

塗布シミュレーションの概要

アドバンスソフトにおける
二相流解析技術の最新動向セミナー
2013年2月13日(水)開催

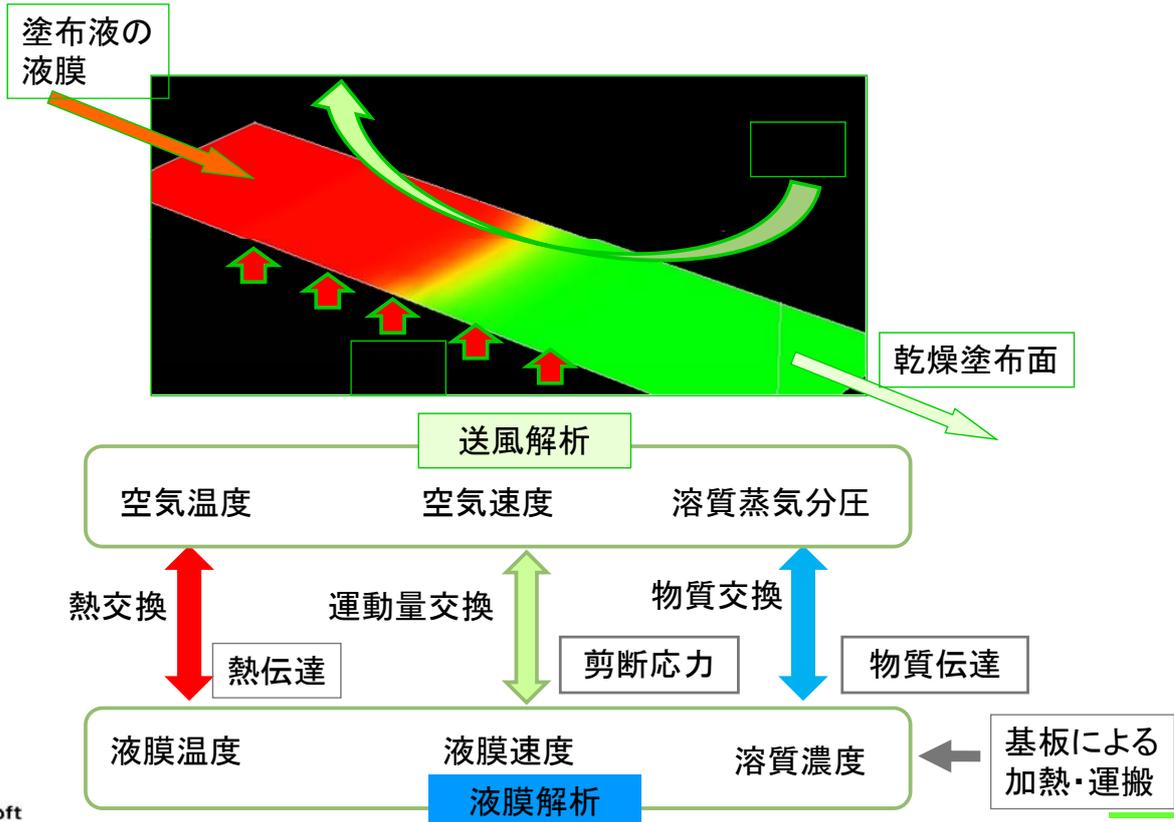


塗布シミュレーションの概要

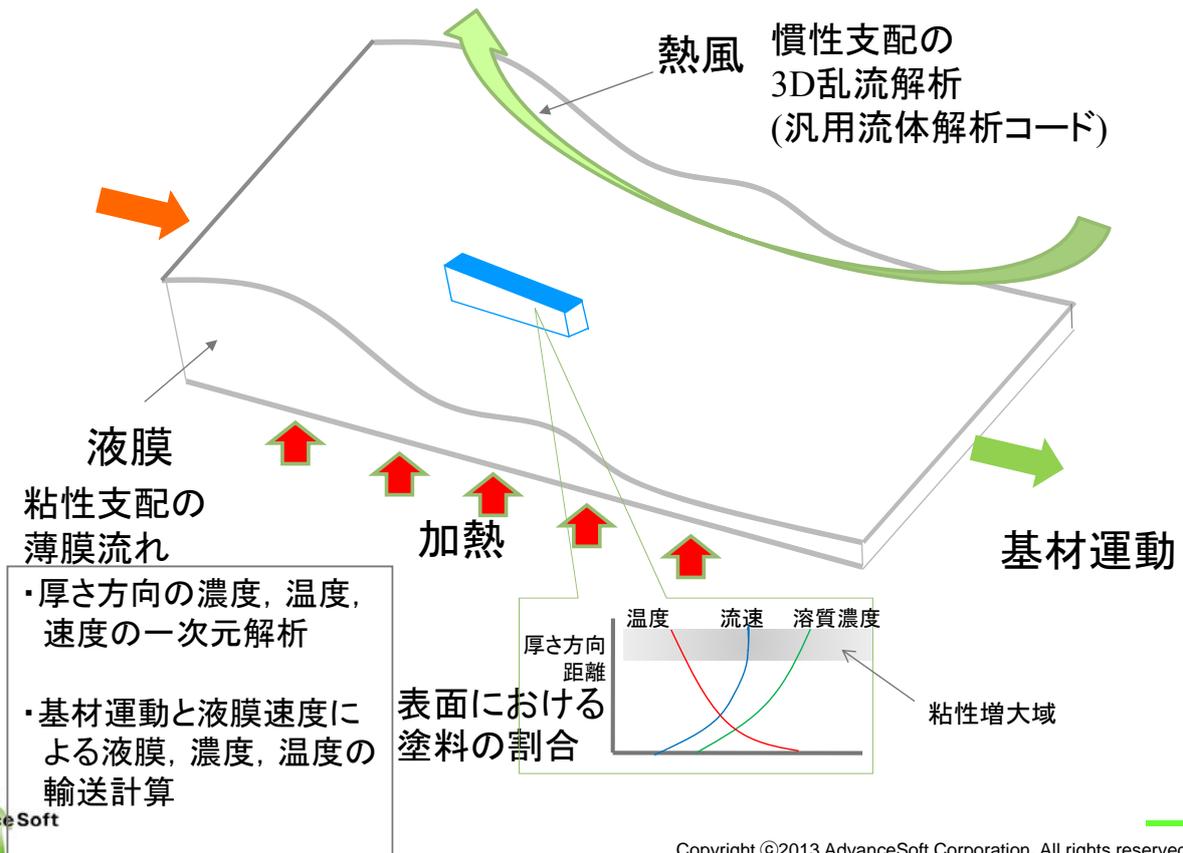
- 基礎式と解析モデル
- 静止塗布膜乾燥解析
- 塗布膜乾燥ライン解析
- 塗布膜内粒子挙動解析



塗布膜乾燥解析の二領域分割解析



送風と液膜を分割した数値解析のイメージ



塗布膜解析の基礎式

(質量保存則) $\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = -R$

(運動量保存則) $\nabla P = \nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{u}) + \sigma \kappa \mathbf{S} \mathbf{n} + \nabla \sigma S + \mathbf{F}_{surf} + \mathbf{F}_{drag} + \rho \mathbf{g}$
表面張力の界面曲率と分布による力

(エネルギー保存則) $\frac{\partial}{\partial t} \rho e + \nabla \cdot \rho \left(e + \frac{P}{\rho} \right) \mathbf{u} = q + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + Q - LR$

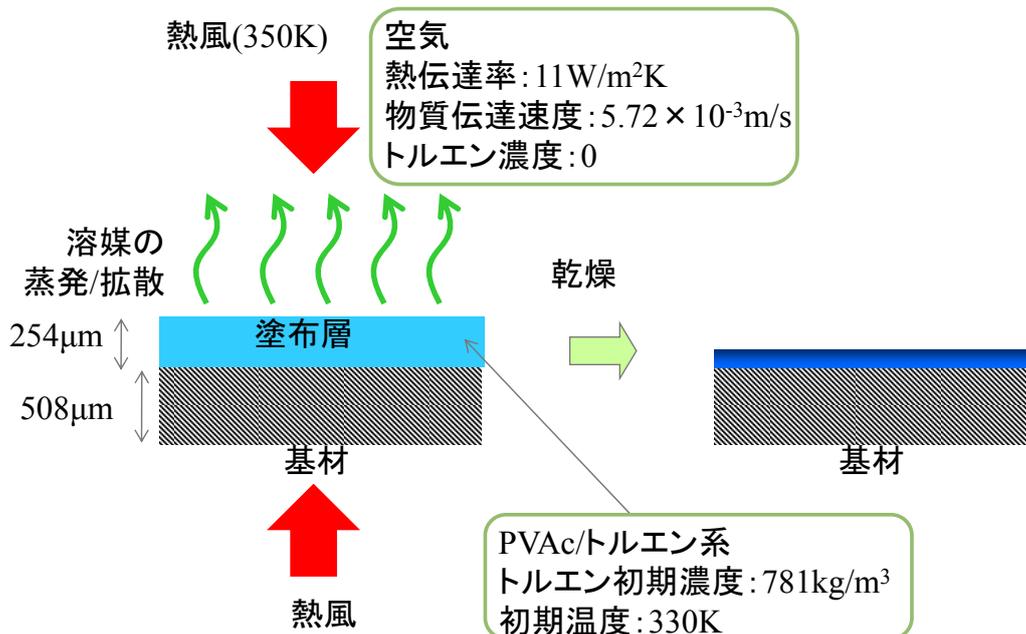
(液体積比保存則) $\frac{\partial}{\partial t} F + \nabla \cdot F \mathbf{u} = -R v_c$

(溶剤濃度保存則) $\frac{\partial}{\partial t} c + \nabla \cdot c \mathbf{u} = \nabla \cdot (D \nabla c) - R$

ρ は密度, \mathbf{u} は速度, P は圧力, η は粘性係数, σ は表面張力, S は界面面積要素, κ は曲率, \mathbf{F}_{drag} は基材抗力, \mathbf{F}_{surf} は表面応力, \mathbf{n} は界面に垂直な単位ベクトル, \mathbf{g} は重力定数, e は内部エネルギー, Q はヒータ加熱量, q は表面伝熱量, T は温度, L は蒸発潜熱, F は液相の占める体積比, R は蒸発速度, c は溶媒濃度, v_c は溶媒比容積



塗布膜乾燥解析



*山村, 化学工学論文集, 35-5, pp.436-441(2009)



自由体積理論による拡散係数(PVAc-トルエン系)

相互拡散係数

$$D_m = D_1(1 - \phi_1)^2(1 - 2\chi_{12}\phi_1)$$

自己拡散係数

$$D_1 = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\omega_1 \hat{V}_1^* + \omega_2 \xi_{12} \hat{V}_2^*}{\hat{V}_{FH}}\right)$$

$$\hat{V}_{FH} = \omega_1 \left(\frac{K_{11}}{\gamma}\right) (K_{21} - T_{g1} + T) + \omega_2 \left(\frac{K_{12}}{\gamma}\right) (K_{22} - T_{g2} + T)$$

Gas parameters	Solution parameters
$M_1 = 92.14 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$	$\Delta H = 3.6 \times 10^5 \text{ J/kg}$
$P_b = 0 \text{ Pa}$	$\rho_{10} = 781 \text{ kg/m}^3$
$h^g = 11 \text{ J/(m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K)}$	$\chi_{12} = 0.393$
$h^l = 11 \text{ J/(m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K)}$	$C_p = 1.65 \times 10^3 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$
$k^g = 5.72 \times 10^{-3} \text{ m/s}$	$D_0 = 2.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$
Substrate parameters	$h_0 = 254 \text{ } \mu\text{m}$
$\rho_s = 1370 \text{ kg/m}^3$	$\tilde{V}_1 = 1.16 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{kg}$
$C_{ps} = 1.25 \times 10^3 \text{ J/(kg} \cdot \text{K)}$	$\tilde{V}_2 = 8.47 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$
$b = 508 \text{ } \mu\text{m}$	
Drying conditions	$E_a = 7787.4 \text{ J/mol}$
$T_a = 330 \text{ K}$	
$T_b = 350 \text{ K}$	

Solvent parameters	$(K_{11}/\gamma) [\text{m}^3/(\text{kg} \cdot \text{K})]$	$K_{21} - T_{g1} [\text{K}]$	$D_{01} [\text{m}^2/\text{s}]$
$\tilde{V}_1^* [\text{m}^3/\text{kg}]$	0.917×10^{-3}	1.57×10^{-6}	-90.5
0.917×10^{-3}			8.25×10^{-7}
Polymer parameters	$(K_{12}/\gamma) [\text{m}^3/(\text{kg} \cdot \text{K})]$	$K_{22} - T_{g2} [\text{K}]$	$\xi_{12} [-]$
$\tilde{V}_2^* [\text{m}^3/\text{kg}]$	0.850×10^{-3}	4.33×10^{-7}	-256
0.850×10^{-3}			0.77



溶媒蒸発速度

$$\dot{m}_{eva} = k^g \frac{M_1}{RT} (P_i - P_b)$$

混合系の蒸気圧(Flory-Huggins理論)

$$P_i = P_1^o \phi_1 \exp[\phi_2 + \chi_{12} \phi_2^2]$$

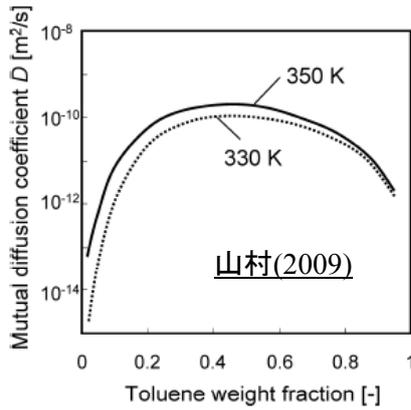
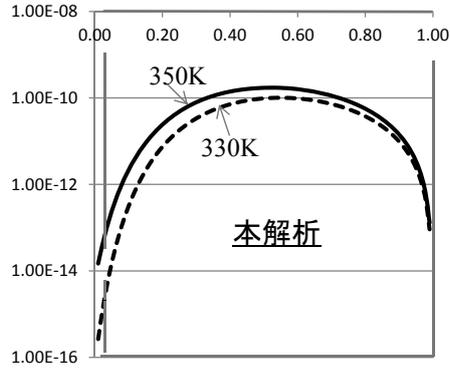
純蒸気圧のAntoin式

$$\log_{10} P^o = A - \frac{B}{T + C}$$

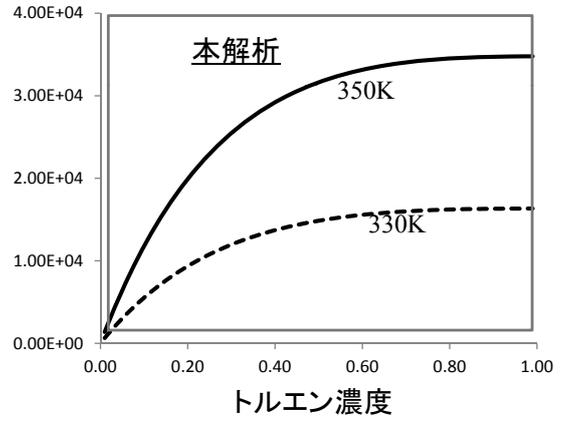
トルエン	$A=6.96554$
(mmHg-°C)	$B=1351.272$
	$C=220.191$



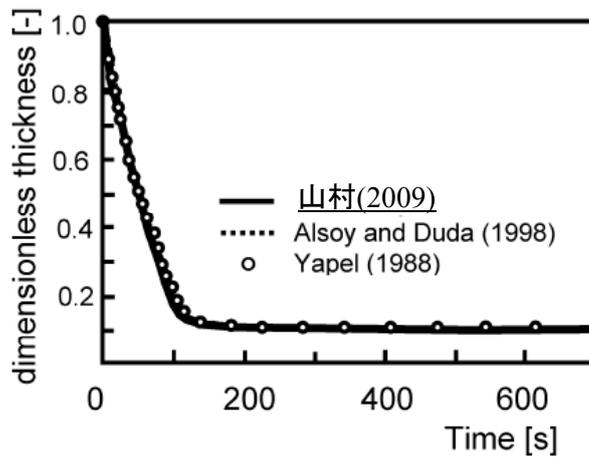
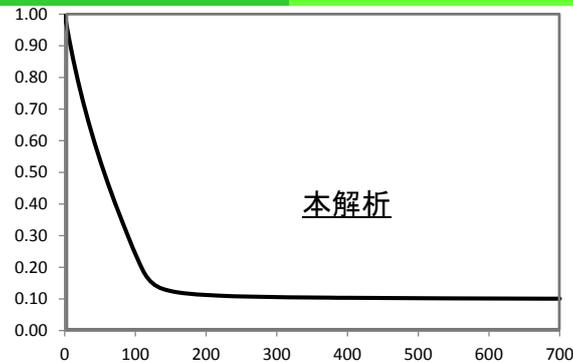
PVAc/トルエン系
相互拡散係数
(m^2/s)

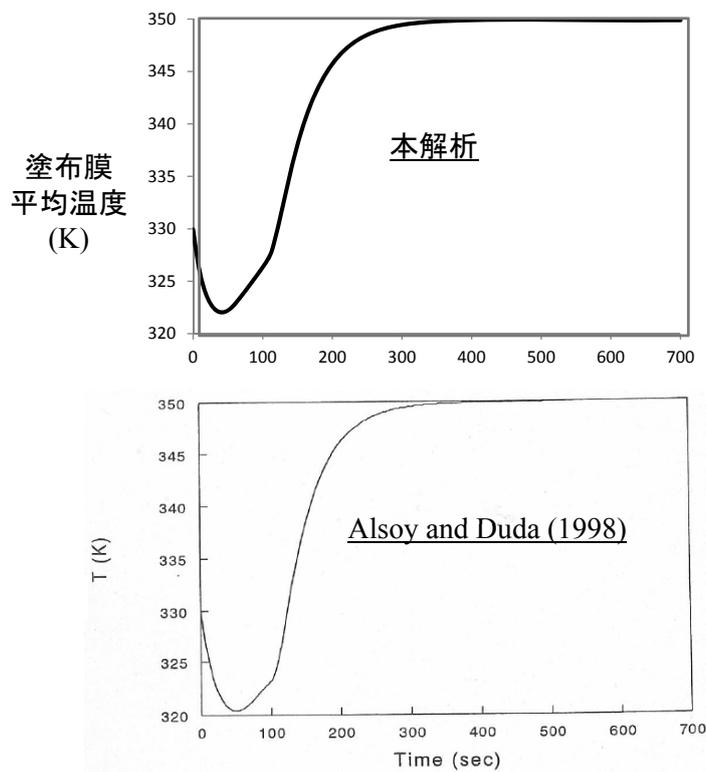
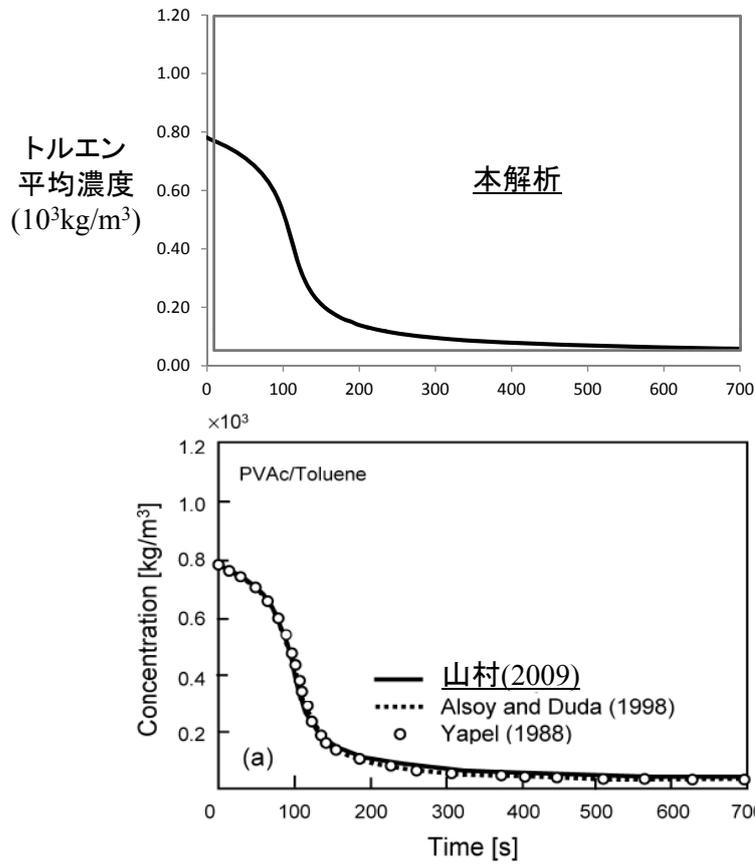


PVAc/トルエン系
トルエン蒸気圧
(Pa)

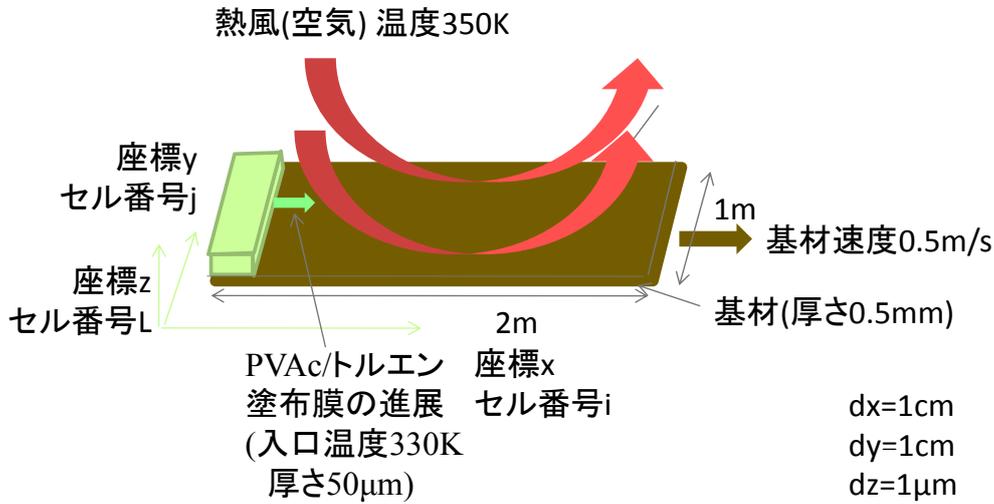


塗布膜
無次元厚さ
(-)

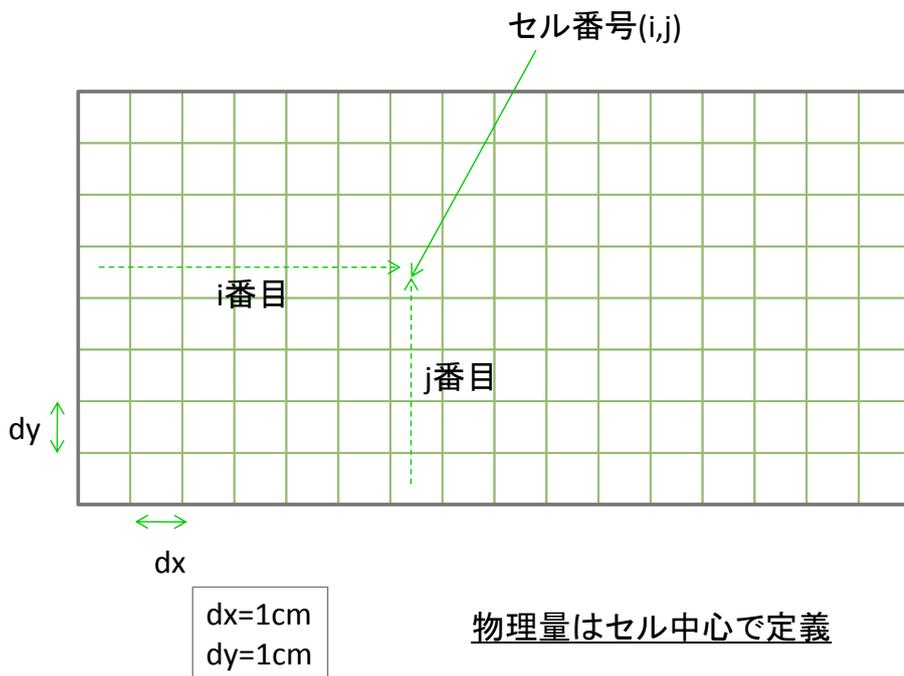




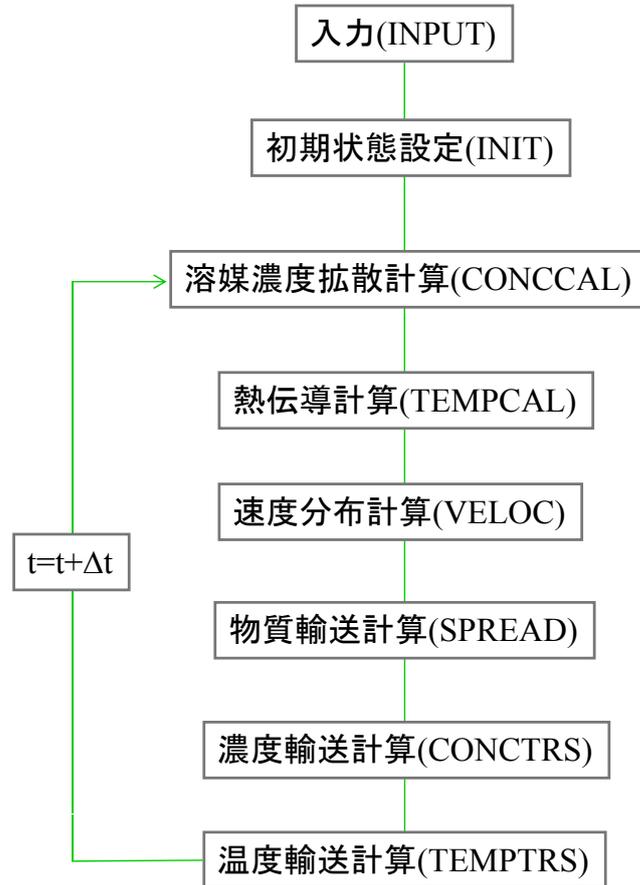
二次元塗布膜形成解析



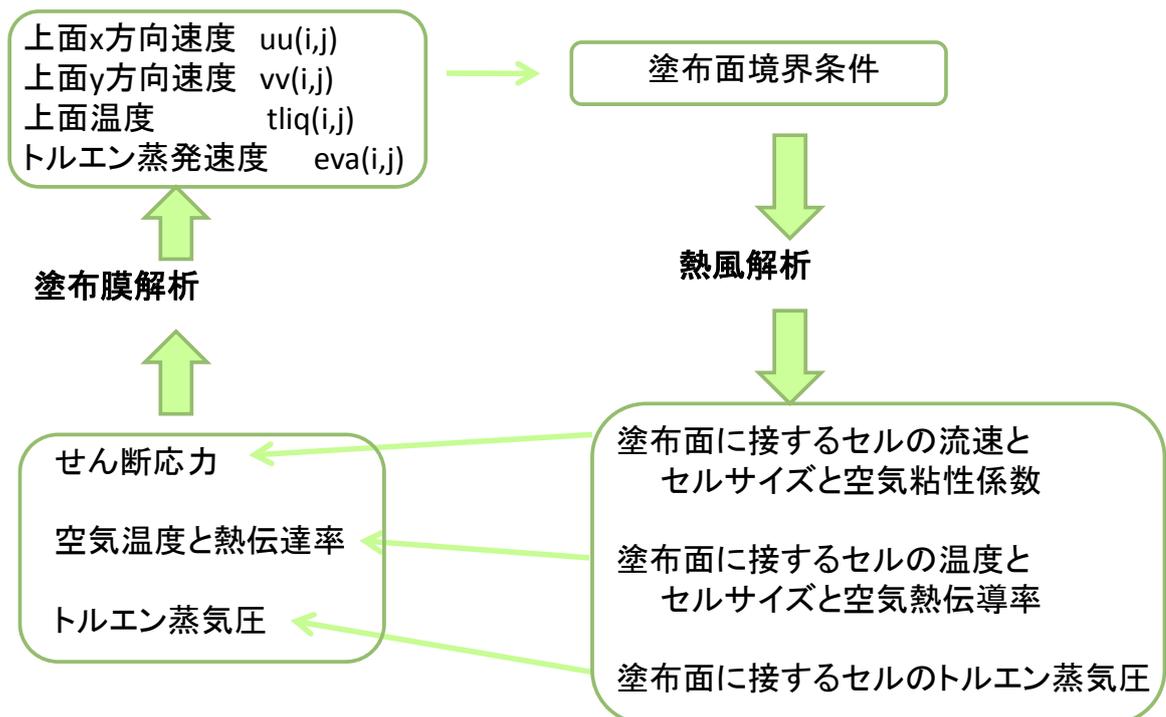
上から見た塗布膜上面のマップ



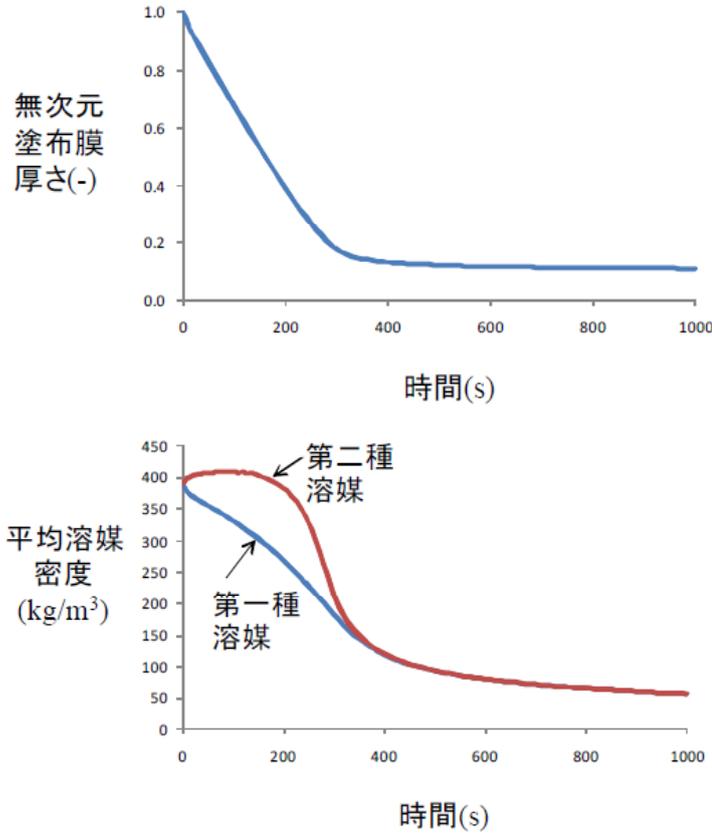
計算の流れ



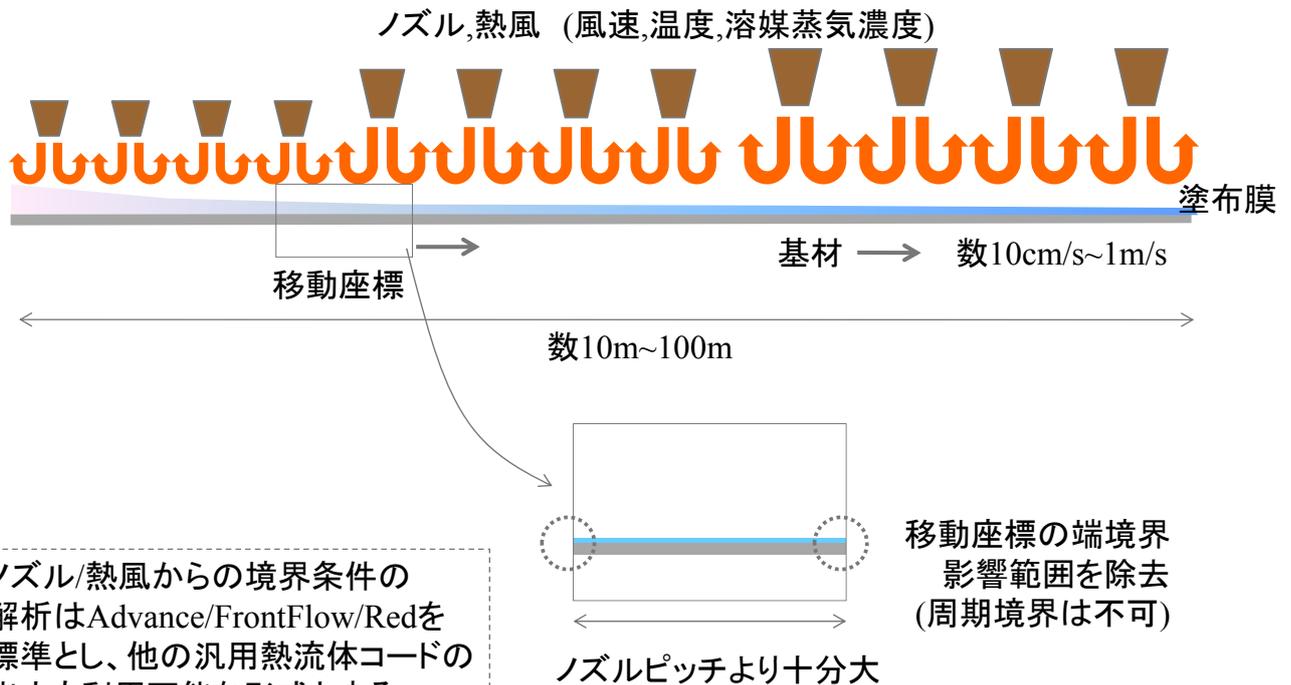
1タイムステップ内のデータの流れ



応用機能(蒸発速度の異なる二種類の溶媒)



移動座標を用いた計算の効率化

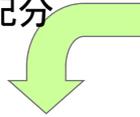


ノズル/熱風からの境界条件の解析はAdvance/FrontFlow/Redを標準とし、他の汎用熱流体コードの出力も利用可能な形式とする



汎用コードによる熱風解析との連携

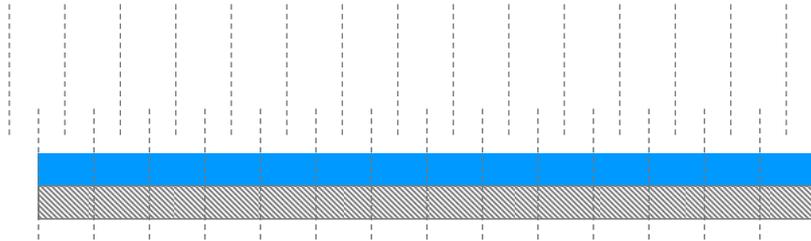
FLUENT等の
定常計算結果を
予めメッシュに配分



塗布膜表面

- ガス流速又はせん断力
- ガスの溶媒蒸気圧
- ガスの温度
- 熱伝達係数(ガス速度から評価可能)
- 物質伝達係数(ガス速度から評価可能)

ガス流等分割メッシュ(固定)



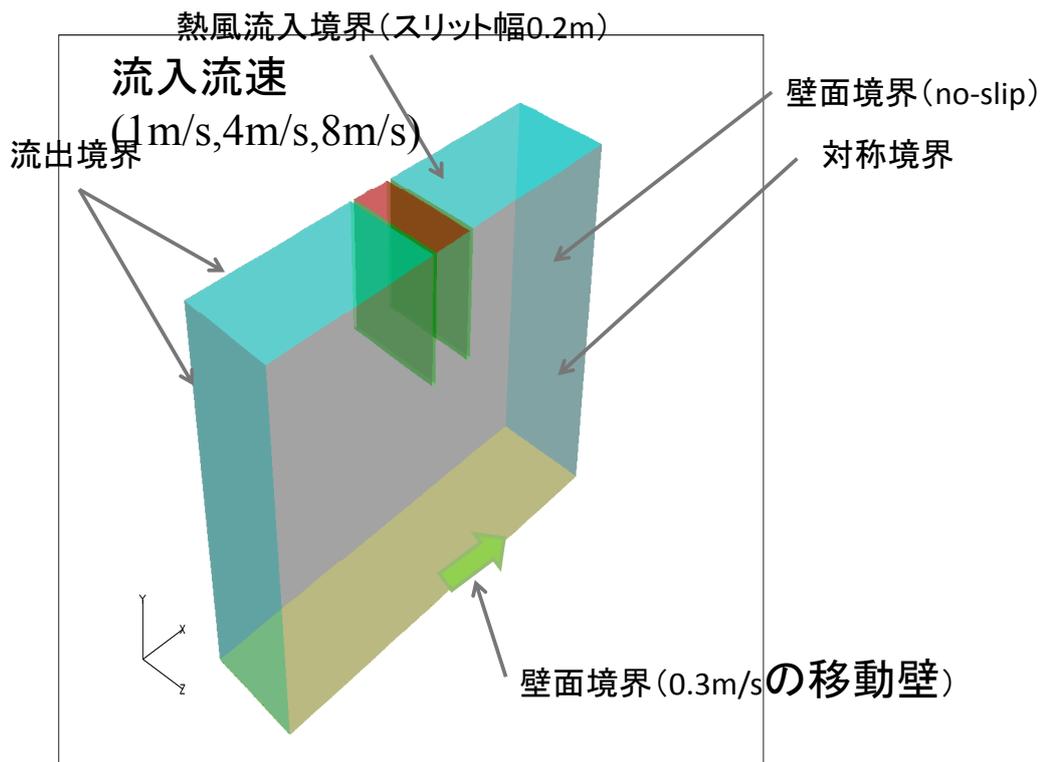
膜内部流速
基材速度

塗布膜等間隔分割メッシュ(移動)

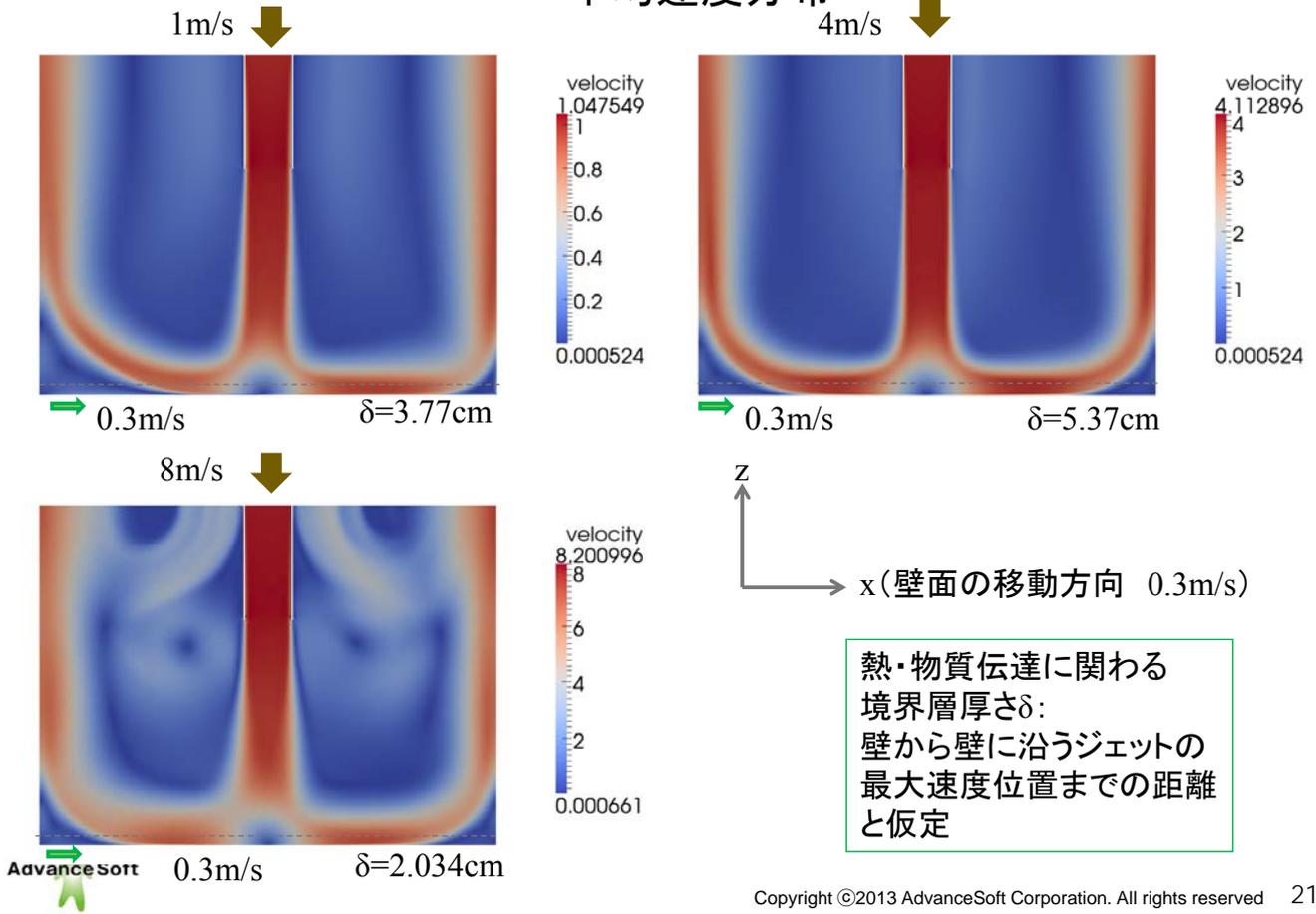


計算領域と境界条件

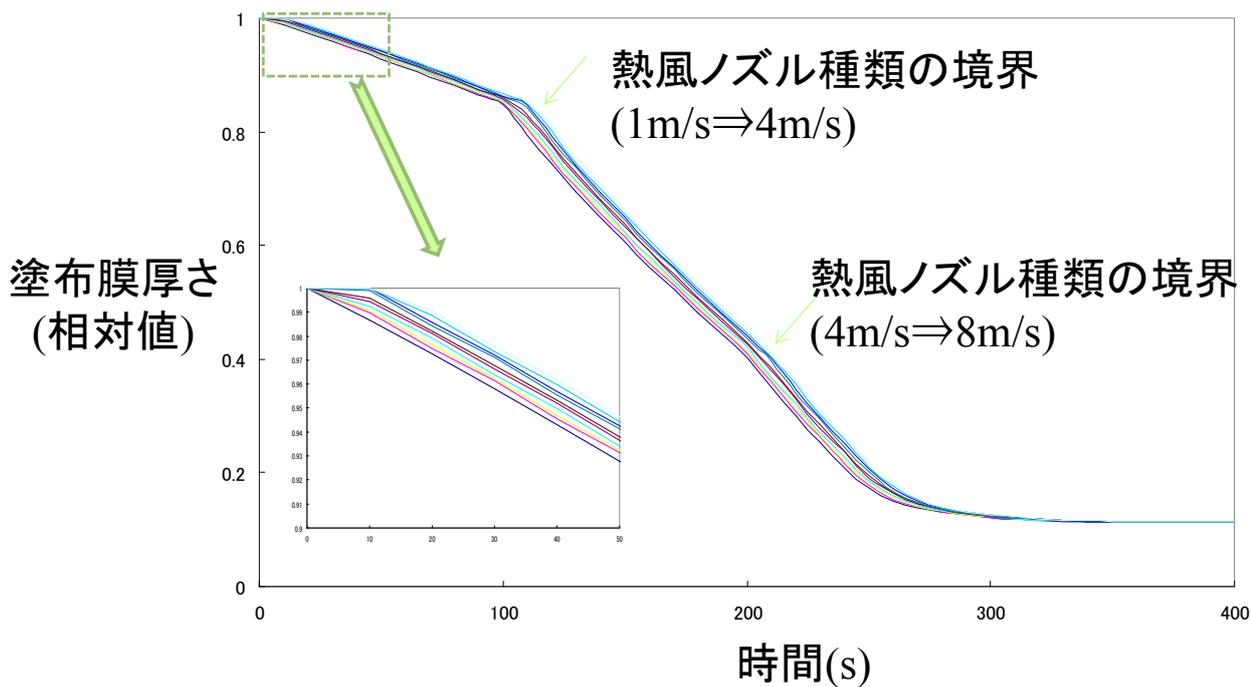
計算領域 長さ2m×高さ1mの2D解析 (実際には幅方向2メッシュの3D解析)



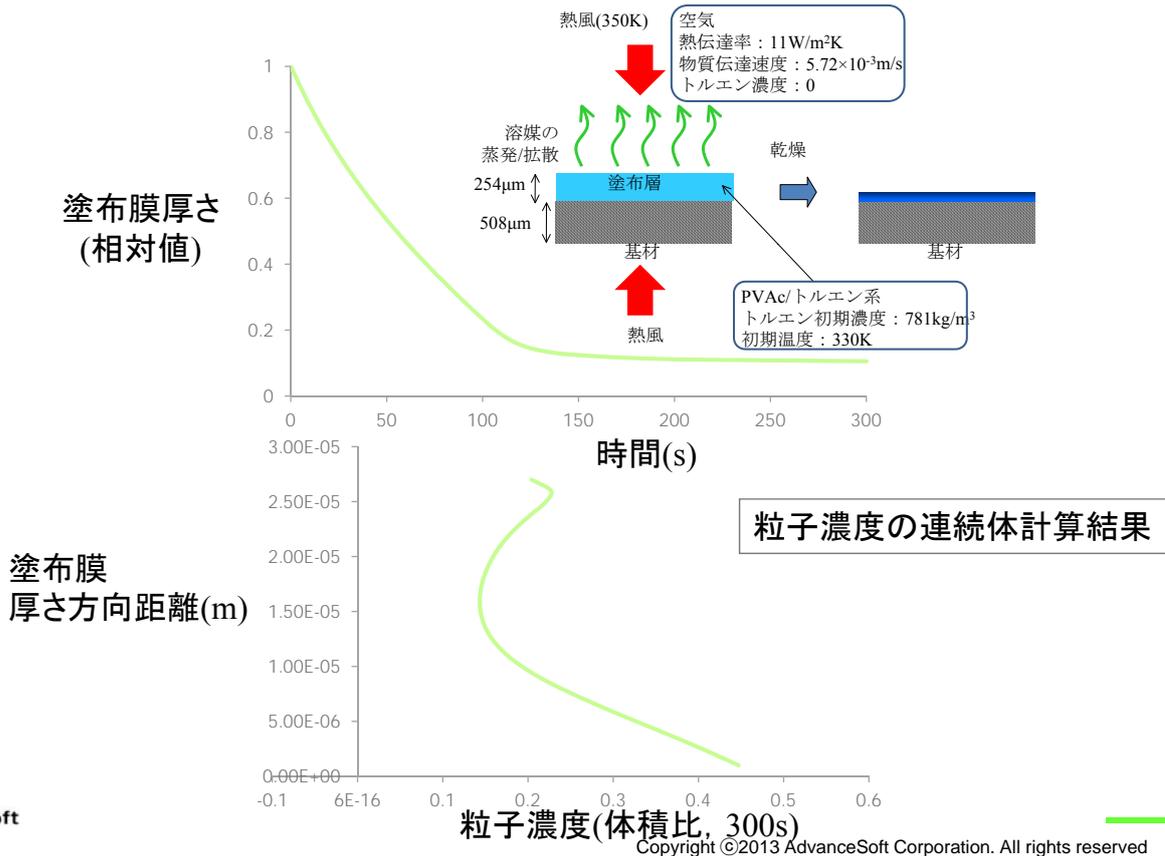
平均速度分布



塗布膜厚さの時間変化



山村論文の塗布膜乾燥条件による粒子濃度計算

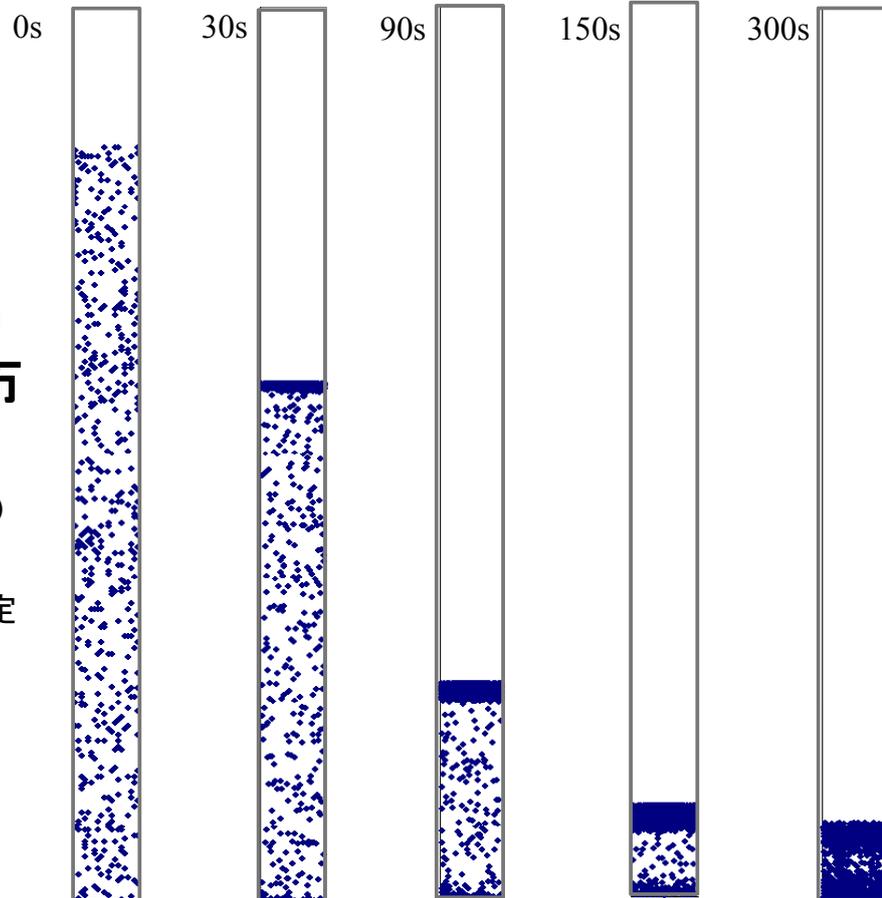


粒子法による 粒子濃度分布 過渡変化

(縦断面中央部スライス)

ランダム移動距離設定

$$l = 0.75\sqrt{2D\Delta t}$$



まとめ

- (1) 一次元移動座標による長尺乾燥ラインの解析
 - ・温風速度分布を汎用熱流体コードにより計算して適用
 - ・温風速度と境界層厚さによる剪断力, 熱伝達, 物質伝達評価式を適用
 - ・粘性, 熱伝導率など物性値をタイムステップ毎, メッシュ毎に設定可能(温度, 濃度の任意関数が導入可)
- (2) 塗布膜乾燥解析に粒子濃度連続体計算モデルを導入
 - ・Stokesによる沈降速度を考慮
 - ・Einsteinによるブラウン運動ランダム移動を考慮
- (3) 粒子法(個別要素法)による乾燥塗布膜内粒子挙動解析
 - ・Stokesによる沈降速度を考慮
 - ・Einsteinによるブラウン運動ランダム移動を考慮

謝辞

三菱製紙株式会社様には資料をご提供いただきましたことに感謝申し上げます。