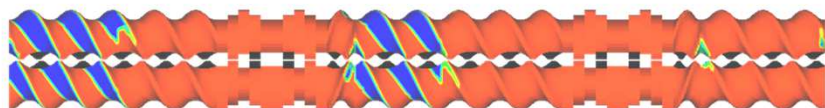


- せん断エネルギーの小さな流路中心層では分子量低下傾向が小さく、スクリュ表面およびバレル表面に近い層ほど大きな分子量低下を示しました。
- 樹脂の粘性が高い(B)vis2000の方が、せん断エネルギーが大きいため(前ページ)、各層において(A)vis1000よりも大きな分子量低下を示しました。

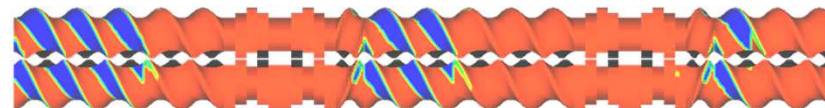
テスト解析結果

○ 充満率分布 [-]

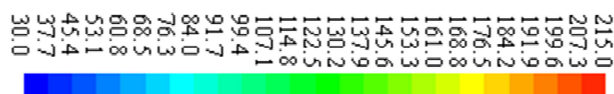
(A) vis1000



(B) vis2000

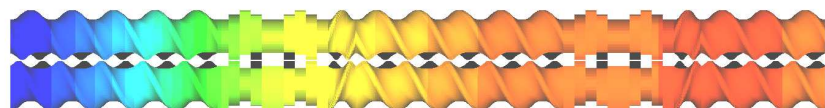


○ 温度分布 [°C]



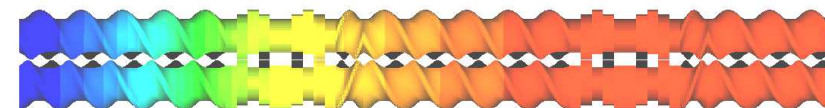
(A) vis1000

スクリュ出口: 208°C

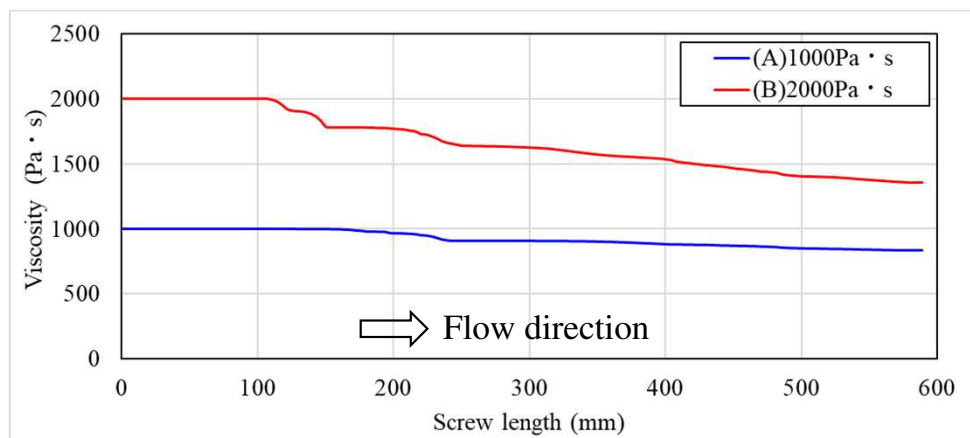


(B) vis2000

スクリュ出口: 213°C



○ 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。

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

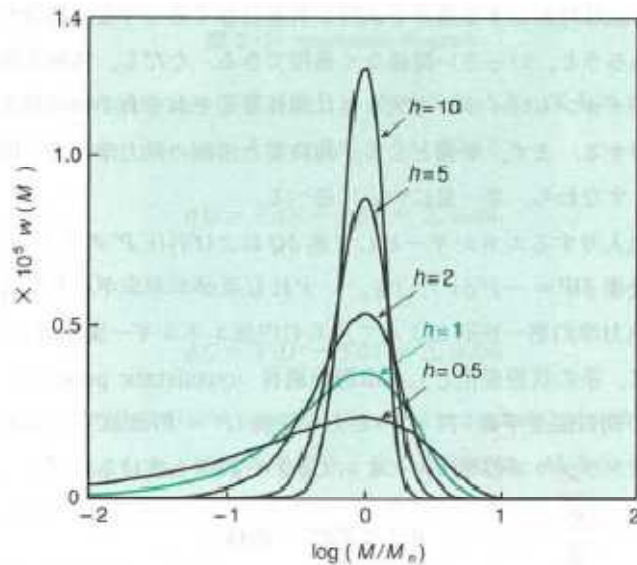


図 2-1 シュルツ-ジムの重量分布関数の形。
 $h=1$: 最も確からしい分布

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

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

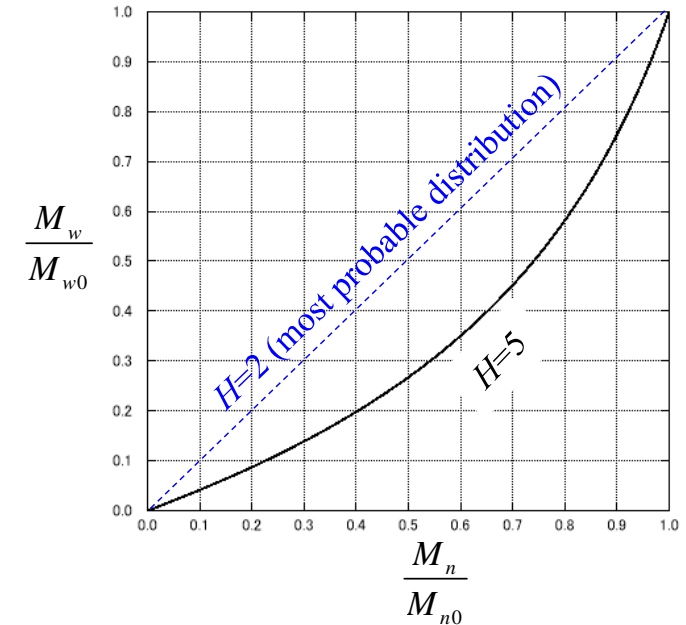
主鎖がランダムに分解する場合, 参考文献3(p.47)において, 以下の関係式(6)-(8)が提案されています.

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

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

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

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, TSS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.51-52 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.

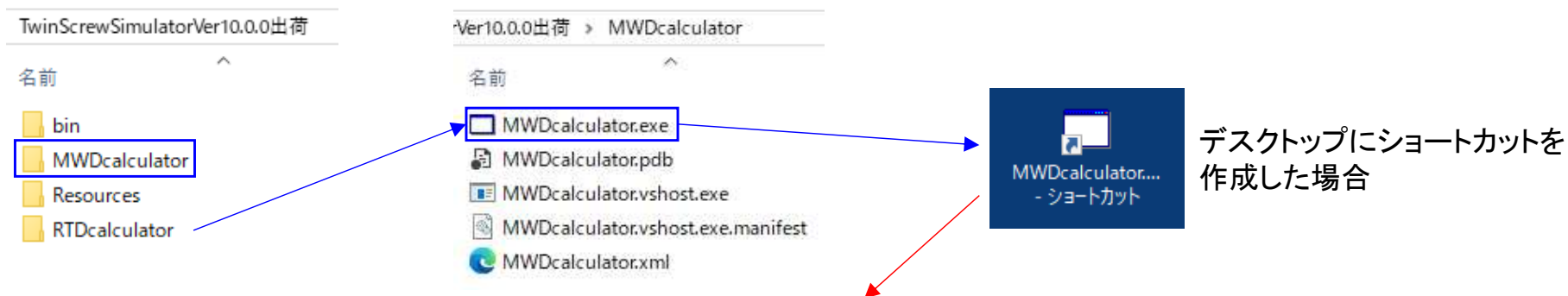
(参考) p.52 のテスト解析例: testmol_vis1000.mwexitinf

M_{w0}	—	350000.0		
肉厚層毎の分子量 $\langle M_w \rangle_l$	1	, 278289.1	, 2.5936155E-02	流量重み付け関数 $\sum_{l=1}^{ndiv} \langle W_q \rangle_l = 1$
	2	, 306253.0	, 6.2837221E-02	
	3	, 348444.7	, 8.8365540E-02	
	4	, 349751.5	, 0.1068230	
	5	, 349749.6	, 0.1199482	
	6	, 349285.4	, 0.1283674	
	7	, 345090.2	, 0.1319712	
	8	, 289202.2	, 0.1297738	
	9	, 245714.0	, 0.1188363	
	10	, 216266.5	, 8.7141149E-02	
$\langle M_w \rangle_{avg}$	—	312520.856744408		

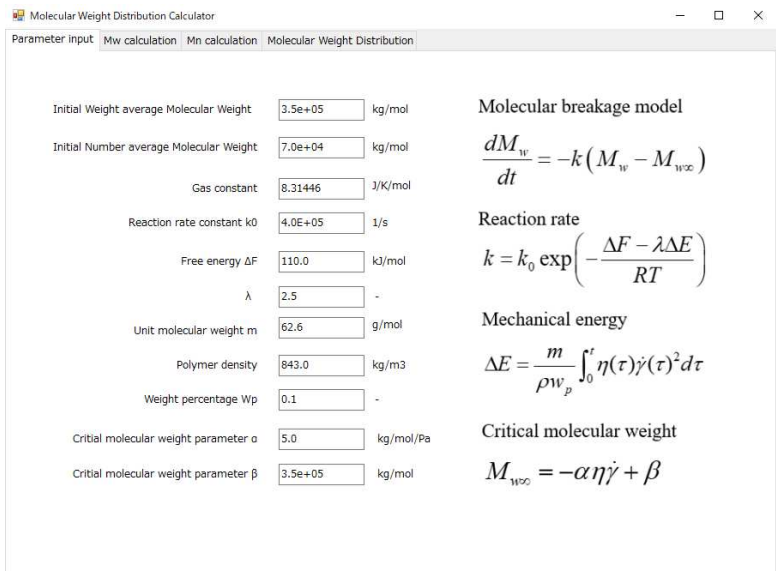
$$\langle M_w \rangle_{avg} = \sum_{l=1}^{ndiv} \langle W_q \rangle_l \langle M_w \rangle_l$$

利用手順

(2) TwinScrewSimulatorVer10.0.0¥RTDcalculator フォルダ内に存在する、MWDcalculator.exe を起動します。



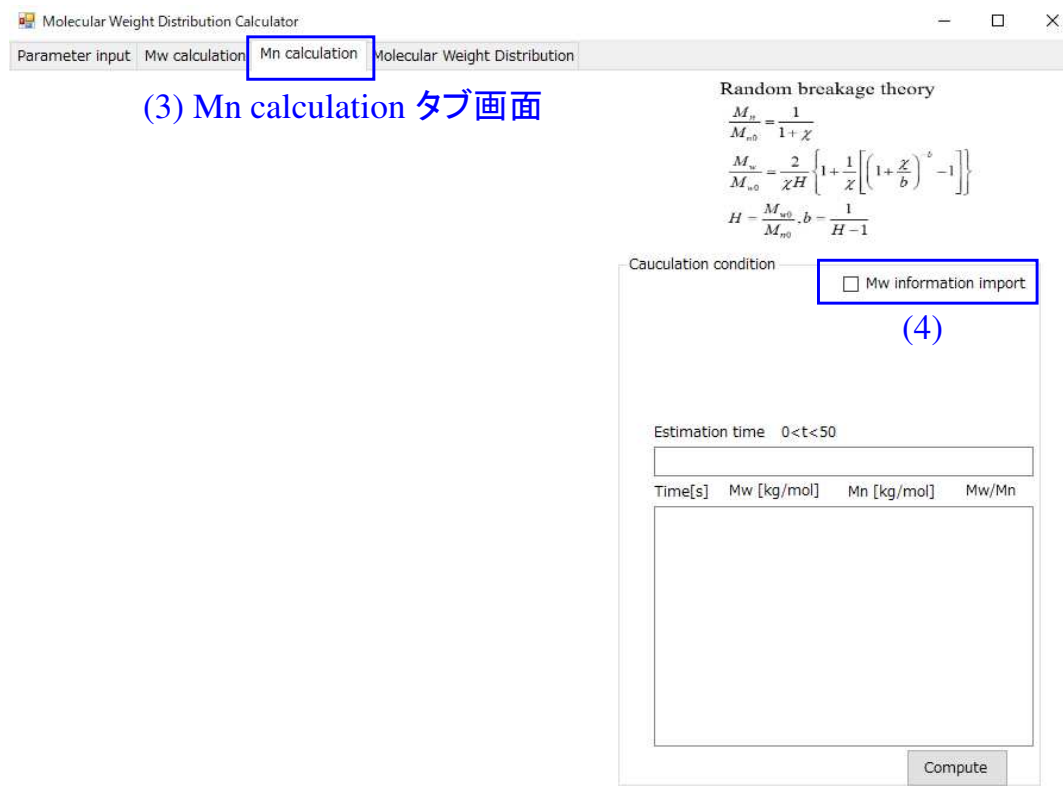
デスクトップにショートカットを作成した場合



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.57)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。

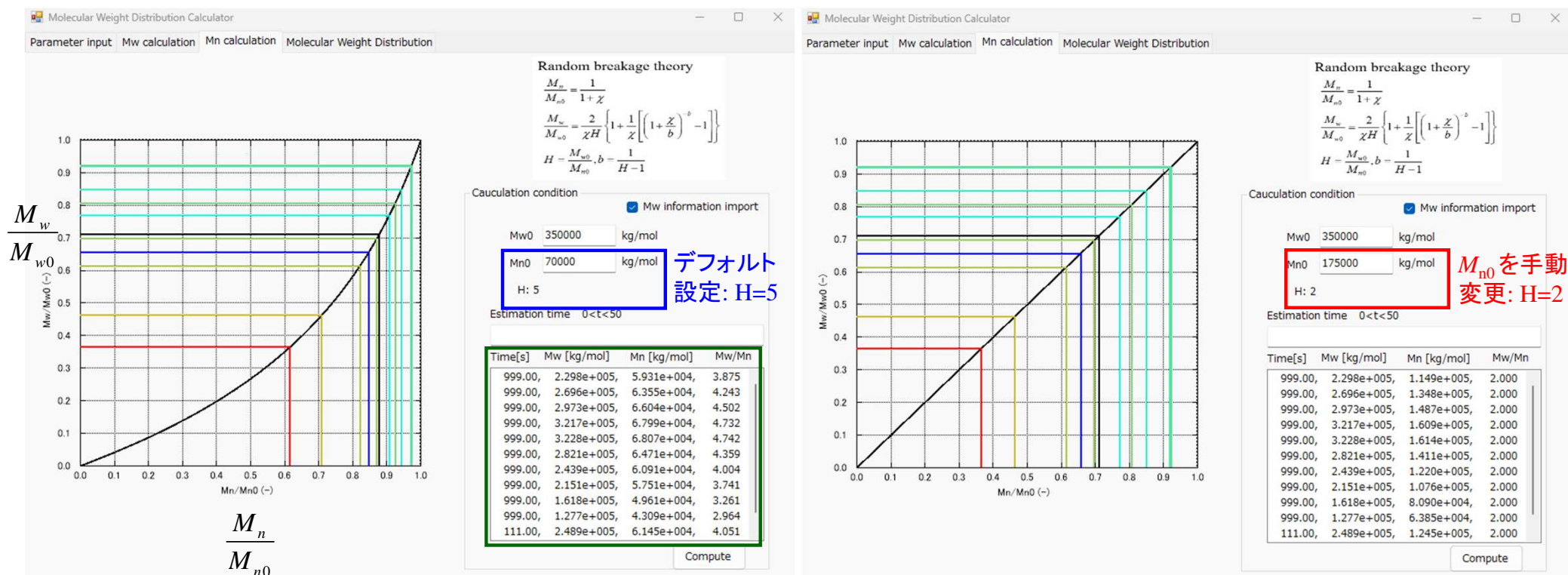
Mw information import

名前

testmol_vis2000.mwexitinf 使用例: (B)vis2000
 testmol_vis1000.mwexitinf

利用手順

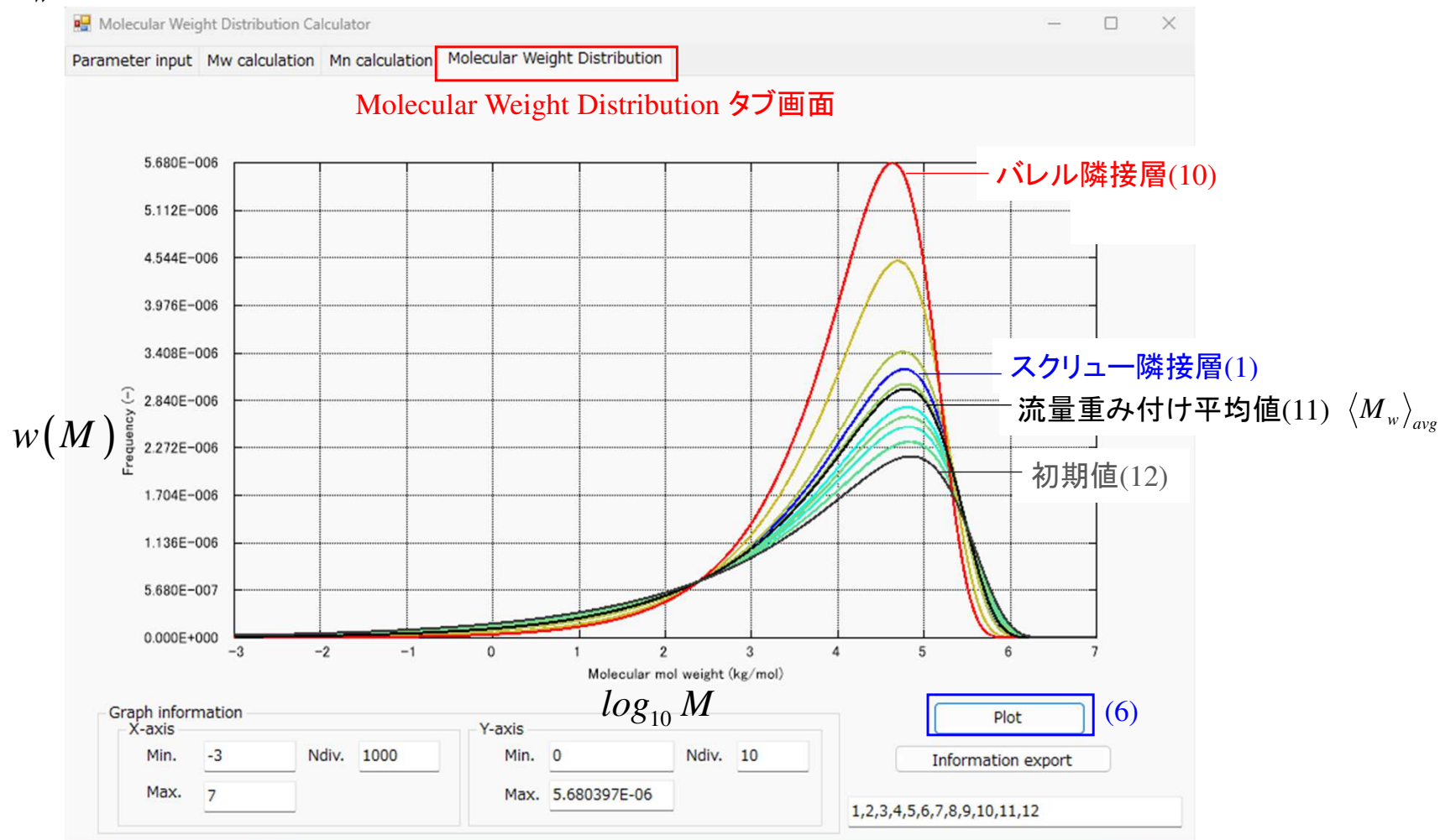
(5) .mwexitinf を読み込むと、中央のグラフには、肉厚層毎の解析結果 $\langle M_w \rangle_i$ と $H (= M_{w0}/M_{n0})$ に基づく M_n の予測曲線がプロットされます。Calculation condition 内の M_{n0} の値を変更すると、自動的に変更が反映されます。



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

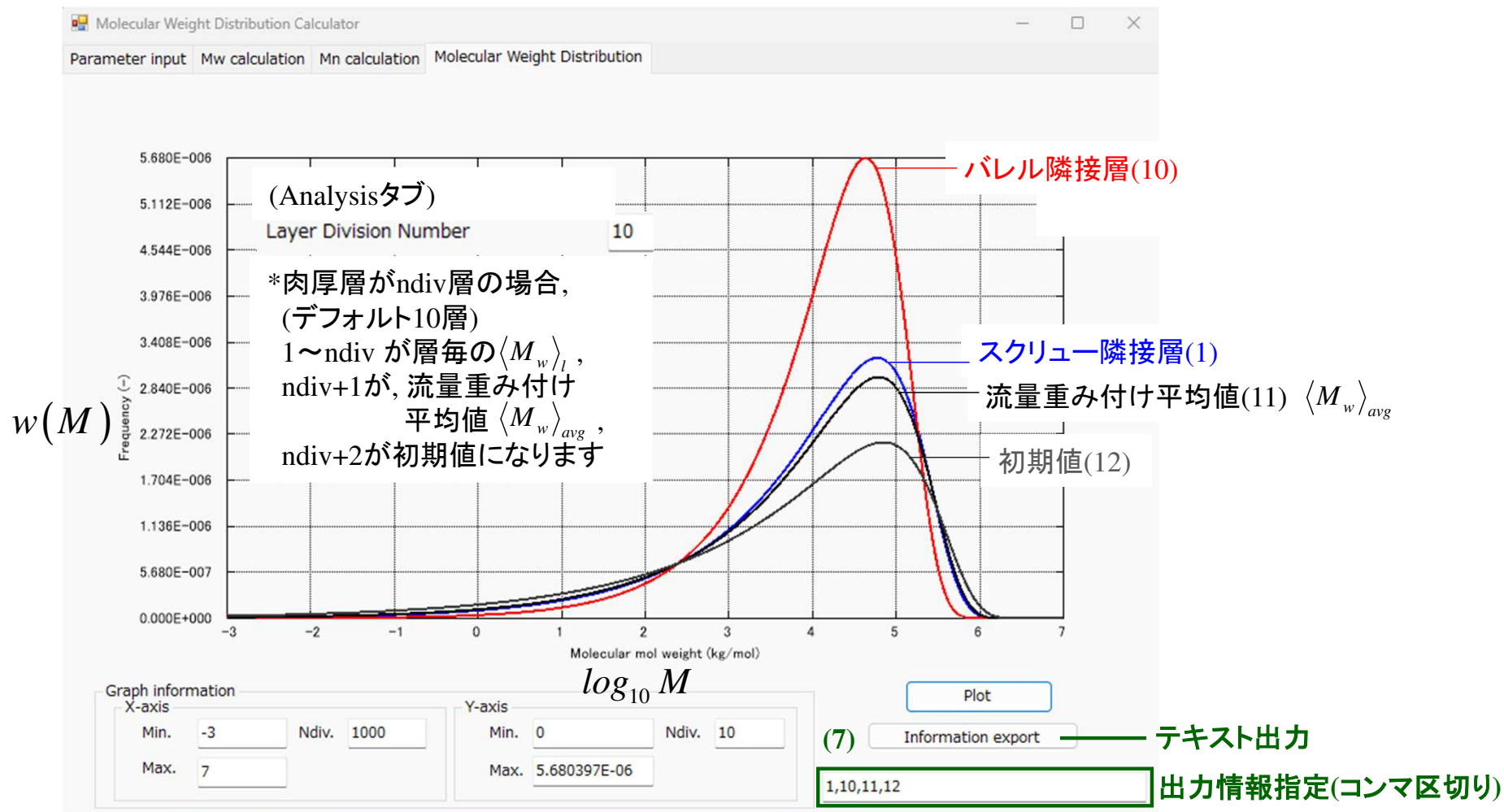
利用手順

- (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

【改良1】3D FVM (有限体積法) 温度解析

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)で解析する方法を実装しました。

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

移流項 拡散項 ソース項

\mathbf{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

従来の温度解析(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

● 2.5D FEM

Thermal-Flow Calculation Control Parameters	
Non-Newtonian Iteration Number	10
Layer Division Number	10
Temperature SOR iteration number	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

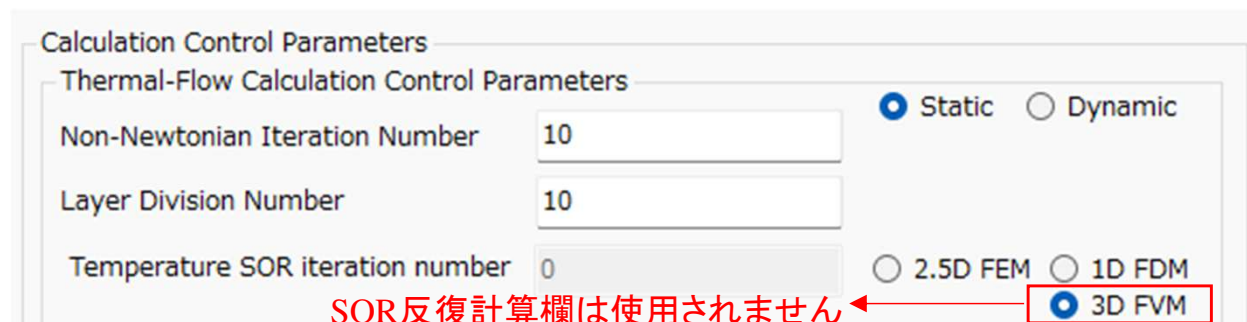
● 3D FVM 追加

Thermal-Flow Calculation Control Parameters	
Non-Newtonian Iteration Number	10
Layer Division Number	10
Temperature SOR iteration number	0

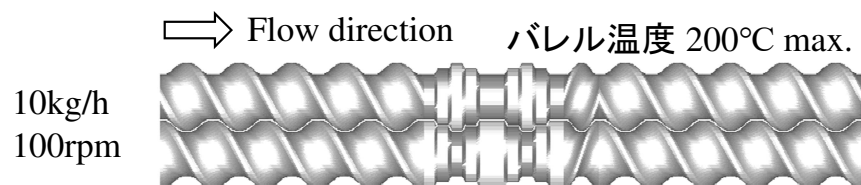
離散化に要するメモリ容量は大きくなるが、1回で収束解が求まる。

3D FVM (有限体積法) 温度解析の利用手順

Analysisタブ画面の解析条件設定にて、3D FVMのラジオボタンをチェック状態にします。それ以外の項目は従来通りに設定し、条件保存および解析を実施します。



テスト解析例 (サンプルファイル: ver10testsample¥normal_tempcal3d.tscal)



未充填解析
出口圧力
1MPa

○解析内容: 温度解析方法の比較

(A) 2.5D FEM

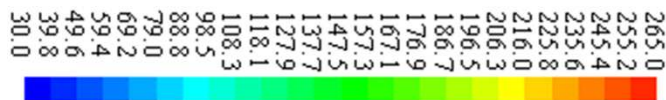
SOR 反復計算: 10, 50, 100, 150回

(B) 3D FVM

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

テスト解析結果／温度分布 [°C]

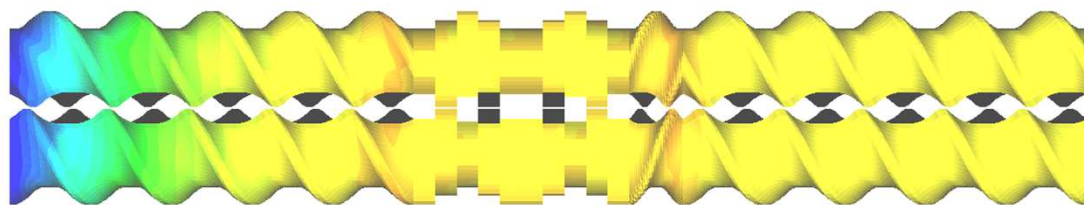


(1) 2.5D FEMの収束性

*SOR 10回

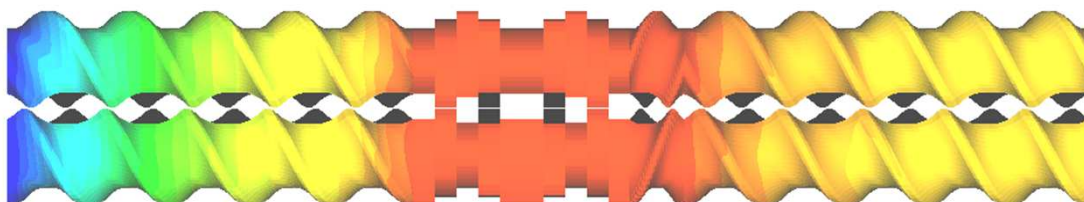
⇒ Flow direction

スクリュウ出口: 212°C



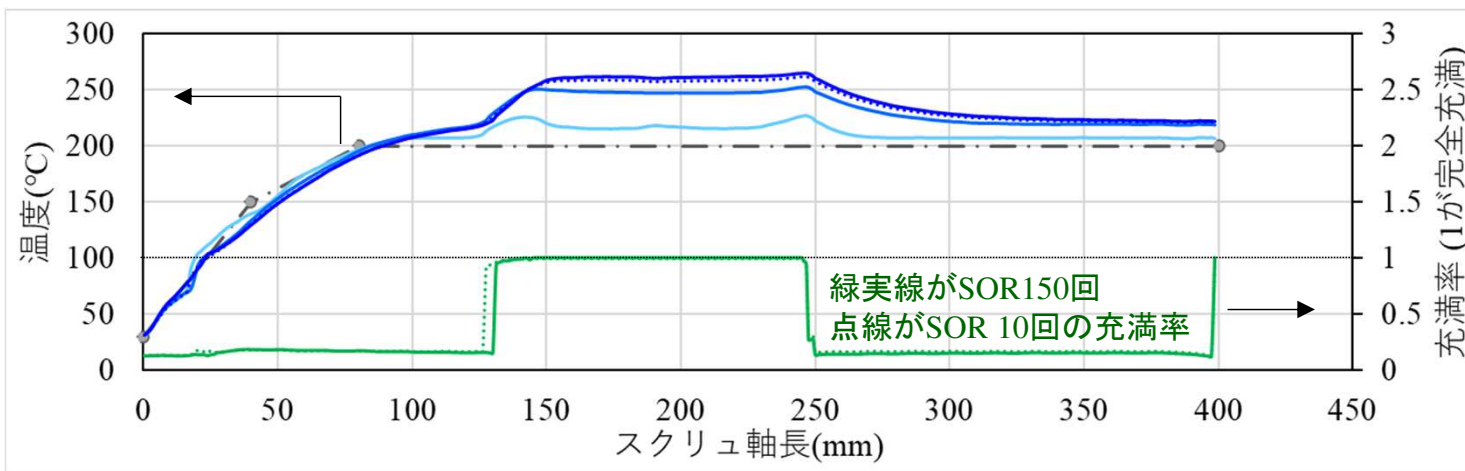
*SOR 150回

スクリュウ出口: 222°C

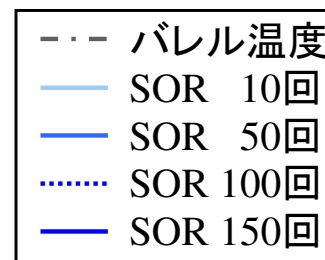


・本解析では、SOR反復計算が10回(デフォルト条件)の場合、全体的にバレル温度に近い温度分布を示しました。

・そこで他の条件は変えずに、SOR反復計算回数を増加させた結果、スクリュウ下流側への熱エネルギーの移流が十分に発達したSOR100-150回において、温度分布の変化がほぼなくなり、収束解に到達しました。そのときの温度分布は、充填率の高い混練部では樹脂のせん断発熱量が大きくなるためにバレル温度よりも約60°C高くなり、スクリュウ出口で222°Cになる分布を示しました。



左図: .suminf の軸方向平均温度



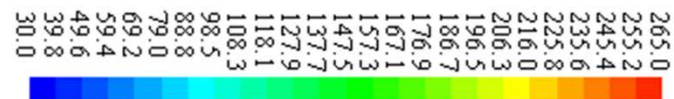
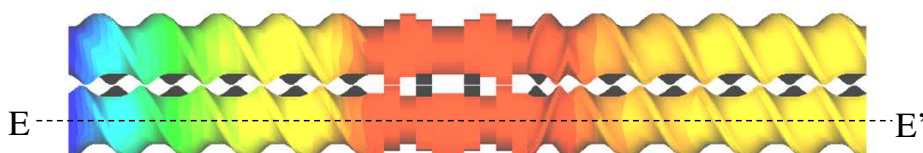
テスト解析結果／温度分布 [°C]

(2) 2.5D FEM と 3D FVM の温度分布比較

(A) 2.5D FEM (SOR 150回, 計算時間281 sec)

⇒ Flow direction

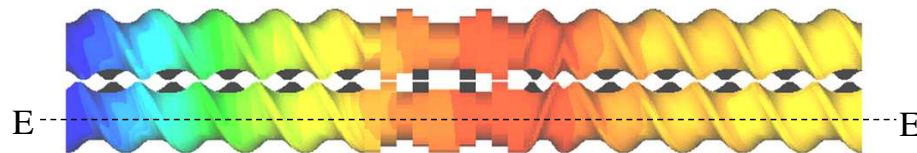
スクリュウ出口: 222°C



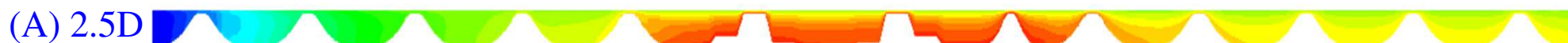
(B) 3D FVM (定常1回, 計算時間168 sec)

⇒ Flow direction

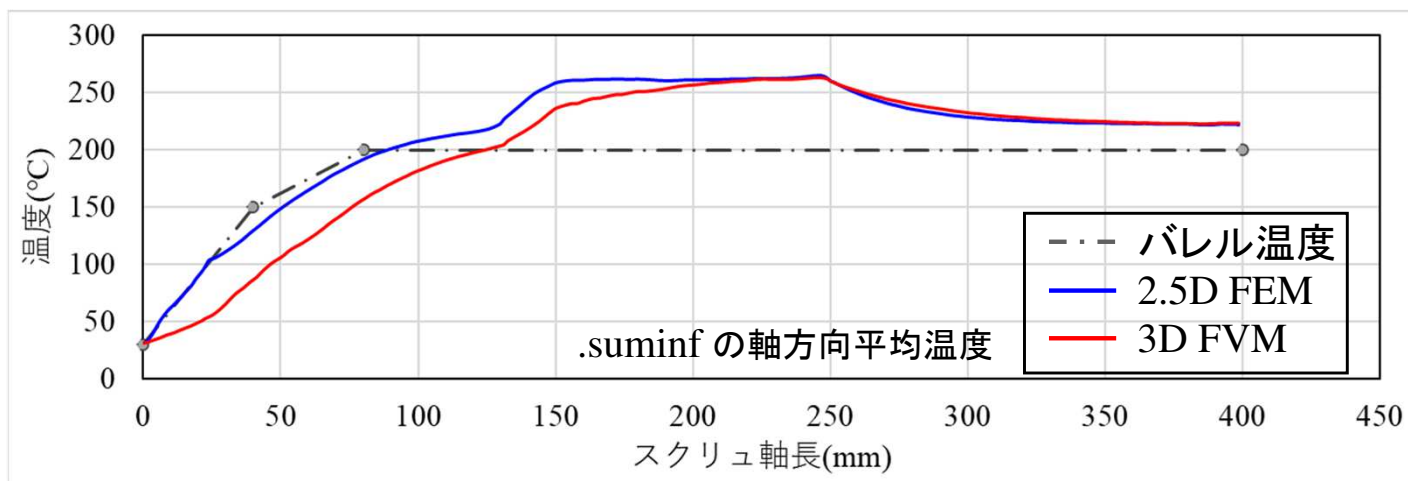
スクリュウ出口: 223°C



軸方向肉厚断面の比較(E-E')



↑ 移流項の影響強い



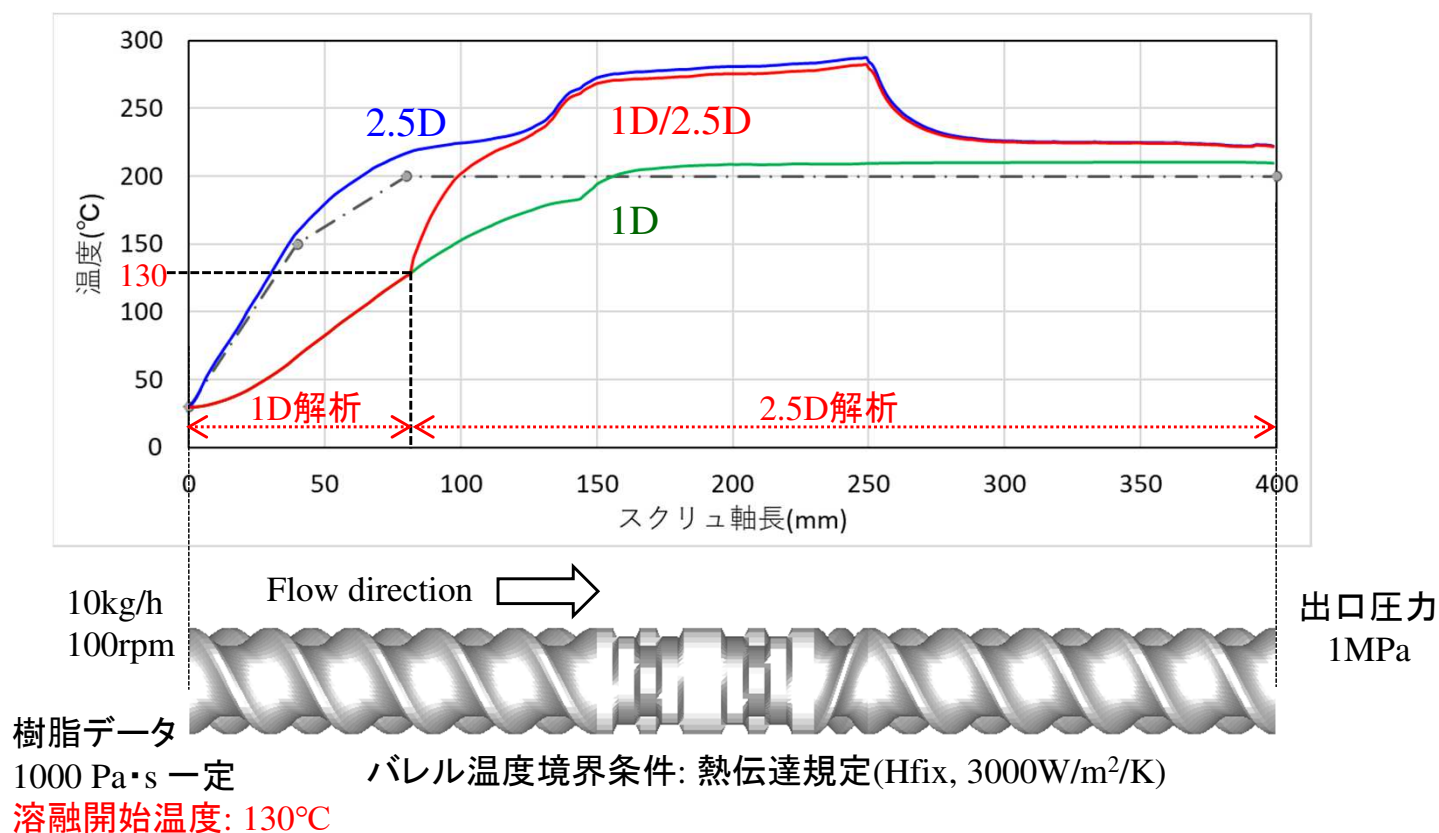
・3D FVM の温度分布は、2.5D FEMの収束解と比較して、混練部後半以降のスクリュウ下流側でほぼ同じ温度分布を示しました。

・一方、スクリュウ上流側では、肉厚断面の比較において、入口温度30°Cの移流の影響をスクリュウ表面近傍で強く受けて、平均温度(グラフ図)としては2.5D FEMよりも低い温度分布を示しました。

【改良2】1D FDM/2.5D FEM 併用温度解析

本機能では、温度分布の実験値再現を目的に、溶融温度未満の領域を1D FDM、溶融温度以上の領域を2.5D FEMに自動的に切替えて解析する方法を実装しました。

解析結果例: 下図の赤線が1D FDM/2.5D FEM



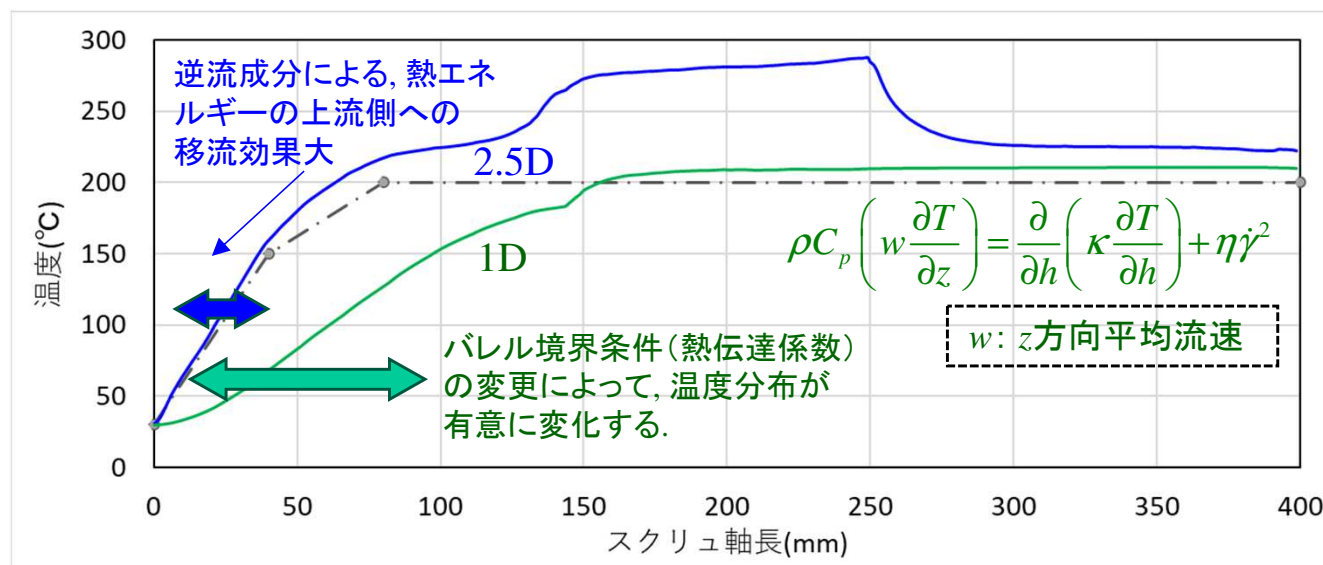
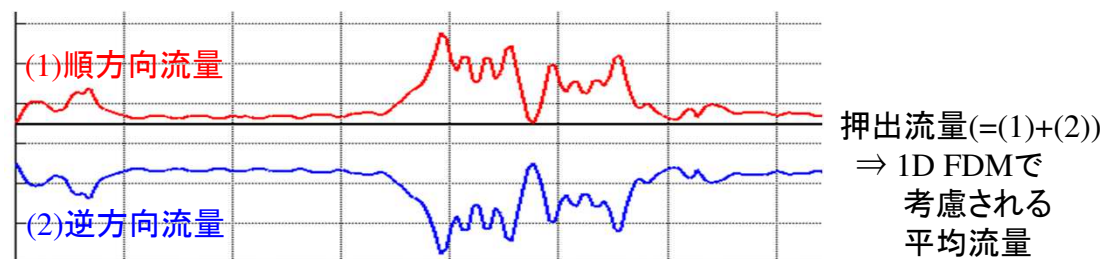
(参考) 温度解析方法の違いがスクリュ上流側に与える影響

- ・移流項について、3次元流速ベクトルを考慮する 2.5D FEM および 3D FVM と異なり(p.64), 1D FDMではスクリュ軸方向への平均流速を考慮して離散化を行います.
(詳細は, ver8.0.0改良成果資料p.72- を参照ください).

・2.5D FEMでは, スクリュ上流側において, 実成形(溶融温度未満の固相領域)では生じない, 熱エネルギーの上流側への移流(逆流)が生じるため, 上流側の解析温度が実験温度よりも高くなる可能性があります.

・このような場合, 溶融温度未満領域で1D FDMを採用すれば, 逆流成分が考慮されないため, バレル境界条件(熱伝達係数)の調整により, 実験温度と解析温度を近づけることが可能になると考えられます.

スクリュ軸方向の流量成分(.bfcinf), 詳細はp.23参照



1D FDM/2.5D FEM併用温度解析の利用手順

- (1) Analysisタブ画面の解析条件設定にて、2.5D FEMのラジオボタンをチェック状態にします。
- (2) Thermal boundary condition setタブ画面の右下の、Consideration of Melting State欄に追加された、Using 1D FDM under Melt Temp. をチェック状態にします。(1)(2)の組合せで条件保存し、解析実行すると、1D FDM/2.5D FEM温度解析が実施されます。

Analysisタブ画面

Calculation Control Parameters

Thermal-Flow Calculation Control Parameters

Non-Newtonian Iteration Number 10

Layer Division Number 10

Temperature SOR iteration number 500

Static Dynamic

2.5D FEM 1D FDM 3D FVM

SOR反復計算回数

Thermal boundary condition タブ画面

Consideration of Melting State

Viscous Heat Out under Melt Temp. and less than Fill Ratio 1

Viscours heating power ratio under Melt Temp. 0

Heat Transmission Coefficient under Melt Temp. on Barrel Surface (W/m2/K) 300

Using 1D FDM under Melt Temp.

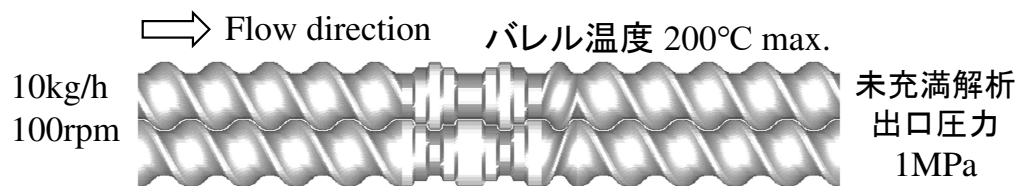
(参考)解析実行中の表示画面例

```
iteration = 5 / 10
iter= 5 call tempcal
1D tempcal for solid state
2.5D tempcal for melt state from iz = 67
qoutletp= 3.575004 qoutletm= 0.0000000E+00
**** flowrateoutlet : -3.57500392317474
flowoutlet= 3.57500392317474 cc/s : Mass flux= 10.0000008378697
kg/h
iteration = 6 / 10
iter= 6 call tempcal
1D tempcal for solid state
2.5D tempcal for melt state from iz = 67
qoutletp= 3.575004 qoutletm= 0.0000000E+00
**** flowrateoutlet : -3.57500392317474
flowoutlet= 3.57500392317474 cc/s : Mass flux= 10.0000008378697
kg/h
```

(1D/2.5Dの切替え位置の表示)

溶融温度未満を 1D 温度解析: z軸方向分割数 1~66
溶融温度以上を2.5D 温度解析: z軸方向分割数 67以降

テスト解析例 (サンプルファイル: ver10testsample¥のnormal_temp1d25d.tscal)



樹脂データ: HDPE_B3.pro (Materialfit DB), 熔融温度 130°C
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) 1D FDM, 反復計算なし
- (B) 2.5D FEM, SOR 反復計算: 500回
- (C) 1D FDM/2.5D FEM, SOR 反復計算: 500回

解析条件の要点: 熔融温度未満の定義

- (1) 熔融温度は材料データ内で定義される。
- (2) Consideration of Melting State欄で、
熔融未満領域の詳細な設定が可能。
(詳細は、Ver8.0.0改良成果資料p.76-参照)
- (3) No flow temp を熔融温度に合わせる。

(1) 材料データ: 熱物性入力欄

Thermal material properties (melt)		Solid phase parameter set	
Density	770	【kg/m ³ 】	
Heat capacity	2250	【J/kg/K】	
Thermal conductivity	0.25	【W/m/K】	
Solid phase parameter			
Solid density	960	【kg/m ³ 】	
Solid heat capacity	2303	【J/kg/K】	
Melt temperature	130	【°C】	熔融温度
Latent heat	201189	【J/kg】	

(2) Thermal boundary condition タブ画面

Consideration of Melting State	
<input checked="" type="checkbox"/> Viscous Heat Cut under Melt Temp. and less than Fill Ratio	1
Viscous heating power ratio under Melt Temp.	0
<input type="checkbox"/> Heat Transmission Coefficient under Melt Temp. on Barrel Surface (W/m ² /K)	300
<input checked="" type="checkbox"/> Using 1D FDM under Melt Temp.	

熔融温度未満のせん断発熱を無視する場合

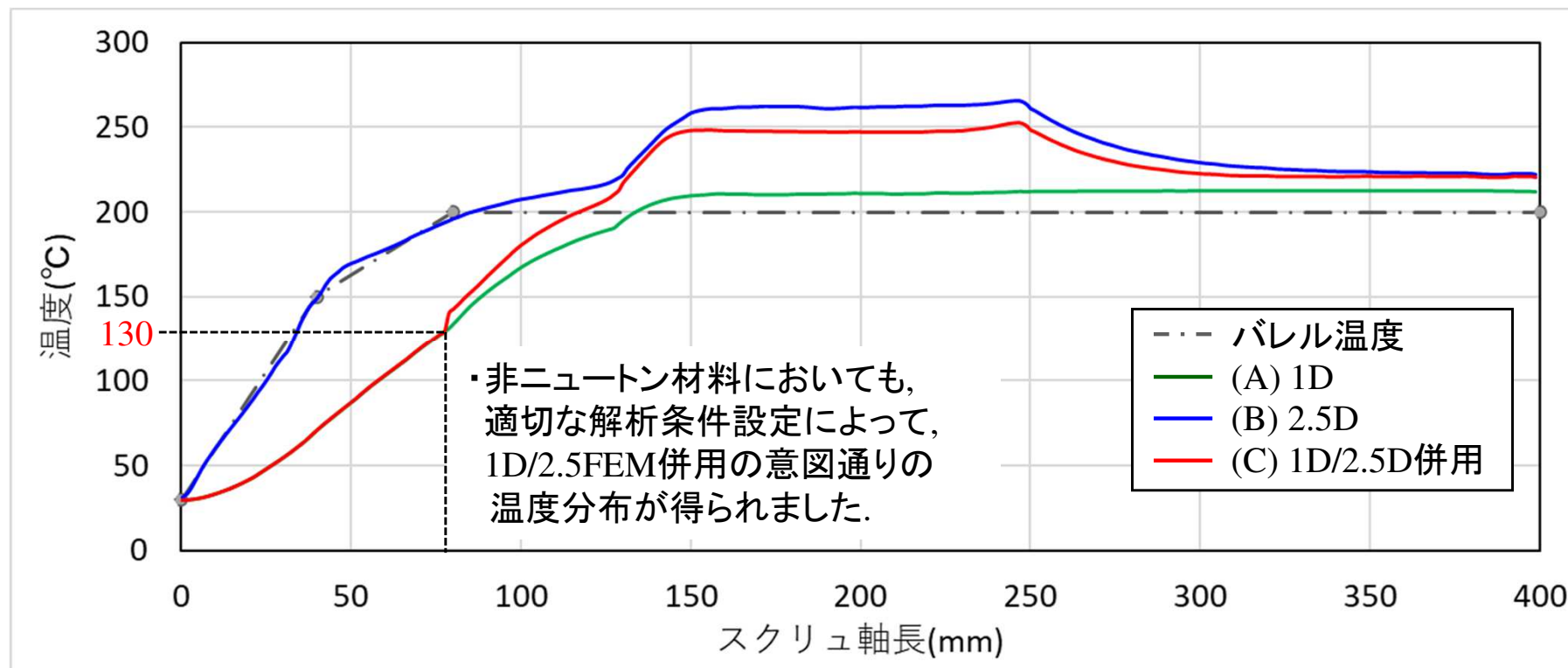
(3) Analysisタブ画面: No-flow temperature入力欄

Optional information	
<input checked="" type="radio"/> Shear Cutoff	<input type="radio"/> Stress cutoff
Shear cutoff(1/s)	1E+10
No-flow temperature (°C)	130
No-flow viscosity(Pa · s)	1000
Viscous heating power ratio	1

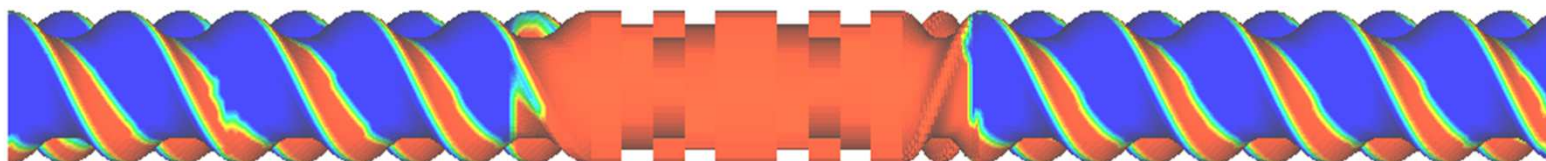
熔融温度未満の粘度が一定値で決定される。

テスト解析結果／温度分布 [°C]

○スクリュ軸方向の温度分布比較(.suminf)



○充填率分布: (C) 1D FDM/2.5D FEM



温度解析機能: まとめ

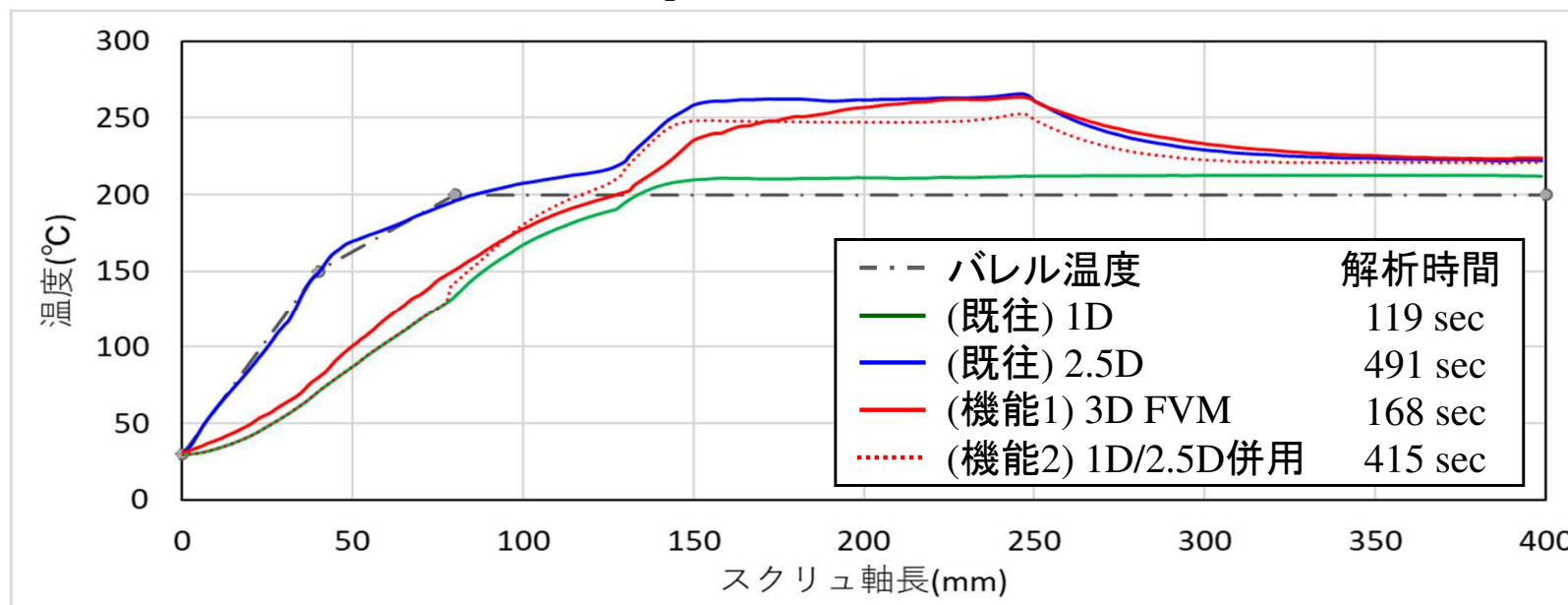
本章では、温度解析の収束性改善および温度分布の実験値再現を目的に、以下の2つの改良機能を実装し、本資料のテスト解析で効果確認を行いました。

【機能1】3D FVM (有限体積法) 解析

【機能2】1D FDM/2.5D FEM 併用解析

特に、エネルギー方程式のような定常移流拡散方程式の解析精度に優れる有限体積法を採用した、【機能1】3D FVM は、既往の2.5D FEM に比べて収束性に優れ、解析結果はスクリュ下流側で2.5D FEM, 上流側では1D FDMに近い傾向を示しており、解析精度の向上に有効な可能性が示唆されました。

○スクリュ軸方向の温度分布比較: p.72のグラフ図に、3D FVM の解析結果を追加



(6) ユーザプログラム機能の拡張

本機能では、Ver.9.0.0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.9.0.0 : 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.10.0.0 : 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) tempcall	温度計算(1D FDM)
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.9.0.0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。

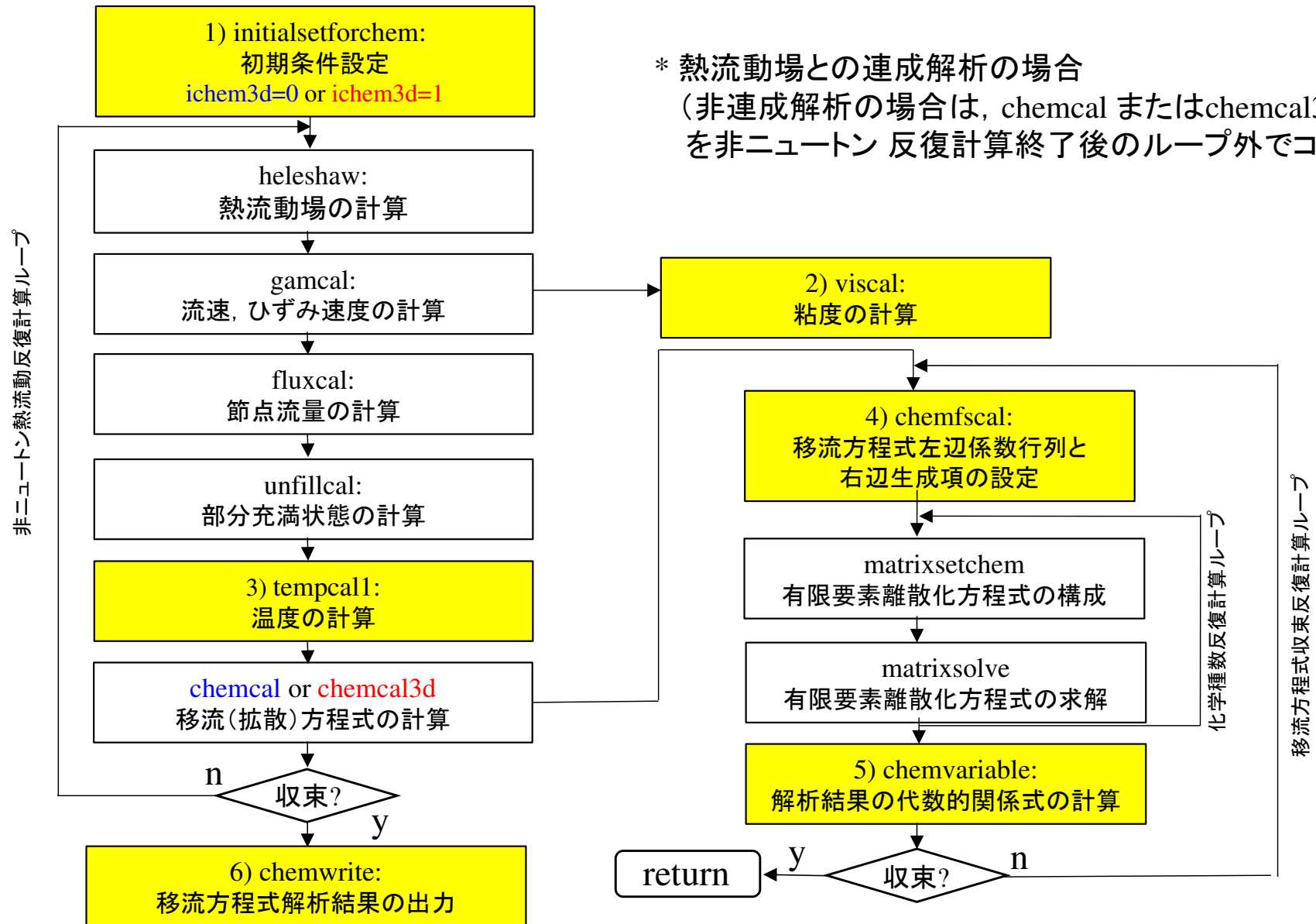
1) initialsetforchem:
ichem3d=0
...

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)

○コーディングシーケンス

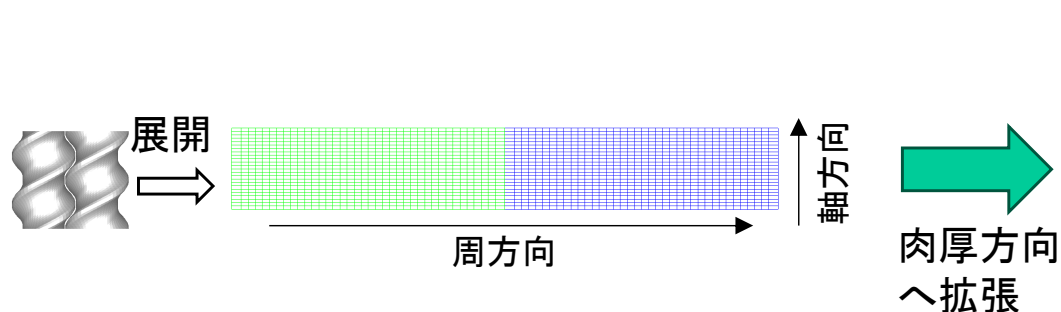


* 熱流動場との連成解析の場合
 (非連成解析の場合は, chemical または chemical3d
 を非ニュートン 反復計算終了後のループ外でコール)

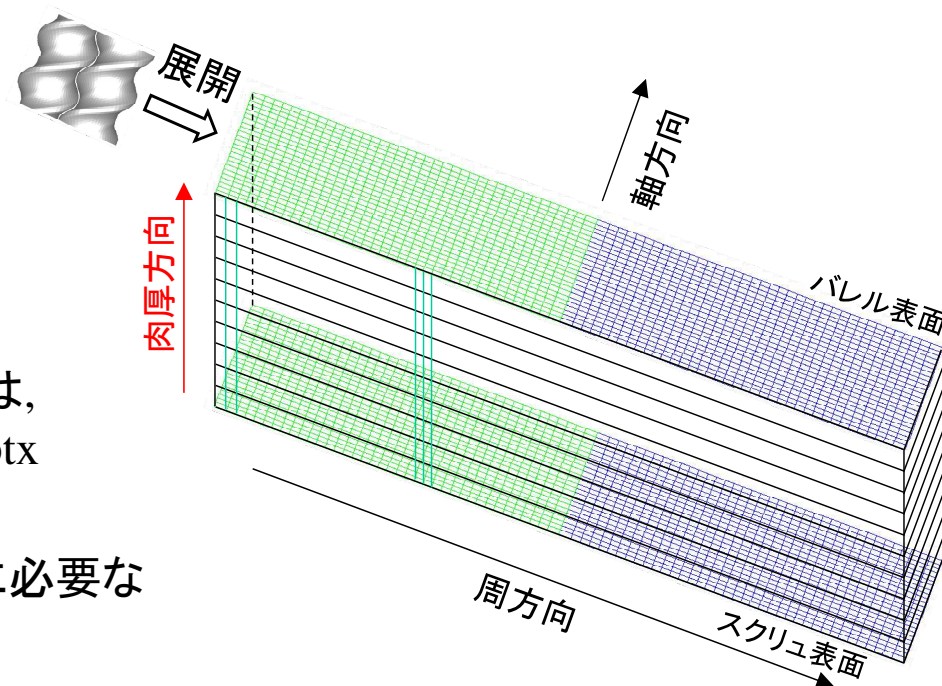
○公開情報／マトリクス(要素)構成

- 旧Ver.9.0.0では、二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.10.0.0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.9.0.0 : 移流方程式の公開情報



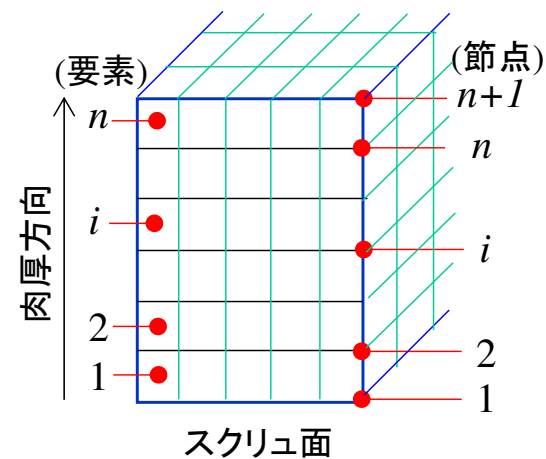
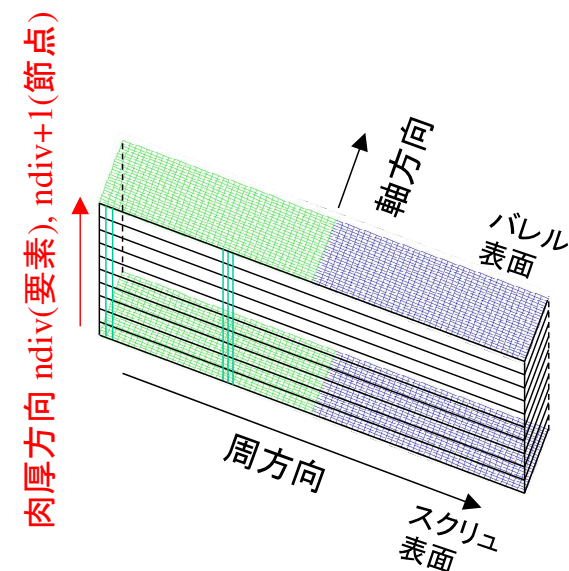
Ver.10.0.0 : 移流拡散方程式の公開情報



- * 周方向と軸方向の構成は従来と同じです。詳細は、Ver9.0.0(2022)TSSカスタマイズ環境設定方法.pptxを参照ください。
- * 以降では、Ver.10.0.0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。

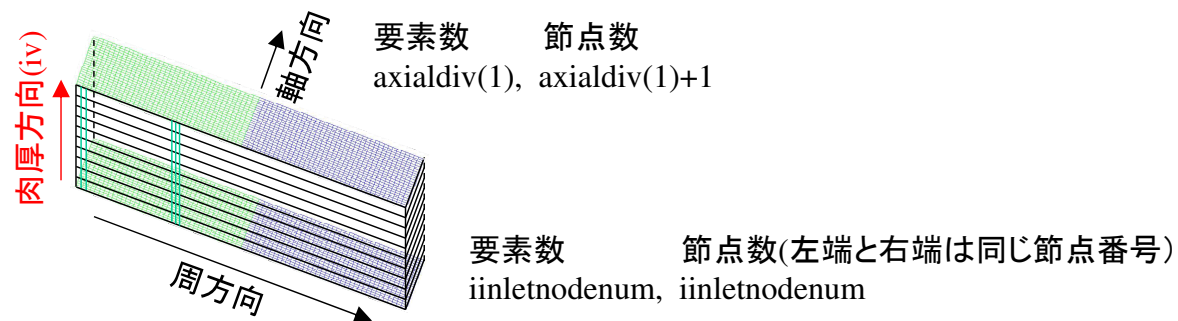
○公開情報／ユーザ定義変数

変数名	内容
ichem3d	1) ichem3d=0 の場合は chemical (Ver.9.0.0の移流方程式), 2) ichem3d=1 の場合は chemical3d (Ver.10.0.0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.



○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
iinletnodenum	周方向要素分割数
axialdiv(1)	軸方向要素分割数
nelem(1)	周方向×軸方向の要素数. $nelem(1)=iinletnodenum \times axialdiv(1)$ 3次元マトリクスの全要素数は, $nelem(1) \times ndiv$ となる
nnode(1)	周方向×軸方向の節点数. $nnode(1)=iinletnodenum \times (axialdiv(1)+1)$ 3次元マトリクスの全要素数は, $nnode(1) \times (ndiv+1)$ となる
chemc3d(ic, ie, iv)	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(1), iv=1~ndiv)
chemcn3d(ic, in, iv)	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(1), iv=1~ndiv+1)
chempar(i, ie)	解析で考慮する(化学種依存の)要素変数(i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(1))
chemparn(i, in)	解析で考慮する(化学種依存の)節点変数(i=1~chemvnumber, in=1~nnode(1))
commonvpar(i)	ルーチン間で共用するスカラー変数(i=1~commonvnumber)



○公開情報／ユーザ定義変数, ichem3d=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:

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

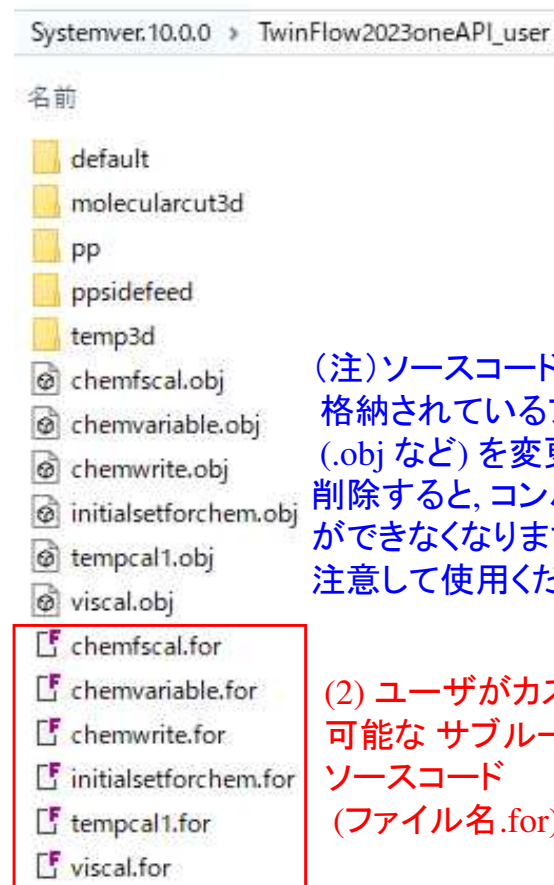
\downarrow
 $chemc3d(ic, ie, iv)$

$A_{ic,iv}, B_{ic,iv}, C_{ic,iv}$: 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)	関数形 A_i の定数値を設定する. ($ic=1\sim chemcnumber, ie=1\sim nelem(1), iv=1\sim ndiv$)
chems3d(ic, ie, iv)	関数形 B_i (ソース項) の定数値を設定する. ($ic=1\sim chemcnumber, ie=1\sim nelem(1), iv=1\sim ndiv$)
chemd3d(ic, ie, iv)	関数形 C_i (拡散項) の定数値を設定する. ($ic=1\sim chemcnumber, ie=1\sim nelem(1), iv=1\sim ndiv$)

利用手順/Ver10.0.0

- (1) TSS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、TwinScrewSimulatorVer9.0.0(2022)TSS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) TSSフォルダ内のSystemver.10.0.0¥TwinFlow2023oneAPI_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。



(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。

(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)

```
Intel(r) oneAPI Tools
C:\TSS\TwinScrewSimulatorVer9.0.0\bin\x86\Systemver.9.0.0\TwinFlow2022oneAPI_user>
C:\TSS\TwinScrewSimulatorVer9.0.0\bin\x86\Systemver.9.0.0\TwinFlow2022oneAPI_user> nmake (3) nmakeを入力
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 tempcal1.for
Intel(R) Fortran Intel(R) 64 Compiler Classic for applications running on Intel(R) 64, Version 2021.6.0 Build 20220
000
Copyright (C) 1985-2022 Intel Corporation. All rights reserved.

ifort -O3 -C /check:uninit /I:INCFIL.INC *.obj /link smsmfd.lib /out:C:\TSS\TwinScrewSimulatorVer9.0.0\bin\
temver.9.0.0\multiprofilesimulator.exe
Intel(R) Fortran Intel(R) 64 Compiler Classic for applications running on Intel(R) 64, Version 2021.6.0 Build 20220
000
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:binarycal.exe
-subsystem:console
smsmfd.lib
/out:C:\TSS\TwinScrewSimulatorVer9.0.0\bin\x86\Systemver.9.0.0\multiprofilesimulator.exe
binarycal.obj
```

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

利用手順/Ver10.0.0

- (4) ¥TwinFlow2023oneAPI_user フォルダ内の multiprofilesimulator.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.10.0.0フォルダ内に存在する multiprofilesimulator.exe を上書き保存して更新します。

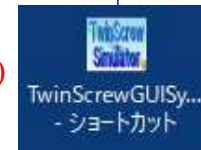
名前	更新日時
multiprofilesimulator.exe	2024/02/29 10:02
smsmfd.dll	2015/05/21 18:25
spooles.lib	2001/06/15 8:01

(4)
上書き保存して更新

(参考) 更新前のmultiprofilesimulator.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。

名前	更新日時
TwinFlow2023oneAPI_user	2024/03/04 10:35
multiprofilesimulator.exe	2023/10/03 10:34
multiprofilesimulatorbuk.exe	2023/10/03 10:34

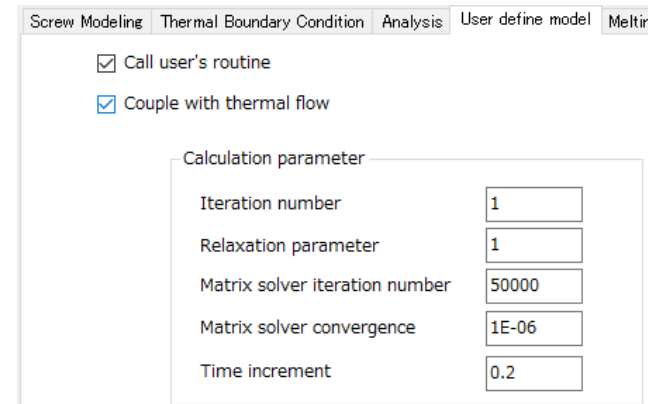
(5)



TSS(GUI)から解析実行すると, Systemver.10.0.0フォルダ内に存在するmultiprofilesimulator.exe が実行されます。

- (5) TSSのGUIを起動し, User define modelタブ画面にて, Call user's routine をチェック状態にすると, 解析実行時に, p.76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, Call user's routine を利用した場合には, p.51 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.10.0.0 ¥¥TwinFlow2023oneAPI_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。

Systemver.10.0.0 > TwinFlow2023oneAPI_user

名前

- default ————— 初期出荷状態
- molecularcut3d ——— 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.47-) 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(ver9.0.0と同内容)
- ppsidefeed } 従来通りの運用で利用可能
- temp3d ————— 3D FVM 温度解析: (5)温度解析の改良機能1 . 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、Ver10.0.0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.84-88

【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) pp89-95

(6) ユーザプログラム機能の拡張

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析

temp3d

initialsetforchem.for の内容1

```
subroutine initialsetforchem
  use dalloc
  include 'incfil.inc'
  character(2) num
cccccccccccccccccccc
c+++++
c+ User define variable number
c+++++
c
c Number of chemical species
c
c 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
c commonvnumber=0
c
c Equation used
c
cccc New_user_program_Version.10.0.0
      ichem3d=1
cccc Old_user_program_Version.9.0.0/
cver9 ichem3d=0
cccc
```

移流拡散方程式
を利用する場合

```
c
c
c if(chemnumber.gt.0) then
c
c   if(ichem3d.eq.0) then
c     allocate(chemc(chemnumber,nelem(1)))
c     allocate(chemco(chemnumber,nelem(1)))
c     allocate(chemcn(chemnumber,nnode(1)))
c     allocate(chemf(chemnumber,nelem(1)))
c     allocate(chems(chemnumber,nelem(1)))
c     allocate(chemd(chemnumber,nelem(1)))
c     allocate(tschemc(0:1,chemnumber,maxnode))
c     allocate(chemcname(chemnumber))
c
c   elseif(ichem3d.eq.1) then
c     allocate(chemc3d(chemnumber,nelem(1),ndiv))
c     allocate(chemco3d(chemnumber,nelem(1),ndiv))
c     allocate(chemcn3d(chemnumber,nnode(1),ndiv+1))
c     allocate(chemf3d(chemnumber,nelem(1),ndiv))
c     allocate(chems3d(chemnumber,nelem(1),ndiv))
c     allocate(chemd3d(chemnumber,nelem(1),ndiv))
c     allocate(tschemc3d(0:1,chemnumber,maxnode,ndiv+1))
c     allocate(tschemh3d(0:1,chemnumber,maxnode,ndiv+1))
c     allocate(chemcname(chemnumber*(ndiv+1)))
c     allocate(chemcnamecross(chemnumber))
c     allocate(ibbc(chemnumber,nelem(1),1))
c     allocate(isbc(chemnumber,nelem(1),1))
c     allocate(vbdir(chemnumber,nelem(1),1))
c     allocate(vsdir(chemnumber,nelem(1),1))
c     allocate(vbneu(chemnumber,nelem(1),1))
c     allocate(vsneu(chemnumber,nelem(1),1))
c
c   else
c     write(*,*) "Setting error of ichem3d"
c     pause
c     stop
c   end if
```

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+++++
cver9 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
do iv=1,ndiv
do ie=1,nelem(1)
do i=1,chemnumber
chemc3d(i,ie,iv)=tempinlet
end do
end do
end do
c
do iv=1,ndiv+1
do in=1,nnode(1)
do i=1,chemnumber
chemc3d(i,in,iv)=tempinlet
end do
end do
end do
c
do ie=1,nelem(1)
do i=1,chemnumber
chempar(i,ie)=tempinlet
end do
end do
c
do in=1,nnode(1)
do i=1,chemnumber
chemparn(i,in)=tempinlet
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。

Inlet Boundary Condition	
Inlet Pressure(MPa)	0.0
Inlet Temperature(°C)	30.0

Thermal Boundary Condition	
<input checked="" type="radio"/> Temperature fix	<input type="radio"/> Heat Transmission
Heat Transmission Coefficient(W/m2/K)	3000
Height Ratio	0.0
Reference Temperature(C)	200.0

境界条件の設定

```

cccccc スクリュ表面の境界条件
do ie=1,nelem(1)
do i=1,chemnumber
isbc(i,ie,1)=iebound(1,ie,1) ①
vsdir(i,ie,1)=tbound(1,ie,1) ②
vsneu(i,ie,1)=href(1,ie,1)/(rhoa*cpa) ③
end do
end do
c
cccccc バレル表面の境界条件
do ie=1,nelem(1)
do i=1,chemnumber
ibbc(i,ie,1)=iebound(2,ie,1) ④
vbdir(i,ie,1)=tbound(2,ie,1) ⑤
vbneu(i,ie,1)=href(2,ie,1)/(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,1)には、Temperature fixの場合1、Heat Transminnsonの場合0が設定されている
- ②: スクリュ表面のReference Temperature値
- ③: スクリュ表面のHeat Transmission
÷ (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,1)には、Temperature fixの場合1、Heat Transminnsonの場合0が設定されている
- ⑤: バレル表面のReference Temperature値
- ⑥: バレル表面のHeat Transmission
÷ (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+++++
C
Ccccc 熱物性/定数 rheoin
ct      write(*,*) rhoa,cpa,rana
ct      rhoa: 溶融体密度
ct      cpa:  溶融体比熱
ct      rana: 溶融体熱伝導率
C
do i=1,chemnumber
do ie=1,nelem(1)
C
dh=height(i,1)/ndiv
se=vol(i,1)/height(i,1)
djc=powerratio*1.0e-06
C
do iv=1,ndiv
chemf3d(i,ie,iv)=0.0
chemd3d(i,ie,iv)=-rana/(rhoa*cpa)
C
gammv=0.5*(gam(iv,ie,1)+gam(iv+1,ie,1))
if(gammv.gt.cutoffshear) gammv=cutoffshear
visv=0.5*(vish(iv,ie,1)+vish(iv+1,ie,1))
C
chems3d(i,ie,iv)=djc*gammv*gammv*visv/(rhoa*cpa)
C
end do
end do      *djclは粘性発熱係数
           Viscous heating power ratio  1.0
C
end do
return
stop
end

```

解析対象とする移流拡散方程式:

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

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

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

肉厚 iv 層目のエネルギー方程式

* \mathbf{u}_{iv} には, p.13-14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.

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

【サンプルプログラム1】3D FVM 温度解析



chemvariable.for の内容

```
subroutine chemvariable
use dalloc
include 'incfil.inc'
do ic=1,chemnumber
do ie=1,nelem(1)
chempar(1,ie)=0.0
do iv=1,ndiv
chempar(1,ie)=chempar(1,ie)+chemc3d(ic,ie,iv)
end do
chempar(1,ie)=chempar(1,ie)/ndiv
end do
end do
return
stop
end
```

層毎の温度解析結果 chemc3d(ic,ie,iv)
の平均値を, chempar(1,ie)に代入

tempcal1.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

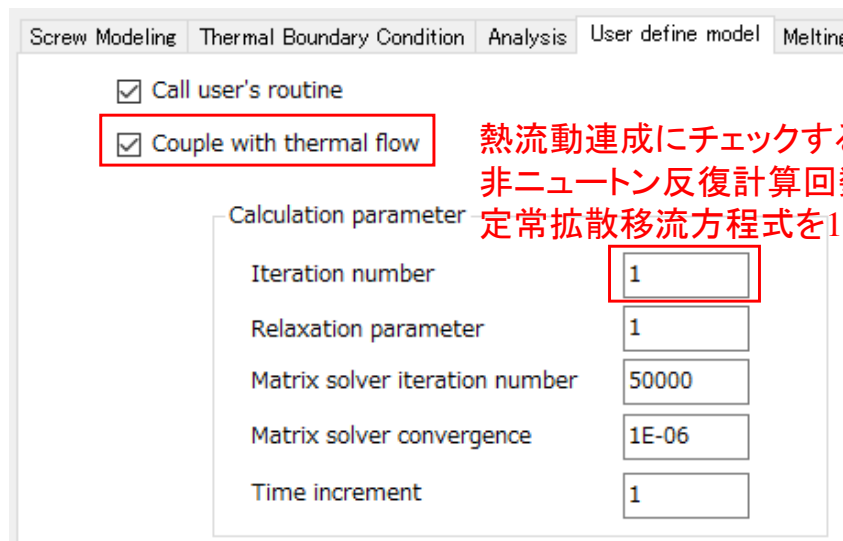
```
subroutine chemwrite
use dalloc
include 'incfil.inc'
dimension chemparameter(10)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
open(111,File='CHEMPAR',access='sequential',status='unknown',
& recl=220)
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
if(chemvnumber.ne.0) then
do iz=0,axialdiv(1)
ntops=iinletnodenum*iz+1
ntope=iinletnodenum*(iz+1)
do ic=1,chemvnumber
chemparameter(ic)=0.0
end do
do ic=1,chemvnumber
countn=0.0
do in=ntops,ntope
countn=countn+1.0
chemparameter(ic)=chemparameter(ic)+chemparm(ic,in)
end do
chemparameter(ic)=chemparameter(ic)/countn
end do
write(111,*) znodel(1)*10.0,' ',chemparameter(1)
end do
close(111)
end if
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
```

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.9.0.0改良成果資料の
p.35-, 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

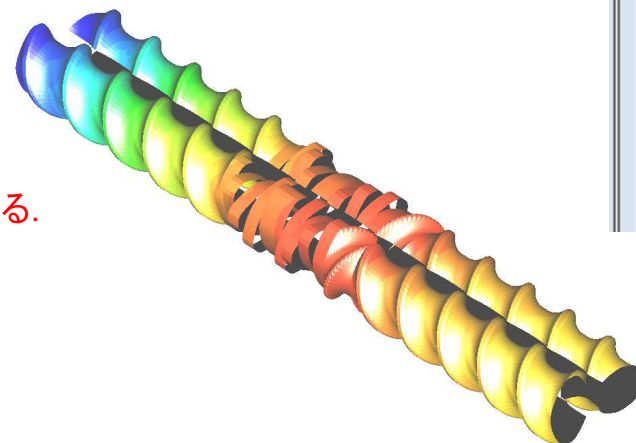
temp3d

○ 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。

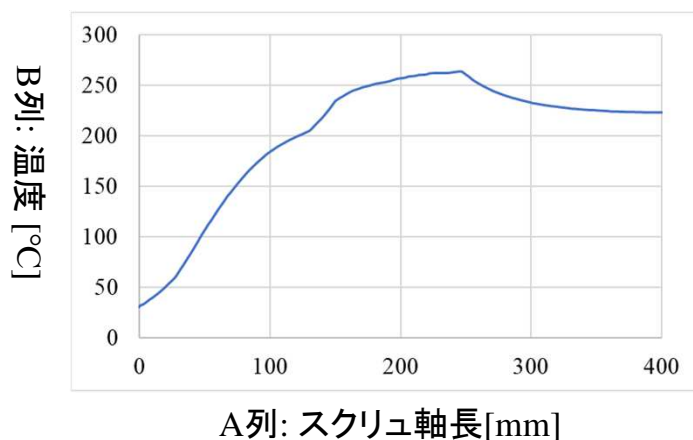
○ コンター図の出力例(.twinres)



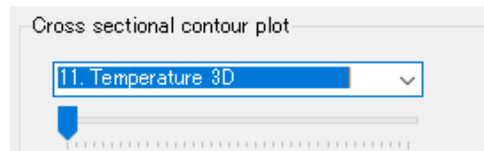
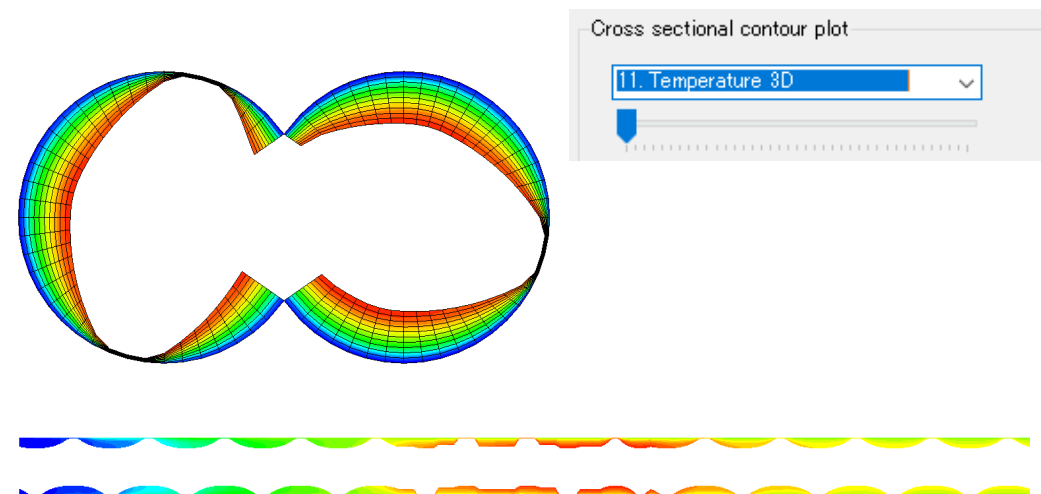
```
18:Layer- 1 Temperature 3D
19:Layer- 2 Temperature 3D
20:Layer- 3 Temperature 3D
21:Layer- 4 Temperature 3D
22:Layer- 5 Temperature 3D
23:Layer- 6 Temperature 3D
24:Layer- 7 Temperature 3D
25:Layer- 8 Temperature 3D
26:Layer- 9 Temperature 3D
27:Layer-10 Temperature 3D
28:Layer-11 Temperature 3D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

18-28(ndiv+1): 層毎の温度
29: 平均温度

○ 'CHEMPAR'の出力例(.chempar)



○ スライスコンター図の出力例(.crosscont)



【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molecularcut3d

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   chemcnumber=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
c                       ndiv+2: 層流量重み付け
c   Number of common variable   平均分子量
c
c   commonvnumber=9  設定パラメータ用の変数: 9
c
c   Equation used
c
cccc New_user_program_Version.10.0.0
      ichem3d=1
cccc Old_user_program_Version.9.0.0/
cver9  ichem3d=0
cccc
    
```

当モデルを使用する場合、
imolcut=1を設定します。
(デフォルトはimolcut=0)

移流拡散方程式
を利用する場合

*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。

```

c
c   if(chemcnumber.gt.0) then
c
c   if(ichem3d.eq.0) then
      allocate(chemc(chemcnumber,nelem(1)))
      allocate(chemco(chemcnumber,nelem(1)))
      allocate(chemcn(chemcnumber,nnode(1)))
      allocate(chemf(chemcnumber,nelem(1)))
      allocate(chems(chemcnumber,nelem(1)))
      allocate(chemd(chemcnumber,nelem(1)))
      allocate(tschemc(0:1,chemcnumber,maxnode))
      allocate(chemcname(chemcnumber))
c
c   elseif(ichem3d.eq.1) then
      allocate(chemc3d(chemcnumber,nelem(1),ndiv))
      allocate(chemco3d(chemcnumber,nelem(1),ndiv))
      allocate(chemcn3d(chemcnumber,nnode(1),ndiv+1))
      allocate(chemf3d(chemcnumber,nelem(1),ndiv))
      allocate(chems3d(chemcnumber,nelem(1),ndiv))
      allocate(chemd3d(chemcnumber,nelem(1),ndiv))
      allocate(tschemc3d(0:1,chemcnumber,maxnode,ndiv+1))
      allocate(tschemh3d(0:1,chemcnumber,maxnode,ndiv+1))
      allocate(chemcname(chemcnumber*(ndiv+1)))
      allocate(chemcnamecross(chemcnumber))
      allocate(ibbc(chemcnumber,nelem(1),1))
      allocate(isbc(chemcnumber,nelem(1),1))
      allocate(vbdir(chemcnumber,nelem(1),1))
      allocate(vmdir(chemcnumber,nelem(1),1))
      allocate(vbneu(chemcnumber,nelem(1),1))
      allocate(vsneu(chemcnumber,nelem(1),1))
c
c   else
      write(*,*) "Setting error of ichem3d"
      pause
      stop
    end if
    
```

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

molecularcut3d

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)=1.2
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.47-) 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.51)

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 : 1.2 [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

molecularcut3d

chemfscal.for の内容

```

c
cccccc chemnumber=1: Residence time
do ie=1,nelem(1)
c
do iv=1,ndiv
chemf3d(1,ie,iv)=0.0
chemd3d(1,ie,iv)=0.0
chems3d(1,ie,iv)=1.0
end do
end do
c
cccccc chemnumber=2: Mechanical energy history
do ie=1,nelem(1)
c
do iv=1,ndiv
chemf3d(2,ie,iv)=0.0
chemd3d(2,ie,iv)=0.0
c
gammv=0.5*(gam(iv,ie,1)+gam(iv+1,ie,1))
if(gammv.gt.cutoffshear) gammv=cutoffshear
visv=0.5*(vish(iv,ie,1)+vish(iv+1,ie,1))
c
chems3d(2,ie,iv)=gammv*gammv*visv
c
end do
end do

```

解析対象とする移流拡散方程式:

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

滞留時間解析(ic=1)

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

せん断エネルギー履歴解析(ic=2)

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

* \mathbf{u}_{iv} には、p.13-14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。

$$(\boxed{\text{chemf3d}(ic,ie,iv)} + \mathbf{u}_{iv} \cdot \nabla + \boxed{\text{chemd3d}(ic,ie,iv)} \Delta) f_{ic,iv}^{\text{chemc3d}(ic,ie,iv)} = \boxed{\text{chems3d}(ic,ie,iv)}$$

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molecularcut3d

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

```

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c   Mw calculation
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
   rgas=8.314462618  R
c   パラメータ設定
   dmw0  =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
   ecoefmw=dmmw/rhomw/wpmw   $\frac{m}{\rho w_p}$ 

do ii=1,ndiv  肉厚層毎の物性計算
do iz=1,axialdiv(1)-2*btlayer  スクリュ軸方向毎の物性計算
ntops=iinletnenum*(iz-1)+1
ntope=iinletnenum*iz
ic=0
avenergymwd1=0.0
avtimemwd1=0.0
avvismwd1=0.0
avgammwd1=0.0
avtempmwd1=0.0
volsum=0.0
i1=ii+ndiv+1
do ie=ntops,ntope
volsum=volsum+filleavb(ie)*vol(ie,1)
avtimemwd1=avtimemwd1+filleavb(ie)*vol(ie,1)*chemc3d(1,ie,ii)  <tres>iv
avtempmwd1=avtempmwd1+0.5*filleavb(ie)*vol(ie,1)*
& (temh(ii,ie,1)+temh(ii+1,ie,1))
avenergymwd1=avenergymwd1
& +filleavb(ie)*vol(ie,1)*chemc3d(2,ie,ii)  <vhres>iv
avvismwd1=avvismwd1+0.5*filleavb(ie)*vol(ie,1)*
& (vish(ii,ie,1)+vish(ii+1,ie,1))
avgammwd1=avgammwd1+0.5*filleavb(ie)*vol(ie,1)*
& (gam(ii,ie,1)+gam(ii+1,ie,1))
end do
avtempmwd(iz)=avtempmwd1/volsum
avtimemwd(iz)=avtimemwd1/volsum
avenergymwd(iz)=ecoefmw*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.48 (2)式
end do

```


【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molecularcut3d

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,axialdiv(1)
  avvisavgamm=avvismwd(iz)*avgammwd(iz) —  $\tau = \eta \dot{\gamma}$ 
  if(iscut.eq.1.and.avvisavgamm.gt.1.0e+03*cutoffshear) then
    avvisavgamm=1.0e+03*cutoffshear
  end if
  dmwinf(ii,iz)=-alpha*avvisavgamm+cbeta —  $M_{w\infty} = -\alpha\tau + \beta$ 
  if(dmw(ii,iz-1).le.dmwinf(ii,iz)) then
    dmw(ii,iz)=dmw(ii,iz-1)
    p.49 (4)式
  else
    dt=avtmemwd(iz)-avtmemwd(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)*(1.0-coef1)
    dmw(ii,iz)=coef1*dmw(ii,iz-1)+coef2 —  $M_{w,n} = \frac{M_{w,n-1}}{(1+k\Delta t)} + M_{w\infty} \left(1 - \frac{1}{(1+k\Delta t)}\right)$ 
    if(ii.eq.1) then
      write(lp,*) iz,',',avtmemwd(iz)-avtmemwd(iz-1),',',
        dt,',',dk(iz),',',dmw(ii,iz),',',
        avtempmwd(iz),',',avenergymwd(iz)
    &
    &
  end if
end if

ntops=iinletnenum*(iz-1)+1
ntope=iinletnenum*iz
do ie=ntops,ntope
  chempar(ii,ie)=dmw(ii,iz)
  dmwshift(ii,ie)=(dmw(ii,iz)/dmw(ii,1))*3.4 —  $\left(\frac{M_w(z)}{M_{w0}(0)}\right)^{3.4}$ 
end do
end do
```

層毎の分子量 $\langle M_w \rangle_l$

粘度更新に利用する

```
do ie=1,nelem(1)
  chempar(ndiv+2,ie)=0.0
  do ii=1,ndiv
    chempar(ndiv+2,ie)=chempar(ndiv+2,ie)
    & +weightq(ii)*chempar(ii,ie)  $\langle M_w \rangle_{avg}$ 
  end do
end do
```

層流重み付け分子量平均値

```
do ic=1,chemcnumber
  do ie=1,nelem(1)
    chempar(ndiv+1,ie)=0.0
    do iv=1,ndiv
      chempar(ndiv+1,ie)=chempar(ndiv+1,ie)
      & +weightq(iv)*chemc3d(1,ie,iv)  $\langle t_{res} \rangle_{avg}$ 
    end do
  end do
end do
```

層流重み付け滞留時間平均値

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,axialdiv(1)
    ntops=iinletnenum*(iz-1)+1
    write(368,*) 10.0*znode(ntops,1),((',',dmw(ii,iz)),ii=1,ndiv)
    write(369,*) 10.0*znode(ntops,1),((',',dmwinf(ii,iz)),ii=1,ndiv)
  end do
  c 分子量分布計算で使用する, .mwexitinf の出力(p.58)
  write(367,*) dmw0
  do ii=1,ndiv
    write(367,*) ii,',',dmw(ii,axialdiv(1)),',',weightq(ii)
  end do
  write(367,*) chempar(ndiv+2,nelem(1))
```

【サンプルプログラム2】分子鎖切断モデル解析

molecularcut3d

viscal.for の内容

```

cccccccc for molecular cut
  if(imolcut.eq.1) then
    omgvis1=0.5
    if(i.eq.1) then
      dmwshift1=dmwshift(1,ie)
    else if(i.eq.ndiv+1) then
      dmwshift1=dmwshift(ndiv,ie)
    else
      dmwshift1=0.5*(dmwshift(i-1,ie)+dmwshift(i,ie))
    end if
    if(ie.eq.nelem(1)) then
      write(*,*) 'b=',i,dmwshift1,vish(i,ie,ib)
    end if
    vish(i,ie,ib)=omgvis1*dmwshift1*acoef
    & +(1.0-omgvis1)*vish(i,ie,ib)
    if(ie.eq.nelem(1)) then
      write(*,*) 'a=',i,dmwshift1,vish(i,ie,ib)
    end if
  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]

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.

$$\eta = \eta_0 \left(\frac{M_w}{M_{w0}} \right)^{3.4} \quad (p.52)$$

*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.51)

Screw Modeling Thermal Boundary Condition Analysis **User define model** Melting

Call user's routine

Couple with thermal flow

Calculation parameter

Iteration number	1
Relaxation parameter	1
Matrix solver iteration number	50000
Matrix solver convergence	1E-06
Time increment	1

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.



*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.47-) の解析結果(p.53-55) を得ることができます。

粘度更新を考慮して、Analysisタブの解析条件にて非ニュートン反復計算解を増やしておく。

Thermal-Flow Calculation Control Parameters

Non-Newtonian Iteration Number	30
Layer Division Number	10

(7) スクリューエレメント単位の肉厚変更機能 (STLファイル利用)

テンプレートからの寸法入力では定義できない複雑形状のエレメントを, STLファイルを利用して作製する場合に, エレメント毎にSTL肉厚情報を反映させた個別ファイルを事前に準備することで, 従来よりも簡便に, エレメントの追加や配置ができるよう機能改良しました.

Screw modeling (テンプレート)

Screw Configuration

Blk.No.	Type	Rev. or Nor.	Radius Screw	Tips	Disk Angle or Disk Thick.	Pitch
1,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	20,
2,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	10,
3,	KD,	Nor.,	19.5,	2,	45,	8.0,
4,	SW,	Rev.,	19.5,	2,	0,	10,
5,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	20,

↑ 寸法情報を入力し, SW, KD を作成 (従来通り)

新機能

STL element information 事前準備した形状ファイル

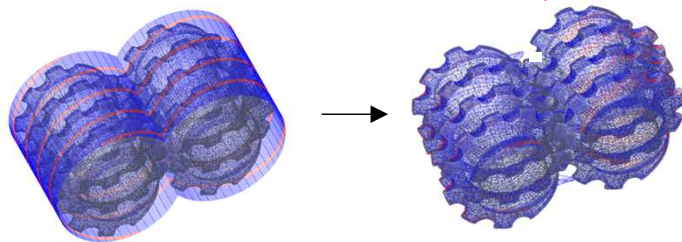
stl normal thick / stl revrese thick

Replaced Block No. 2 4 変更位置

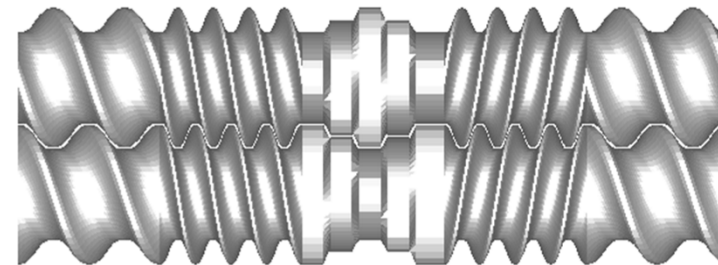
Select

Reset

事前準備: エレメントのSTLファイルを読み込み, 形状をメッシュに転写.

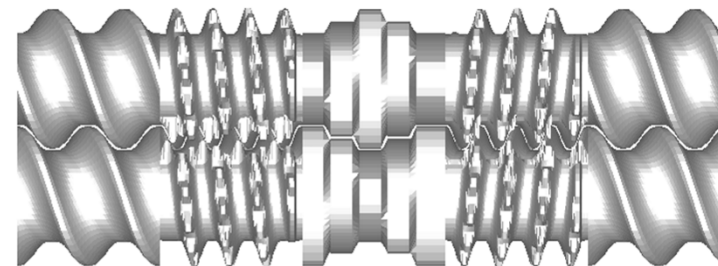


変更前



変更後

Blk.No. 1 2 3 4 5



標準スクリューモデルと同様に保存し(.twinmsh), 解析に利用できます.

利用手順(Ver.10.0.0)／エレメントの事前準備

- (1): Screw modelingタブ画面にて、STLファイルを利用するエレメントに対応した寸法を設定し、2.5D メッシュを作成、保存(.twinmsh)します。

Screw Modeling Thermal Boundary Condition Analysis User define model Melting/Morphology model Binary

Intermeshing Type
Intermeshing co-rotating

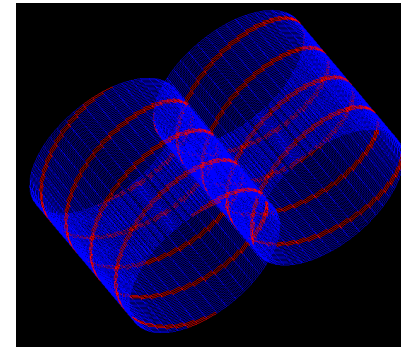
Block Number 1

Barrel radius(mm) 20 Distance between Axis(mm) 32.85 Clearance(mm) 0.5 Total Screw Length(mm) 40 L/D 1

Screw Configuration

Blk.No.	Type	Rev. or Nor.	Radius Screw	Tips	Disk Angle or Disk Thick.	Pitch or Disk No.	Turns or Disk No.	Length	Division Number Top	Flank	
1,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	10,	4,	40,	2,	10,	20

*STLファイルの3D形状と、軸方向の寸法を同じにします。
スクリュピッチが明確な場合は、ピッチも同じにします。
*本設定で使用した要素分割数(Top, Flank, Axis)は、
本番のスクリュモデル作成時(p.100の手順(7))と
同じにする必要があります。



名前

stl_normal.twinmsh
normal.twinmsh

- (2): (1)で作成したメッシュファイルを用いて、適当な条件で解析(仮解析)を実施します。

Calculation Control Information File Name
stl_normal

Material Property Information File Name
DefaultMaterial

Model Information File Name
stl_normal

Calculation Control Parameters

Thermal-Flow Calculation Control Parameters

Non-Newtonian Iteration Number 2

Layer Division Number 10

stl_normal.twinres2d
stl_normal.twinmod

解析後に得られる形状ファイル、
“解析結果ファイル名.twinmod”を
得ることが目的の仮解析になります。

利用手順(Ver.10.0.0)/エレメントの事前準備

(3): メニュー/Model/CAD STL file information set をクリックし, 対象のSTLファイルと(2)の仮解析後に得られた .twinmod を用いて, 従来通りの方法で肉厚情報を更新し, .thickstl を保存します.

1. (2)のメッシュ情報
読み込み

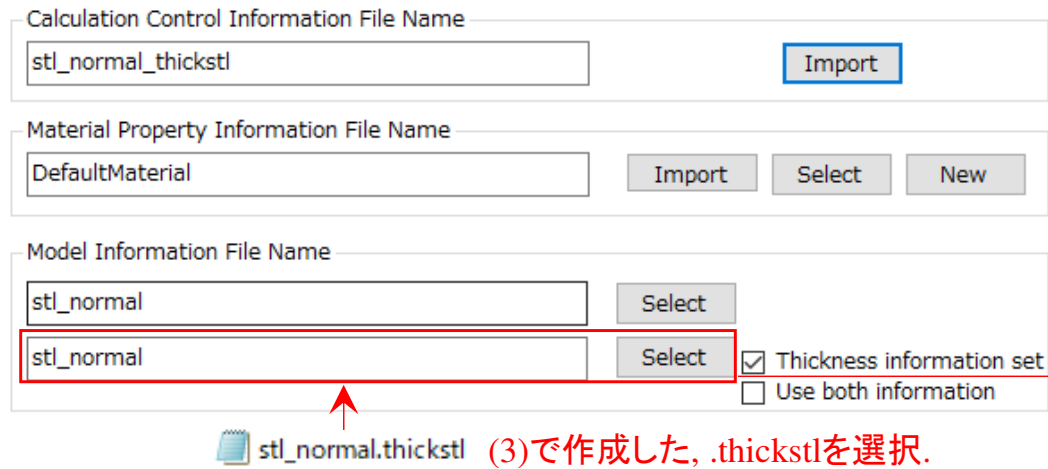
2. STLファイル
読み込み

3. 肉厚情報の更新メッシュ情報
(.thickstl) を保存

*本操作の詳細は, TSSVer10.0.0フォルダ内の
TSS要素肉厚変更方法まとめ(Ver9.0.0).pdf
を参照ください.

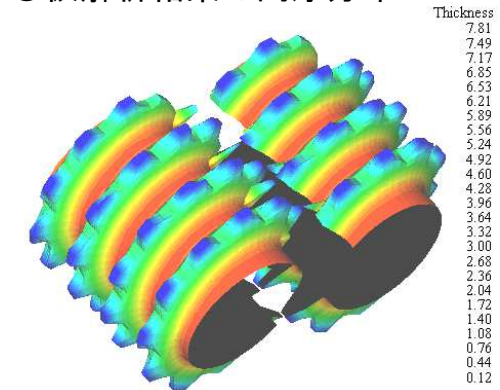
利用手順(Ver.10.0.0)／エレメントの事前準備

(4): (2)の仮解析の解析条件を読み込み, (3)で得られた .thickstl を追加して再度仮解析を実施します. 解析結果(.twinres) を読み込み, 意図通りの形状になっているかを確認します.



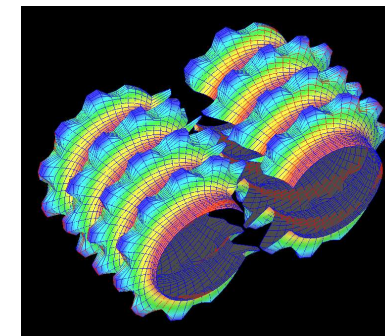
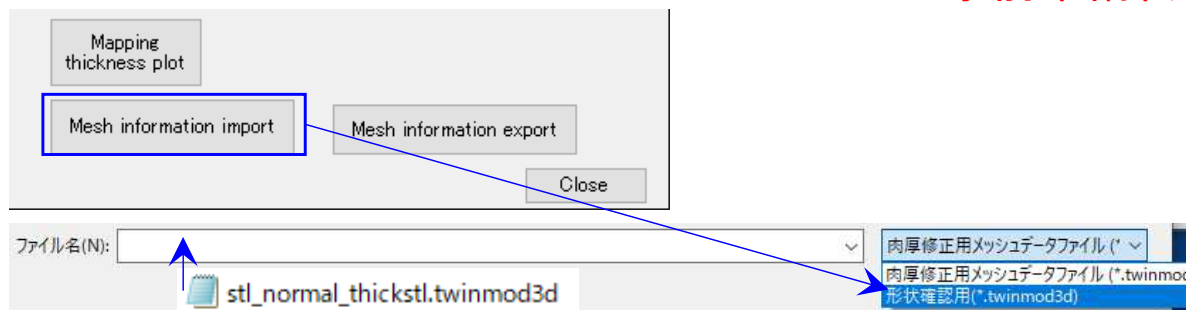
仮解析後の
解析結果
を読みこむ.

○仮解析結果の肉厚分布



(5): 解析後, メニュー/Model/CAD STL file information set をクリックし, Mesh information import ボタンをクリック後, ファイル選択の拡張子を, (4)の仮解析後に自動作成される “.twinmod3d” (新機能) に変更してメッシュ情報を読み込みます. 内容に問題がなければTSSを終了します.

⇒エレメント事前準備終了



利用手順(Ver.10.0.0)／事前準備したエレメントの利用方法

- (7): Screw modelingタブ画面にて、事前準備したエレメントを含むスクリュー構成のモデルをテンプレートで寸法設定して作成します。このとき、変更するエレメントの位置には、事前準備の手順(1) (p.97)で作成した寸法および要素分割数と同じ情報を設定する必要があります。

Screw Configuration

Blk.No.	Type	Rev. or Nor.	Radius Screw	Tips	Disk Angle	Pitch or Disk Thick.	Turns or Disk No.	Length	Division Number		
									Top	Flank	
1,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	20,	2,	40,	2,	10,	20
2,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	10,	4,	40,	2,	10,	20
3,	KD,	Nor.,	19.5,	2,	45,	8.0,	5.0,	40,	2,	10,	20
4,	SW,	Rev.,	19.5,	2,	0,	10,	4,	40,	2,	10,	20
5,	SW,	Nor.,	19.5,	2,	0,	20,	2,	40,	2,	10,	20

肉厚変更するエレメント
(手順(1)と同じ情報)

- (8): Screw modelingタブ画面下段の、STL information をチェック状態にすると、変更エレメント情報と変更位置の設定枠が表示されます。

The screenshot shows the software interface with several panels. On the left is the 'Input Parameters' panel. In the center is the 'Screw Configuration Information File' panel. On the right is a detailed view of the 'STL element information' panel, which is highlighted with a red box. This panel contains a 'Replaced Block No.' input field, 'Select' and 'Reset' buttons, and checkboxes for 'STL information' (checked) and 'Assemble import'. Below these are buttons for 'Min Thickness', 'Hopper info set', and 'Hopper meshing'. Red arrows and text annotations point to the 'Replaced Block No.' field and the 'STL information' checkbox.

1.チェック状態にする

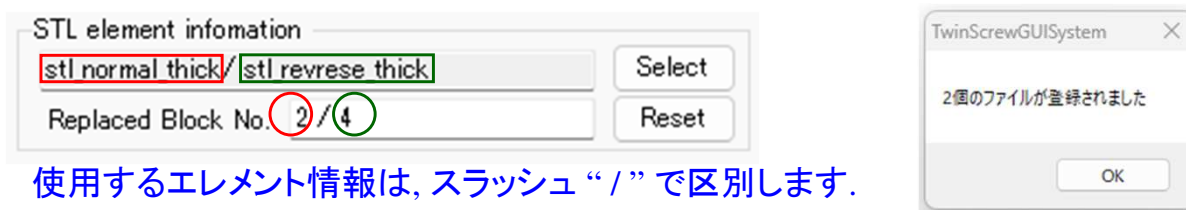
2.設定枠が表示

利用手順(Ver.10.0.0)／事前準備したエレメントの利用方法

(9): STL element information 内の Selectボタンをクリックし, 使用する事前準備したエレメント情報(.twinmod3d)を選択します. 次に, Replaced Block No. に変更するエレメントの位置に対応する Block No. を入力します.



*複数のエレメント情報を選択する場合には, 再度Selectボタンをクリックして, .twinmod3dを選択すると, 前回の情報に続いてファイルが登録されます.

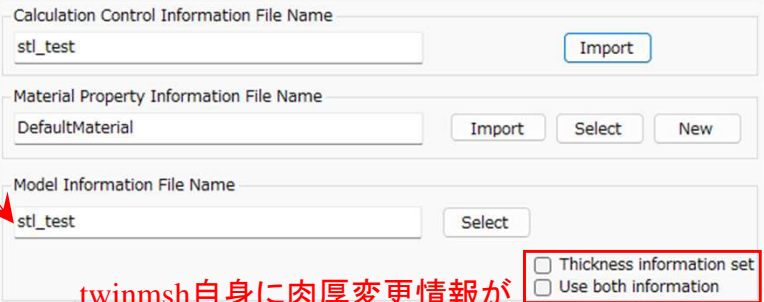


*同じエレメントを複数位置で使用する場合には, コンマ ”, “ で区切ってBlock No.を設定します.

設定イメージ例
Replaced Block No. 8,16,24, 38,47,52,54,57, 30

利用手順(Ver.10.0.0)／事前準備したエレメントの利用方法

- (10): 設定終了後、従来通りの方法で、スクリュー構成情報(.tsmodel)を保存します。
Meshing ボタンをクリックすると、肉厚変更を反映したメッシュモデルが作成されます。
内容に問題がなければ、従来通りの方法で、2.5Dメッシュファイル(.twinmsh)を保存します。
本方法で作成された、.twinmsh をAnalysisタブ画面で設定して解析します。



○解析結果の肉厚分布

stl_test.twinmsh

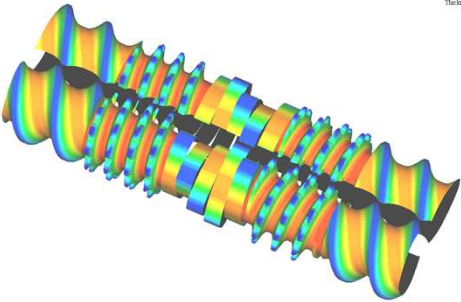
Calculation Control Information File Name
stl_test Import

Material Property Information File Name
DefaultMaterial Import Select New

Model Information File Name
stl_test Select

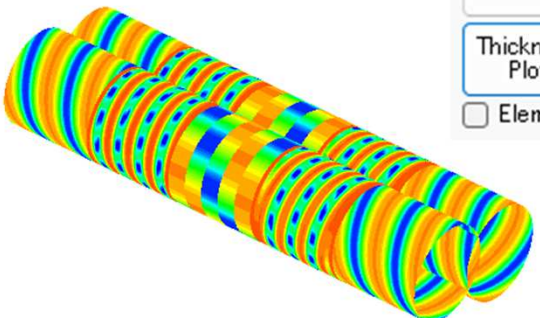
Thickness information set
 Use both information

.twinmsh自身に肉厚変更情報が含まれているため、オプション機能を使用する必要がありません。



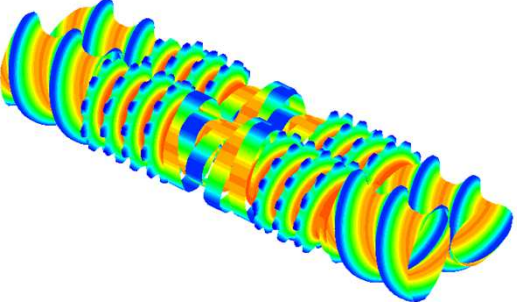
(参考)Screw modelingタブ内での、肉厚情報の確認方法

2.5Dメッシュ/Thickness Plot

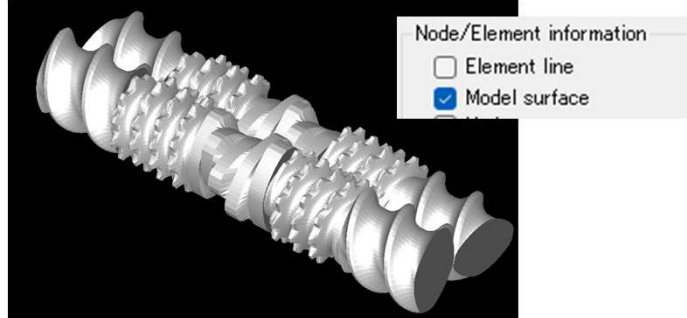


Meshing
Thickness Plot
 Element line

3Dメッシュ/Thickness Plot



3Dメッシュ/Model surface (Optionフォーム右上)



Node/Element information
 Element line
 Model surface

(参考) STLファイルなしでフライト摩耗の影響を確認する方法: Min Thickness

STL information の下に設置された, Min Thicknessボタンをクリックすると, フライト部の最小肉厚を設定するフォームが出現します. STLファイルを使用せずに, フライト摩耗の影響を確認する場合などの使用を想定しています.

STL information Assemble import

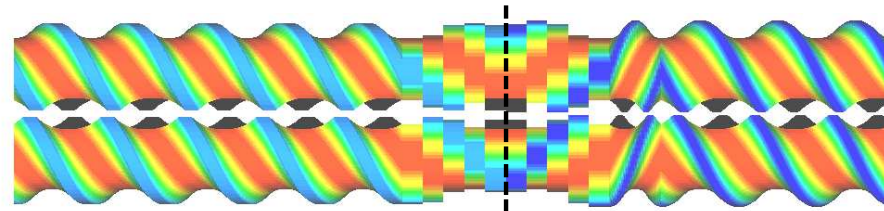
最小肉厚
 1.5mm
 0.5mm
 スクリュ軸方向の相対位置(0-1)
 0.0 1.5
 0.6, 1.5
 0.6, 0.5
 1, 0.5
 Set Mimumum Thickness on Elements
 Height Ratio (0-1) Minimum Thickness (mm)
 0.0 1.5
 Add Up Insert Delete
 Down Modify All Delete
 Set
 Close

Set Mimumum Thickness on Elements

チェック状態にすると, 本フォームでの変更がモデルに反映されます.

設定後にフォームを閉じて, Mesingボタンをクリックし, 変更状況を確認します. 意図通りの変更になっていることを確認し, メッシュファイル(.twinmsh) を保存します.

3Dメッシュ/Thickness Plot



下流側の最小肉厚が1.5mm ← 上流側の最小肉厚0.5mmに変更された.

全領域を一括変更する場合

Height Ratio Minimum Thickness Set Mimumum Thickness on Elements
 Height Ratio (0-1) Minimum Thickness (mm)
 0.0 1.5

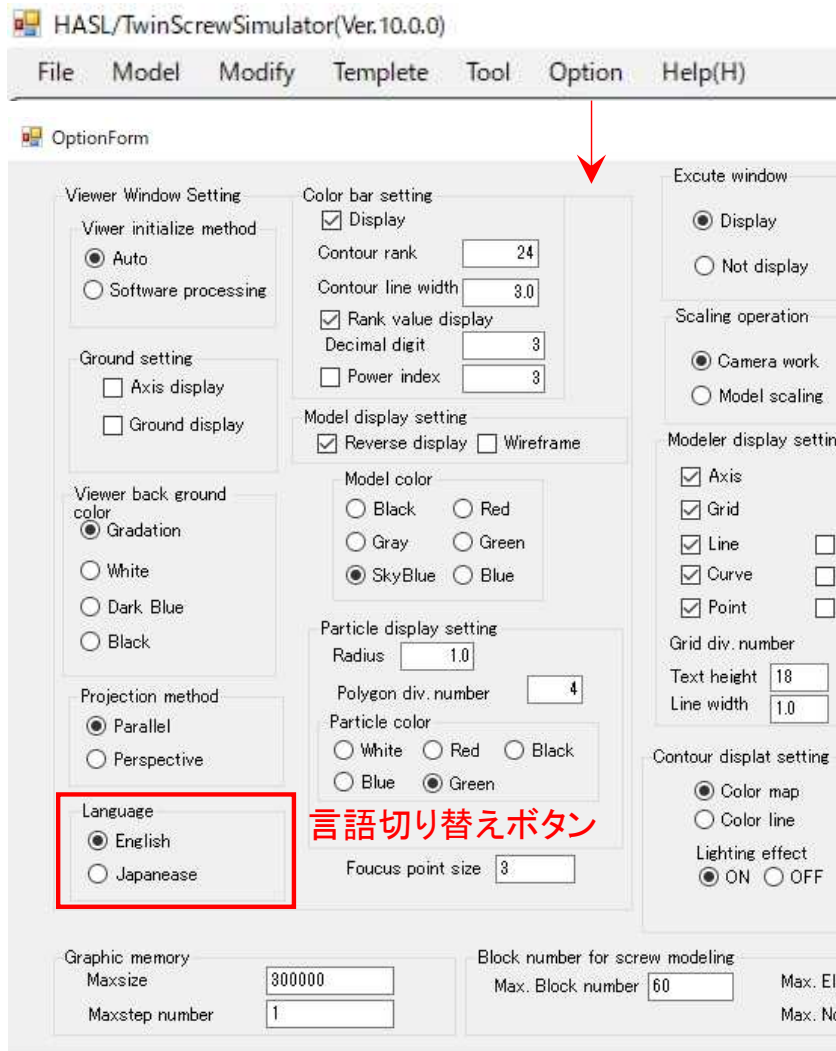
対象エレメントのみ変更する場合

Height Ratio Minimum Thickness Set Mimumum Thickness on Elements
 Height Ratio (0-1) Minimum Thickness (mm)
 0.0 1.5

(8) 言語設定の切り替え機能 (英/日)

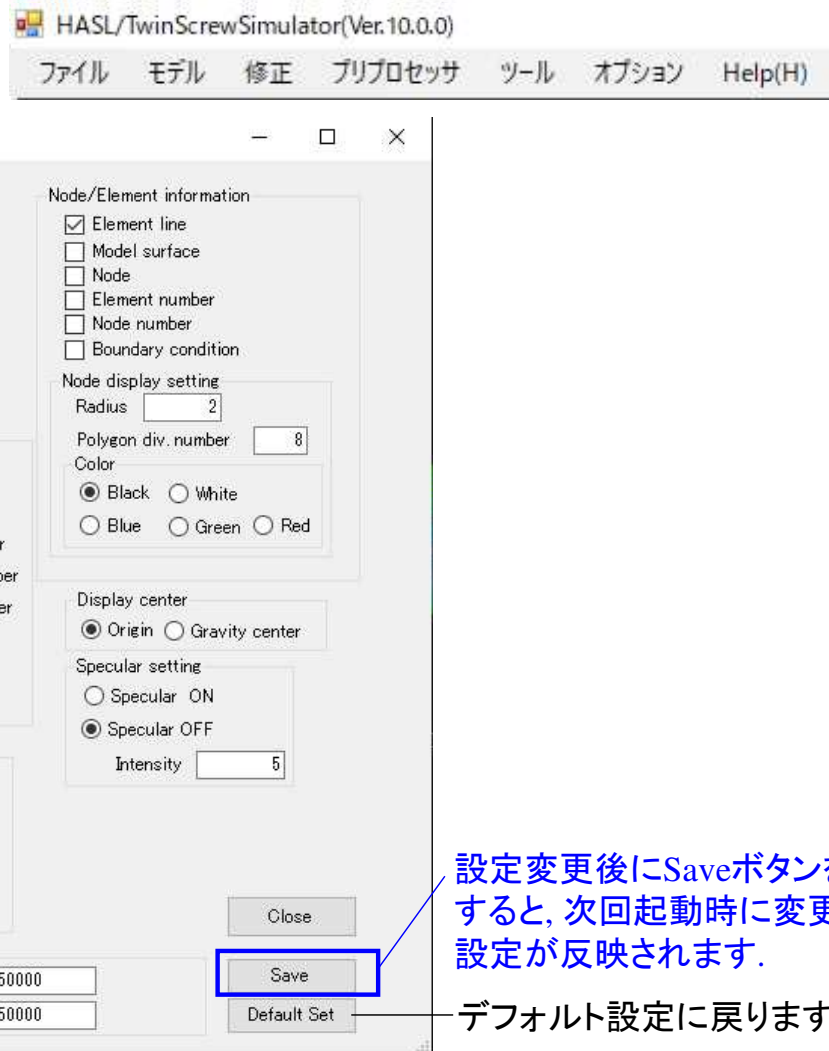
Twin Screw Simulator の使用言語に日本語が追加されました。

○English (デフォルト)



言語切り替えボタン

○Japanese (オプション)



設定変更後にSaveボタンをクリックすると、次回起動時に変更後の設定が反映されます。

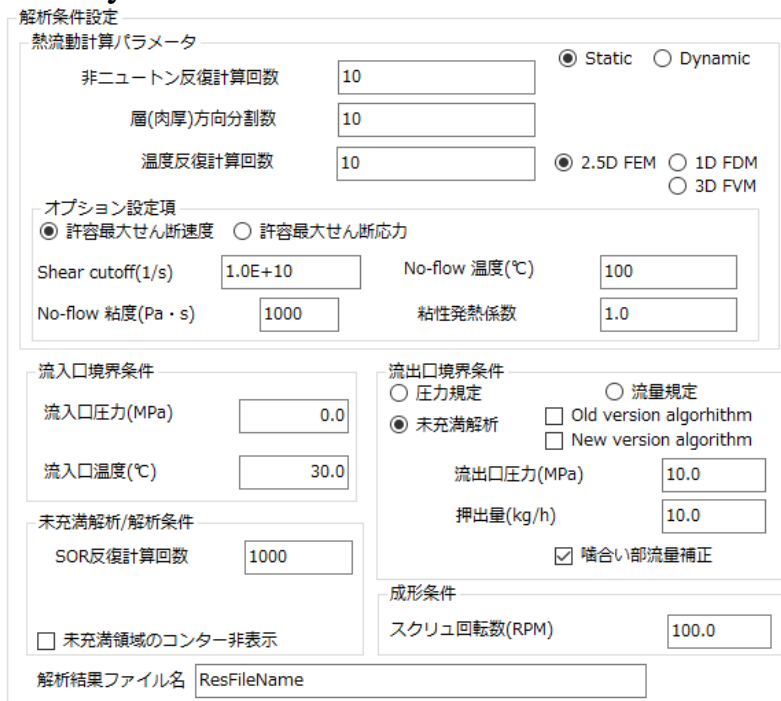
デフォルト設定に戻ります。

○日本語の表示例

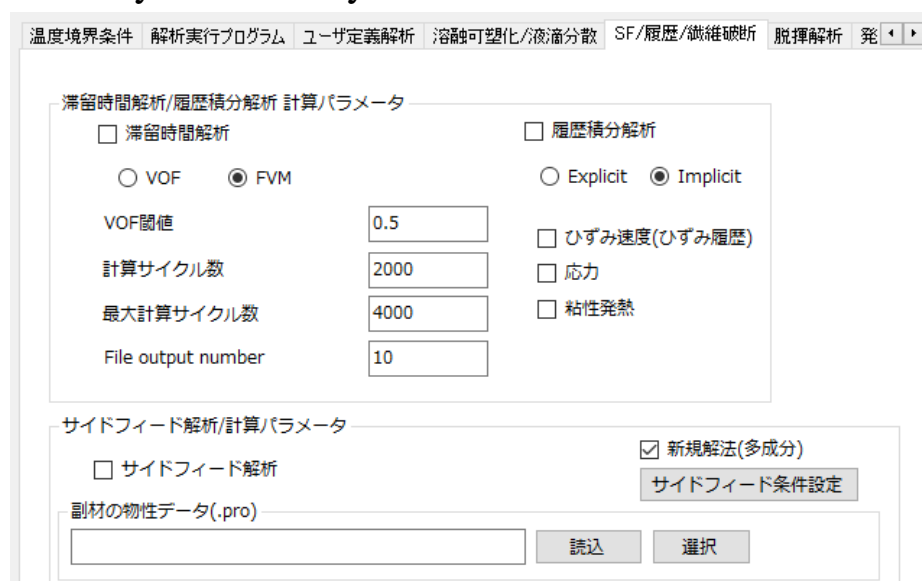
- Screw modeling タブ画面



- Analysis タブ画面 / 中段



- Binary condition system set タブ画面 / 上段



補足資料／Ver.10.0.0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。

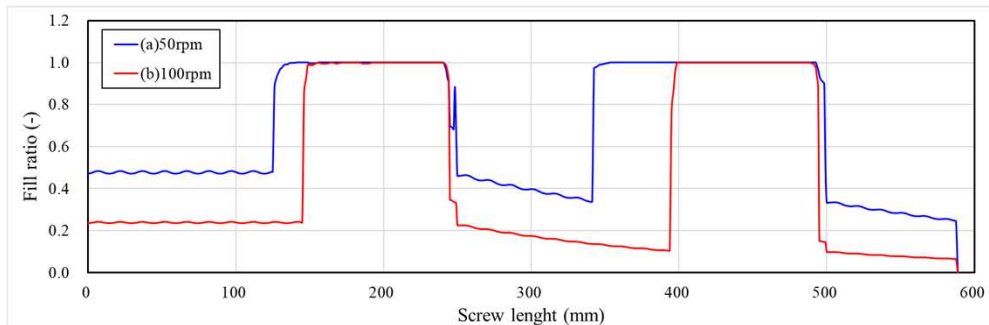
○ .suminf(fill) ファイル: 任意の解析条件において出力される。

【出力内容】スクリュ軸方向の各種平均物理量

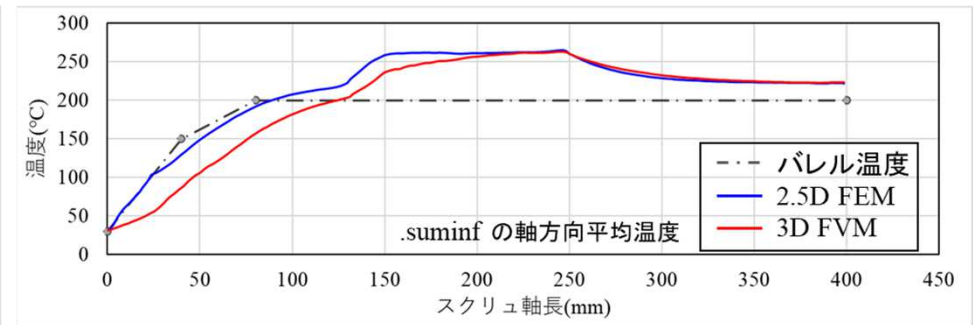
軸方向 分割数	軸方向 距離	充填率	流路 体積	区分 滞留時間	平均滞留時間 (区分積算)	バレル表面層のせん断速度 最小値, 平均値, 最大値			バレル表面層の熔融粘度 最小値, 平均値, 最大値			平均 温度	平均 圧力	平均 せん断速度	平均 熔融粘度	充填 要素数	周方向 要素数
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
n	zlength mm	fillnave	voln cc	dtm sec	restime sec	gammin o 1/sec	gamave or 1/sec	gammax o 1/sec	vismin on Pa*sec	visave on Pa*sec	vismax on Pa*sec	tempave C	presave MPa	gamave 1/sec	visave Pa*sec	countnfill	countn
1	0.00E+00	0.197207	0.818137	4.47E-02	4.47E-02	101.4539	175.8595	342.3474	1000	1000	1000	30	0.422299	314.4749	3166.667	24	76
2	0.833333	0.197724	0.815999	4.47E-02	8.94E-02	104.4508	149.8644	276.1723	1000	1000	1000	30.34247	0.378743	360.9225	3619.048	21	76
3	1.666667	0.198777	0.811676	4.47E-02	0.134172	108.2133	154.1205	317.9525	1000	1000	1000	30.79662	0.347516	363.9269	3619.048	21	76

- 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.43) スクリュ軸方向距離 B列 vs. 充填率 C列



(グラフ作成例, p.67) 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)

- Surface renewal devolatilization model calculation
- Thermal flow coupling

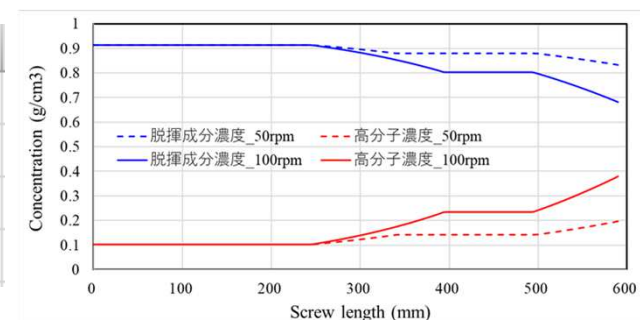
	軸方向 距離 (mm)	揮発成分 濃度(ppm)	暴露表面 境界長(cm)	Latinenモデルの 計算結果		拡散係数 (cm ² /s)	揮発成分 濃度平衡値 (ppm)
	A	B	C	D	E	F	G
1	0.00E+00	50					
2	0.833333	49.98967	12.84035	7.16E-04	2.56E-03	1.00E-06	1.00E-06
3	1.666667	49.97934	12.84035	7.16E-04	2.56E-03	1.00E-06	1.00E-06
4	2.5	49.96901	12.84035	7.16E-04	2.56E-03	1.00E-06	1.00E-06

【case2】揮発による流量減少を考慮する場合
(p.28-, 新機能)

- Surface renewal devolatilization model calculation
- Thermal flow coupling

	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	0.914603	5.466854	0.97	0.101623	1.00E-09	30	1
2	1.25	0.914603	5.466854	0.97	0.101623	1.00E-09	30.00437	1
3	2.5	0.914603	5.466855	0.97	0.101623	1.00E-09	30.01592	1
4	3.75	0.914603	5.466855	0.97	0.101623	1.00E-09	30.03312	1

(グラフ作成例, p.45)
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.28-, 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	5.466854	8.54E-02	0.914603	1.016225	20	0.00E+00	20	0.00E+00
2	1.25	5	5.466854	8.54E-02	0.914603	1.016225	20	0.00E+00	20	0.00E+00
3	2.5	5	5.466854	8.54E-02	0.914603	1.016225	20	0.00E+00	20	0.00E+00
4	3.75	5	5.466854	8.54E-02	0.914603	1.016225	20	0.00E+00	20	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.47-, 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
232	308.75	278289.1	349801.8	349996.7	349998.7	349998.4	349997	349990.3	349937.7	348347.1	216266.5
233	310	278289.1	349795.2	349996.6	349998.6	349998.4	349996.9	349990.1	349935.7	348281.1	216266.5
234	311.25	278289.1	349787.9	349996.5	349998.6	349998.3	349996.8	349989.8	349933.6	348209.2	216266.5
235	312.5	278289.1	349774.5	349996.3	349998.6	349998.3	349996.7	349989.2	349929.8	348077.7	216266.5

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

○ .mwincalinf ファイル: 分子量解析を実施した場合に出力される(p.47-, 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
232	308.75	310510.4	320807	325935.9	320882.6	309609.3	297390.8	284833.4	272063.1	257278.8	243095.7
233	310	310492	320793.1	325933.8	320885.1	309612.5	297394.9	284838.3	272068.3	257285	243106.9
234	311.25	309636.5	320106.9	325602.3	320774.8	309498.8	297267.8	284694.6	271905.8	257100.1	242904.6
235	312.5	308639.6	319274.1	325133.9	320579.9	309277.5	297000.6	284374.5	271527.7	256653.9	242400.4

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