コンピュータによる紡糸シミュレーション*

安 田 浩**

技術解説

1. 緒 言

熔融紡糸では、熔融ポリマはノズルより押出された後、一般に下方に設置されたローラを介して一定の速度で引取られる。ポリマはその間、冷却されて固化しながら細化し所定の繊度の繊維になる。内部構造的に見ると発生した紡糸伸張応力によって分子配向が生じ、また場合によってはこの紡糸応力と冷却履歴によって結晶化する。熔融紡糸過程での熔融ポリマの細化冷却現象を対象とした理論は、すでに松尾ら¹⁾により、詳しく報告されている。これらの理論は、紡糸中の1本の糸条に関するものであったが、熔融紡糸では、通常多数本の糸条が同時に紡糸される。この多数糸条間のばらつき等を問題にする場合は、上記理論のみでは取扱えない。紡糸中の多数の糸条を冷却する場合、冷却雰囲気条件が糸条ごとに異なってくる可能性がでてくる。そのため糸条ごとに、その糸条に応じた雰囲気条件を与えて、上記の理論を適用すべきことになる。

紡糸条件を与えて、これら理論式を解くことによって紡糸状態（ポリマの温度、断面積、張力の位置的、時間的变化）が求められる。このようにして求めた紡糸状態より紡糸された繊維の性質、繊維のむら、紡糸時の安定性等に関する種々の情報を引出すことができる。もちろん、この場合、例えば“得られた糸条の分子配向度”に“固化完了点付近での紡糸中糸条の応力（これは紡糸状態の解の一部）”を対応させて後者から前者を推定するという対応操作が必要である。この対応操作がどの範囲まで、どの程度の精度まで行うことができるかが、本シミュレーションの実用的価値を決める鍵となる。本報で後述するように、この対応操作はかなり広い範囲にわたって、ある程度の信頼性をもって行うことができる

のである。

入力としての紡糸条件と出力としての紡糸状態ならびに、これから演繹される諸情報がコンピュータ等によって簡単に結付けることができるようになると机上で紡糸実験ができるようになる。机上シミュレーション実験の特長は、実験費用が非常に安いということと、将来技術的な条件をも与えることができるということである。このように本報の熔融紡糸のシミュレーションをうまく活用すれば、熔融紡糸の現行技術の改善にも新しい技術の開発にも大いに役立てることができる。

2. 計算に用いた式

計算に用いた微分方程式は、単糸内の微小体積部分に関する運動量、エネルギー、物質の3収支式とレオロジ方程式ならびに単糸外周を境界とする巨視的体積に関する同様な4つの方程式から成っている。これら諸式の詳細は、文献²⁾を参照されたい。実際にこれら8個の連立偏微分方程式をそのまま解くことは困難で、そのため適当な近似を行い式を簡略化して解くことになる。

具体的に式を解くには、移動係数（熱伝達係数、空気との摩擦係数）ならびにポリマ特性（伸長粘度、密度、比熱）が与えられている必要がある。ここでは主としてポリエチレンテレフタレートの場合について、上記移動係数およびポリマ特性を与えて解いた。方程式を解くに当たっては、電子計算機を利用して解くことになる。定常単糸の巨視系、定常単糸の微視系、定常多数糸の巨視系および非定常単糸の巨視系について、それぞれコンピュータプログラムを開発した。

3. シミュレーション計算とその応用例

3.1 紡出糸配向度の推定

*Simulation of Melt Spinning by Computer.

**H. Yasuda, 東洋紡績 総合研究所 繊維研究所 主任研究員、

図1 σ_{95} と実測 Δn の関係 (ポリエステル, $[\eta]=0.58$, $T_N=287^\circ\text{C}$, $W=0.0475\text{g/sec}$, $T^*=22^\circ\text{C}$, $V_y=40\text{cm/sec}$)

図2 一定吐出量における Δn の実測値と計算値に及ぼす巻取速度の効果 (ポリエステル, $[\eta]=0.58$, $T_N=287^\circ\text{C}$, $W=0.0475\text{g/sec}$, $T^*=22^\circ\text{C}$, $V_y=40\text{cm/sec}$)

紡糸計算値より紡出糸の主な特性である配向度が推定できれば非常に便利である。この点に関しては古くから種々議論されている。特にポリエチレンテレフタレートについて、工程中の紡糸応力と配向度の大小を示す複屈折率が良く対応することを浜名ら³⁾は示した。筆者らは紡出糸の配向度と良好な相関関係を示す紡糸計算値を検討した結果、95%細化完了点での紡糸応力値 (σ_{95}) が複屈折 Δn と $25 \sim 40 \times 10^{-3}$ の範囲で良い一致を示すことを明らかにした (対応操作) (図1)。対応関係を示す実験式を用いて、計算値 σ_{95} よりさらに広範囲の紡出糸複屈折率 (Δn) を推定することができれば便利であり、その結果を図2に示す。

3.2 単糸内の半径方向の温度分布

単糸内の断面方向の差で最も重要な因子は温度である。こうした温度差があれば、温度差→伸長粘度差→伸長応力差→分子配向度差という結果になる。こうした分子配向度差が大の場合、例えば、伸長破断に要するエネルギーが減少し、一般に繊維の特性としては好ましくないことになる。単糸の表面と中心におけるトラウト粘度差 ($\delta\beta$) の平均粘度 β に対する比率を計算すると引取速度の大きいほどこの値 ($\delta\beta/\beta$) は大きくなる (図3)。このことは高速になるほど得られた糸の伸長破断エネルギーが減少することを示している。高速紡糸において顕著になる単糸内の温度分布、これにより引起こされる配向度の分布の幅を小さくするべく冷却気流温度の効果を検討した。図4は冷却気流温度 T^* を変化させたときの ($\delta\beta/\beta$) の変化ならびに糸表面と中心部の複屈折

図3 断面内伸張粘度差と距離 X の関係 (ポリエステル, $[\eta]=0.58$, $T_N=280^\circ\text{C}$, $W=0.0475\text{g/sec}$, $T^*=22^\circ\text{C}$, $V_y=40\text{cm/sec}$) ……糸の平均温度

図4 計算値 ($\delta\beta/\beta$) および実測値 ($\delta\Delta n$) の冷却気流温度効果

率差 (δn) (ツァイス社示差的複屈折率測定装置インターファコを用いて測定した) の変化を示す。計算結果 (a) より予測されるように、冷却気流温度を上げることにより配向度分布を小さくすることができることが実験的に明らかになった。この断面方向の温度差は、紡糸過程で配向結晶化が顕著に進行する、5 000 m/min の紡速領域において、微細構造的な特異性を引起させ、小角 X 線像において特徴的な散乱図を示す (図 5)。⁵⁾ この

図 5 ポリエチレンテレフタレート 5 000m/min 紡出糸の小角 X 線散乱図

図 7 非対称冷却時の繊維断面内冷却等温線 (計算値)

小角 X 線像の紡糸条件による変化挙動 (図 6) も、紡糸計算によりシミュレートすることができる。⁵⁾

一方、紡糸中の糸条が繊維軸に非対称に冷却される場合の繊維の半径方向の温度分布も図 7 のように計算することが可能である。この温度分布に応じて、分子配向度が非対称に分布し、それにより潜在巻縮性を与える。⁶⁾ 図 8 はポリプロピレン繊維を非対称冷却紡糸後延伸した

糸を染めたものであり、計算で求めた温度分布に対応する微細組織の発現を示している。

単糸間の、むらの場合は多孔系の取扱いが必要となってくる。²⁾ 例えば分子配向度の単糸間の、ばらつきは単糸 1 本ずつの応力 σ_{ss} (これは 3.1 で述べたように Δn と対応している) を求め、その変動幅を調べることになる。特定のノズル孔配置に対して計算した結果 (図 9) は、風下側の糸ほど細化は遅れ、紡糸張力も小

図 8 非対称冷却されたポリプロピレン繊維の断面写真 (スミブレン、ブリリアントブルーにて染色)

3.3 単糸間の むら

図 9 各糸条の温度、張力、断面積の変化 (冷却方向から 1 列目と 7 列目の糸条について示した)

図 6 ポリエチレンテレフタレート 6 000m/min 紡出糸の小角 X 線図の紡糸条件依存性、吐出量および冷却気流温度効果

さくすることを示す。しかし、 σ_{95} の値は同伴流量の見積りの程度により変化するが、風下側の糸ほど大となり配向度の高い糸が得られることを示唆する。ノズル孔の配列の仕方により σ_{95} の単糸間の、ばらつきは変化する。

3.4 織度むら

紡出糸の織度むらは、非定常の単糸の巨視系の計算により得られ、引取点での単糸断面積の時間変動を求めればよい。加瀬⁷⁾は基礎方程式を摂動展開により線型化し、過渡解を求めて、織度むらの検討を行い冷却気流が1%突変した時の巻取点での張力 (F_w) と断面積 (F_w) の時間変化を計算し図10に示した。この非定常解

図10 冷却空気風速1%突変時の過渡応答
巻取点での断面積 ($\bar{A}_w$) および張力 ($\bar{F}_w$) の変化

を一般的に得ることは現時点では非常に困難である。そのため我々は定常解により織度むらの発生しやすいさを検討した。変動入力を $\text{Inp}(x, t)$ 、その応答関数を $\text{Res}(x)$ とすると織度むらの大きさは(1)式で表わすことができる。

$$\text{織度むら} = \int_{x=0}^L \text{Res}(x) \text{Inp}(x, t) dx \dots\dots\dots (1)$$

変動入力のもっと重要な因子は冷却風のゆらぎである。応答関数 $\text{Res}(x)$ の正確な形を理論的に導出することには、まだ成功していないが $1/V (dV/dx)$ が $\text{Res}(x)$ の簡単で比較のめつもらしい近似だと考えている。ここで V はノズル口金下 x 点での紡出糸の線速度、 t は時間である。 $1/V (dV/dx)$ の最大値とこの最大値を与える位置 x_m の計算値は、吐出量を低くする、すなわち、ファイン デニール化するほど前者は大きく後者は小さくなる (図11)。実際に単糸デニールが小さくなるほど織度むらは大きくなり、しかもノズル口金により近い点での冷却風速の変動に敏感になることと合致している。

3.5 紡糸不安定性

溶融紡糸系では、種々の原因によって不安定になるが、現象は大変複雑なので、まだその整理分類さえ明確化されていない。いまだ不充分であるが不安定化現象の分類を提案した²⁾。この中で、石原⁸⁾が解析したドローレゾナンス現象が近年注目されていることを特記したい。

図11 吐出量に対する $\frac{1}{V} \frac{dV}{dx}$ の最大値とそれを与える位置 (x_m) の関係 (ポリエステル, $[\eta] = 0.58$, $T_N = 287$ $T_N = 287^\circ\text{C}$, $V_w = 5028 \text{ cm/sec}$, $T^* = 22^\circ\text{C}$, $V_y = 40 \text{ cm/sec}$)

4. 結 言

溶融紡糸過程での溶融ポリマの細化、冷却現象に対する理論式を与えられた紡糸条件のもとで解くことによって紡糸状態 (ポリマの温度、断面積、張力の位置的、時間変化) が求められる。この紡糸状態の解から適当な指標を引出して、得られた糸の分子配向度、得られた糸 (特に織度) のむら、紡糸系の安定性等を推定することができる。これらの紡糸シミュレーション計算にコンピュータを活用すれば、比較的容易にかなりの精度で机上実験をすることができる。

本理論に基づく、これらの計算システムをうまく活用すれば、現行技術の改善にも新しい紡糸技術の開発にも役立てることができる。当社では、これらの計算システムを長年実用してきており、スパンボンド紡糸技術、多孔ノズル紡糸系の冷却技術、ポリエステル フィラメントの染着むらの改善対策、ポリエステルの高速紡糸技術等に役立っている。

参考文献

- 1) 化学増刊, 化学同人, **39**, p.75 (1969)
- 2) 安田ほか; 繊維学誌, **34**, p.20 (1978)
松尾ほか; II, International Symposium on ManMade Fibers, Preprint, **2**, p.205 (1977)
- 3) 浜名; 化学同人, **39**, p.128 (1969)
- 4) 安田ほか; 繊維学誌, **35**, T-370 (1979)
- 5) 水上ほか; 繊維学会53年春季年次大会要旨集
安田ほか, 繊維学会54年春季年次大会要旨集 p.5
- 6) 松尾ほか; 繊維学誌, **24**, 512 (1968)
T. Matsuo; J. Text. Mach. Soc., Japan **23**, 29 (1977)
- 7) K. Kase et al; J. Appl. Poly. Sci., **11**, 251 (1967)
- 8) H. Ishihara et al; J. Appl. Poly. Sci., **19**, 557 (1975)