

レオロジーと成形加工

CAE

谷藤 真一郎
株式会社HASL

〒179-0041 東京都練馬区石神井町3-30-23
石神井ウエスト201

TEL 03-5923-6988 FAX 03-5923-6987

E-mail:tanifuji@hasl.co.jp

URL:<http://www.hasl.co.jp>



AGENDA

	Page
◇材料特性のモデリング技術	
粘性モデリング	2
粘弹性モデリング	4
◇押出成形CAE	
弾性効果を反映した二次流れとダイスウェル解析	6
フィルム成形プロセスの粘弹性流動解析	14
◇ブロー成形CAE	
成形材料のひずみ硬化性とすべりを考慮した真空成形解析	29
◇スクリュCAE	
二軸スクリュ内の液滴分裂/合体解析	35

◇材料特性のモデリング技術

粘性モデリング

高分子溶融体の粘度は、温度及びひずみ速度に依存して変化する。その特性を正確にシミュレーションで考慮することが重要あり、現状、粘度特性の表現に適した様々な粘度モデルが提案されている。

The screenshot shows the HASL website with several software modules listed:

- FlowSimulator3D
- Single Screw
- Twin Screw
- Flat Simulator
- Spiral Simulator
- HyperBlow
- Materialfit
- NAPLES

A specific section for "Materialfit" is highlighted, showing a graph of shear stress vs. shear rate and a "Materialfit" logo.

Materialfit の特長・機能

特長・機能 適用事例	① 溶融樹脂の各種レオロジー実測データより解析用モデルパラメータを導出するツール ② 非ニュートン純粘性流体のせん断特性 ③ 粘弾性流体のレオロジー特性の: a) 計算/損失弾性率の周波数; ; マスター曲線作成、離散型線; b) せん断粘度、第1法線応力差、 過渡1軸伸張粘度のひずみ速度 モデルの非線形パラメータの導出; ④ マニホールド内での各部のせん断	無償商品につきましては、注文フォームで申込みいただきますと ダウンロード先をお知らせいたします。 有償商品につきましては、注文フォームで申込みいただきますと 折り返し、請求書(PDFファイル)および振込先をご返信します。 お支障からの入金(銀行振込)確認後、ダウンロード先をご案内 いたします。※詳細はお問い合わせください。
---------------	--	---

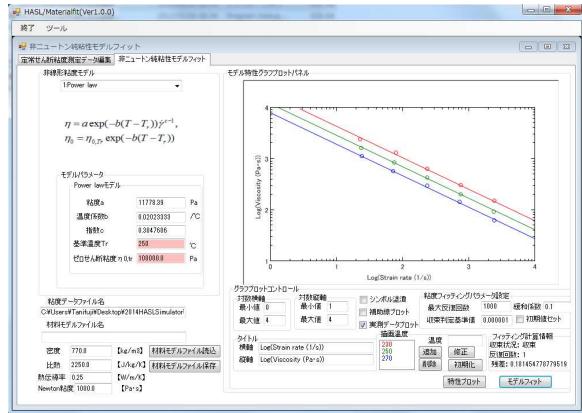
注文フォーム

株式会社 HASL (ハスル)
〒177-0041 東京都練馬区石神井町 3-30-23 石神井リズタ 201
TEL: 03-5923-6988 FAX: 03-5923-6987
URL: <http://www.hasl.co.jp> Email: info@hasl.co.jp

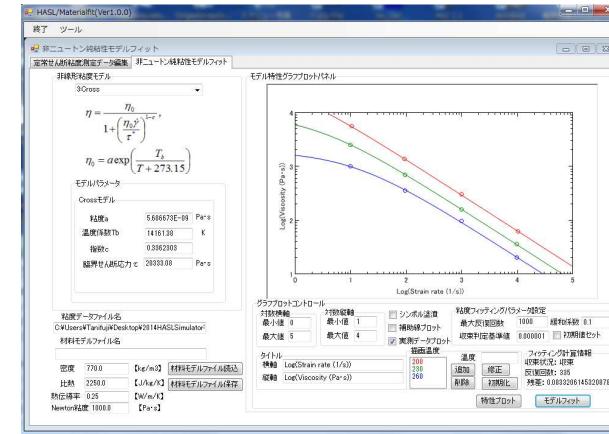
Copyright 2010- HASL Co., Ltd. All Rights Reserved.

ボタンを押すことで、注文フォームが表示されます。当フォーム内で無償ソフト利用の申請が可能です(但し、非線形粘度フィット機能に限定)。

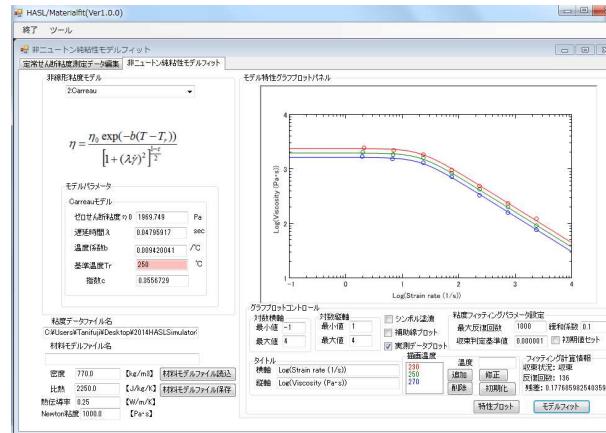
Power law model: フローカーブを一定勾配の直線で表現



Cross model:
フローカーブの曲率を表現可能。
利用頻度高い。

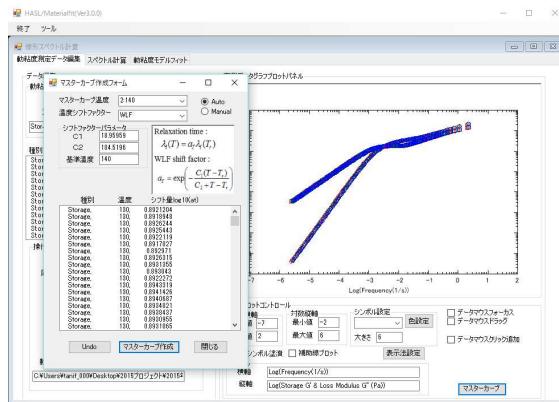


Carreau model: フローカーブのゼロせん 断領域とずり流動領域の 両特性を表現可能。

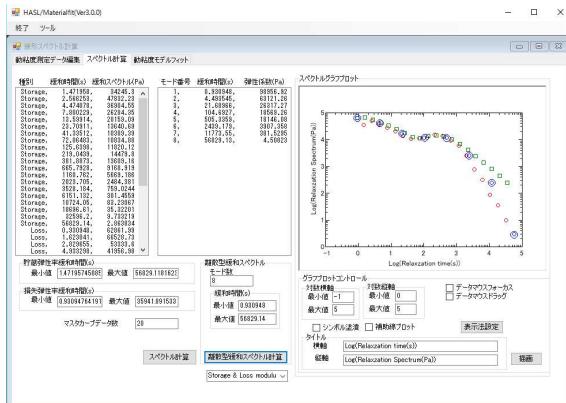


粘弹性モデリング

① 動粘度マスターカーブの作成



② 離散型緩和スペクトルの計算



Relaxation time:

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

Arrhenius shift factor :

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

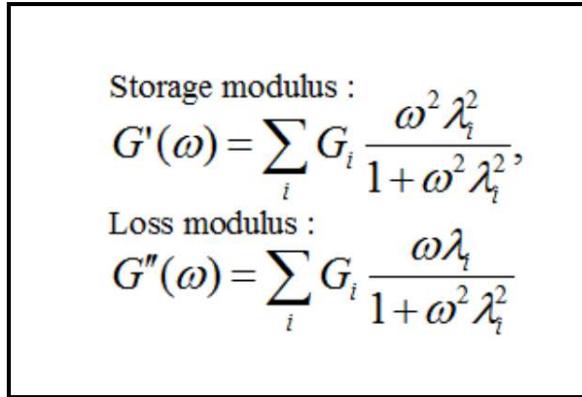
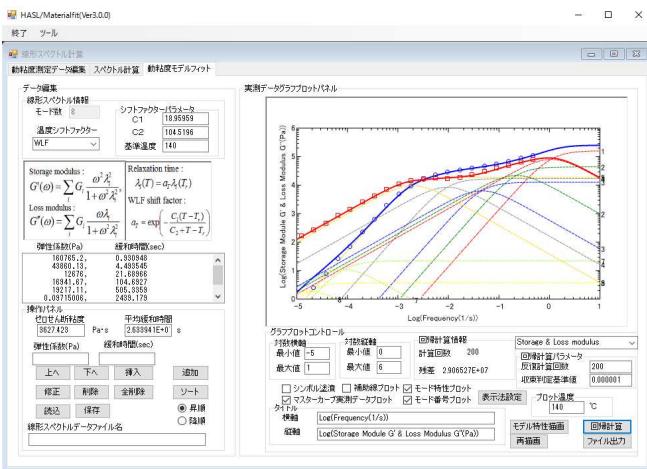
G_i :離散型緩和弾性率(Pa)

λ_i :離散型緩和時間(s)

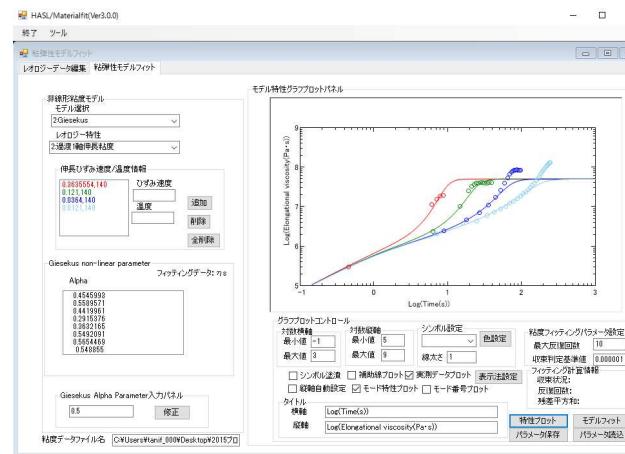
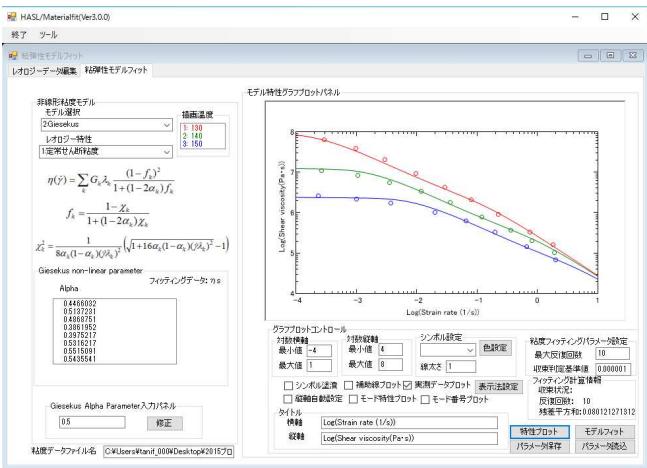
全ての粘弹性モデルに
共通のパラメータ

$$\eta = \sum_{i=1}^n G_i \lambda_i : \text{粘度(Pa}\cdot\text{s)}$$

③ 動粘度フィットによる離散型緩和スペクトルの計算値の補正



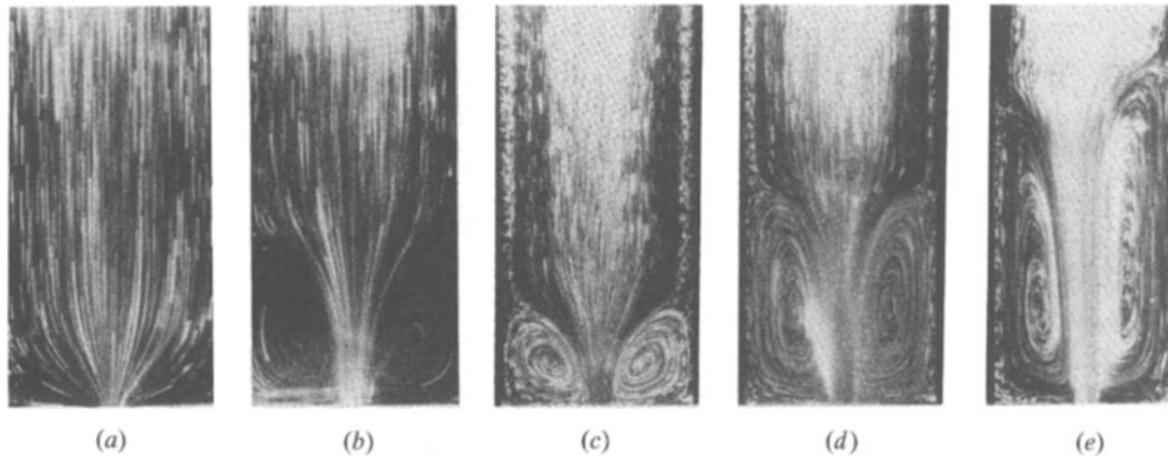
④ 非線形粘弹性パラメータの計算



◇押出成形CAE

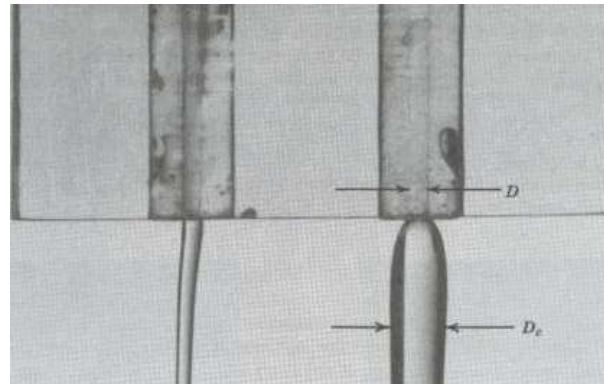
弾性効果を反映した二次流れとダイスウェル解析

Contraction flow



出典:D. B. Boger and H. Nguyen, Polym. Eng. Sci., **18**, 1038 (1978)

Die swell



出典:A. S. Lodge, *Elastic Liquids*, Academic Press, New York (1964)

Criminale-Ericksen-Filbey model

$$\tau = 2\eta(\dot{\gamma})D - \psi_1(\dot{\gamma})\overset{\bullet}{D} + 4\psi_2(\dot{\gamma})D \bullet D,$$
$$\overset{\nabla}{D} = \frac{\partial D}{\partial t} + u \bullet \nabla D - LD - DL^T$$

第一法線応力差係数 **第二法線応力差係数**

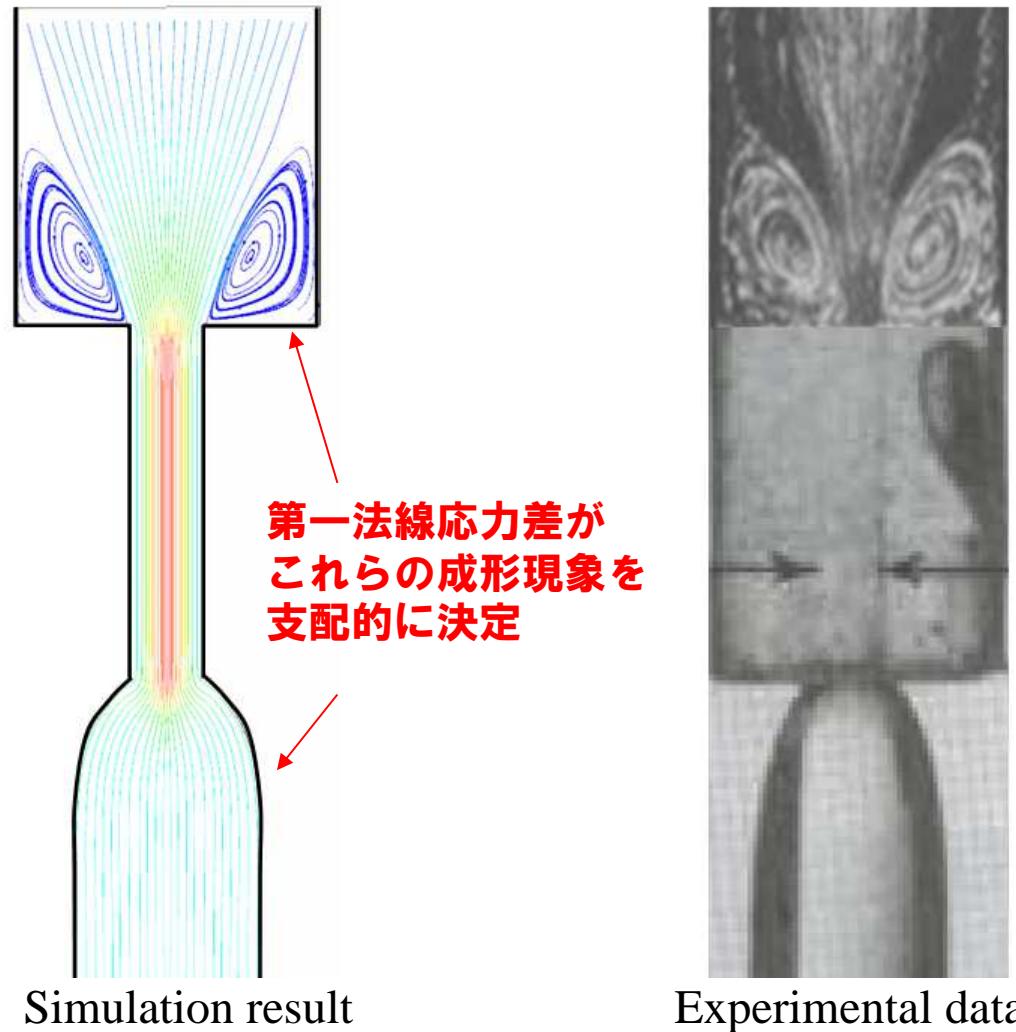
τ : 余剰応力テンソル L: 速度勾配テンソル
 η : 流体粘度 $\dot{\gamma}$: ひずみ速度
D: 変形速度テンソル
 ψ_1 / ψ_2 : 第一/第二法線応力差係数

粘弾性モデルの定量化に際して重要になる第一/第二法線応力差を考慮可能

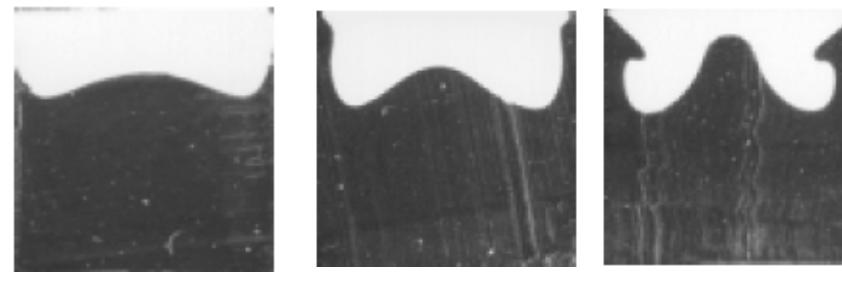
第一/第二法線応力差係数を粘度モデルと同様、代数式でフィット可能
粘性流体解析結果として算出される変形速度テンソルDを用いて、法線応力差が評価されるため、計算負荷が小さい（粘性流体解析と同等）

計算安定性に優れる（但し、CEFモデルは厳密な粘弾性モデルでは無い）

CEFモデルを利用した断面急変流れとダイスウェル解析結果

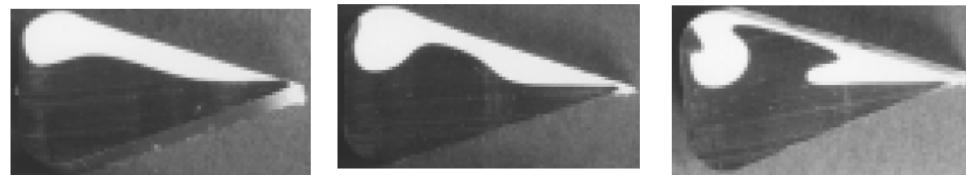


Encapsulation flow



Down stream →

角柱流路を流れる溶融樹脂断面内の界面変形挙動

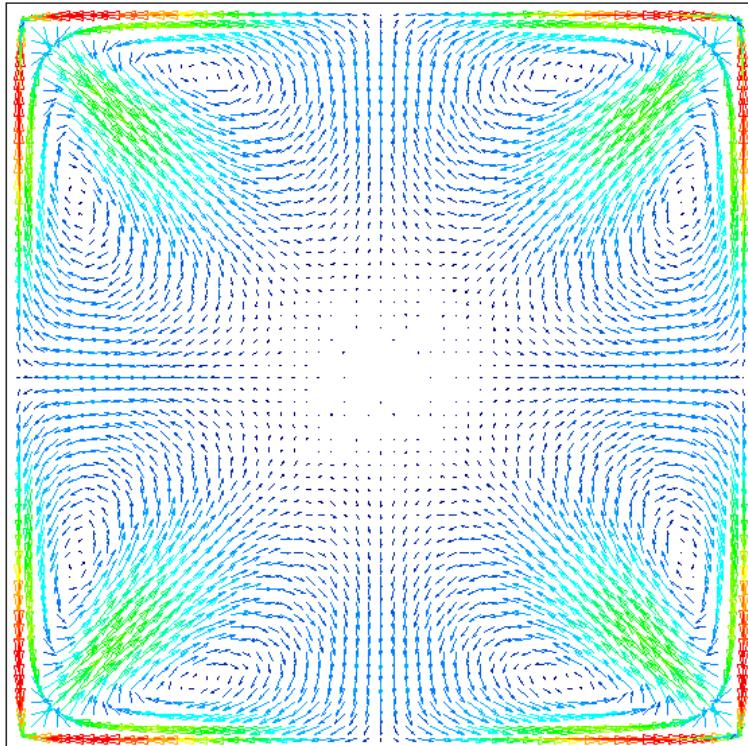


Down stream →

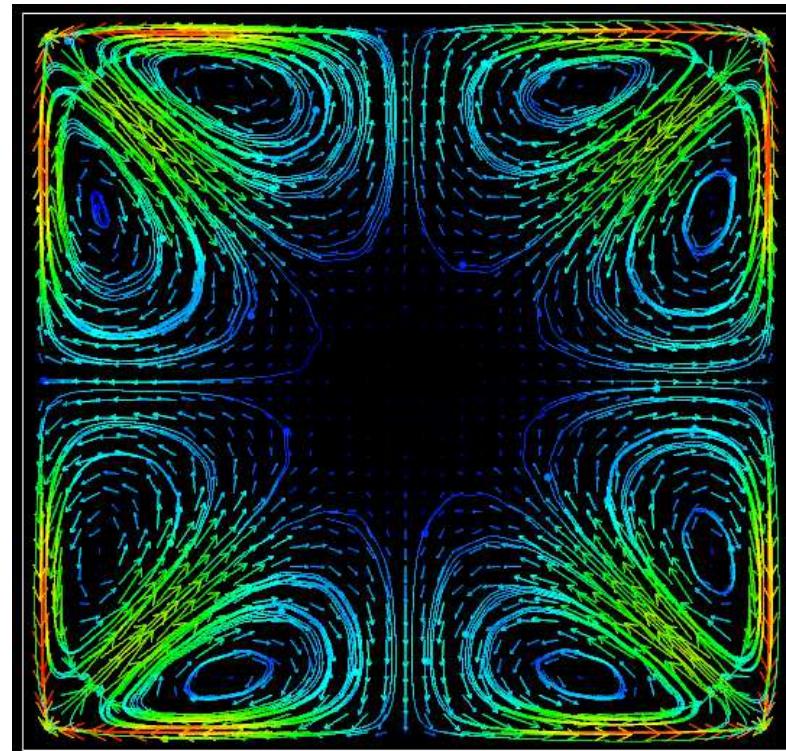
Tear drop断面流路を流れる溶融樹脂断面内の界面変形挙動

出典: Experimental data: Viscoelastic Flow Effects in Multilayer Polymer Coextrusion / by Joseph Dooley, Ph-D thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2002

第二法線応力差がこれらの成形現象を支配的に決定



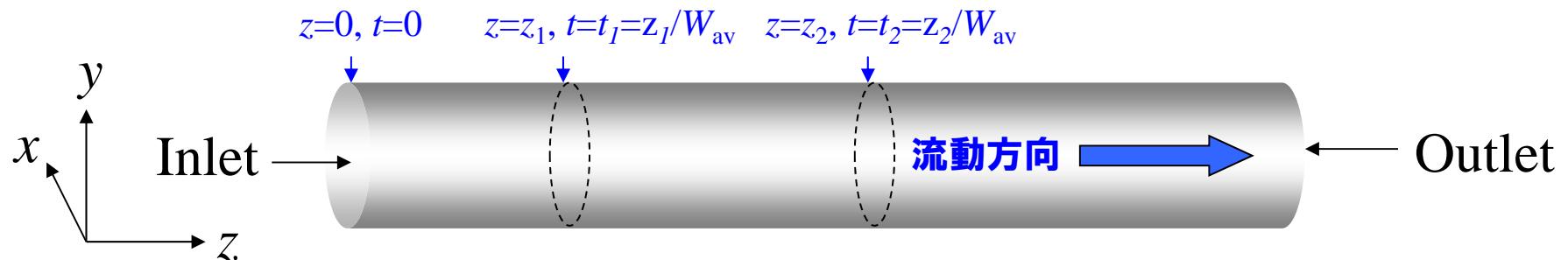
流速ベクトル分布



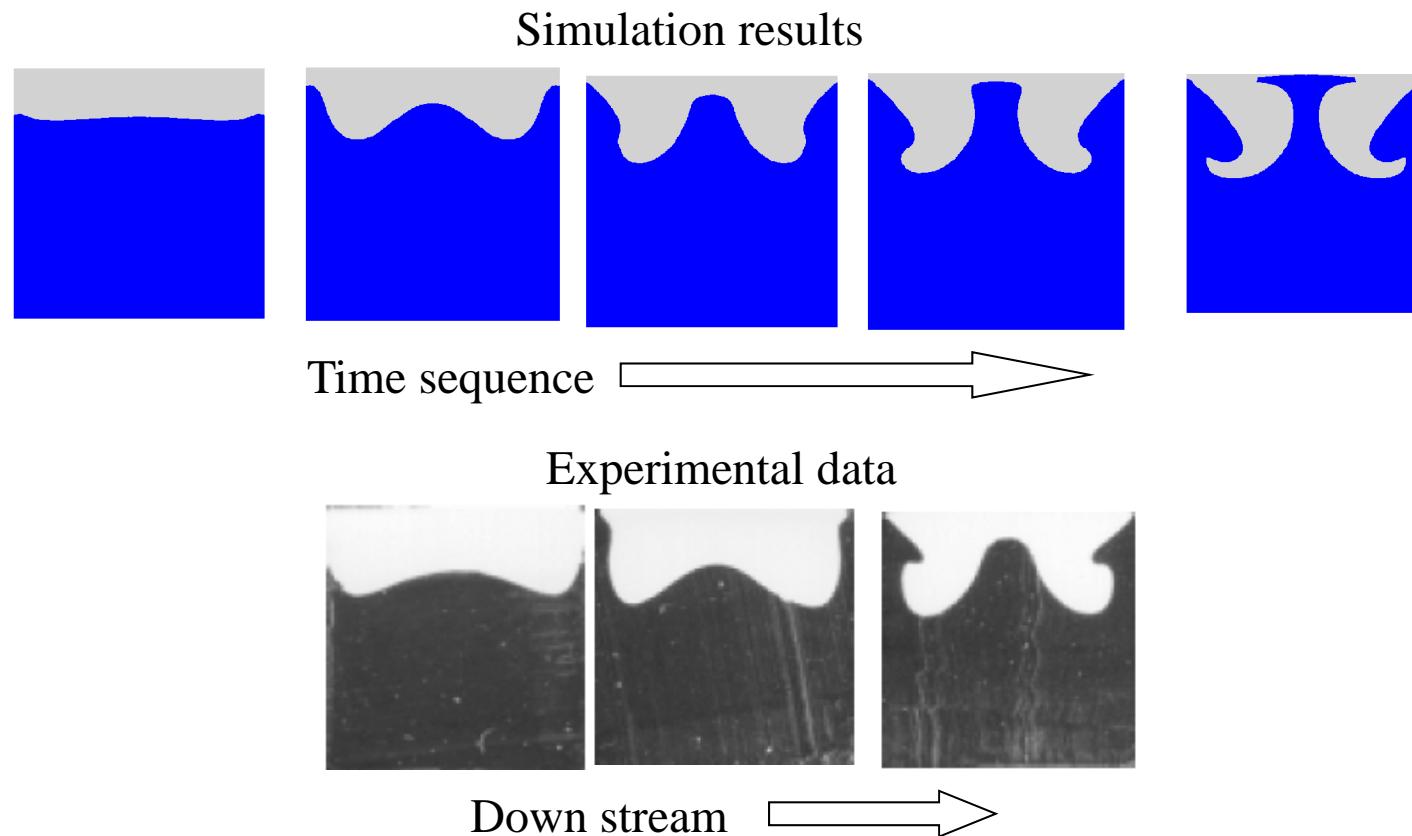
流線分布

CEFモデルを利用した角柱断面内二次流れの解析結果

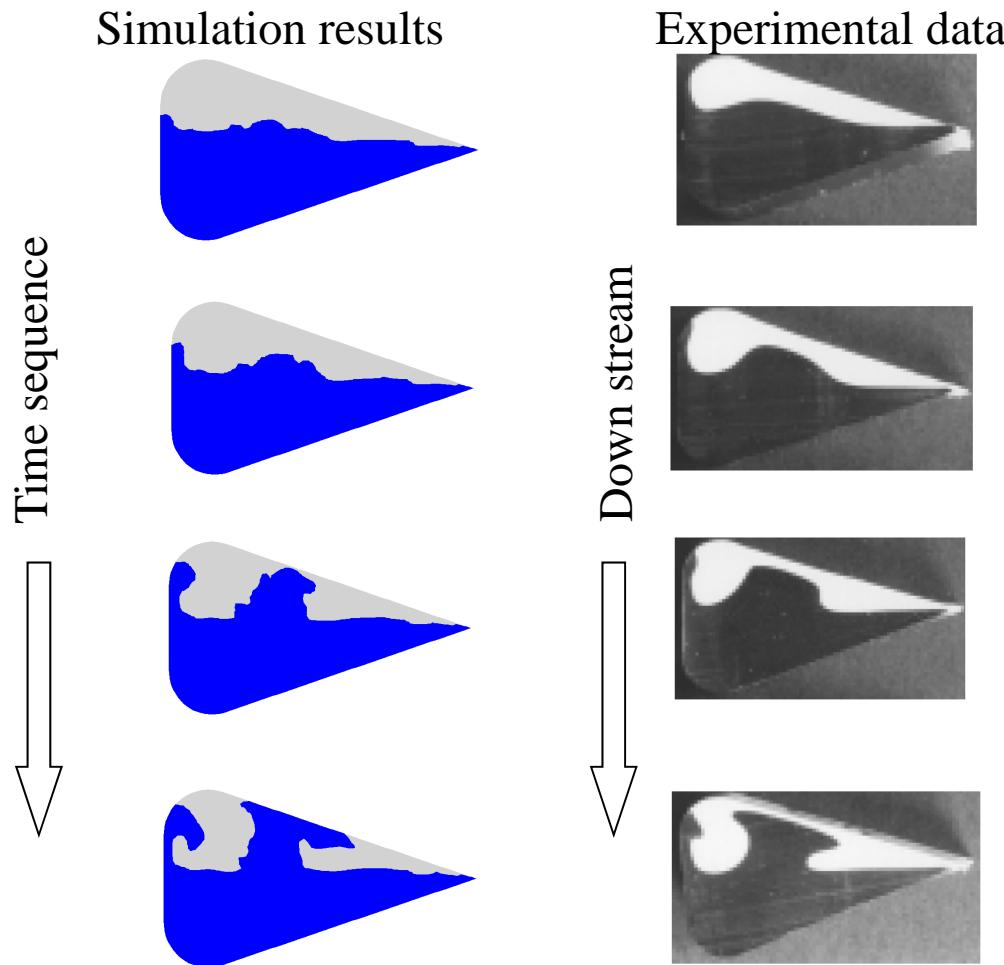
包込シミュレーションにおける界面追跡法



下流側に向けての界面観測位置の変化を樹脂
到達時間の差と見なし、非定常の界面追跡法で
あるVOF(Volume Of Fluid)法を適用



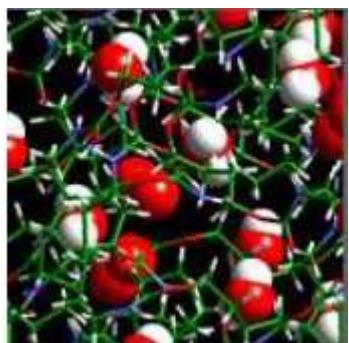
角柱流路を流れる溶融樹脂断面内の界面変形挙動に対するシミュレーション結果と実測値の比較(单層流体)



Tear drop断面流路を流れる多層溶融樹脂断面内の界面変形挙動に対する
シミュレーション結果と実測値の比較(青色領域:高粘性流体)

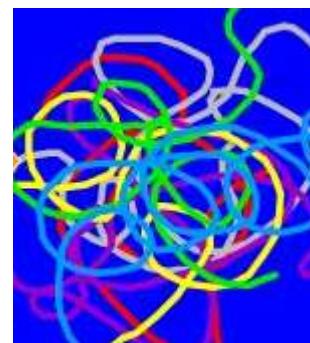
フィルム成形プロセスの粘弹性流動解析

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



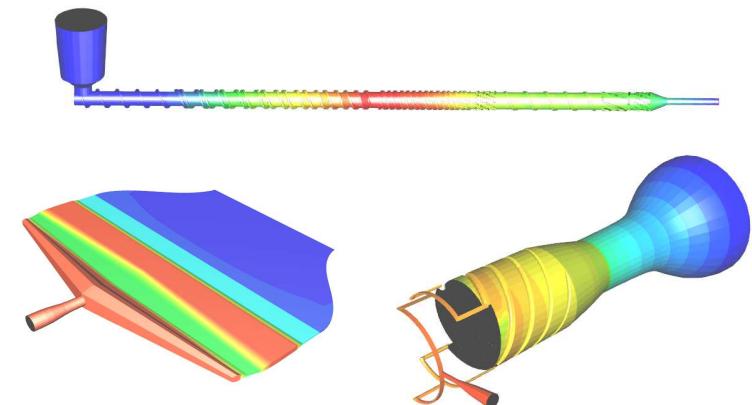
Molecular Dynamics
Micro-scale simulation

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



Rheology
Meso-scale simulation

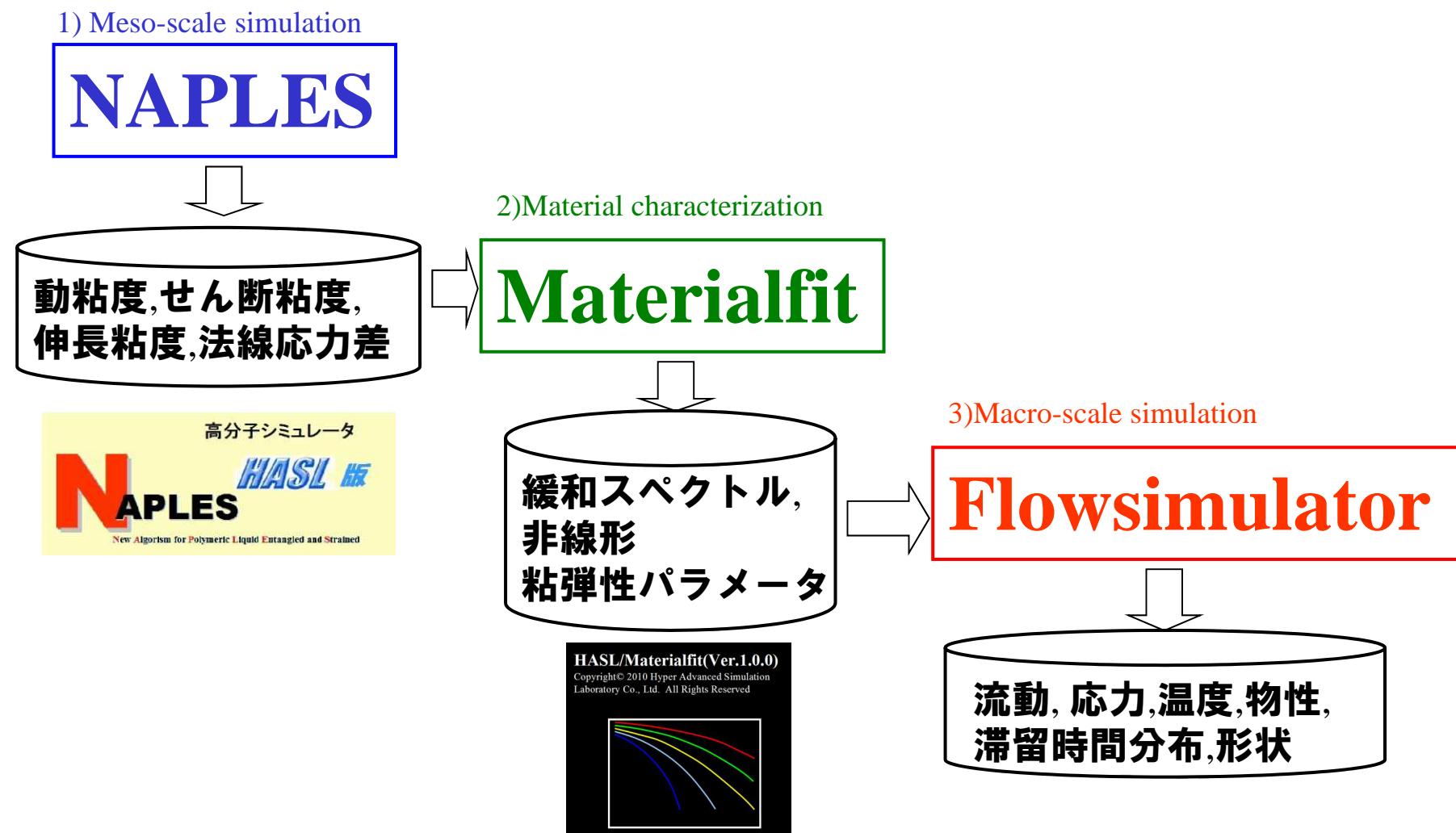
$10^{-7}\sim10^{-4}\text{m}$
 $10^{-3}\sim10^3\text{sec}$



Polymer processing
Macro-scale simulation

$10^{-3}\text{m}<$
 $0.1\text{sec}<$

多階層解析技術



非線形粘弹性構成方程式

(Multi mode Exponential type PTT model):

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

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

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

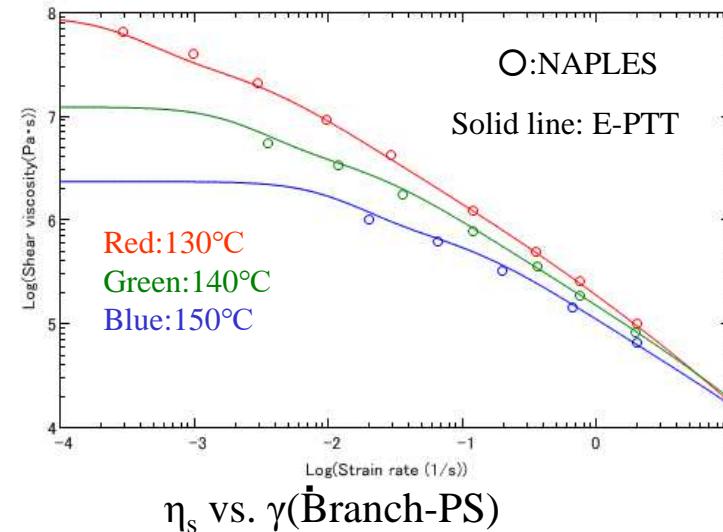
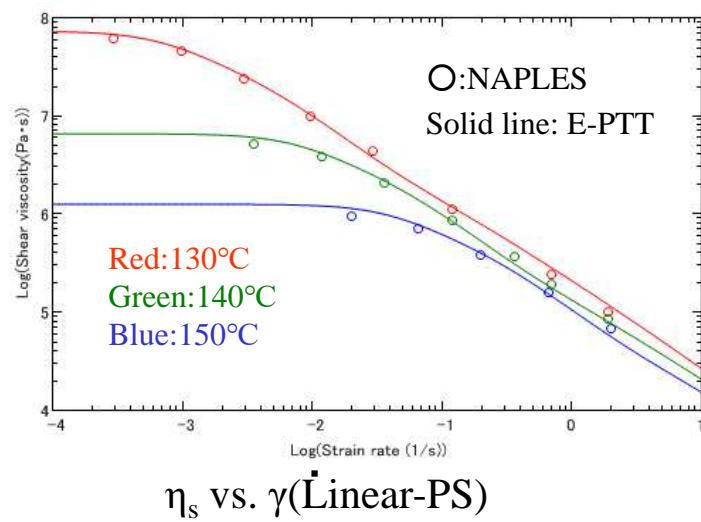
を利用し、従来の純粘性解析では表現されない法線応力を定量化。

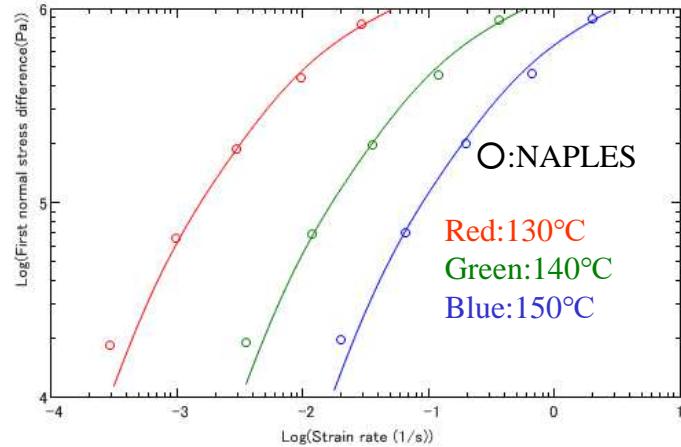
材料物性

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

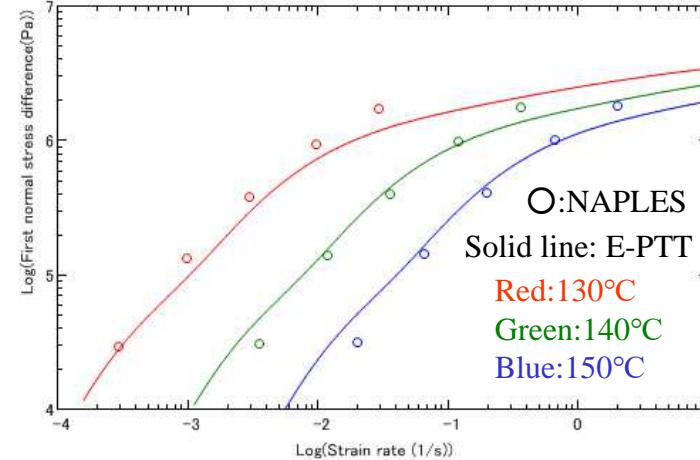
両者は、せん断粘度が、ほぼ等しく、伸長粘度と法線応力差が大きく異なる。

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

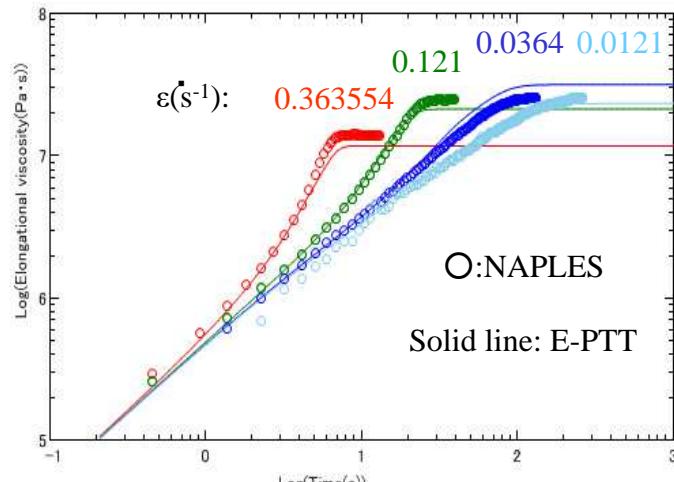




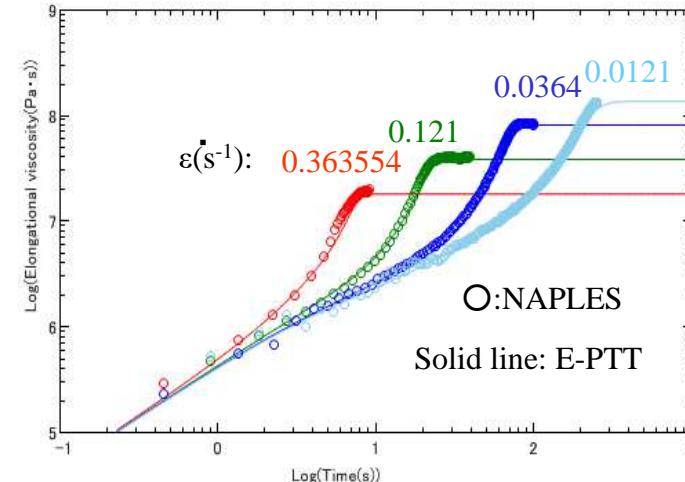
N_1 vs. γ (Linear-PS)



N_1 vs. γ (Branch-PS)

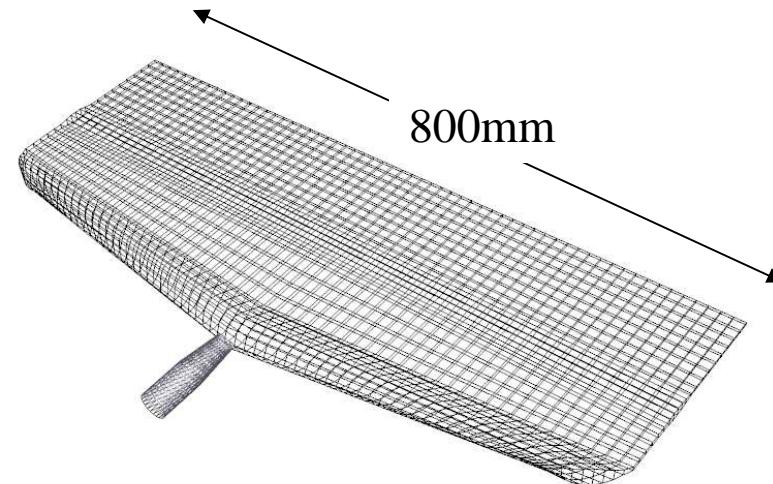
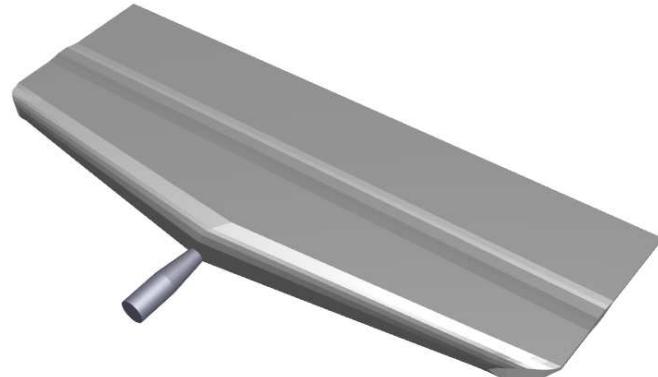


η_e vs. t (Linear-PS, 140°C)



η_e vs. t (Branch-PS, 140°C)

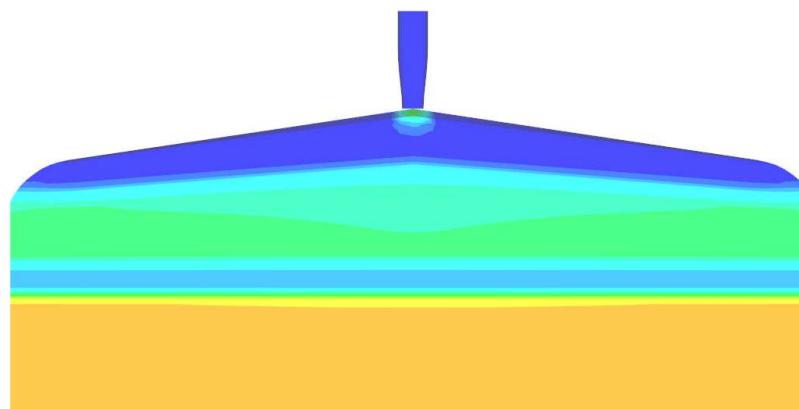
有限要素解析モデル



成形(計算)条件

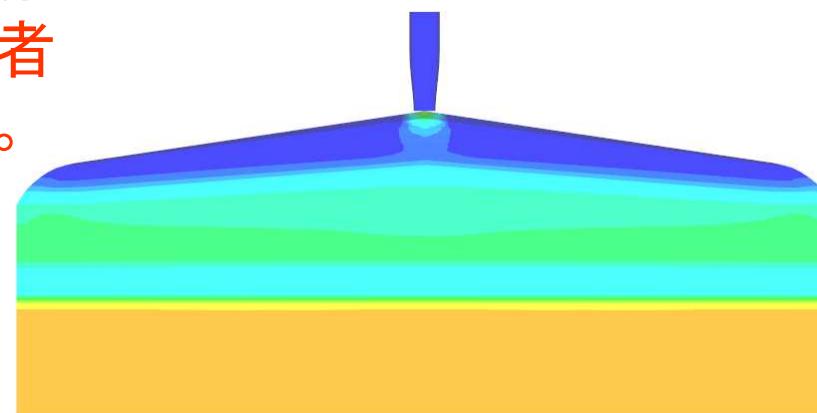
流量	20kg/h
流入温度	220°C
ダイ壁面温度境界条件	環境温度200°C 熱伝達係数300W/m ² /K

解析結果



Linear-PS

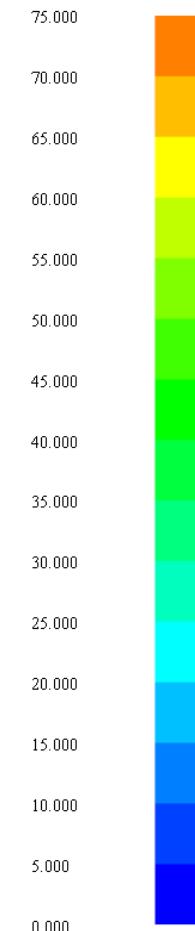
予想通り、せん断
応力分布は、両者
間でほぼ等しい。



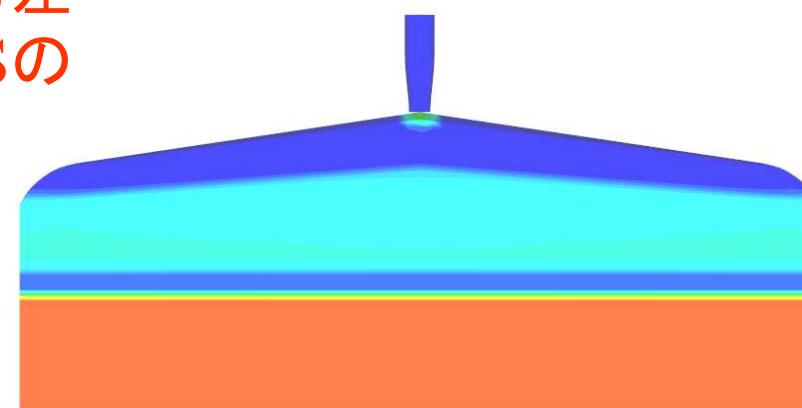
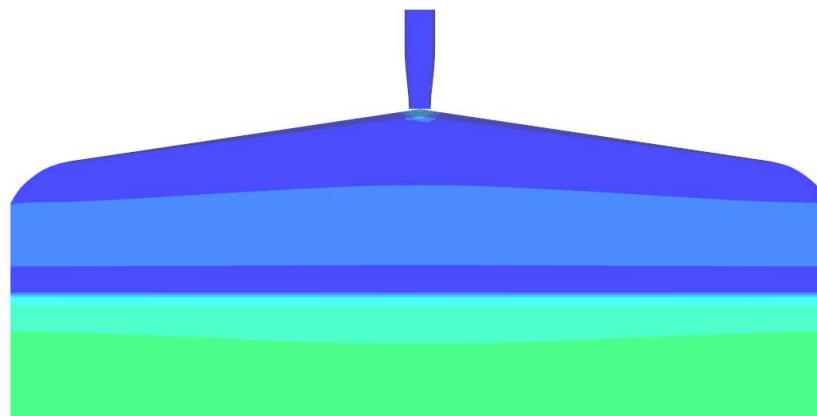
Branch-PS

せん断応力分布解析結果

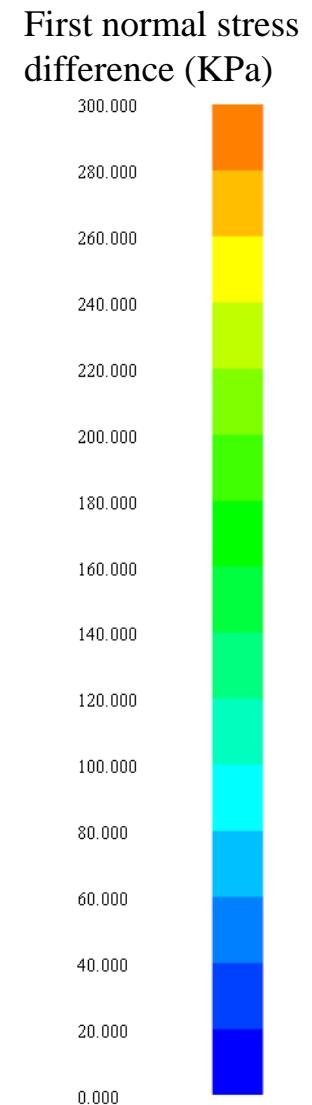
Shear stress (KPa)



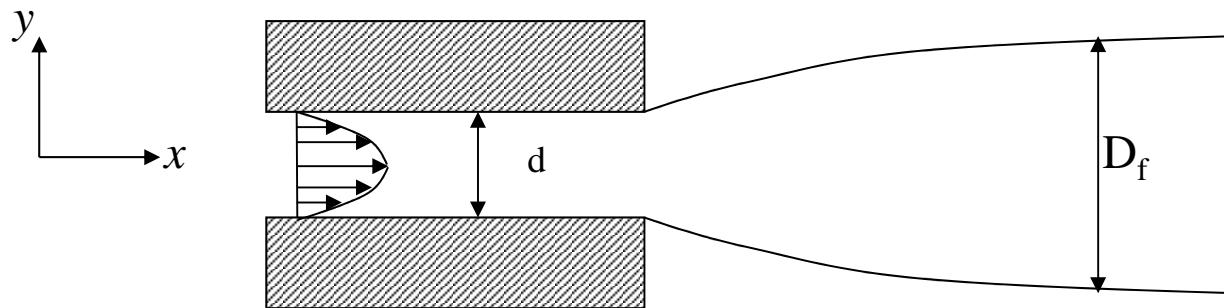
第一法線応力差
は、Branch-PSの
方が大きい。



第一法線応力差分布解析結果

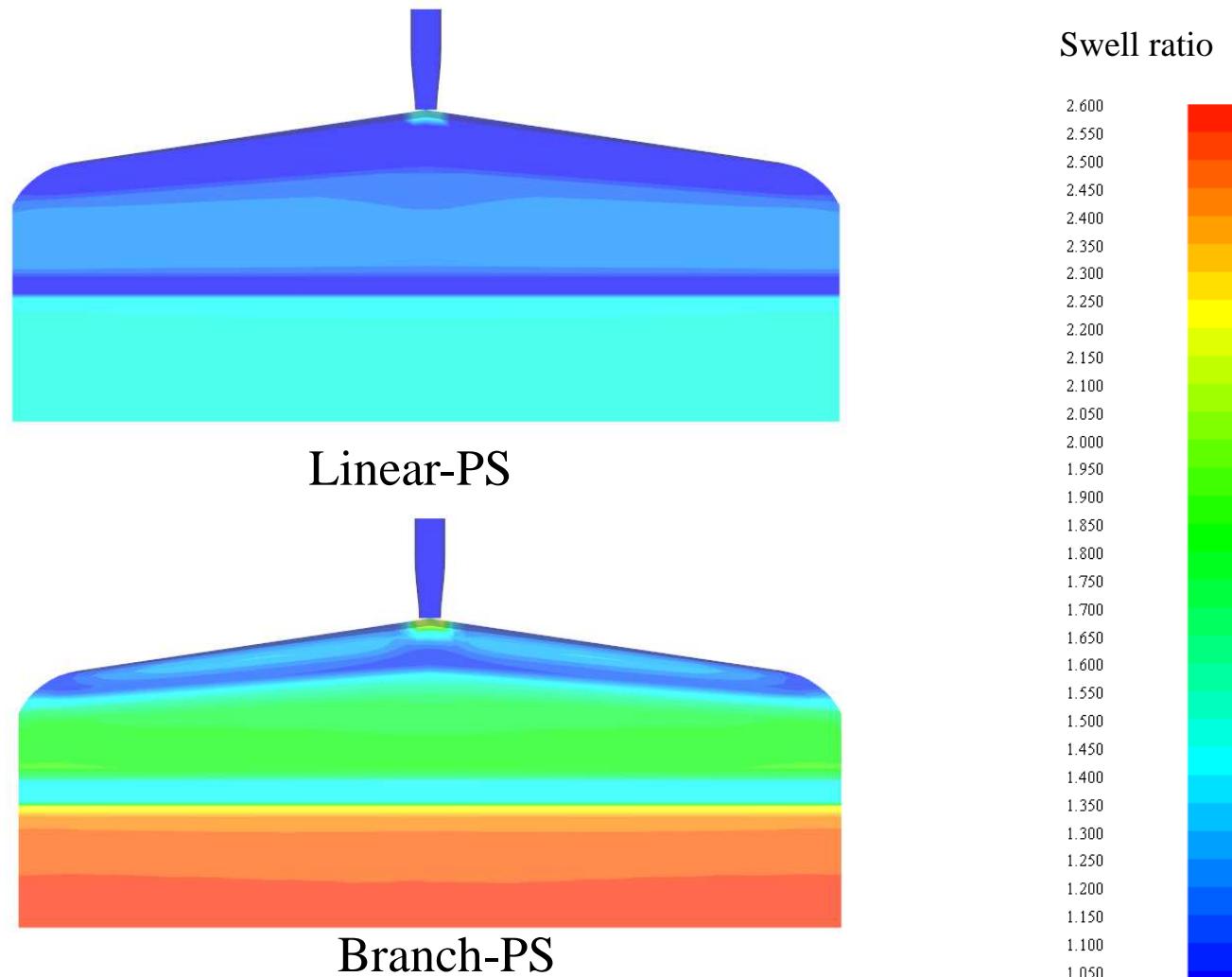


せん断応力 τ と第一法線応力差 N_1 を計算することで、スウェル比の簡易予測が可能。

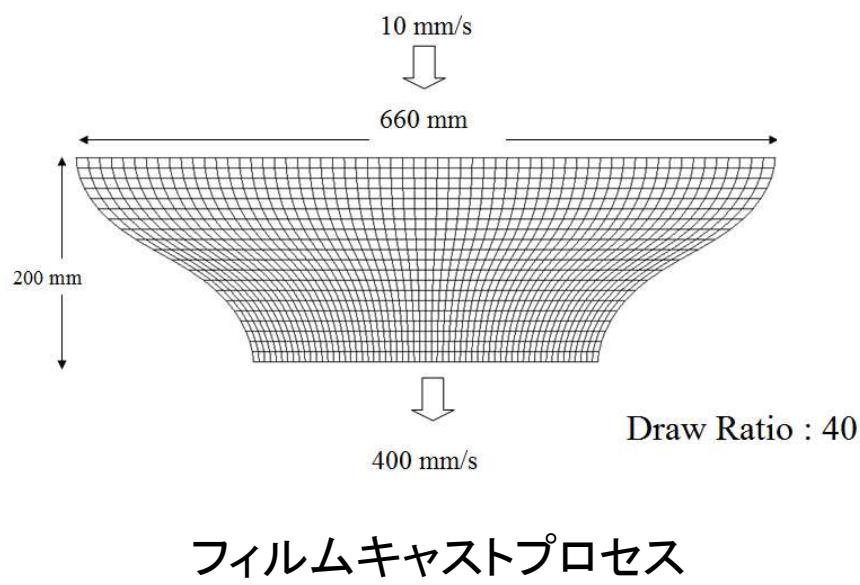


$$\chi = \frac{D_f}{d} = \left[1 + \frac{1}{12} \left(\frac{N_1}{\tau} \right)_w^2 \right]^{1/4}$$

$$N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}, \quad \text{Tanner's theory}$$
$$\tau = \tau_{xy}$$



解析モデル



ケーススタディ一覧

Case	緩和弾性率 (Pa)	緩和時間(s)	Giesekus αパラメータ
0	-	-	-
1	100000.0	0.01	0.5
2	10000.0	0.1	
3	1000.0	1.0	
4	10000.0	0.1	0.1
5	10000.0	0.1	0.9

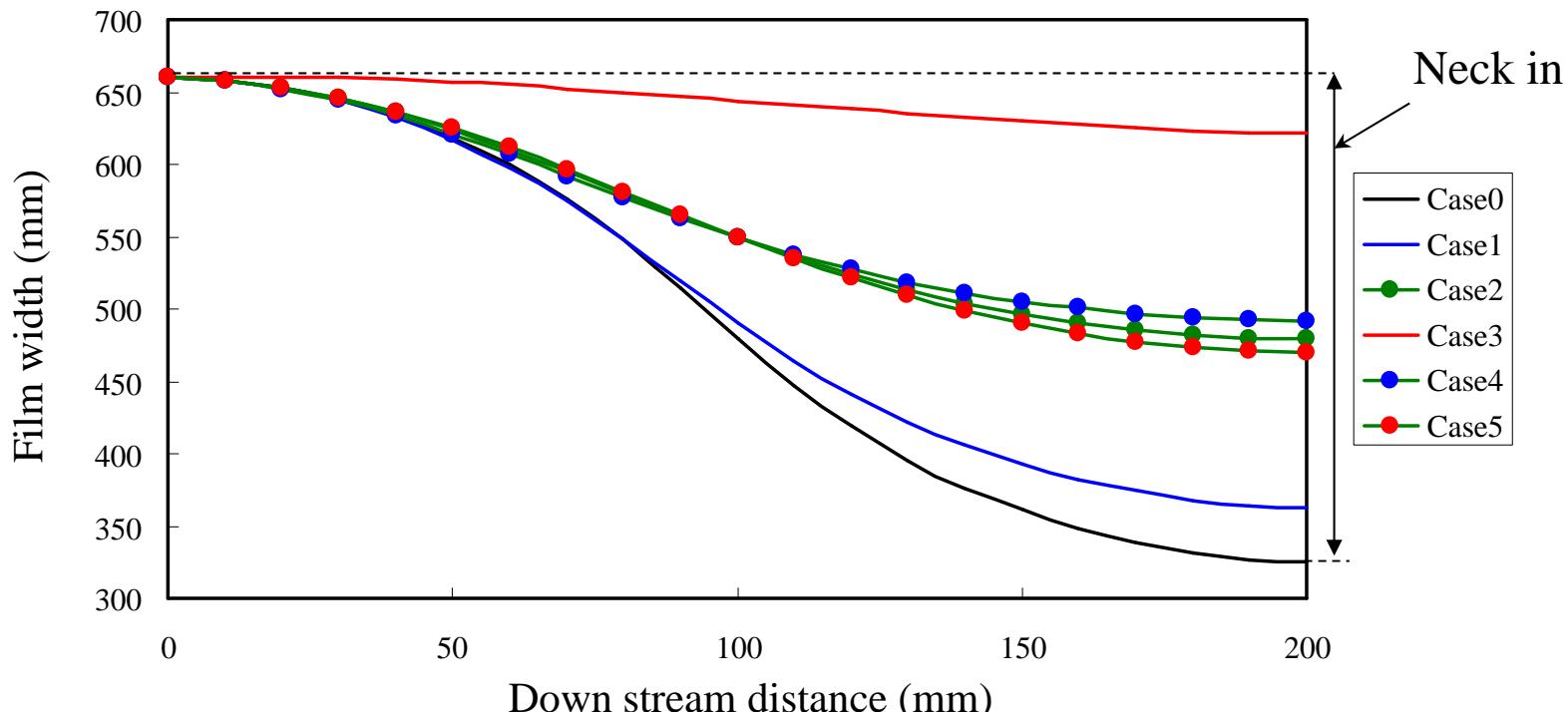
Case0は粘性解析($\eta_0=1000.0\text{Pa}\cdot\text{s}$ を採用)

非線形粘弹性構成方程式 (Multi mode Giesekus model):

$$\begin{aligned}\lambda_k \left(\frac{\partial \tau_{xx}^k}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{xx}^k}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xx}^k}{\partial y} - 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \tau_{xx}^k + \frac{\partial u}{\partial y} \tau_{xy}^k \right) \right) + \tau_{xx}^k + \frac{\alpha_k}{G_k} ((\tau_{xx}^k)^2 + (\tau_{xy}^k)^2) &= 2G_k \lambda_k \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \lambda_k \left(\frac{\partial \tau_{xy}^k}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{xy}^k}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xy}^k}{\partial y} - \left(\frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xx}^k + \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \tau_{xy}^k + \frac{\partial u}{\partial y} \tau_{yy}^k \right) \right) + \tau_{xy}^k + \frac{\alpha_k}{G_k} (\tau_{xx}^k \tau_{xy}^k + \tau_{xy}^k \tau_{yy}^k) &= G_k \lambda_k \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \\ \lambda_k \left(\frac{\partial \tau_{yy}^k}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{yy}^k}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yy}^k}{\partial y} - 2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xy}^k + \frac{\partial v}{\partial y} \tau_{yy}^k \right) \right) + \tau_{yy}^k + \frac{\alpha_k}{G_k} ((\tau_{xy}^k)^2 + (\tau_{yy}^k)^2) &= 2G_k \lambda_k \frac{\partial v}{\partial y}, \\ \lambda_k \left(\frac{\partial \tau_{zz}^k}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{zz}^k}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{zz}^k}{\partial y} + 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \tau_{zz}^k \right) + \tau_{zz}^k + \frac{\alpha_k}{G_k} ((\tau_{zz}^k)^2) &= -2G_k \lambda_k \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)\end{aligned}$$

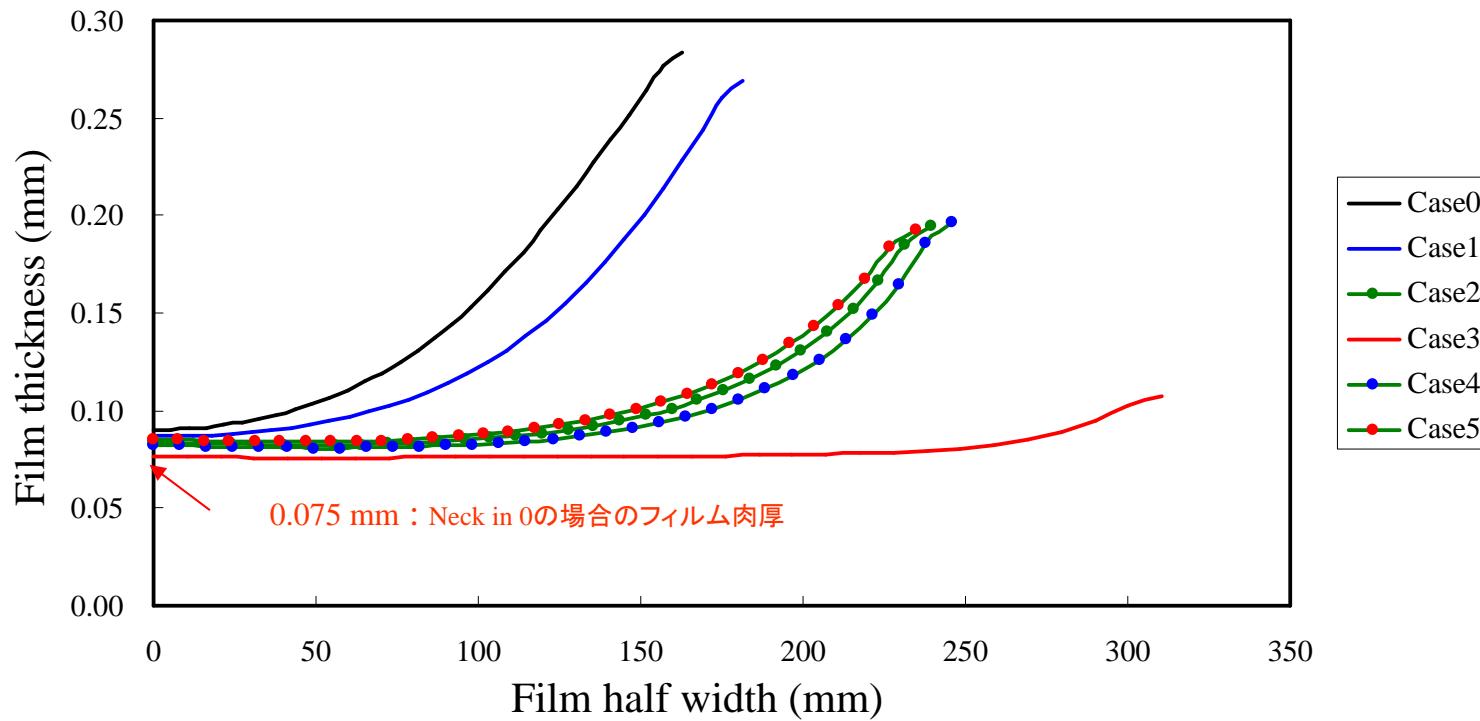
G_k : モード k の緩和弾性率, λ_k : モード k の緩和時間, α_k : モード k の物質パラメータ

解析結果

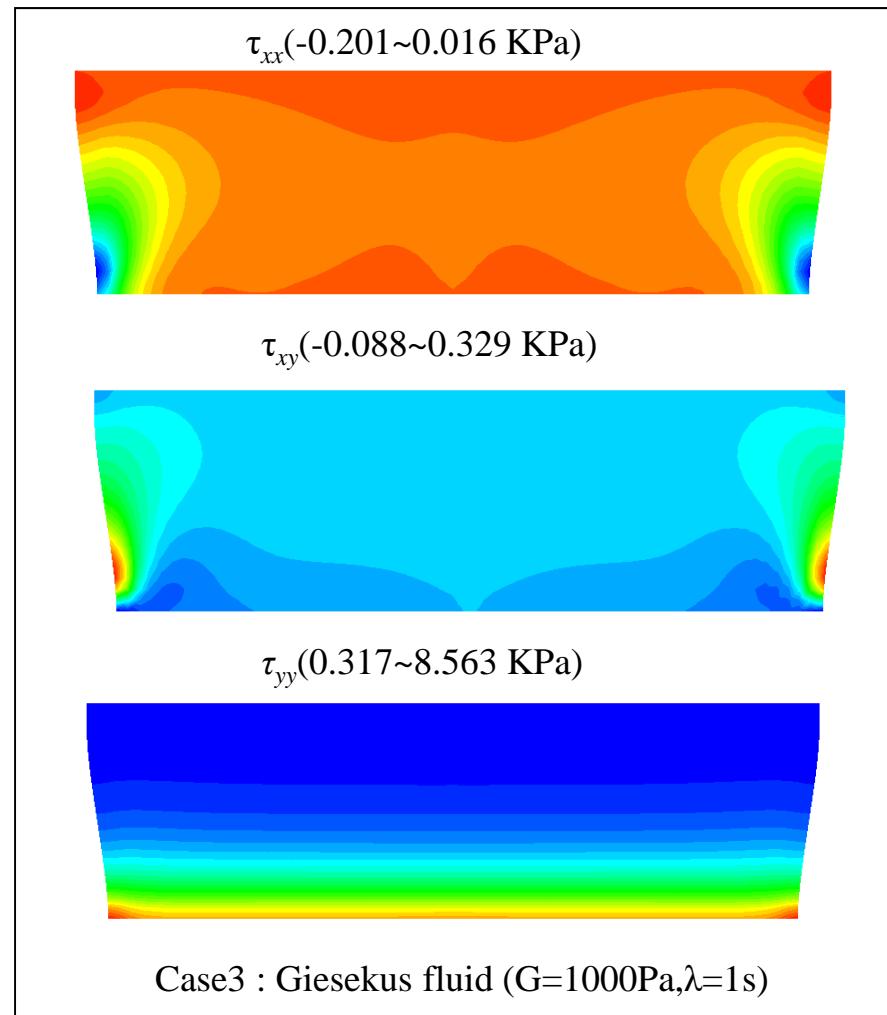
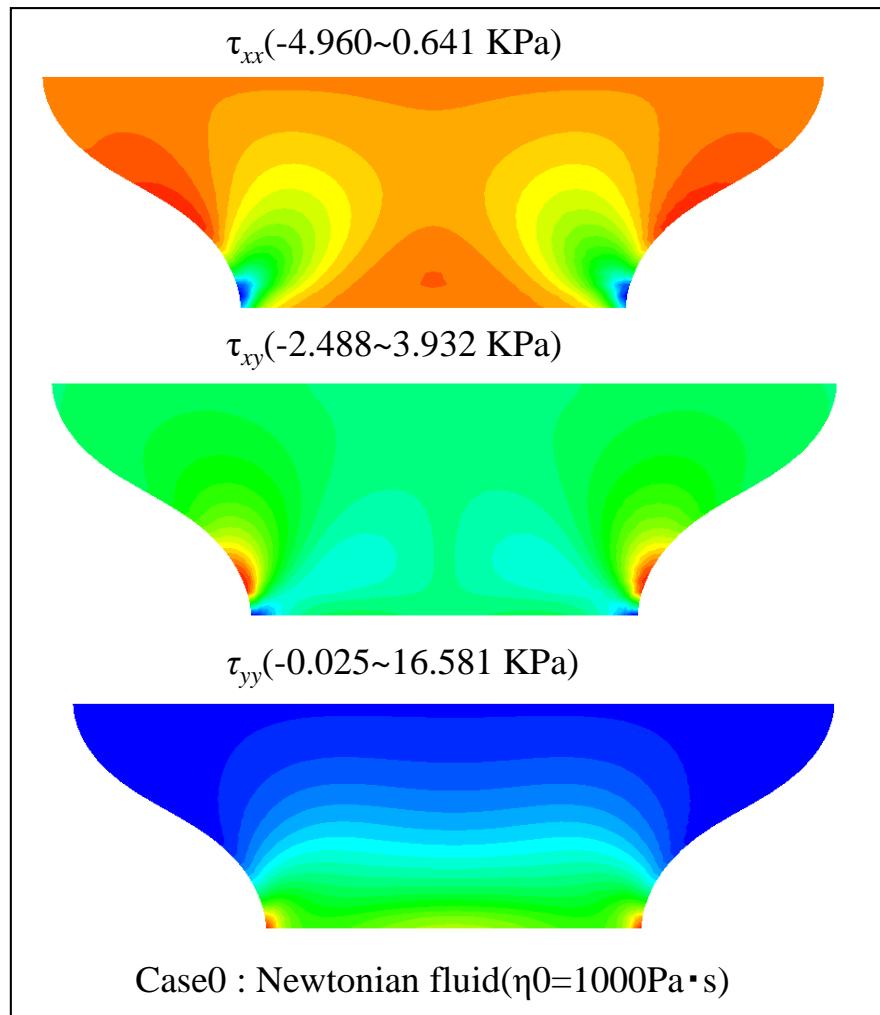


フィルム幅計算結果の比較

α パラメータを増加させると過渡一軸
伸張粘度のひずみ硬化性低下



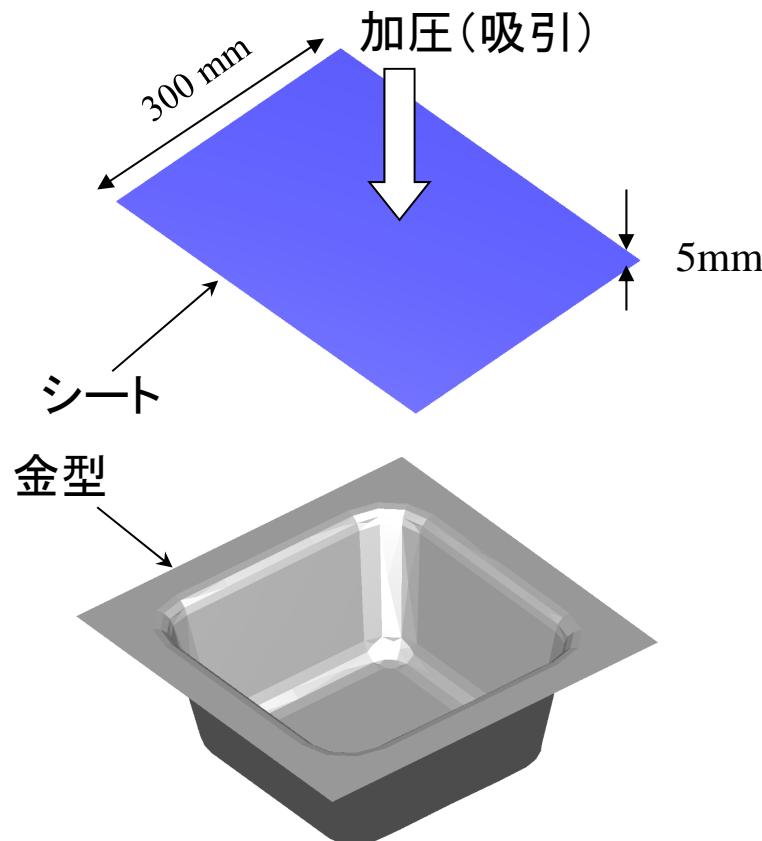
Chill roll位置フィルム肉厚計算結果の比較



各種応力分布状態の比較

◇ブロー成形CAE

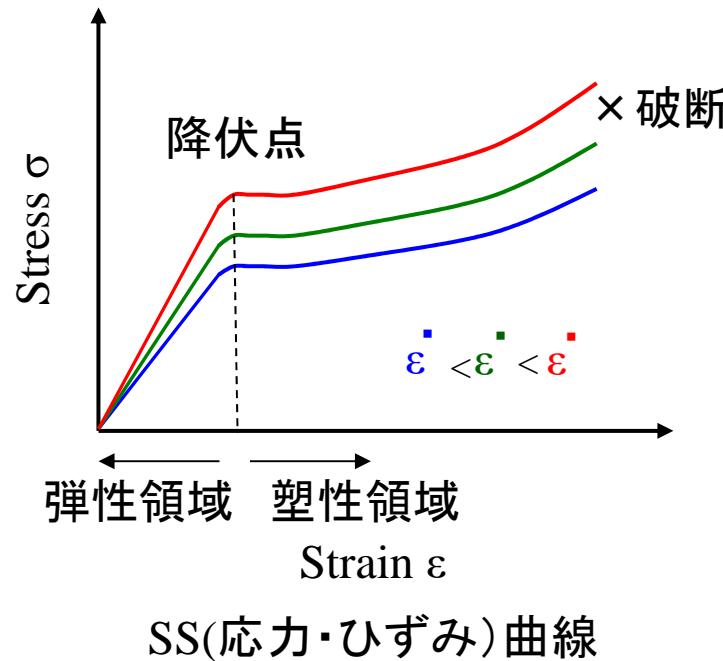
成形材料のひずみ硬化性とすべりを考慮した真空成形解析 解析モデル



ケーススタディ一覧

Case	材料モデル	シート/金型 接触条件
1	Newtonian	固着
2	G'Sell-Jonas	固着
3	G'Sell-Jonas	滑り

真空成形材料のレオロジー特性モデル

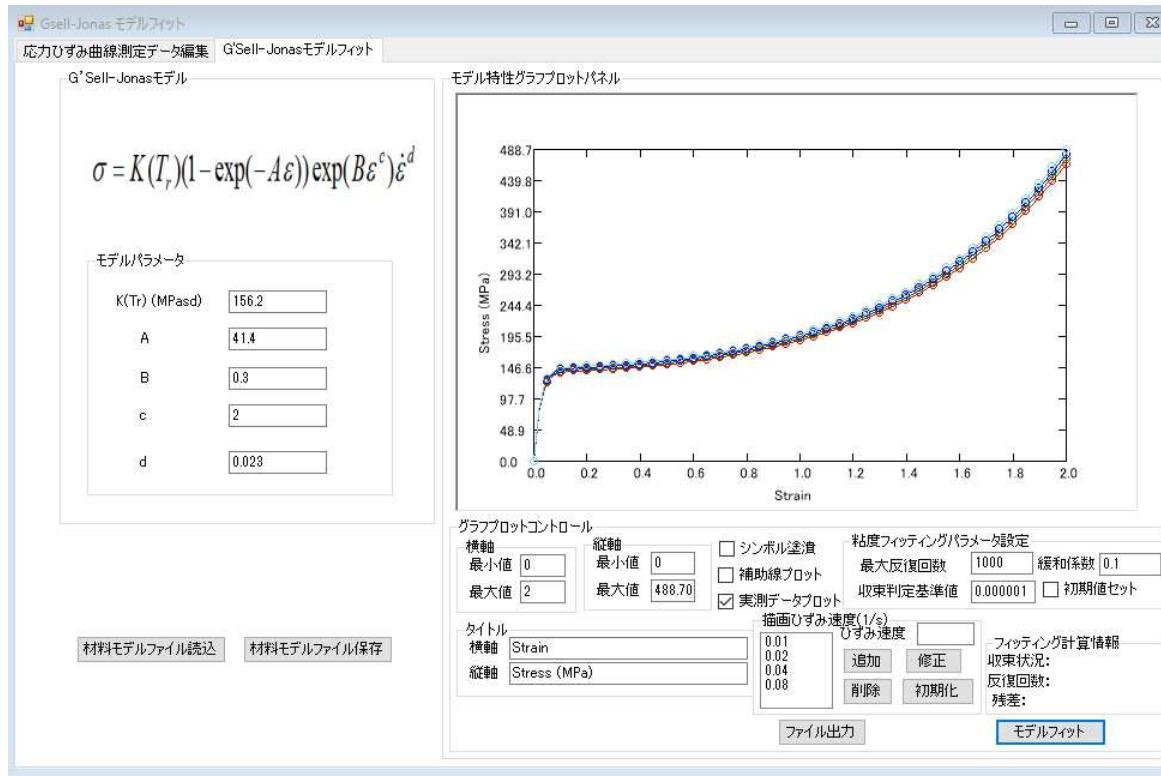


G'Sell-Jonas visco-plastic model *)

$$\sigma = K(T)(1 - \exp(-A\varepsilon)) \exp(B\varepsilon^c) \dot{\varepsilon}^d$$

↑
温度依存性 弹性領域の特性 ひずみ硬化性 ひずみ速度依存性

*) 参考文献 G'SELL, C. & JONAS, J.: *Determination of the plastic behaviour of solid polymers at constant true strain rat.* In: Journal of Materials Science 14 (1979), pp. 583-591



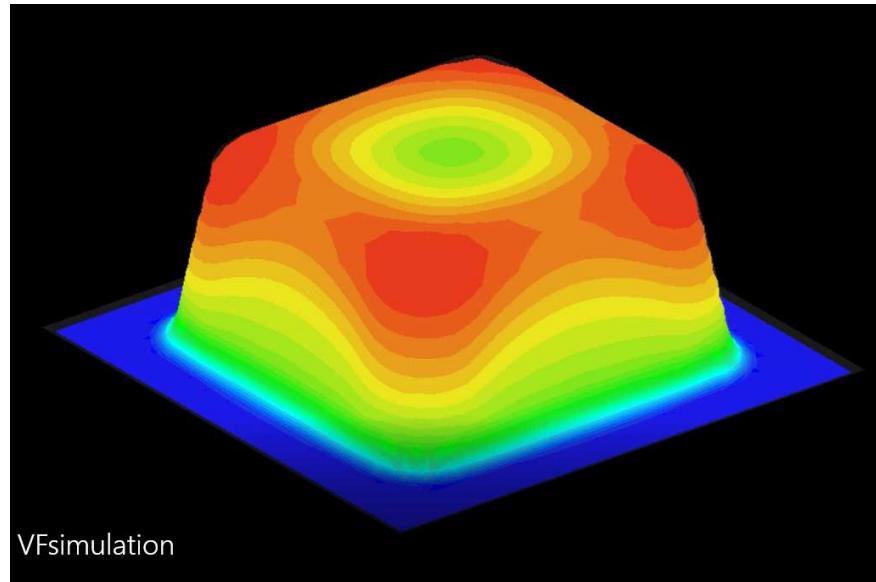
INSTRON 3369



Peak nano-composite SSカーブのG'Sell-Jonas モデルフィット例

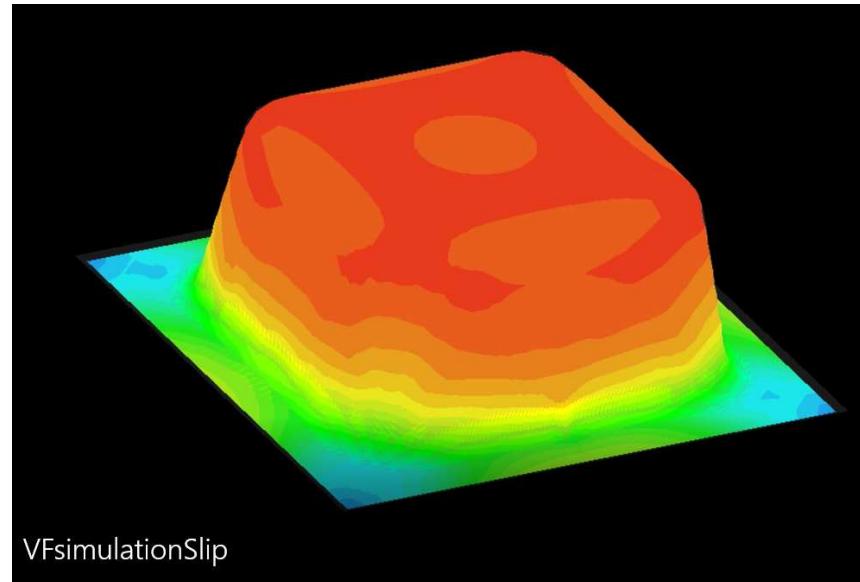
写真出典: Annals of DAAAM for 2011 & Proceedings of the 22nd International DAAAM Symposium, Volume 22, No. 1, ISSN 1726-9679
ISBN 978-3-901509-83-4, Editor B. Katalinic, Published by DAAAM International, Vienna, Austria, EU, 2011

解析結果



VFsimulation

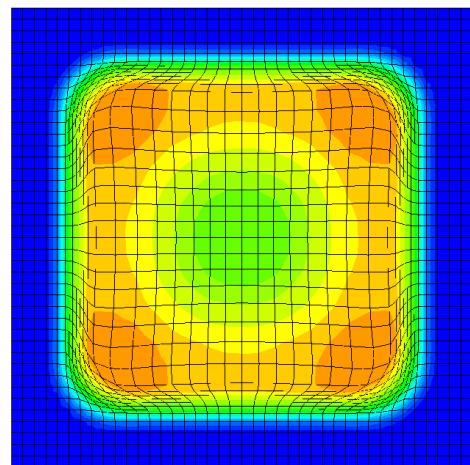
Case2:G'Sell-Jonas nonslip



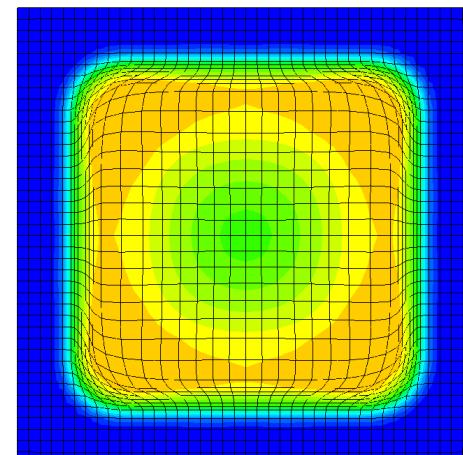
VFsimulationSlip

Case3:G'Sell-Jonas slip

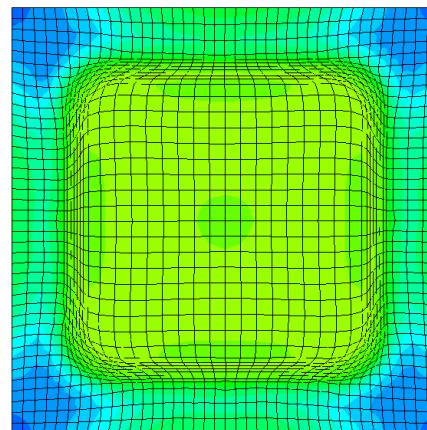
フィルム形状と肉厚分布の時間変化(アニメーション)



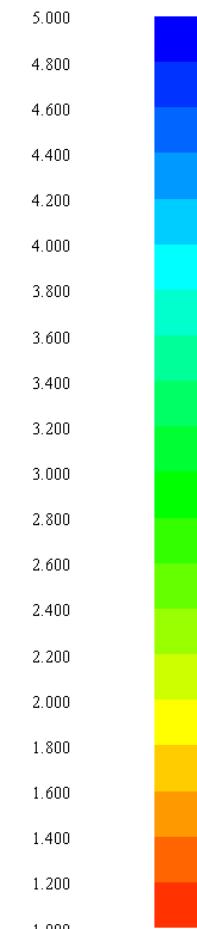
Case1:Newtonian nonslip

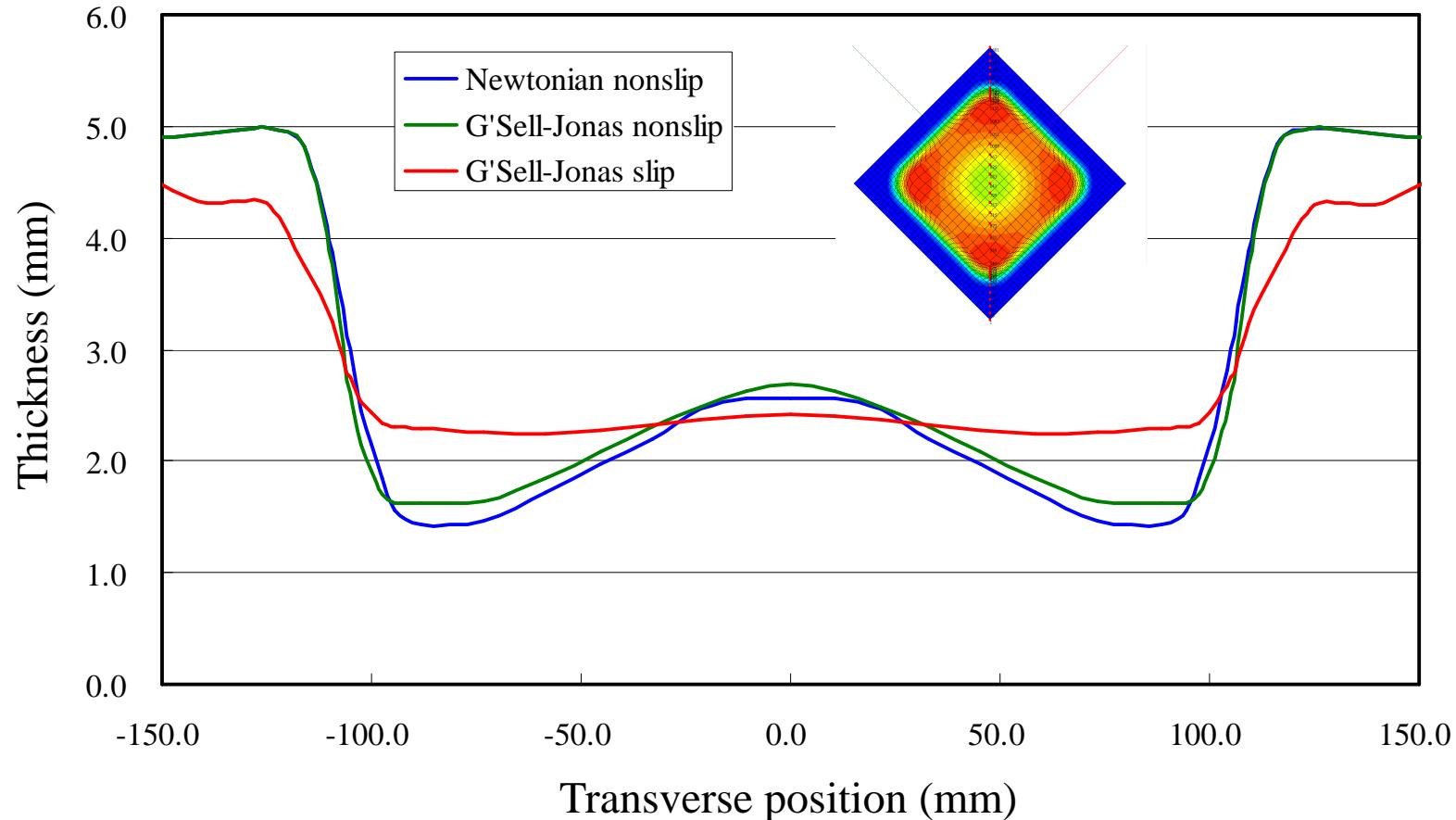


Case2:G'Sell-Jonas nonslip



Case3:G'Sell-Jonas slip
最終成形品肉厚分布の比較





最終成形品対角切断経路上肉厚分布の比較

◇スクリュCAE

二軸スクリュ内の液滴分裂/合体解析

液滴の分裂状態を規定するキーパラメータ: Capillary number

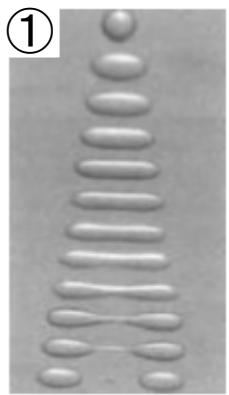
$$Ca = \frac{\eta_m \dot{\gamma}}{\sigma / R} = \frac{Shear\ stress}{Surface\ tension}$$

η_m : マトリクス粘度

$\dot{\gamma}$: マトリクスひずみ速度

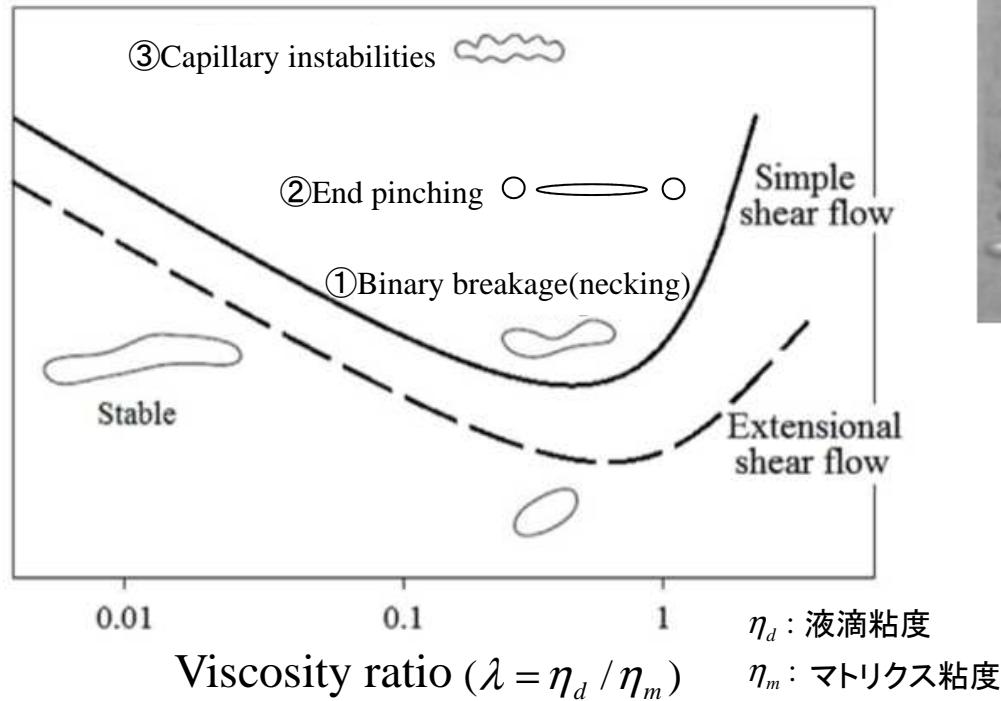
σ : 表面張力係数

R : 液滴半径

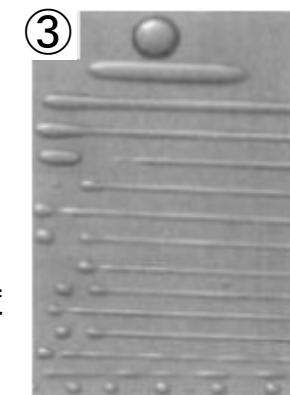
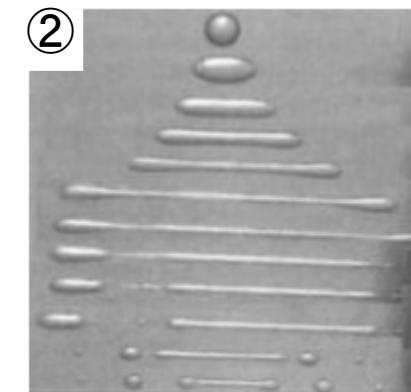


①
せん断流動場内の液滴の変形状態^{**)}

Critical capillary number (Ca_{crit})



臨界キャピラリー数の粘度比依存性^{*})

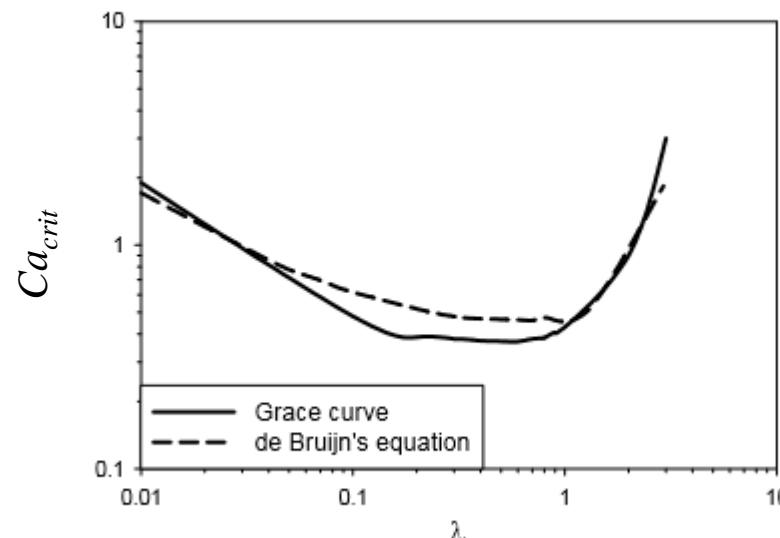


*)出典:H. P. Grace : *Eng. Found. Res. 3rd Conference on Mixing*, Andover(1971)

**)出典:LIU,H., XU, X.M., GUO, S.D., : *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15(1),1-5 (2007)

臨界キャビラリー数に対するBruijnの経験則評価式^{*)}:

$$\log(Ca_{crit}) = -0.5060 - 0.0994 \log \lambda + 0.1240(\log \lambda)^2 - \frac{0.1150}{\log \lambda - 0.6110}$$



Grace curve のBruijn モデルフィット^{*)}

*)出典: R. A. De Bruijn, PhD thesis, Eindhoven University of Technology, The Netherlands(1989)

規格化キャピラリー数による液滴状態の分類^{*)}

$C^* = Ca / Ca_{crit}$	液滴の状態
$C^* < 0.1$	液滴は、変形しない。
$0.1 < C^* < 1$	液滴は、変形するが、分裂しない。
$1 < C^* < 4$	液滴は、変形し、2つに分裂する。
$4 < C^*$	液滴はフィラメント化し、その後、複数に分裂する。

注) フィラメント化した後に分裂する液滴径は、粘度比に依存し、
0.1< λ <1の場合は均一、1< λ の場合は不均一になる。^{**)}

*)参考文献:M.A. Huneault, Z. H. Shi, and L.A. Utracki : *Polym. Eng. Sci.* **35**(1),115(1995)

**)参考文献:S. Maindarkar, A. Dubbleboer, and J. Meuldijk, H. Hoogland, and M. Henson:
Polym. Eng. Sci. **118**,114(2014)

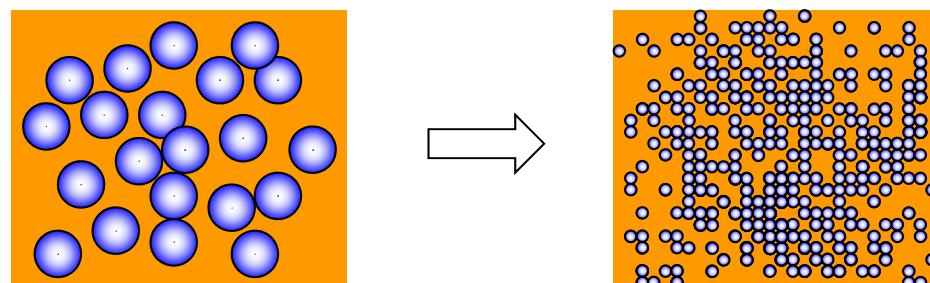
Morphological Evolution Model^{*)}

液滴の単位体積当たりの分裂/合体に伴う形状(半径)変化を定量化する現象論的計算モデル

$$\frac{DR}{Dt} = -\frac{\dot{\gamma}R}{3Ca_{crit}t_b^*} + \frac{C_{coalescence}}{R} \phi^{8/3} \dot{\gamma} \quad \text{for } 1 \leq C^* \leq 4$$

↑ ↑ ↑
 液滴半径の 分裂に伴う液滴 合体に伴う液滴
 時間変化 半径の減少率 半径の増加率

R : 液滴半径	t_b^* : 無次元時間
$\dot{\gamma}$: ひずみ速度	ϕ : 液滴体積分率 (不变)
Ca_{crit} : 臨界キャピラリー数	
$C_{coalescence}$: 液滴合体実験観測定数 ($1.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2$)	

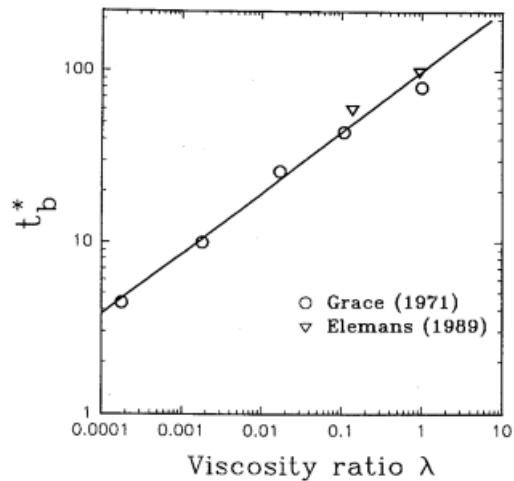


*)参考文献:S. Maindarker, A. Dubbleboer, and J. Meuldijk, H. Hoogland, and M. Henson: *Polym. Eng. Sci.* **118**, 114(2014)

$$\frac{DR}{Dt} = 0 \quad \text{for } C^* < 1$$

$$R(t + \Delta t) = 2\sqrt{\frac{2}{3}} R(t) \gamma(t : t + \Delta t)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{for } 4 < C^*$$

無次元パラメータ t_b^* は液滴分裂の実験観測結果より決定

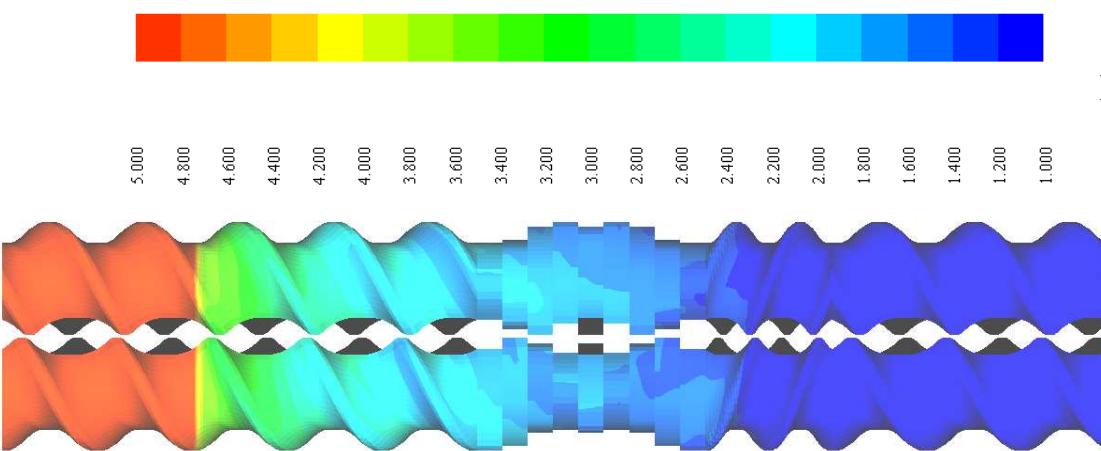
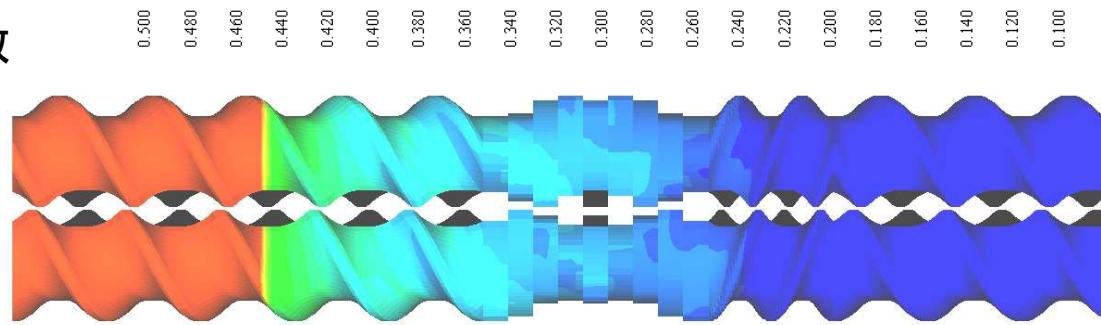


$$\log_{10}(t_b^*) = 0.3396 \log_{10}(\lambda) + 1.9604$$

粘度比と無次元分裂時間の関係

液滴徑解析結果

液滴徑 V.S.
表面張力係數

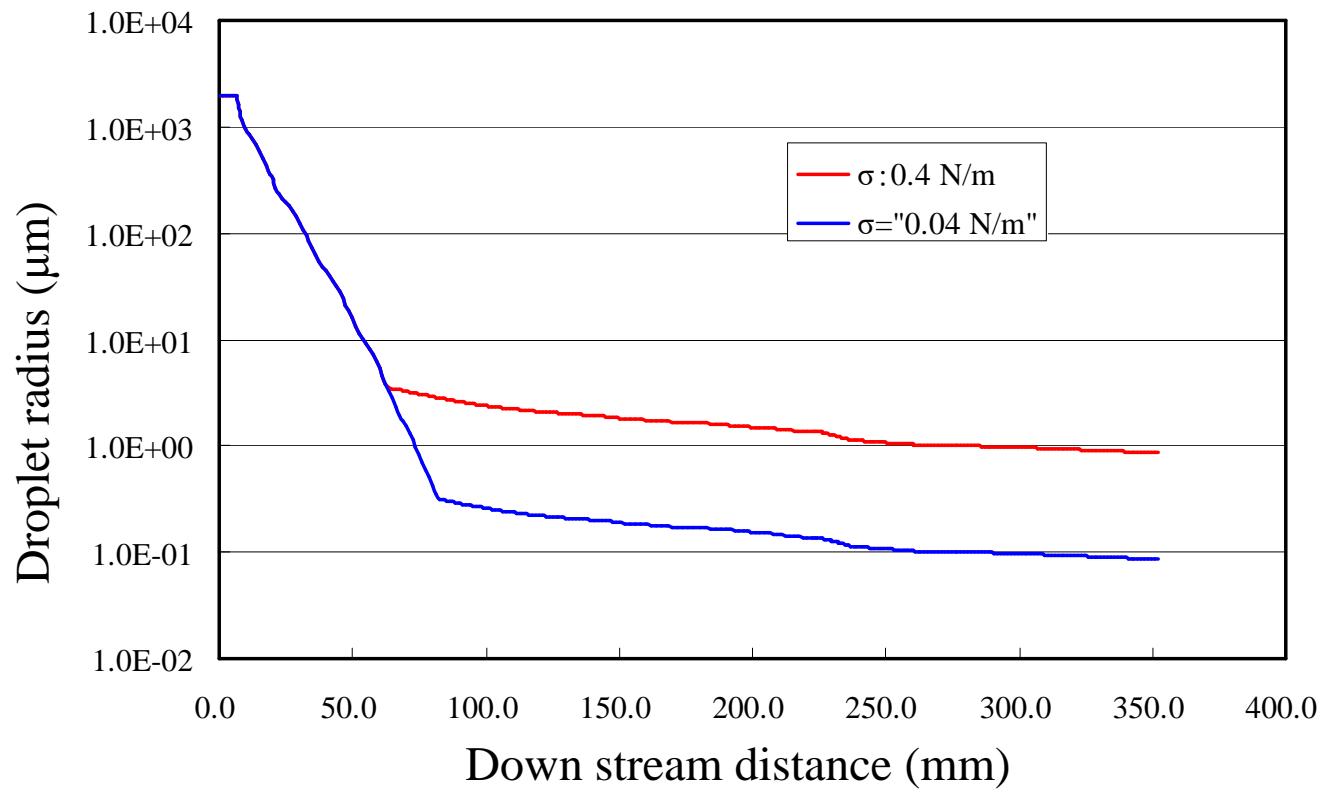


液滴徑分布

Droplet radius (μm)

Min.1.0
Max. 5.0

$R_0 = 2000(\mu\text{m})$,
 $\eta_m = 300 \text{ (Pa}\cdot\text{s)}$,
 $\eta_d = 600 \text{ (Pa}\cdot\text{s)}$,
 $\Omega = 100 \text{ rpm}$,
 $Q = 50 \text{ kg/h}$,
Filled analysis



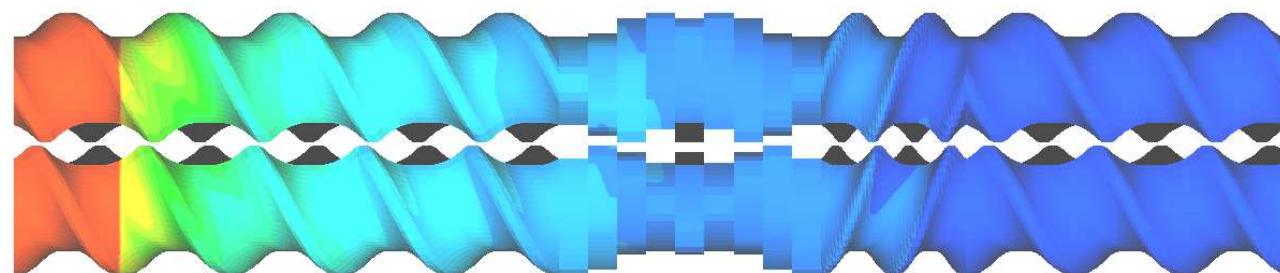
周方向平均液滴径分布

液滴径 V.S. 充満率

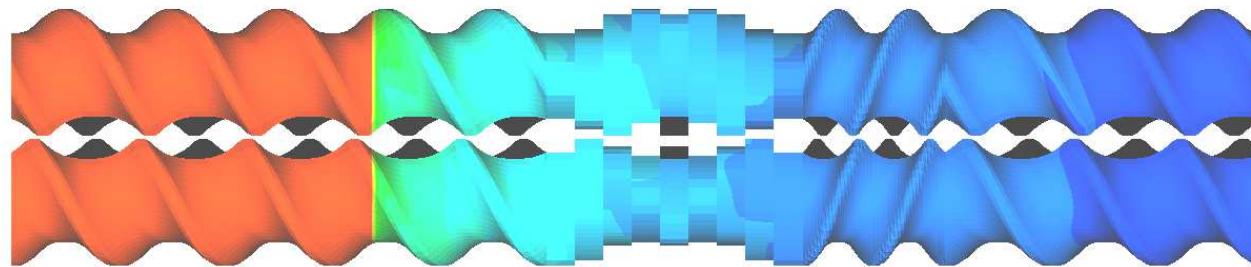


Droplet radius (μm)
Min.0.0
Max. 0.5

0.500 0.475 0.450 0.425 0.400 0.375 0.350 0.325 0.300 0.275 0.250 0.225 0.200 0.175 0.150 0.125 0.100 0.075 0.050 0.025 0.000



背压Ph:2 (MPa)



背压Ph:1 (MPa)

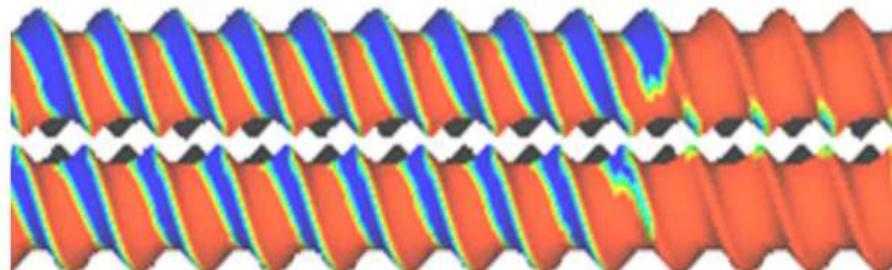
液滴径分布

$R_0 = 2000(\mu\text{m})$,
 $\eta_m = 300 (\text{Pa} \cdot \text{s})$,
 $\eta_d = 600 (\text{Pa} \cdot \text{s})$,
 $\Omega = 100 \text{ rpm}$,
 $Q = 15 \text{ kg/h}$,
Un-filled analysis

完全噛合型同方向回転平行
二軸押出機中の樹脂充満率の測定
(金沢大) ○杉山武雅, (ハッスル) 谷藤眞一郎,
(カネカ) 村田隼一, 辻村勇夫, (金沢大) 災健太郎
プラスチック成形加工学会第27回年次大会発表資料(A-201,2016)

30 rpm
0.5 kg/h

HASL TSSによる充満率の計算結果(赤が充満率1, 青が充満率0)

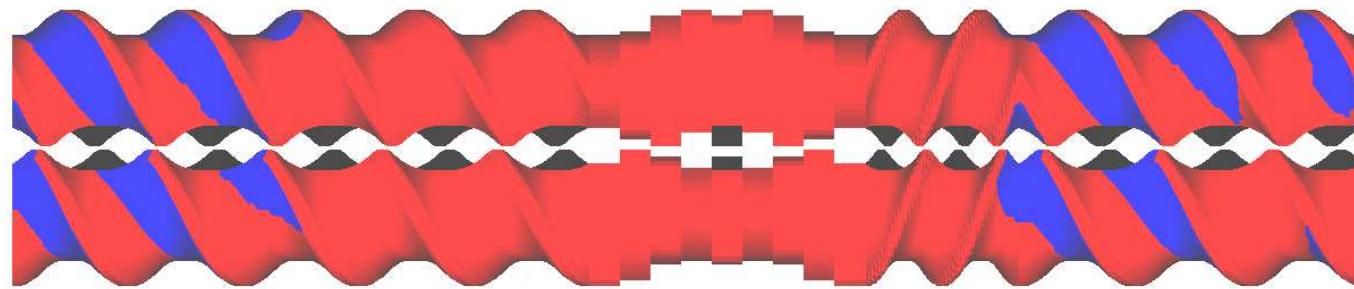


Flow direction

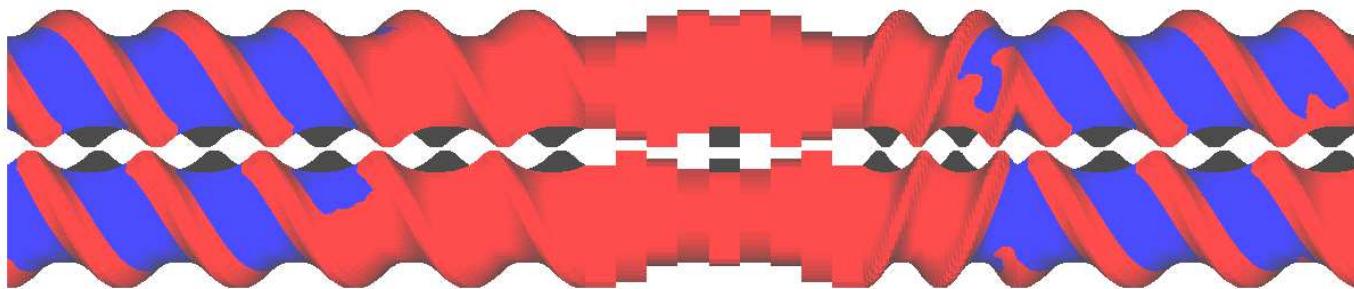


スクリュー引き抜き実験結果(白い領域は樹脂が存在している)

フライツクリューの押し側の充満状態が良好に表現されている。

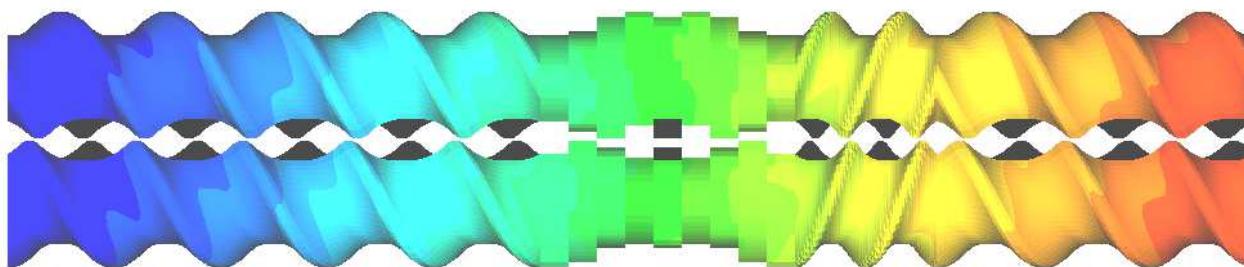
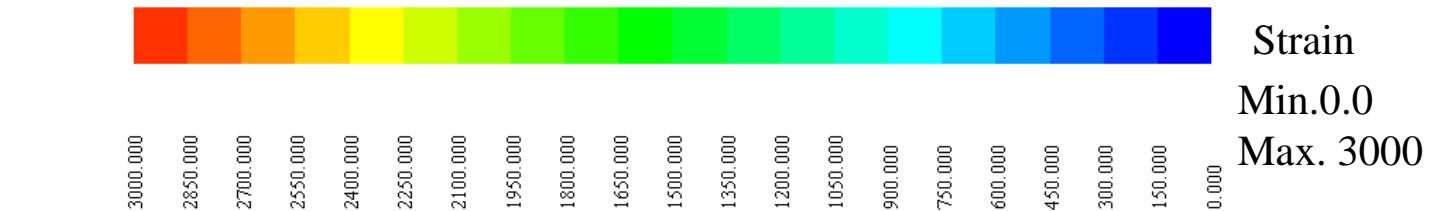


背压Ph:2 (MPa)

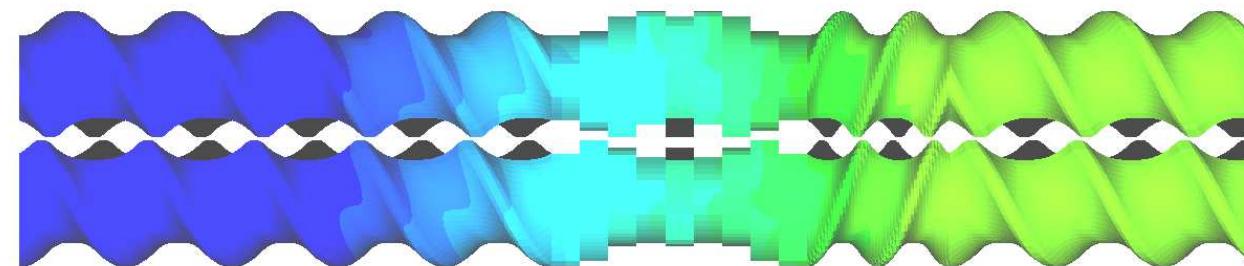


背压Ph:1 (MPa)

充满率分布



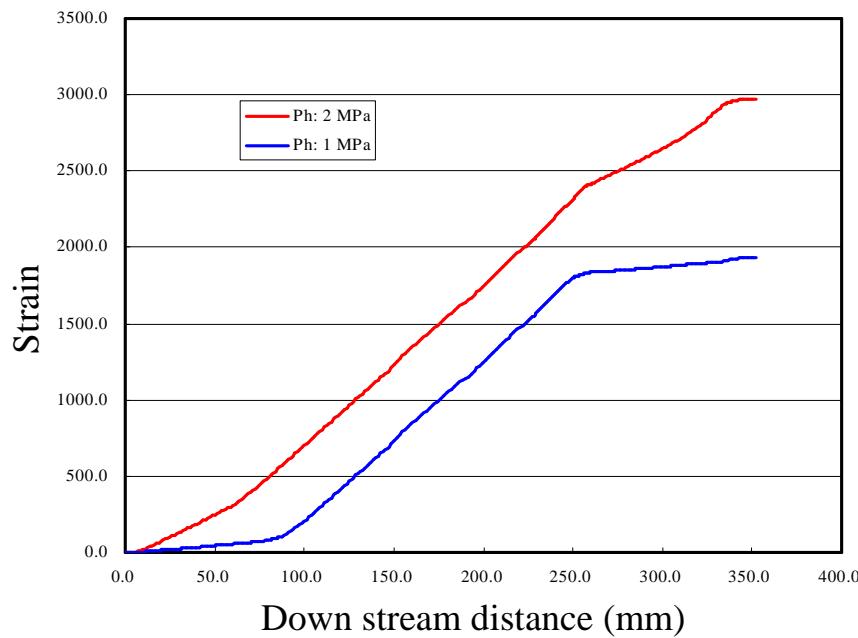
背压Ph:2 (MPa)



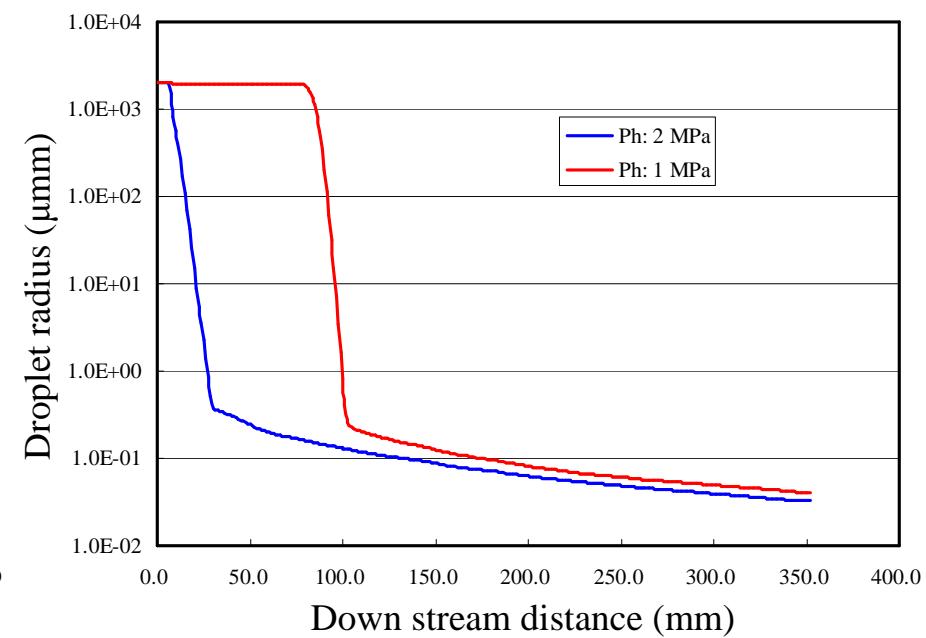
背压Ph:1 (MPa)

ひずみ分布

$$\gamma = \int_0^t \dot{\gamma} dt \Rightarrow \frac{D\gamma}{Dt} = \dot{\gamma}$$



周方向平均ひずみ分布



周方向平均液滴径分布