

メッシュフリー法による樹脂混練機内の部分充満状態および相変化を伴う材料挙動の数値解析に関する研究

関山, 和英

<https://hdl.handle.net/2324/5068195>

出版情報 : Kyushu University, 2022, 博士 (工学), 課程博士
バージョン :
権利関係 :

博士學位論文

メッシュフリー法による樹脂混練機内の
部分充満状態および相変化を伴う材料
挙動の数値解析に関する研究

2022年 6月

関山 和英

目次

第 1 章 序論	1
1.1. 緒言	2
1.2. 樹脂混練機内の材料挙動の特徴と数値解析に必要となる技術	3
1.3. 熔融混練部の数値解析に関する既往の研究	5
1.4. 熔融混練部の部分充満流動の数値解析に関する既往の研究	5
1.5. 可塑化混練部の数値解析に関する既往の研究	7
1.6. 本研究の目的	7
1.7. 本論文の構成	8
参考文献	8
第 2 章 高粘性流体の部分充満状態に関する三次元流動解析技術	13
2.1. 緒言	14
2.2. 支配方程式	14
2.3. 数値解析手法	15
2.3.1. Element-Free Galerkin Method	15
2.3.2. 速度の近似関数	15
2.3.3. 重み関数	17
2.3.4. 離散化手法	17
2.3.5. 積分法	20
2.3.6. 時間進行手法	21
2.3.7. 計算精度向上のための再配置手法	21
2.4. 解析手法の精度検証	23
2.4.1. 正方形体の回転による MLS 補間の精度比較	23
2.4.2. 共軸二重円筒内の完全充満流動解析による計算点再配置の効果検証	25
2.4.3. 円柱ロータ回転実験による自由表面形状の解析精度検証	28
2.4.4. 三角形形状ロータ回転実験による解析精度検証	34
2.5. 結言	38
参考文献	38
第 3 章 混練機内部の充満率と滞留時間に関する数値計算	40
3.1. 緒言	41
3.2. 支配方程式	42

3.3.	解析条件.....	42
3.4.	準定常状態でのマーカー粒子追跡方法.....	44
3.5.	解析結果.....	48
3.5.1.	充満状態とロータ形状および操作条件の関係.....	48
3.5.2.	平均滞留時間と滞留時間分布の関係.....	52
3.5.3.	完全充満の平均滞留時間との差異.....	58
3.5.4.	マーカー粒子挙動と流動状態.....	60
3.6.	結言.....	67
	参考文献.....	68
第4章 連続混練機内部の混練状態の評価.....		70
4.1.	緒言.....	71
4.2.	連続混練機と二軸押出機による樹脂混練実験.....	72
4.2.1.	使用材料.....	72
4.2.2.	実験装置.....	72
4.2.3.	運転条件.....	74
4.2.4.	混練評価方法.....	74
4.2.5.	実験結果.....	75
4.3.	数値解析による混練挙動の解釈.....	76
4.3.1.	解析手法.....	76
4.3.2.	解析条件.....	76
4.3.3.	評価指標.....	80
4.3.4.	数値解析の結果.....	82
4.4.	混練指標の検討.....	87
4.4.1.	せん断応力と混練指標の関係.....	87
4.4.2.	平均滞留時間と混練指標の関係.....	90
4.4.3.	応力と平均滞留時間を組み合わせた指標と混練指標の関係.....	91
4.5.	結言.....	92
	参考文献.....	93
第5章 連続体近似の構成則による可塑化現象の数値解析.....		95
5.1.	緒言.....	96
5.2.	固相および固液二相流の連続体構成則.....	96
5.3.	固相における構成則.....	98
5.3.1.	実験手法と実験装置.....	98
5.3.2.	実験条件.....	100

5.3.3.	実験結果と連続体構成則	101
5.4.	固液二相における構成則	104
5.4.1.	実験手法と実験装置	104
5.4.2.	実験条件	105
5.4.3.	トルクの時間変化	105
5.4.4.	固液二相流域での連続体構成則	108
5.4.5.	樹脂の状態による流動性の比較	110
5.5.	連続体近似の可塑化構成則を用いた数値解析	112
5.5.1.	支配方程式	112
5.5.2.	共軸二重円筒モデルによる固体領域での運動抵抗率の検証	113
5.5.3.	共軸二重円筒モデルによる可塑化を伴う流動場の計算	117
5.6.	結言	120
	参考文献	120
第 6 章	結論	122
	謝辞	125

第 1 章

序論

1.1. 緒言

二軸押出機や連続混練機は樹脂成形や製薬、食品などの製造プロセスにおいて重要な要素であることが知られている[1-5]。例えば、ポリエチレンは、原油から蒸留・精製されたナフサを原料に重合された段階では不均質な粉体の形態であり、この状態のまま成形した場合に、不均質な部分がざらざらとした質感となるためフィルム製品などの意匠性に問題が生じることや、パイプ製品などの環境応力破壊に繋がることが知られている[6,7]。また、粉体の状態では、輸送や工場内での取り扱いが難しいといった問題も生じる。二軸押出機や連続混練機（以後、混練機）はこのような材料の均質化や搬送性の向上を目的として使用されることがある。ほかに、ポリプロピレンにカーボンファイバーを混合することで機械強度が向上し、金属に替わる軽量材料として自動車や飛行機に利用されており、このカーボンファイバーの混合プロセスにも混練機が使用されている。このように、高品質な樹脂材料の大量生産プロセスとして混練機は重要な機械である。

一般的に混練機には、粉体（パウダー）もしくは粒状体（ペレット）の形態で樹脂が機械内に送り込まれ、可塑化工程と溶融混練工程を経て、造粒工程（ペレタイジング）によりペレットが製造される。パウダーを原料としたペレット製造は一次造粒と呼ばれ、材料の均質化や搬送性の向上を目的とする。一次造粒により製造されたペレットに対し、カーボンファイバーや添加剤を混ぜ込む工程は二次造粒と呼ばれ、樹脂材料の機械強度の向上といった高付加価値化が行われる。

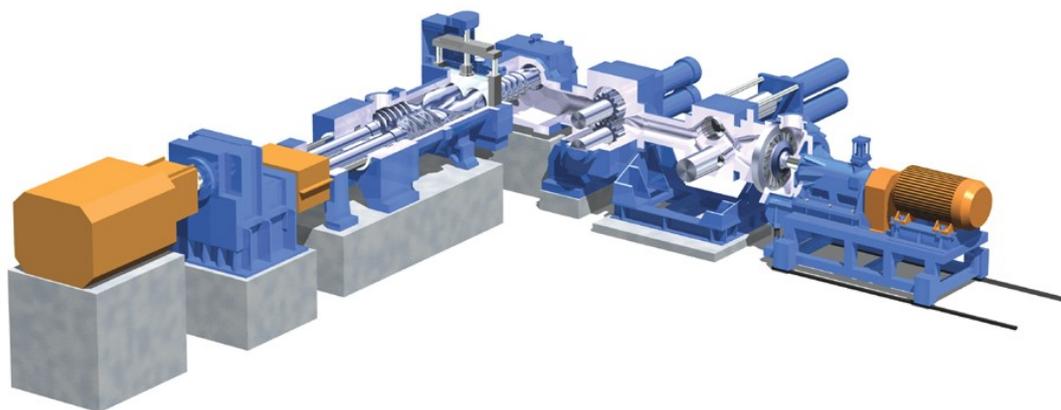


Fig. 1-1 Overview of counter-rotating continuous mixer.

混練過程での材料の均質化や高付加価値化には、樹脂材料内部の不均質部分やカーボンファイバーなどの分散や分配、配向などが影響することが知られており[8-11]、これら混練状態の制御、最適化を図る上で、ロータ軸の形状や操作条件の検討が長年の研究対象となっ

ている。また、混練機は樹脂の製造プロセスにおけるエネルギー消費の大きい機械であることから、混練プロセスの最適化は、樹脂製品の高付加価値化に加え、省エネルギー性への貢献も大きいと考えられる。

混練プロセスの最適化を行うためには、樹脂材料の混練機内部での挙動を把握することが重要である。前述のように、樹脂材料は混練機にパウダーまたはペレットの固体状態で投入され、シリンダからの加熱と内部のせん断発熱により可塑化が進行し、熔融状態で混練が行われる。この過程では、固体粒子群の流動、固体粒子の一部が熔融した固液二相流、完全な液体单相流が含まれ、これらの材料挙動を把握するために、実験および数値解析による混練機内部の可視化に関する検討が数多く取り組まれている[12-18]。しかし、混練機内部は後述する流動の複雑性から、実験的に流動挙動を正確に把握することが困難であり、近年は数値解析を利用した研究事例が多くなってきている。数値解析を用いることによって、詳細な速度分布や温度分布、変形挙動が把握でき、材料内部の応力分布といった実験では観察不可能な情報を得ることができるため、混練機性能を向上させるメカニズムを解明するためにも有用である。

したがって、混練機内の材料挙動を定量的に再現できる数値解析技術は、可塑化および混練が進行するメカニズムの解明を可能とし、樹脂材料の高品質化かつ省エネルギーの混練機開発に繋がること、また材料挙動の制御により新たな付加価値を持つ樹脂材料の開発に繋がることを期待できる。よって、本研究では、混練機内の可塑化挙動および熔融混練挙動を再現できる数値解析技術に着目することとした。

1.2. 樹脂混練機内の材料挙動の特徴と数値解析に必要な技術

混練機内部の材料挙動の数値解析技術を開発する上でポイントになるのは、一般的な液体流動と比較した時に混練機内の材料挙動の特徴と考えられる以下の4点であり、それぞれについて必要となる技術を示す。

- 1) 固体から液体に変化する可塑化挙動を伴うこと
- 2) 完全充満部と部分充満部の両方を含むこと
- 3) 複雑な流路断面形状の回転境界をもつこと
- 4) 流体が高粘性であること

・1) について

可塑化挙動の数値解析では、固体粒子群の流動、固液二相流、液单相の3つの状態を扱うため、液体流動だけでなく固体粒子間や固体粒子-液体間の相互作用を考慮する必要があり、計算負荷が高い。したがって、1)の条件を満たすためには、可塑化挙動の解析を高速度化し、混練プロセス全体を現状の計算技術や計算機環境で取り扱うことが可能な技術が必要である。

・2) および3) について

流動解析技術として一般的である格子法 (Mesh method) は、計算領域を格子 (Mesh) で分割し、格子点上に物理量をもつ計算点が配置され、格子の接続関係に基づいて微分方程式が離散化される。Fig. 1-2 に示すような部分充填状態により、流体の分離や合流が起こり存在領域が大きく変化する場合や、Fig. 1-3 に示すような流路断面形状が大きく変化する場合には、この接続関係を維持することが難しく、接続関係を再構築する必要が生じる。しかし、高速かつ自動的にこれらを達成する手段は存在せず、2)、3) の条件を満たすためには、適切に計算領域を分割し、その接続関係を維持できる技術が必要である

・4) について

流体が高粘性である場合、慣性力と粘性力の比である Re 数は極めて小さくなり、粘性の効果が大きくなる。また数値安定性の条件を満たすためには、一般的な数値解析手法では時間刻みが極めて小さくなる。このため、4) の条件を満たすためには、粘性の効果の高精度な考慮方法および計算負荷を低減する手法が必要となる。



Fig. 1-2 Example of partially filled condition of full-flight screw.

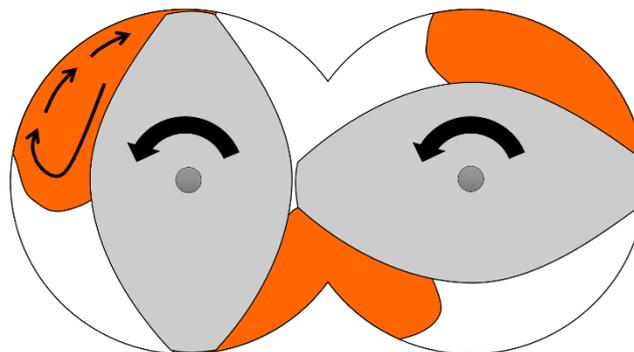


Fig. 1-3 Image of cross-sectional flow field of full-flight screw.

1.3. 溶融混練部の数値解析に関する既往の研究

混練機内部の樹脂流れについては、押出機の流路を二次元の平板流れに展開し、展開された流路の分割された要素間での樹脂の流入出の流量や圧力バランスを押し出し特性式に基づいて解く Flow Analysis Network Method[19] (FAN 法) などによって解析されてきた[12, 20-22]. 富山ら[22]は FAN 法を用いて、噛合同方向回転二軸押出機の樹脂物性やスクリュ形状、押し出し条件の設定により、軸方向の樹脂圧力や充填率、滞留時間や動力の予測が可能であると示している。しかし、FAN 法では、押し出し機全体での定性的な流動状態の把握は可能である一方で、局所的な流動状態は知ることができない。

局所的な流動状態については、数値流動解析の代表的な手法である有限差分法 (Finite Difference Method, FDM) や有限要素法 (Finite Element Method, FEM) を用いて検討されている[15, 16, 18, 23-31]. Yang ら[15]は FEM を用いて同方向回転二軸押出機の三次元解析を行い、せん断応力分布や伸長流動分布、軸方向の圧力勾配に対する、ニーディングディスク (KD) の位相、構成、運転条件の影響について検討している。Ishikawa ら[29]は異方向回転連続混練機の三次元解析を行い、溶融混練部における速度、圧力、温度分布の予測を行い、実験との比較検証を行っている。Zhang ら[25]は FEM を用いて同方向回転二軸押出機の三次元混練流動解析を行い、種々の KD セグメントについての滞留時間分布についての検討を行っている。解析結果と実験結果の滞留時間分布のトレンドはよく一致した一方で、解析結果の滞留時間分布は実験結果よりも幅の広い分布になったと述べており、この原因として、解析が完全充填であったことを原因の一つに挙げている。

このように、従来の数値解析による混練機内部の流動解析は完全充填を仮定している。前述の Ishikawa らの検討のように、完全充填に近い条件の場合は解析と実験で良い一致を示すが、部分充填の領域が大きい運転条件の場合には差異が大きくなっていると考えられ、部分充填状態での流動現象の解明は長年の課題となっていた。

1.4. 溶融混練部の部分充填流動の数値解析に関する既往の研究

混練機内部は部分充填状態であることが一般的である。混練機内部の樹脂の滞在位置や充填率、すなわち充填状態は、樹脂の滞留時間や応力状態の決定因子の一つであるため、混練状態を評価する上で重要な指標となる。混練機内部の充填状態を把握するためには、部分充填状態の流動解析技術として、連続機の入口から出口まで樹脂が流動する間の自由表面の追跡が可能であることと、回転する移動壁面を考慮可能であることが必要となる。しかし、これらを全て満たす数値解析技術として確立された手法は現在のところ存在していない。したがって、前節に示したように、混練機内部の流動解析は、混練機内が完全充填であると仮定した流動の特徴評価や、詳細な流動解析は行わず充填率の変化を一次的に評価する

など、目的に応じて適切な手法が選択されている。

混練流動解析として必要となる自由表面の追跡については、格子法では VOF 法[32]などを用いて研究が古くから進められている[33,34]. 近年では、計算機性能の向上により、格子法よりも計算負荷が高いとされる手法も工業的に利用できるようになっており、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) [35]や Moving Particle Simulation (MPS) [36]などの粒子法、Boltzmann 方程式を元とした格子ボルツマン法 (LBM) [37]を用いた研究も増えてきている[38-41]. 特に粒子法のようなメッシュフリー法は、回転する移動壁面を考慮する上で、複雑な境界条件の取り扱いや、流路形状の変化に対してもメッシュ生成に関わる問題がなくなるため、VOF 法等の格子ベースの手法よりも混練機内の流動解析に適した技術であると考えられる。

粒子法を用いた混練機内部の部分充満状態の数値解析については、主に SPH と MPS を用いた検討がなされている[42-48]. Eitzlmayr ら[42]は、SPH を用いて混練機内部の部分充満解析を行い、同方向回転二軸押出機のスクリュ部に関し、スクリュ形状と樹脂材料の分配特性の検討を行っている。しかし、実際の樹脂粘度 (10^2 - 10^4 Pa·s 程度) を計算上取り扱うことができず、 0.2 Pa·s 程度の材料粘度を与えている。Dong ら[48]は、GPU による並列計算 SPH を用いて、二軸押出機のフルフライトスクリュ部の部分充満解析を行い、部分充満状態における軸方向速度分布や、樹脂材料の分配特性の検討を行っている。しかし、Bonet ら[49]は、SPH や MPS を適用した場合、角運動量の保存性が悪いことから予測精度が低下すると報告しており、また 1.2 節に示したように高粘性流体を対象として十分な解析精度を得るための計算には、数値安定性の問題から、混練部の一部分の解析においても膨大な計算時間を必要とすることがわかっている。

以上のように、数値解析による混練機の部分充満状態の流動挙動については検討が進められているが、樹脂の粘度特性を考慮し、混練機全体での定量的な部分充満流動挙動について検討した研究はほとんどない。

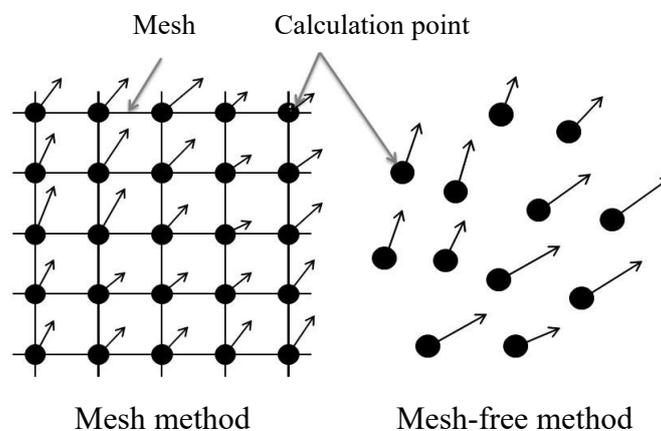


Fig. 1-4 Image of mesh method and mesh-free method.

1.5. 可塑化混練部の数値解析に関する既往の研究

混練機内部での樹脂の可塑化については、単軸押出機を中心に物理モデルの検討が進められており、モデルにより可塑化の進展がほぼ説明できる状態となっている[50]。これに対し、二本の軸を持つ二軸押出機や連続混練機などでも物理モデルの検討が進められているが[3, 51]、軸と軸の間で複雑な挙動が生じることから理論的に検討することが困難であり、数値解析技術の開発への期待は大きい。

可塑化現象の数値解析は大きく3つのアプローチが存在する。1つ目は物理モデルに基づいた発熱量予測から断面固相率を算出するものである。Wilczynskiら[21]は、同方向回転二軸押出機の固体搬送から熔融混練までの全工程について、流量に応じた断面平均圧力の軸方向分布、および圧力に応じた摩擦係数モデルを構築し、二軸押出機全体の充満状態や固体領域の予測を行っている。2つ目は、固体状態を高粘度流体として取り扱い、連続体の流動解析で熔融挙動を再現するものである。Altunkaynakら[52]は、融点以下では10 MPa・s以上の流体とすることで流動性のない材料として固体状態を表す手法を用いて、三次元FEM解析により単軸押出機内での熔融挙動の再現を行っている。3つ目は、離散要素法(Discrete Element Method, DEM)を用いて、固体の粒状体である樹脂挙動を再現するものである。Moyseyら[53]は実験によりHDPEペレットの衝突挙動をモデル化し、DEMにより押出機による搬送挙動、および搬送中の温度変化の予測を行っている。

以上のように、二本の軸を持つ混練機の可塑化混練部については、複数のアプローチが試されている段階で、可塑化混練部全体の詳細挙動について検討した事例はほとんどない。

1.6. 本研究の目的

本研究の目的は、混練機内の部分充満流動および可塑化混練部での材料挙動の詳細評価が可能となる数値解析技術を確立し、熔融混練部および可塑化混練部を含めた混練機全体の混練挙動を明らかにすることである。適用する手法は、部分充満状態の解析にメリットをもつメッシュフリー法とする。混練機内流動の特徴を高精度に解析することが可能となる手法について検討し、解析の安定性についても検討する。構築した解析手法を用いて、混練機全体の解析を行い、完全充満状態を仮定した場合に得られない、充満率や充満状態の評価を行う。また、部分充満状態と詳細な流動解析結果に基づいた新たな混練評価方法を検討する。加えて、混練機全体解析のために、熔融混練部だけでなく、可塑化混練部の数値解析手法についても検討する。

1.7. 本論文の構成

第1章では、本論文の位置付けと、本論文の構成を示す。

第2章では、本論文で用いる Element-Free Galerkin Method (EFGM) について、概要および混練流動向けの改良アルゴリズムについて示し、基礎的な流動モデルでの厳密解および実験結果との比較から、EFGM の混練流動への適用性について言及する。

第3章では、EFGM を用いた混練機内部の部分充満流動状態について、操作条件や混練機ロータ形状の差異によって変化する充満率や充満状態、滞留時間分布等の内部状態について述べる。

第4章では、実際の混練実験結果と部分充満流動解析結果を比較し、充満率と全体の詳細な流動解析結果に基づいた新たな混練評価指標を提案する。

第5章では、混練機全体解析のために必要となる可塑化混練部のメッシュフリー法による予測方法について、連続体近似した可塑化構成則の提案と、その構成則に基づいた可塑化解析結果について述べる。

第6章では、混練機全体解析のために必要となる可塑化混練部のメッシュフリー法による予測方法について、連続体近似した可塑化構成則の提案と、その構成則に基づいた可塑化解析結果について述べる。

参考文献

1. Z. Tadmor and C. G. Gogos, *Principles of Polymer Processing*. 2013: John Wiley & Sons.
2. K. Kohlgrüber, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Fundamentals*. 2019: Carl Hanser Verlag GmbH Co KG.
3. H. Potente and U. Melisch, *Theoretical and Experimental Investigations of the Melting of Pellets in Co-Rotating Twin-Screw Extruders*. *International Polymer Processing*, 1996. **11**(2): pp. 101-108.
4. L. Wang, S. Smith, and C. Chessari, *Continuous-Time Model Predictive Control of Food Extruder*. *Control Engineering Practice*, 2008. **16**(10): pp. 1173-1183.
5. A. Eitzlmayr, J. Khinast, G. Hörl, G. Koscher, G. Reynolds, Z. Huang, J. Booth, and P. Shering, *Experimental Characterization and Modeling of Twin-Screw Extruder Elements for Pharmaceutical Hot Melt Extrusion*. *AIChE Journal*, 2013. **59**(11): pp. 4440-4450.
6. *Better Quality Control by on-Line Testing*. *Plastics, Additives and Compounding*, 2000. **2**(5): pp. 34-37.
7. 細田 喜六郎, ポリエチレンの環境亀裂と配合剤. *日本ゴム協会誌*, 1962. **35**(2): pp. 115-124.
8. H. R. Dennis, D. L. Hunter, D. Chang, S. Kim, J. L. White, J. W. Cho, and D. R. Paul, *Effect of*

- Melt Processing Conditions on the Extent of Exfoliation in Organoclay-Based Nanocomposites*. Polymer, 2001. **42**(23): pp. 9513-9522.
9. W. Lertwimolnun and B. Vergnes, *Effect of Processing Conditions on the Formation of Polypropylene/Organoclay Nanocomposites in a Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2006. **46**(3): pp. 314-323.
 10. 船津 和守, 庄田 真一, 篠原 久, *高分子溶融体の不安定流動に及ぼすノズル形状の影響*. 化学工学論文集, 1979. **5**(6): pp. 553-558.
 11. B. Dryer, G. Fukuda, J. Webb, K. Montemayor, D. I. Bigio, P. Andersen, and M. Wetzel, *Comparison of Scale-up Methods for Dispersive Mixing in Twin-Screw Extruders*. Polymer Engineering and Science, 2017. **57**(3): pp. 345-354.
 12. P. J. Kim and J. White, *Flow Visualization and Residence Time Distributions in a Modular Co-Rotating Twin Screw Extruder*. International Polymer Processing, 1994. **9**(2): pp. 108-118.
 13. Z. Linjie and G. Xiaozheng, *Experimental Investigation of Polymer Pellets Melting Mechanisms in Corotating Twin-Screw Extrusion*. Advances in Polymer Technology, 2002. **21**(3): pp. 188-200.
 14. K. Taki, T. Sugiyama, M. Ohara, S. Umemoto, S.-i. Tanifuji, J.-i. Murata, I. Tsujimura, and S.-i. Kihara, *Online Monitoring of the Degree of Fill in a Rotating Full-Flight Screw of a Corotating Twin-Screw Extruder*. AIChE Journal, 2019. **65**(1): pp. 326-333.
 15. H.-H. Yang and I. Manas-Zloczower, *Flow Field Analysis of the Kneading Disc Region in a Co-Rotating Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 1992. **32**(19): pp. 1411-1417.
 16. T. Kajiwara, Y. Nagashima, Y. Nakano, and K. Funatsu, *Numerical Study of Twin-Screw Extruders by Three-Dimensional Flow Analysis—Development of Analysis Technique and Evaluation of Mixing Performance for Full Flight Screws*. Polymer Engineering & Science, 1996. **36**(16): pp. 2142-2152.
 17. V. L. Bravo, A. N. Hrymak, and J. D. Wright, *Study of Particle Trajectories, Residence Times and Flow Behavior in Kneading Discs of Intermeshing Co-Rotating Twin-Screw Extruders*. Polymer Engineering and Science, 2004. **44**(4): pp. 779-793.
 18. Y. Nakayama, H. Takemitsu, T. Kajiwara, K. Kimura, T. Takeuchi, and H. Tomiyama, *Improving Mixing Characteristics with a Pitched Tip in Kneading Elements in Twin-Screw Extrusion*. AIChE Journal, 2018. **64**(4): pp. 1424-1434.
 19. Z. Tadmor, E. Broyer, and C. Gutfinger, *Flow Analysis Network (Fan)—a Method for Solving Flow Problems in Polymer Processing*. Polymer Engineering & Science, 1974. **14**(9): pp. 660-665.
 20. J. White, J. Keum, H. Jung, K. Ban, and S. Bumm, *Corotating Twin-Screw Extrusion Reactive Extrusion-Devolatilization Model and Software*. Polymer-Plastics Technology and Engineering, 2006. **45**(4): pp. 539-548.
 21. K. Wilczynski, Q. Jiang, and J. L. White, *A Composite Model for Melting, Pressure and Fill Factor Profiles in a Metered Fed Closely Intermeshing Counter-Rotating Twin Screw Extruder*.

- International Polymer Processing, 2007. **22**(2): pp. 198-203.
22. 富山 秀樹, 石橋 正通, 井上 茂樹, 二軸スクリュ押出機内の樹脂挙動解析ソフトウェア「Tex-Fan」の開発. 日本製鋼所技報, 2004(55): pp. 32-38.
23. P. S R, S. K. Arumugam, R. Gangradey, S. Mukherjee, S. Kasthuriengan, U. Behera, G. Pabbineedi, and M. M, *Cfd Modelling and Performance Analysis of a Twin Screw Hydrogen Extruder*. Fusion Engineering and Design, 2019. **138**: pp. 151-158.
24. Y. Nakayama, E. Takeda, T. Shigeishi, H. Tomiyama, and T. Kajiwara, *Melt-Mixing by Novel Pitched-Tip Kneading Disks in a Co-Rotating Twin-Screw Extruder*. Chemical Engineering Science, 2011. **66**(1): pp. 103-110.
25. X.-M. Zhang, L.-F. Feng, W.-X. Chen, and G.-H. Hu, *Numerical Simulation and Experimental Validation of Mixing Performance of Kneading Discs in a Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2009. **49**(9): pp. 1772-1783.
26. T. Ishikawa, T. Amano, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, *Flow Patterns and Mixing Mechanisms in the Screw Mixing Element of a Co-Rotating Twin-Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2002. **42**(5): pp. 925-939.
27. T. Ishikawa, S.-I. Kihara, K. Funatsu, T. Amaiwa, and K. Yano, *Numerical Simulation and Experimental Verification of Nonisothermal Flow in Counter-Rotating Nonintermeshing Continuous Mixers*. Polymer Engineering & Science, 2000. **40**(2): pp. 365-375.
28. E. E. Acur and J. Vlachopoulos, *Numerical Simulation of a Single-Screw Plasticating Extruder*. Polymer Engineering & Science, 1982. **22**(17): pp. 1084-1094.
29. T. Ishikawa, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, *Numerical Simulation and Experimental Verification of Nonisothermal Flow in Counter-Rotating Nonintermeshing Continuous Mixers*. Polymer Engineering and Science, 2000. **40**(2): pp. 365.
30. Y. Nakayama, N. Nishihira, T. Kajiwara, H. Tomiyama, T. Takeuchi, and K. Kimura, *Effects of Pitched Tips of Novel Kneading Disks on Melt Mixing in Twin-Screw Extrusion*. Nihon Reoroji Gakkaishi, 2017. **44**(5): pp. 281-288.
31. P. S. Ravi Kumar and S. K. Arumugam, *Non-Newtonian and Non-Isothermal Numerical Modelling of a Twin Screw Hydrogen Extruder with Slip Imposed Boundary Condition on the Screw Surface*. Fusion Engineering and Design, 2020. **161**: pp. 111896.
32. C. W. Hirt and B. D. Nichols, *Volume of Fluid (Vof) Method for the Dynamics of Free Boundaries*. Journal of Computational Physics, 1981. **39**(1): pp. 201-225.
33. X. Sun and M. Sakai, *Numerical Simulation of Two-Phase Flows in Complex Geometries by Using the Volume-of-Fluid/Immersed-Boundary Method*. Chemical Engineering Science, 2016. **139**: pp. 221-240.
34. H. Arisawa, M. Nishimura, H. Imai, and T. Goi, *Computational Fluid Dynamics Simulations and Experiments for Reduction of Oil Churning Loss and Windage Loss in Aeroengine Transmission*

- Gears*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2014. **136**(9): pp. 092604-092604-9.
35. J. J. Monaghan, *Simulating Free Surface Flows with Sph*. Journal of Computational Physics, 1994. **110**(2): pp. 399-406.
36. S. Koshizuka and Y. Oka, *Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid*. Nuclear science and engineering, 1996. **123**(3): pp. 421-434.
37. 蔦原 道久, *格子ボルツマン法の基礎と応用*. 日本機械学会論文集 B 編, 2011. **77**(784): pp. 2367-2378.
38. Y. Tanaka, Y. Washio, M. Yoshino, and T. Hirata, *Numerical Simulation of Dynamic Behavior of Droplet on Solid Surface by the Two-Phase Lattice Boltzmann Method*. Computers & Fluids, 2011. **40**(1): pp. 68-78.
39. 深澤 仁, 園田 佳巨, *Sph 粒子法の構造部材の弾塑性解析への適用に関する基礎的研究*. 構造工学論文集 A, 2009. **55A**: pp. 1358-1365.
40. 松隈 洋介, 井上 元, 峯元 雅樹, *溶融スラグの流下状態に粘度が及ぼす影響の数値的検討*. 理論応用力学講演会 講演論文集, 2013. **62**.
41. 横山 真男, 菊地 謙次, 窪田 佳寛, 望月 修, *物体壁面の表面性状を考慮した流れのシミュレーション*. ながれ : 日本流体力学会誌, 2013. **32**(4): pp. 319-326.
42. A. Eitzlmayr, J. Matic, and J. Khinast, *Analysis of Flow and Mixing in Screw Elements of Corotating Twin-Screw Extruders Via Sph*. AIChE Journal, 2017. **63**(6): pp. 2451-2463.
43. A. Eitzlmayr and J. Khinast, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Detailed Analysis of Conveying Elements Based on Smoothed Particle Hydrodynamics. Part 1: Hydrodynamics*. Chemical Engineering Science, 2015. **134**: pp. 861-879.
44. A. Eitzlmayr and J. Khinast, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Detailed Analysis of Conveying Elements Based on Smoothed Particle Hydrodynamics. Part 2: Mixing*. Chemical Engineering Science, 2015. **134**: pp. 880-886.
45. 福澤 洋平, 富山 秀樹, 柴田 和也, 越塚 誠一, *Mps 法による高粘性非ニュートン流体の流動解析*. 日本計算工学会論文集. 2014. p. 20140007.
46. P. Wittek, G. G. Pereira, M. A. Emin, V. Lemiale, and P. W. Cleary, *Accuracy Analysis of Sph for Flow in a Model Extruder with a Kneading Element*. Chemical Engineering Science, 2018. **187**: pp. 256-268.
47. J. Trippe and V. Schöppner, *Investigation of the Influence of Material and Pellet Shape on the Dissipation in the Solids Conveying Zone of Single-Screw Extruders Based on the Discrete Element Method (Dem)*. Vol. 1914. 2017. 080002.
48. T. Dong, S. Jiang, J. Wu, H. Liu, and Y. He, *Simulation of Flow and Mixing for Highly Viscous Fluid in a Twin Screw Extruder with a Conveying Element Using Parallelized Smoothed Particle Hydrodynamics*. Chemical Engineering Science, 2020. **212**: pp. 115311.
49. J. Bonet and T. S. L. Lok, *Variational and Momentum Preservation Aspects of Smooth Particle*

- Hydrodynamic Formulations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1999. **180**(1): pp. 97-115.
50. G. C. C., T. Zehev, and K. M. Ho, *Melting Phenomena and Mechanisms in Polymer Processing Equipment*. Advances in Polymer Technology, 1998. **17**(4): pp. 285-305.
51. B. Vergnes, G. Souveton, M. L. Delacour, and A. Ainsier, *Experimental and Theoretical Study of Polymer Melting in a Co-Rotating Twin Screw Extruder*. International Polymer Processing, 2001. **16**(4): pp. 351-362.
52. A. Altinkaynak, M. Gupta, M. A. Spalding, and S. L. Crabtree, *Melting in a Single Screw Extruder: Experiments and 3d Finite Element Simulations*. International Polymer Processing, 2011. **26**(2): pp. 182-196.
53. P. A. Moysey and M. R. Thompson, *Determining the Collision Properties of Semi-Crystalline and Amorphous Thermoplastics for Dem Simulations of Solids Transport in an Extruder*. Chemical Engineering Science, 2007. **62**(14): pp. 3699-3709.

第 2 章

高粘性流体の部分充満状態に関する 三次元流動解析技術

2.1. 緒言

本章では、二軸押出機や連続混練機の内部流動を取り扱うための数値計算手法を提案する。高粘性流体の流動解析を行うためには、流動へのせん断場や回転場への寄与度が高いため、水や油といった低粘性流体の流動解析に比べ、せん断応力を高精度に予測する必要がある。このような流動場へのせん断力の影響が大きい特徴をもつ流れに対し、メッシュフリー法の代表的な手法である SPH [1]や MPS [2]を適用した場合、角運動量が保存できないことから速度の予測精度が低下する[3]。一方、弱形式積分方程式に基づくメッシュフリー法である Element-Free Galerkin Method (EFGM) [4]は、主に剛性の高い構造物の問題を対象に発展してきており、角運動量が保たれ、物体の剛体回転を高精度に予測することが可能である。したがって、本研究では EFGM を基礎とした離散化を行った。また、一般にメッシュフリー法は計算点の移動に伴い計算配置が不均一になり、計算精度が低下することが知られている[5]。この問題に対し、計算点配置を適切に保ち計算精度の低下を防ぐ再配置手法を提案した。最後に、これらの手法を用いた高粘性流体の解析結果に関し、厳密解および実験結果との比較により樹脂流動への適用性について検討した。

2.2. 支配方程式

流体は等温で非圧縮の流れを仮定した。運動方程式および構成方程式を次式に示す。

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad \text{in } \Omega \quad (2-1)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{on } \Gamma_t \quad (2-2)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } \Gamma_u \quad (2-3)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon} + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu\right)\dot{\varepsilon}_v\mathbf{I} \quad (2-4)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2-5)$$

$$\dot{\varepsilon}_v = \dot{\varepsilon}_{xx} + \dot{\varepsilon}_{yy} + \dot{\varepsilon}_{zz} \quad (2-6)$$

ここで、 Ω は影響領域、 Γ_t は表面力既定境界、 Γ_u は速度既定境界、 ρ は流体密度、 D/Dt はラグランジュ微分、 $\boldsymbol{\sigma}$ は応力テンソル、 \mathbf{b} は体積力ベクトル、 \mathbf{u} は速度ベクトル、 \mathbf{n} は単位法線

ベクトル, \mathbf{f} は表面力ベクトルである. \mathbf{u} は境界速度ベクトルであり, 速度境界条件はペナルティ法によって満足させた. また, μ は流体粘度, $\mathbf{\epsilon}$, $\mathbf{\epsilon}_v$, \mathbf{I} はそれぞれひずみ速度テンソル, 体積ひずみ速度, 単位テンソルである. 非圧縮性はペナルティ関数法により満足させた. ペナルティ係数 λ は粘度に対して十分大きい値とし, 本研究では $\lambda = 10000\mu$ とした. この時, 圧力 p は以下の式で近似することができる.

$$p = -\lambda \mathbf{\epsilon}_v \quad (2-7)$$

2.3. 数値解析手法

2.3.1. Element-Free Galerkin Method

一般的に EFGM では, 数値積分のための Background cell [6, 7]が必要であるが, 計算負荷軽減のために, 本研究ではこれを用いず計算点で積分 (Nodal integration [8]) を行った. 時間積分については, 陽解法では高粘性流体を解析する場合, 時間増分が極めて小さくなり膨大な計算時間が必要となるため, 完全陰解法を採用した.

2.3.2. 速度の近似関数

EFGM では, 任意点における速度成分を以下のように移動最小二乗補間(以下 MLS 補間)で表す. MLS 補間では, 任意点 \mathbf{x} の速度成分 $u(\mathbf{x})$ を次のような多項式で定義する.

$$u(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad (2-8)$$

ここで, 添字 T は転置を示し, $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ は次数 m の多項式の基底ベクトル, $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ は係数ベクトルを示す. 二次元の場合, 次のようになる.

$$m = 0: \quad \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1], \quad \mathbf{a}(\mathbf{x}) = [a_1(\mathbf{x})] \quad (2-9)$$

$$m = 1: \quad \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1, x, y], \quad \mathbf{a}^T(\mathbf{x}) = [a_1(\mathbf{x}), a_2(\mathbf{x}), a_3(\mathbf{x})] \quad (2-10)$$

次に, \mathbf{a} を決定するために, 残差 $J(\mathbf{x})$ を次のように定義する.

$$J(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^n w_I(\mathbf{x}) [\mathbf{P}^T(\mathbf{x}_I) \mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_I]^2 \quad (2-11)$$

ここで、 $w_I(\mathbf{x})$ は重み関数、 n は影響領域内の計算点数、添字 I は I 番目の計算点を示す。 $J(\mathbf{x})$ は $\mathbf{u}(\mathbf{x}_I)$ と u_I の間での重み付き二乗和を表しており、これを最小化することにより $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ は次式のようになる。

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{B}(\mathbf{x}) \mathbf{u} \quad (2-12)$$

$$\mathbf{u}^T = [u_1, u_2, \dots, u_N] \quad (2-13)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^n w_I(\mathbf{x}) \mathbf{P}(\mathbf{x}_I) \mathbf{P}^T(\mathbf{x}_I) \quad (2-14)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = [w_1(\mathbf{x}) \mathbf{p}(\mathbf{x}_1), \dots, w_n(\mathbf{x}) \mathbf{p}(\mathbf{x}_n)] \quad (2-15)$$

さらに、Eq.(2-12)を Eq.(2-8)に組み込むと、次のようになる。

$$u(\mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{u} \quad (2-16)$$

ここで

$$\mathbf{N}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}^T(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \mathbf{B}(\mathbf{x}) \quad (2-17)$$

であり、 $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ は FEM における形状関数に相当する。

Eq.(2-16)を \mathbf{x} に関して微分すると、次の式が得られる。

$$u_{,i} = \mathbf{N}_{,i} \mathbf{u} \quad (2-18)$$

$$\mathbf{N}_{,i} = \mathbf{p}_{,i}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{p}^T \mathbf{A}_{,i}^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{p}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_{,i} \quad (2-19)$$

ここで、添字 $(,i)$ は x 、 y または z に関する微分を示す。

2.3.3. 重み関数

本研究では重み関数 w として以下の指数関数を用いた.

$$w_I(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{e^{-\alpha(r/r_0)^2} - e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} & \text{if } r \leq r_0 \\ 0 & \text{if } r > r_0 \end{cases} \quad (2-20)$$

$$r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_I| \quad (2-21)$$

ここで、 r_0 は重み関数の影響領域半径、 α は係数である. 過去の研究[7, 9]で安定した解析結果が得られるとされる数値を参考に、 $\alpha = 7$ 、 r_0 は二次元計算では初期計算点間隔の2.6倍、三次元計算では2.1倍とした.

2.3.4. 離散化手法

任意点の速度は、次のように表される.

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^n N_I(\mathbf{x}) \tilde{u}_I \quad (2-22)$$

ここで、 N_I は \mathbf{N} ベクトルの I 番目の成分、 u は x 方向の速度、 \tilde{u}_I は同方向の I 番目計算点の節点速度である. y 方向、 z 方向についても同様である.

以上の式を用いて、支配方程式は次のように離散化される.

$$\mathbf{K}\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{f} \quad (2-23)$$

$$\mathbf{K}_{IJ} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_I^T \mathbf{D} \mathbf{B}_J d\Omega + \kappa \int_{\Gamma_u} \mathbf{N}_I^T \mathbf{N}_J d\Gamma \quad (2-24)$$

$$\mathbf{f}_I = \int_{\Omega} N_I \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma_t} N_I \bar{\mathbf{t}} d\Gamma + \kappa \int_{\Gamma_u} N_I \bar{\mathbf{u}} d\Gamma \quad (2-25)$$

ここで、 $\bar{\mathbf{u}}$ は速度ベクトルを表し、添字 I と J はそれぞれ計算点 I と J の成分を表す. 二次元問題の場合、各行列成分は次のように表される.

$$\mathbf{B}_I = \begin{bmatrix} N_{I,x} & 0 \\ 0 & N_{I,y} \\ N_{I,y} & N_{I,x} \end{bmatrix} \quad (2-26)$$

$$\mathbf{N}_I = \begin{bmatrix} N_I & 0 \\ 0 & N_I \end{bmatrix} \quad (2-27)$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 4\mu/3 + \lambda & -2\mu/3 + \lambda & 0 \\ -2\mu/3 + \lambda & 4\mu/3 + \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \quad (2-28)$$

これらの行列は、応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ とひずみ速度テンソル $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ をベクトル表示した $\boldsymbol{\sigma}_c$ 、 $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_c$ を用いると、次のような関係式に変換される。

$$\boldsymbol{\sigma}_c = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} \quad (2-29)$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_c = \begin{bmatrix} \dot{\epsilon}_{xx} \\ \dot{\epsilon}_{yy} \\ \dot{\epsilon}_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial u / \partial x \\ \partial v / \partial y \\ 1/2(\partial u / \partial y + \partial v / \partial x) \end{bmatrix} \quad (2-30)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_c = \mathbf{D} \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_c \quad (2-31)$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_c = \mathbf{B} \tilde{\mathbf{u}} = \sum_I^n \mathbf{B}_I \tilde{\mathbf{u}}_I \quad (2-32)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_I = \begin{bmatrix} \tilde{u}_I \\ \tilde{v}_I \end{bmatrix} \quad (2-33)$$

完全な非圧縮性流体では $\lambda \rightarrow \infty$ であるが、本研究では $\lambda = 10000\mu$ とし、非圧縮性を近似した。

なお、三次元問題の場合、Eq.(2-10)に示した次数1の多項式の基底ベクトルは次式となる。

$$\mathbf{p}^T(\mathbf{x}) = [1, x, y, z], \quad \mathbf{a}^T(\mathbf{x}) = [a_1(\mathbf{x}), a_2(\mathbf{x}), a_3(\mathbf{x}), a_4(\mathbf{x})] \quad (2-34)$$

また, Eq.(2-26)から Eq.(2-28)の各行列成分および応力テンソルとひずみ速度テンソルのベクトル表記は次のように表される.

$$\mathbf{B}_I = \begin{bmatrix} N_{I,x} & 0 & 0 \\ 0 & N_{I,y} & 0 \\ 0 & 0 & N_{I,z} \\ 0 & N_{I,z} & N_{I,y} \\ N_{I,z} & 0 & N_{I,x} \\ N_{I,y} & N_{I,x} & 0 \end{bmatrix} \quad (2-35)$$

$$\mathbf{N}_I = \begin{bmatrix} N_I & 0 & 0 \\ 0 & N_I & 0 \\ 0 & 0 & N_I \end{bmatrix} \quad (2-36)$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 4\mu/3 + \lambda & -2\mu/3 + \lambda & -2\mu/3 + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ -2\mu/3 + \lambda & 4\mu/3 + \lambda & -2\mu/3 + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ -2\mu/3 + \lambda & -2\mu/3 + \lambda & 4\mu/3 + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \quad (2-37)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_c = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix} \quad (2-38)$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_c = \begin{bmatrix} \dot{\epsilon}_{xx} \\ \dot{\epsilon}_{yy} \\ \dot{\epsilon}_{zz} \\ \dot{\epsilon}_{yz} \\ \dot{\epsilon}_{zx} \\ \dot{\epsilon}_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial u / \partial x \\ \partial v / \partial y \\ \partial w / \partial z \\ 1/2(\partial v / \partial z + \partial w / \partial y) \\ 1/2(\partial w / \partial x + \partial u / \partial z) \\ 1/2(\partial u / \partial y + \partial v / \partial x) \end{bmatrix} \quad (2-39)$$

2.3.5. 積分法

前述の通り，一般的に EFGM では，数値積分のための Background cell が必要であるが，計算負荷軽減のために，計算点での積分 (Nodal integration) を行った．この場合，Eq.(2-24)，Eq.(2-25)はそれぞれ次のようになる．

$$\mathbf{K}_{IJ} \cong \sum_a^n \mathbf{B}_I^T(\mathbf{x}_a) \mathbf{D}(\mathbf{x}_a) \mathbf{B}_J(\mathbf{x}_a) V_a + \kappa \sum_I^{n_u} \mathbf{N}_I^T(\mathbf{x}_a) \mathbf{N}_J(\mathbf{x}_a) S_a^u \quad (2-40)$$

$$\mathbf{f}_I \cong \sum_I^n N_I(\mathbf{x}_a) \mathbf{b}(\mathbf{x}_a) V_a + \sum_I^{n_t} N_I(\mathbf{x}_a) \bar{\mathbf{t}}(\mathbf{x}_a) S_a^t + \kappa \sum_I^{n_u} N_I(\mathbf{x}_a) \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_a) S_a^u \quad (2-41)$$

ここで， S_a^u ， S_a^t は Γ_u および Γ_t 上において計算点 a が占有する面積， V_a は計算点 a が占有する体積を表している． n_u ， n_t は Γ_u および Γ_t 上の計算点数である．また， κ は速度境界条件を満足させるペナルティ数であり，本研究では $\kappa = 10^5$ とした．なお，計算点 a の体積 V_a は，全領域で計算点同士が均等の距離 d に配置されていると仮定することで，以下の式で得られる．境界上の計算点は，境界上に配置し，面積および体積は流体計算点の 1/2 とした．

$$2\text{D:} \quad V_a = \begin{cases} \frac{\sqrt{3}d^2}{2} & \text{fluid} \\ \frac{1}{2} \frac{\sqrt{3}d^2}{2} & \text{boundary} \end{cases} \quad (2-42)$$

$$3\text{D:} \quad V_a = \begin{cases} \frac{d^3}{\sqrt{2}} & \text{fluid} \\ \frac{1}{2} \frac{d^3}{\sqrt{2}} & \text{boundary} \end{cases} \quad (2-43)$$

2.3.6. 時間進行手法

計算点速度の決定には完全陰解法が適用され、座標更新には二次ルンゲ・クッタ法を用いた。以下にその手順を示す。

$$\text{Step1-1: } \quad \tilde{\mathbf{u}}_t = \mathbf{K}(\mathbf{X}_t, t)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{X}_t, t) \quad (2-44)$$

Step1-2: Eq.(2-22)により計算点の速度 \mathbf{U}_t を求める

$$\text{Step1-3: } \quad \mathbf{X}_{t+\Delta t/2} = \mathbf{X}_t + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{U}_t \quad (2-45)$$

$$\text{Step1-4: } \quad \tilde{\mathbf{u}}_{t+\Delta t/2} = \mathbf{K}(\mathbf{X}_{t+\Delta t/2}, t + \frac{1}{2} \Delta t)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{X}_{t+\Delta t/2}, t + \frac{1}{2} \Delta t) \quad (2-46)$$

Step1-5: Eq.(2-22)により計算点の速度 $\mathbf{U}_{t+\Delta t/2}$ を求める

$$\text{Step1-6: } \quad \mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \Delta t \mathbf{U}_{t+\Delta t/2} \quad (2-47)$$

ここで、添字 t は時刻 t における値を示し、 Δt は時間ステップサイズである。

μ がひずみ速度に依存する場合は、step1-6の後にひずみ速度から μ を補正し、 μ の変動が許容値以下になるまで時間を進めずに step1-1 から収束計算を繰り返す必要がある。ただし、ここでは、計算負荷の低減のために、前の時間ステップでのひずみ速度における μ を近似値とし、収束計算を繰り返さないようにしている。

2.3.7. 計算精度向上のための再配置手法

メッシュフリー法に共通する問題として、計算点間距離の不均一による精度の劣化が挙げられる。すなわち、混練シミュレーションの場合、回転が進むにつれて計算点配置の均一性が失われてしまい、解析精度が低下する。この問題を解決するために、計算点配置を適切に再配置する手法が報告されている[5, 10-12]。本研究では、以下で計算される仮想のバネ力によって計算点間隔を均一化（再配置, Rearrangement）した。

$$\text{Step2-1 : } \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \mathbf{X}_{\bar{t}=0} = \mathbf{X} \quad (2-48)$$

Step2-2 : 次式により節点に作用する座標修正力 \mathbf{Q} を計算する.

$$\mathbf{Q}_I = \sum_{J=1}^n q_{IJ} \frac{\mathbf{X}_J - \mathbf{X}_I}{|\mathbf{X}_J - \mathbf{X}_I|} \quad (2-49)$$

$$q_{IJ} = \begin{cases} k\delta_{IJ} & \text{if } \delta_{IJ} < 0 \\ 0 & \text{if } \delta_{IJ} \geq 0 \end{cases} \quad (2-50)$$

$$\delta_{IJ} = |\mathbf{x}_J - \mathbf{x}_I| - s_0 \quad (2-51)$$

Step2-3 : 次式で境界を除く計算点に対し速度と座標を更新する. 境界の計算点については Eq.(2-44)から Eq.(2-47)によって決定される.

$$\hat{\mathbf{u}}_{\bar{t}+\Delta\bar{t}} = \hat{\mathbf{u}}_{\bar{t}} + \Delta\bar{t}(\mathbf{Q} - c\hat{\mathbf{u}}_{\bar{t}}) \quad (2-52)$$

$$\mathbf{X}_{\bar{t}+\Delta\bar{t}} = \mathbf{X}_{\bar{t}} + \Delta\bar{t}u_{\bar{t}+\Delta\bar{t}} \quad (2-53)$$

ここで、 $\hat{\mathbf{u}}$ は計算点の座標修正速度、 k は近接距離に応じた反発力を与えるためのバネ剛性、 c は過大な座標修正を抑制するために減衰係数、 \bar{t} は修正ステップにおける時刻、 $\Delta\bar{t}$ は座標修正速度による座標修正量を決定するための時間ステップサイズ、 s_0 は近接範囲を定める近接検出距離である。Step2-2, 2-3 を繰り返す、計算点同士が既定値以下に近接しないよう計算点座標 \mathbf{X} を修正する。本手法により、計算点間距離が小さくなると、計算点同士に反発力が働き、計算点が均一に配置されるようになる。近接検出距離 s_0 は、Eq.(2-42), Eq.(2-43)で用いた計算点が完全に均一に配置されていると仮定した場合の計算点間距離 d とした。

上に示した計算点の再配置処理では、計算点の座標が物理現象とは無関係に強制的に変更される。そのため、非物理的な再配置処理により速度分布や粘度分布に不整合や、自由曲面形状の歪みなどの誤差が発生する。これらの誤差を最小化するために、最も簡便な方法として、時間進行における Δt を小さく取り、毎ステップで再配置処理を行うことで、1ステップあたりの座標変動が最小となるようにした。

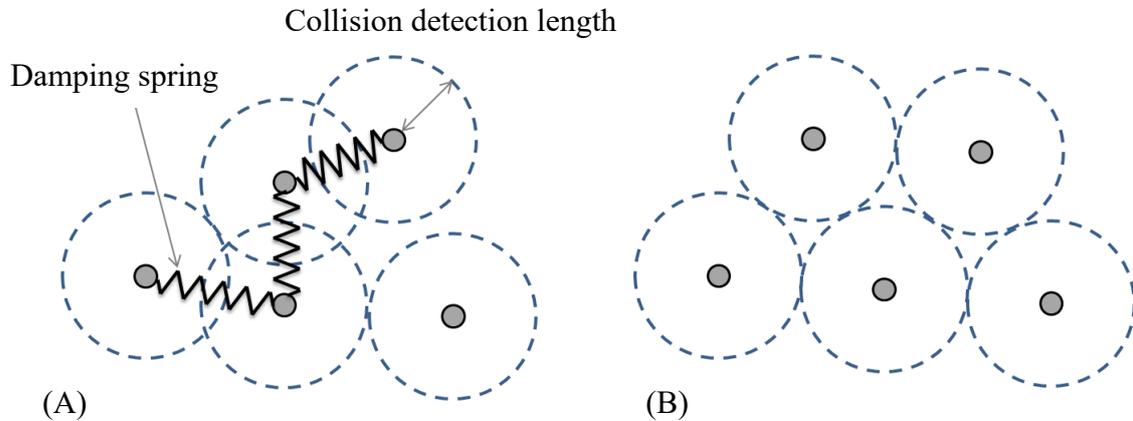


Fig. 2-1 Image of the rearrangement method of calculation points. (A)Position of calculation points before rearrangement. (B)Position of calculation points after rearrangement.

2.4. 解析手法の精度検証

前節までに示した EFGM による部分充満解析手法を用いて、基礎的な高粘性流動場の数値解析を実施し、厳密解および実験結果との比較を行った。正方形体の回転運動の解析による高粘性流体解析を実施する上で重要な剛体回転の再現精度、完全充満状態の共軸二重円筒内の流速分布の検証による再配置による計算点配置の適正化の効果、部分充満状態の共軸二重円筒および三角形ロータの自由表面形状と軸にかかるトルクの検証による総合的な解析精度検証を行った。

2.4.1. 正方形体の回転による MLS 補間の精度比較

前節までに示した解析手法の回転場に対する精度検証のために、Fig.2-2(A)に示すような正方形体の回転問題の解析を実施した。本問題では、原点 O にある計算点座標は固定し、点 A の計算点を回転角速度 ω で移動させる。本問題では慣性項を無視したため、点 A の回転に従い全体が剛体回転する。計算条件は、計算点数 $N = 441$ 、計算点間隔 $d = 0.05$ m、回転角速度 $\omega = 2\pi$ rad/s、材料はニュートン粘性体とし粘度 $\mu = 1000$ Pa \cdot s、 $\Delta t = 0.001$ sとした。本問題は、高精度な剛体回転が再現できた場合に、計算点座標の関係が崩れないことから、再配置は実施していない。

Fig.2-2(B)および(C)に、MLS 補間の次数 m を 0 とした場合、および次数 m を 1 とした場合の、1 回転後 (1000 step, $t = 1$ s) の計算点位置をそれぞれ示す。Fig.2-2(B)が示す通り、次

数 $m = 0$ の場合は正方形の形状が大きく崩れる。一方、 $m = 1$ では Fig.2-2(A)の初期の正方形の形状が維持できていることがわかる。 $m = 1$ の場合、1回転後の点 A の x 方向変位の誤差は 0.01%以下であった。

また Fig.2-3 に、1つの計算点の質量を 1 kg として算出した角運動量の総和の時刻変化を示す。 $m = 0$ では厳密解の 1/2 程度に減少している。一方、 $m = 1$ の場合、厳密解と一致する結果が得られた。Bonet ら[3]によって、角運動量が保存されるためには 1 次以上の補間次数が必要なことが示されており、Fig.2-3 においても同様の結果が確認された。水や油のような低粘性流体に比べ、重力や慣性力といった力によって形状が崩れにくい高粘性流体では、角運動量が保存しない場合の誤差蓄積が顕著に現れるため、長時間の計算精度、計算安定性が保てないことから、1 次以上の MLS 補間が必要となる。

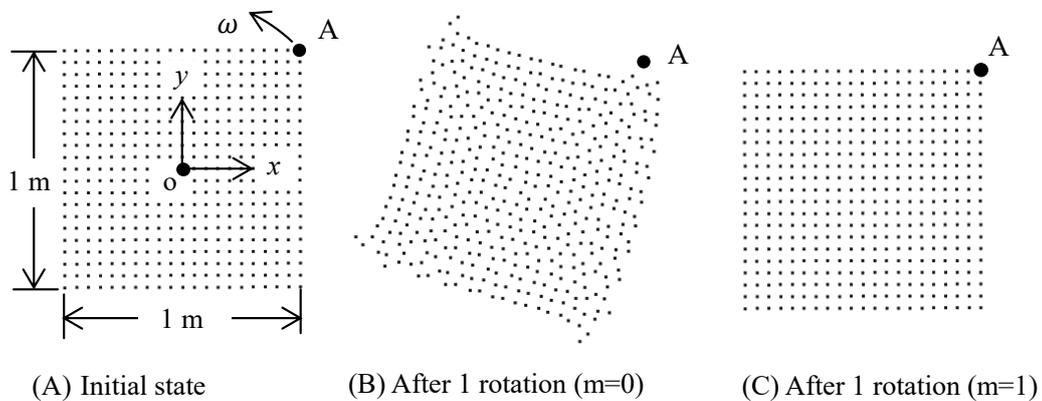


Fig. 2-2 Comparison of shape maintaining state after one rotation of the square shaped high viscosity body for different MLS orders.

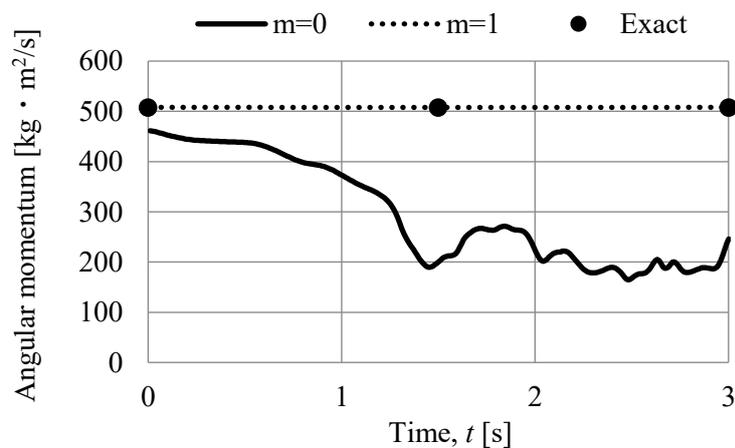


Fig. 2-3 Comparison of the momentum of the square shaped high viscosity body among simulation results for MLS orders $m=0$, $m=1$ and the exact solution.

2.4.2. 共軸二重円筒内の完全充満流動解析による計算点再配置の効果検証

計算点再配置による精度改善効果の検証を行うために、高粘性流体で完全に充満した共軸二重円筒内の解析において、内筒が角速度 ω_0 [rad/s]で回転している場合の定常解の比較を行う。ここで、 $\dot{\gamma}$ はせん断速度 ($=\sqrt{2\dot{\mathbf{e}}:\dot{\mathbf{e}}}$)、 μ_0 および n はそれぞれ物質定数である。慣性項を無視した円筒座標系の Navier-Stokes 方程式を、流速の周方向を壁面固着条件で解くと以下の解が得られる。

$$u(r) = \omega_0 \xi R \frac{(R/r)^{\frac{2}{n}-1} - r/R}{\xi^{1-\frac{2}{n}} - \xi} \quad (2-54)$$

$$\tau(r) = \mu_0 \left[\frac{2}{n} (R/r)^{\frac{2}{n}} \frac{\xi \omega_0}{\xi^{1-\frac{2}{n}} - \xi} \right]^2 \quad (2-55)$$

$$T = 2\pi(\xi R)^2 \tau(\xi R) \quad (2-56)$$

ここで、 $u(r)$ は半径 r の位置における周方向速度、 τ はせん断応力、 r は円筒中心からの距離、 R は外筒半径、 ξ は内筒半径と外筒半径の比、 T は内筒に作用するトルクである。

解析モデルは Fig. 2-4(A)に示すとおりで、 $R = 0.01$ m, $\xi = 4.0$, 流体計算点数 $N_f = 1727$, 境界計算点数 $N_b = 216$, 初期計算点間隔 $d = 0.001$ m, 内筒の回転角速度 $\omega_0 = 20.9$ rad/s ($=200$ min $^{-1}$), 時間刻み $\Delta t = 0.001$ sである。粘度はべき乗則 $\mu = \mu_0 \dot{\gamma}^{n-1}$ に従うものとし、次式に示す 2 種類の流体を用いた。

$$\text{Fluid A (Newton)} : \quad \mu_0 = 1000 \quad [\text{Pa}\cdot\text{s}] \quad n = 1.0 \quad (2-57)$$

$$\text{Fluid B (non-Newton)} : \quad \mu_0 = 11320 \quad [\text{Pa}\cdot\text{s}^{1.7}] \quad n = 0.3 \quad (2-58)$$

再配置の効果を検証するために、再配置を実施しない場合と実施した場合について、内筒が 1 回転するまで計算を実行し、Eq.(2-54)に示す厳密解との比較を行った。

Fig. 2-4(A)は計算点の初期配置であり、ほぼ等間隔に計算点が配置されている。Fig. 2-4(B)および Fig. 2-4(C)に Eq.(2-57)および Eq.(2-58)に示した粘度を用いて計算された内筒 1 回転

後の計算点配置を示す。Fig. 2-4(B)から分かるように、再配置を行わなかった場合（再配置無し）、計算点間隔が初期に比べ不均一になっていることが分かる。一方、再配置を行った場合（再配置有り）には、内筒1回転後も Fig.2-4(C)に示すように、均一な間隔での計算点配置が維持されていることが分かる。

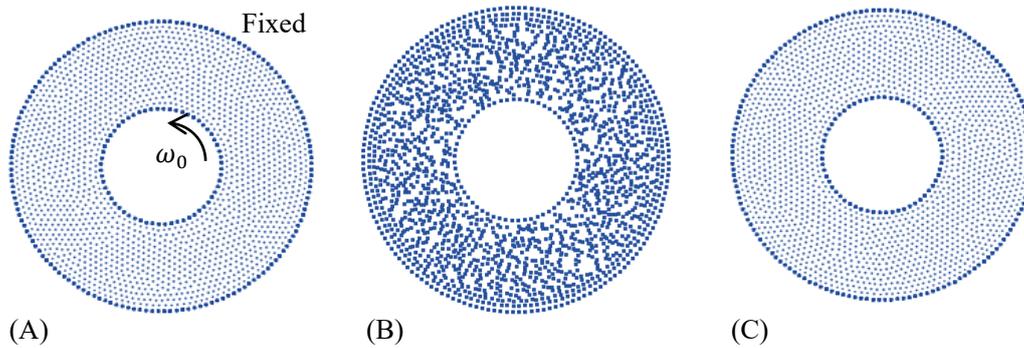


Fig. 2-4 Calculation points position in a coaxial double cylinders. (A) Initial position, (B) After one rotation without rearrangement, (C) After one rotation with rearrangement.

次に Fig.2-5, Fig.2-6 に、周方向速度成分の厳密解との比較結果を示す。再配置なしの結果に比べ、再配置ありの結果は周方向速度成分の解析精度が大幅に改善されており、均一な計算点配置の場合、ほぼ厳密解通りの結果が得られることが分かる。

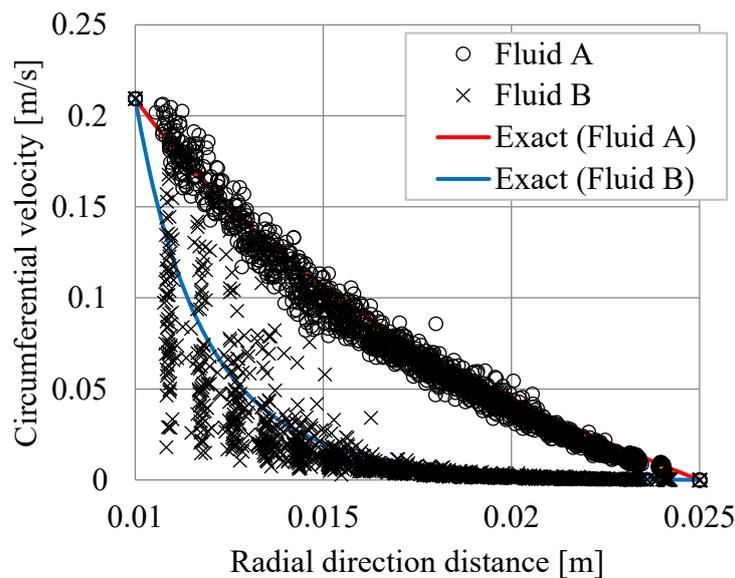


Fig. 2-5 Circumferential velocity distribution inside a coaxial double cylinders after one rotation of the inner cylinder (without rearrangement).

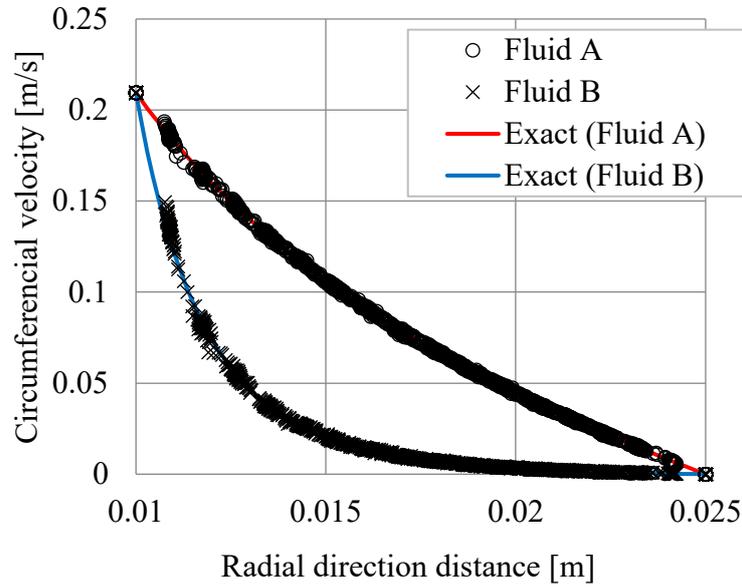


Fig. 2-6 Circumferential velocity distribution inside a coaxial double cylinders after one rotation of the inner cylinder (with rearrangement).

次に、内筒 1 回転後のトルクを算出し、Eq.(2-56)で示した厳密解と比較した。計算点 I に作用する力は以下の式で求められる。

$$\mathbf{R}_I = \kappa\{\mathbf{U}_I - \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_I)\} \quad (2-59)$$

ここで \mathbf{R}_I は境界上の計算点 I に作用する力、 \mathbf{U}_I は内筒の回転速度より算出される厳密な境界速度ベクトル、 $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_I)$ はEq.(2-21)で示した計算点 I の節点速度ベクトルである。右辺の $\{ \}$ 内はほぼ0であるが、これにペナルティ数 κ を乗ずることにより境界計算点 I に加わる力が算出される。

Eq.(2-59)から算出されたトルクと厳密解を比較した結果を Table 2-1 に示す。Table 2-1 から分かるように、再配置によりトルクの厳密解に対する誤差が1%以下になる。この点からも計算点配置の均一性は解析精度への影響が大きいことが分かる。

Table 2-1 Errors from the exact solution of torque acting on the inner cylinder.

	Particle rearrangement	
	With	Without
Fluid A (Newtonian)	-0.6 %	-26.5 %
Fluid B (Non-Newtonian)	-0.3 %	-28.9 %

Fig. 2-7 は、Eq.(2-54)で得られた任意半径における速度の厳密解を、各計算点の流速として与え、内筒 1 回転に相当する時間を同心円運動させた結果である。同図から分かるように、計算点配置は厳密解に従って移動した場合であっても不均一になる。すなわち、計算点の初期配置が均等であり、計算精度が確保されていたとしても、計算点が移動する Lagrange 法では時間経過とともに計算点配置が不均一になり、計算精度が低下することは避けがたい問題であることが分かる。

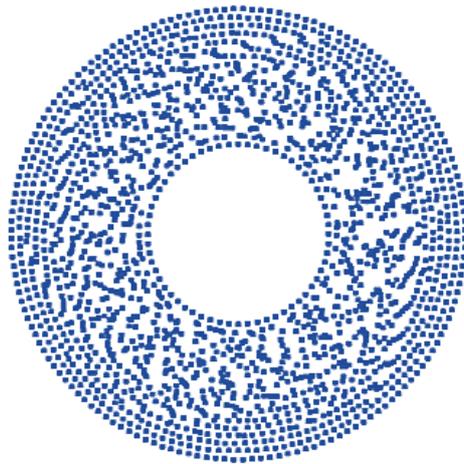


Fig. 2-7 Calculation points position after one rotation of the inner cylinder according to the exact solution of a coaxial double cylinders internal flow.

このように、計算点配置の均一性は解析精度への影響が大きく、計算中の計算点配置を常に均一に保つことが必要である一方で、計算精度に関わらず計算点配置の不均一が発生するため、計算点配置の再配置処理が必要不可欠であることが分かる。なお、提案した再配置手法は、仮想バネの反発力を利用した簡便な処理であり、この処理に要した計算時間は、全計算時間の約 1%程度と低く、計算負荷の増大なく計算精度の向上が可能であることが分かった。

2.4.3. 円柱ロータ回転実験による自由表面形状の解析精度検証

次に、高粘性流体が半充填された共軸二重円筒内の解析と実験結果の比較から、部分充填状態における自由表面形状の再現精度の検証を行う。円筒バレルと円筒ロータからなる共軸二重円筒回転装置を用いて、Fig.2-8, Fig.2-9 に示すような実験を行った。装置にはシリコンオイル（信越化学工業製 KF-96H-100kcs）を充填率が 50%になるよう充填し、円筒ロータ

が回転し、静置状態から定常流動状態に達するまでのシリコンオイルの挙動を解析結果と比較した。実験装置は、バレル直径 50 mm, ロータ直径 20 mm, ロータ回転速度 3 min^{-1} , 装置の軸方向長さ 90 mm である。

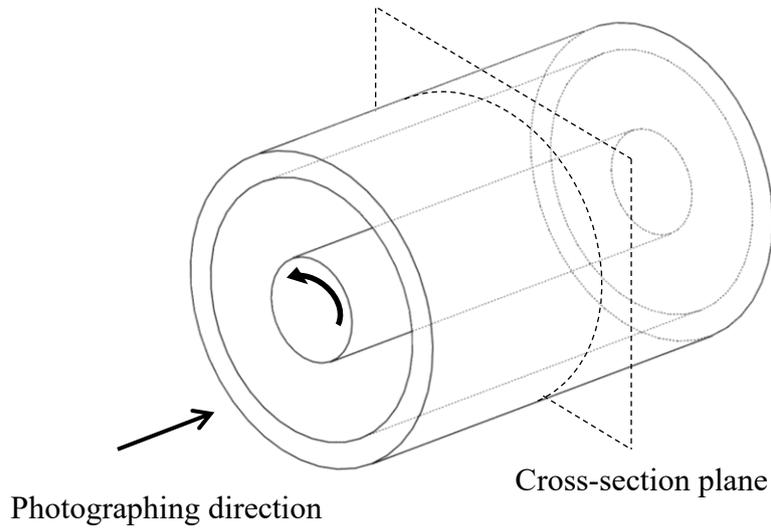


Fig. 2-8 Experimental model of a coaxial double cylinders.

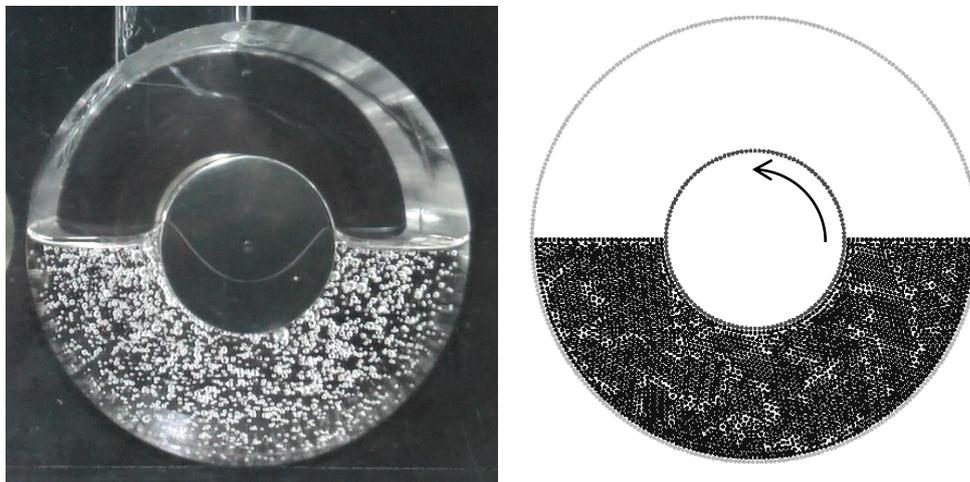


Fig. 2-9 Initial states of a coaxial double cylinders experiment and simulation.

断面形状は軸方向に沿って一定であることから、解析は二次元で実施した。計算条件は、流体計算点数 3639, 境界計算点数 442, 初期計算点間距離 $d = 0.5 \text{ mm}$, $\Delta t = 0.0556 \text{ s}$, 流体密度 1000 kg/m^3 , 重力加速度 9.8 m/s^2 , 粘度 $100 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ とし、すべての時間ステップで再配

置を実施した。Fig.2-10 はコーンプレート型粘度計により測定したシリコンオイルの粘度である。使用したシリコンオイルは Fig.2-10 に示すように高せん断速度領域で非ニュートン特性をもつが、本実験条件である 3 min^{-1} (せん断速度 0.21 s^{-1}) 近傍での粘度はひずみ速度依存性を示さないため、解析で用いる流体はニュートン流体とした。装置にシリコンオイルを充填する過程で周囲の空気を巻き込むため、Fig.2-11 の実験写真に示すように、静置状態においてシリコンオイル中に多数の気泡が観察された。この気泡の有無が実験結果に影響を与えないことを確認するために、長時間シリコンオイルを静置し脱気された状態の結果と比較を行った。Fig.2-11(A)はシリコンオイルをバレルに投入した直後のスナップショットであり、Fig.2-11(C)は 15 時間程度放置した後のスナップショットである。重力によって気泡が上方に移動し、気泡の一部が消失していることが分かる。Fig.2-11 (A), (C)を初期条件に、同じ実験条件での 3 回転後の自由表面形状が Fig.2-11 (B), (D)であり、気泡の有無は流体の自由表面形状にほとんど影響を与えず、自由表面形状比較を行う上で問題が生じないことを確認した。

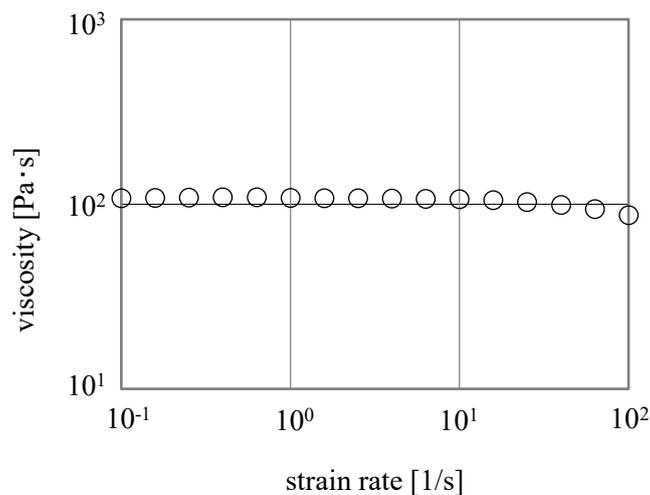


Fig. 2-10 Measured viscosity of the silicone oil using a coneplate type viscometer.

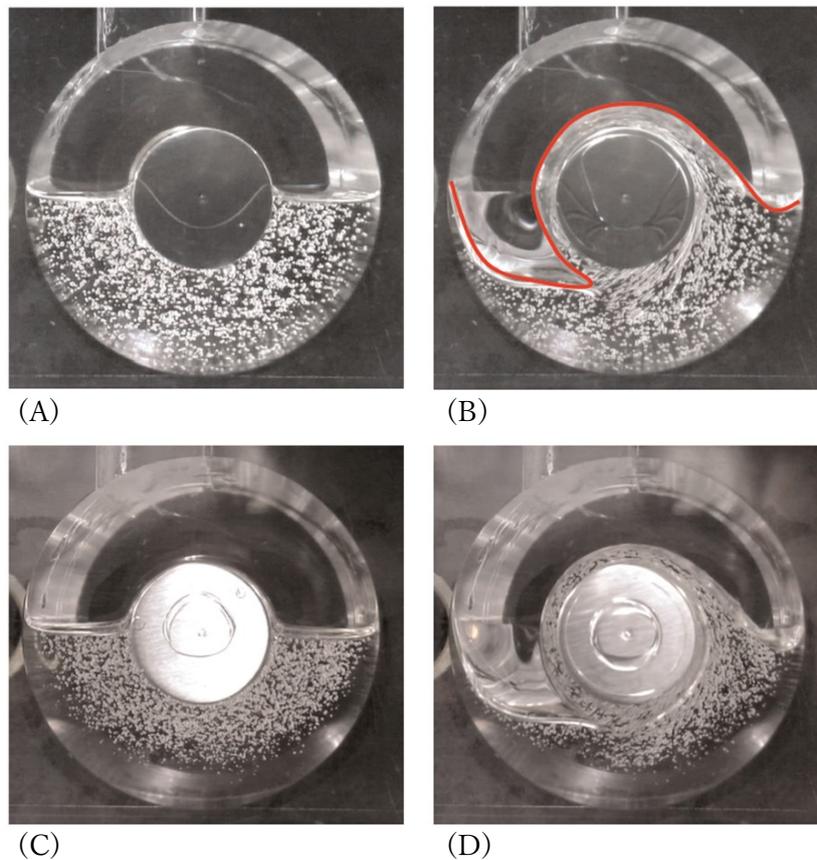


Fig. 2-11 (A), (B) Experimental results with many bubbles; (C), (D) experimental results with few bubbles. The red line in (B) is the free surface position.

Fig. 2-12 に実験結果と解析結果で得られた計算点位置の時系列変化を示す。図中の赤い実線は、対応する時刻のスナップショットから得られた自由表面の位置を表している。この図から分かるように、実験結果と解析結果の自由表面形状はよく一致している。また、実験では内筒が 1 回転程度回転した後に自由表面形状が変化しない定常状態が得られた。解析においても 1 回転後と 3 回転後の自由表面形状にほとんど変化がないことから、1 回転後に定常状態が得られたとした。したがって、解析が静置状態から定常状態までの自由表面形状の非定常変化をよく再現できていることが分かる。

また、本問題に対しても、再配置の有無による解析精度の検証を実施した。Fig.2-13 は、再配置を行った場合と行わなかった場合の結果を比較したものである。再配置なしの場合は、1 回転後に計算点配置が不均一になり、計算点の不自然な分離が発生し、実験のようななめらかな自由表面形状を維持できていない。これらの結果から、非物理的な処理である計算点の再配置処理であるが、この手法により、自由表面形状の不自然な変形を導入すること

第 2 章 高粘性流体の部分充満状態に関する三次元流動解析技術

なく、予測精度の向上が達成できることが確認された。本解析に要した計算時間は 1 回転あたり 528 秒 (i5-3210M, 2.5GHz, 1 コア) であった。陽解法で同様の計算を行った場合、完全陰解法に比べて約 200 倍の解析時間が必要であった。さらに、流体がポリエチレン等の溶融樹脂を想定した場合、本実験で用いたシリコンオイルに比べ粘度が 100 倍以上になり計算時間をさらに要するため、樹脂混練解析に対して完全陰解法の適用効果は大きいことが分かる。

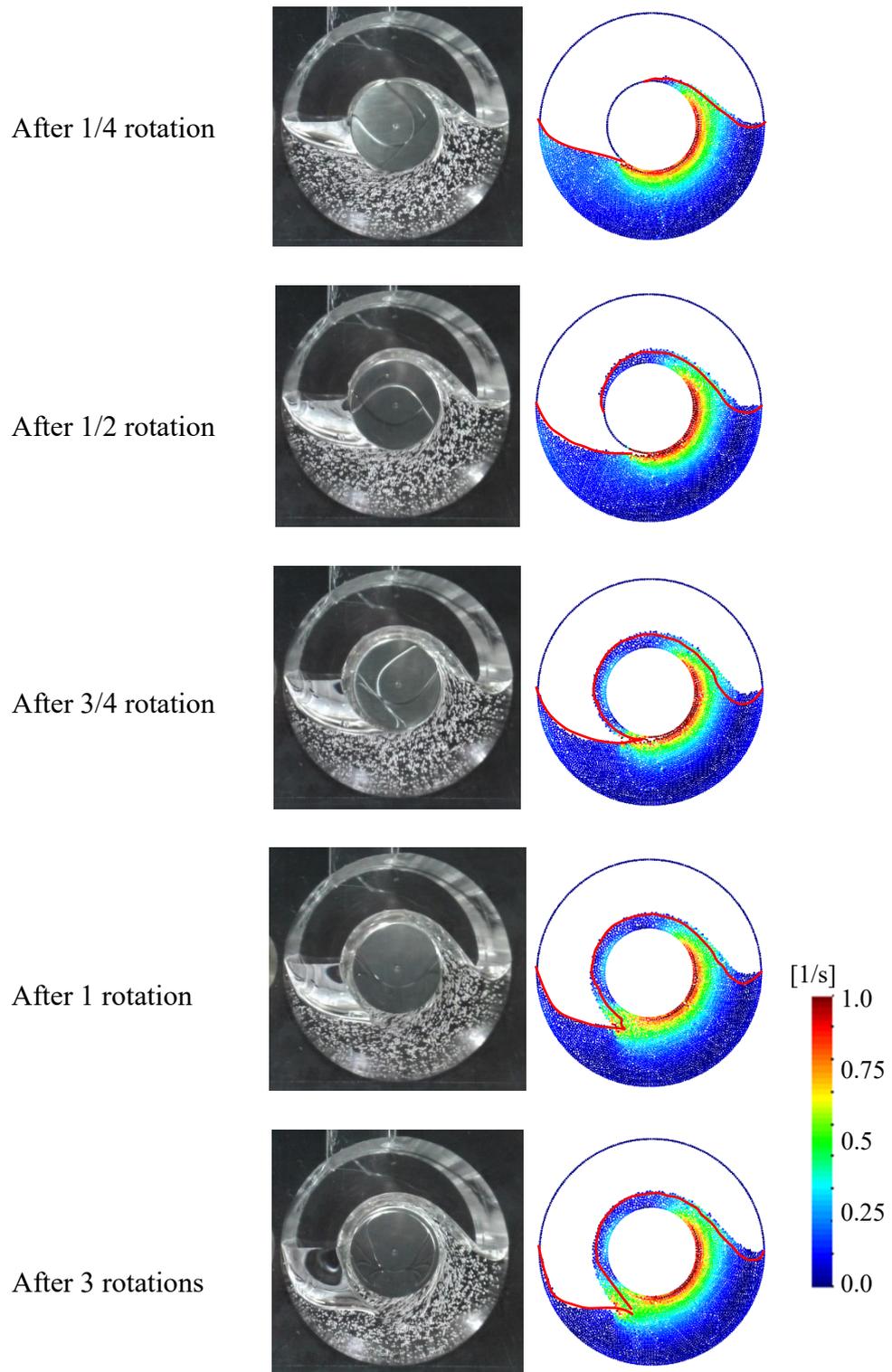


Fig. 2-12 Comparison of the free surface shape after three rotations of the inner cylinder of the experimental and the simulation results. The red line in the right figure indicates the experimental free surface positions at each time, and the colors of the calculated points indicate the shear stress.

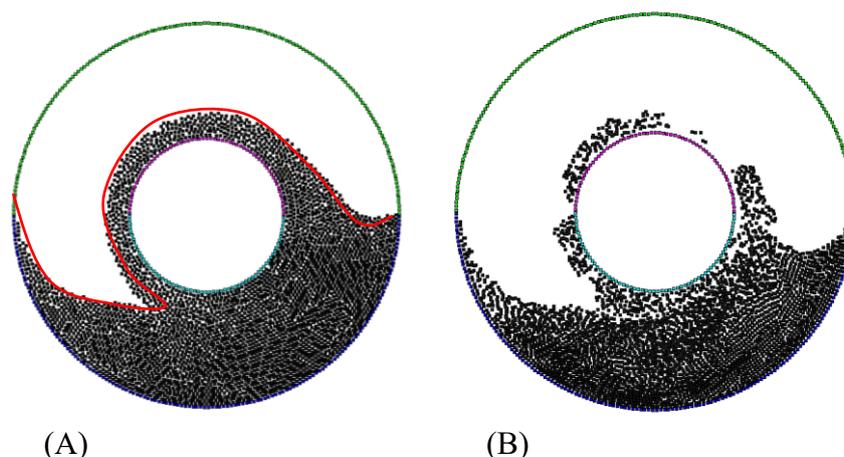


Fig. 2-13 (A) Simulation results after three rotations of the inner cylinder with rearrangement. (B) Simulation results after three rotations of the inner cylinder without rearrangement. The red line in the left figure shows the free surface positions obtained from the experimental results.

2.4.4. 三角形状ロータ回転実験による解析精度検証

次に、三角形状のロータによって 3 翼構造の連続混練機[13]を模擬した実験を行い、解析結果と定常状態における自由表面形状および軸に加わるトルクの比較を行った。Fig.2-14(A)に実験モデルを示す。円筒バレル内にシリコンオイル（信越化学工業製 KF-96H-1Mcs）を 80% 充填し、三角形状ロータを $3 - 45 \text{ min}^{-1}$ の範囲で回転させた。三角形状ロータの軸方向長さは 89 mm、バレルの軸方向長さは 90 mm であり、軸方向端面に前後合わせて 1.0 mm の隙間が存在する。Fig.2-14(B)に解析で用いた断面形状および初期の流体位置を示す。実験ではロータは軸方向に一定でねじりがない形状であり、軸方向中央近傍では自由表面形状が軸方向に一様で、軸端部の影響が確認できなかった。したがって、二次元での比較が可能であるため、解析は二次元で実施した。また初期流体位置は定常状態を早く得るために三角形の各頂点（チップ）で分割される領域に三等分して配置した。

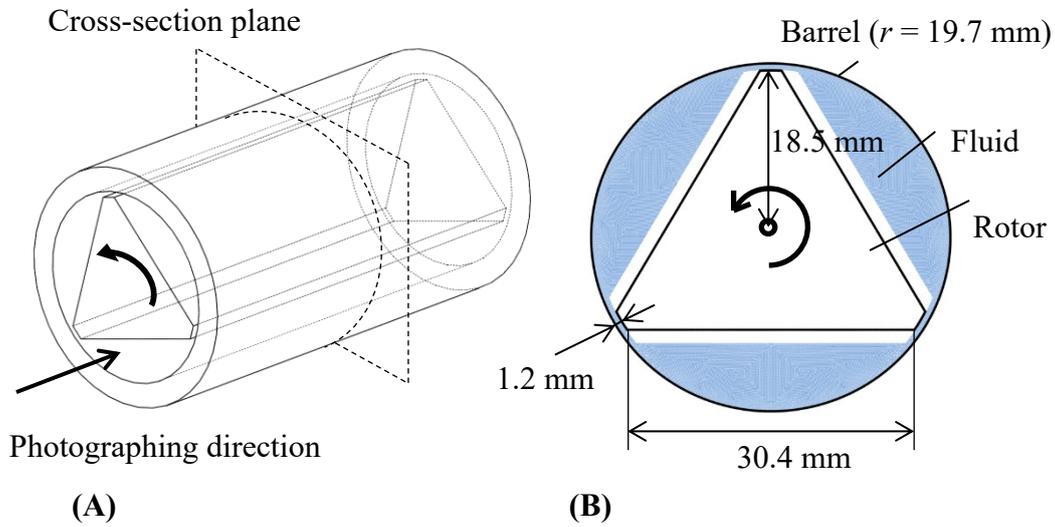


Fig. 2-14 (A) Isometric view of the simulation and experimental model of a triangular-shaped rotor. (B) Cross-sectional model of the initial state of the simulation.

実験では、三角形状ロータに加わるトルクを測定するとともに、軸端方向から自由表面形状を観察した。解析条件として、流体計算点数は 23400、境界計算点数は 2898、初期計算点間隔は 0.2 mm、流体密度は 1000 kg/m^3 とし、すべての時間ステップにおいて計算点の再配置処理を実施した。本実験での最小回転数は 3 min^{-1} であり、三角形状ロータの先端が通過する時間間隔は約 6.7 s が最大である。三角ロータの回転を停止させた後のシリコンオイルの重力による変形挙動を 10 s 以上観察したところ、目視できる範囲では自由表面形状の変形が観察されなかったことから、解析上の重力は無視した。

Fig.2-15 は本実験で使用したシリコンオイルのコーンプレート式粘度計による粘度測定結果および解析で使用した粘度モデルである。粘度モデルは以下の式で定義した。

$$\mu \text{ [Pa}\cdot\text{s]} = \begin{cases} 2491\dot{\gamma}^{-0.4186} & \text{if } \mu > 1000 \quad (\dot{\gamma} \text{ [s}^{-1}\text{)}) \\ 1000 & \text{if } \mu \leq 1000 \end{cases} \quad (2-60)$$

前節で示したシリコンオイルと同様に、本実験で使用したシリコンオイルも低せん断速度領域ではニュートン流体として振る舞うが、高せん断速度領域において粘度はせん断速度依存性を示す。本実験では、最大の回転速度時にチップ部でのせん断速度は 70 s^{-1} 程度 (回転速度 45 min^{-1}) に達し、粘度のせん断依存性を考慮する必要があることから、解析で用いる流体は非ニュートン流体とした。

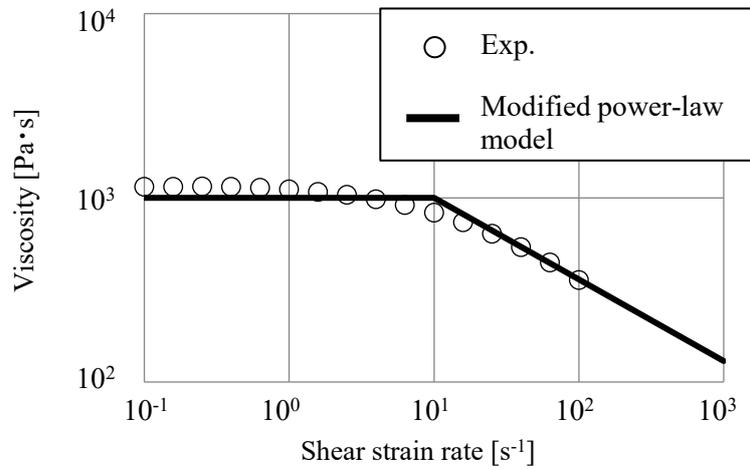
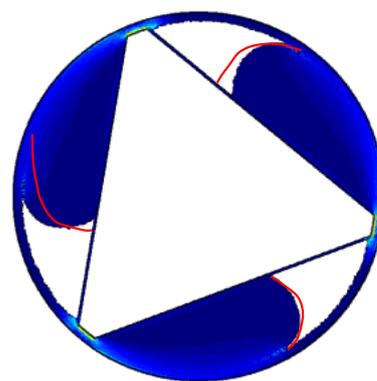


Fig. 2-15 Viscosity model of silicone oil. The plots show experimental results measured from a coneplate type viscometer. The black line shows modified power-law model that used for simulation.

Fig.2-16 に、回転速度 6 min^{-1} の定常状態における解析および実験の自由表面形状の比較結果を示す。Fig.2-16 (B)の赤実線は、ラインレーザーを照射することにより実験結果から読み取った軸方向の中央部における自由表面形状を示している。同図が示すように、3つに分離した流体の自由表面形状は一致した。



(A) Experiment



(B) Simulation
(with particle rearrangement)

Fig. 2-16 Steady flow state of triangle rotor when rotation speed of rotor is 6 min^{-1} .

Fig. 2-17 に定常状態における回転数に対する計測トルクの結果を示す。同図から、解析結果 (T_{sim}) は実験結果 (T_{exp}) に比べてトルクが小さいことがわかる。この差異の要因としては、以下が挙げられる。

- (1) 解析は奥行きが完全に変化のない二次元解析であることに對し、実験では軸方向端面とロータに隙間があり、この隙間においてもトルクが発生する
- (2) 実験では、軸方向端面の影響により軸方向の流れがわずかではあるが発生し、トルク変化が生じている。

これらの要因のうち、(1)の軸方向端面とロータの隙間で発生するトルクの算出を試みた。試算については、簡単のため三角形と同一面積をもつ半径 l の円に置き換え、シリコンオイルが b [m] の隙間全体に充満していると仮定した。この場合、隙間部で発生するトルクは以下のように計算される。

$$T_{gap} = \int_0^l \frac{r\omega_0}{b} 2\pi r dr \quad (2-61)$$

上記の式で算出された隙間トルクを加算した結果 T_{total} ($= T_{sim} + T_{gap}$) を Fig. 2-17 に合わせて記載する。この結果から分かるように、 T_{total} は T_{exp} と良く一致しており、本解析の結果が妥当であることを示唆している。

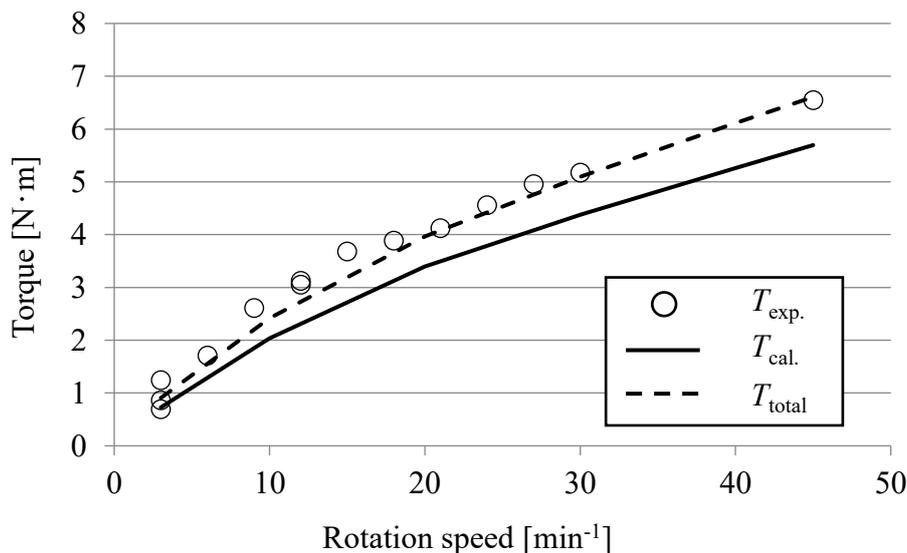


Fig. 2-17 Relationship between torque acting on inner rotor and rotation speed of inner rotor.

2.5. 結言

本章では、メッシュフリー法である EFGM を基礎とした高粘性流体に適した流動解析手法について提案し、完全充填流動場の厳密解およびシリコンオイルを用いた部分充填流動場の実験結果との比較を行った。以下に要点をまとめる。

- 1) せん断や回転の影響が大きい高粘性流体特有の流動現象に対し、角運動量が保存される EFGM を適用することを提案した。正方形体の剛体回転挙動の検証により、剛体回転の再現および角運動量の保存が可能であることが確認され、高粘性流体の回転運動を高精度に予測可能であり、長時間の解析安定性を保つことが分かった。
- 2) 計算点移動に伴う計算点配置の不均一性から生じる計算誤差の拡大に対し、計算点間距離に応じた反発力を利用した簡便な再配置手法を提案した。共軸二重円筒内の完全充填流動の厳密解に対し、提案した再配置手法により速度分布および軸に加わるトルクの予測精度が向上することが分かった。また計算点が移動する Lagrange 法では、計算点配置の不均一の発生は避けがたく、高粘性流体の数値解析には再配置手法が必要不可欠な処理であることが分かった。
- 3) 共軸二重円筒内の部分充填流動の実験との比較から、再配置処理を実行することで、ロータ軸の回転に伴う自由表面形状の時間変化を高精度に予測することが可能であることが確認された。
- 4) 三角形状ロータの回転実験との比較から、三角形状ロータの回転に伴う自由表面形状を再現することが可能であることがわかった。またロータ軸に加わるトルクを高精度に予測することができた。

参考文献

1. J. J. Monaghan, *Sph- Simulation of 2d Turbulence Driven by a Moving Cylinder*. European Journal of Mechanics - B/Fluids, 2017.
2. S. Koshizuka and Y. Oka, *Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid*. Nuclear science and engineering, 1996. **123**(3): pp. 421-434.
3. J. Bonet and T. S. L. Lok, *Variational and Momentum Preservation Aspects of Smooth Particle Hydrodynamic Formulations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1999. **180**(1): pp. 97-115.
4. T. Belytschko, Y. Y. Lu, and L. Gu, *Element-Free Galerkin Methods*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1994. **37**(2): pp. 229-256.
5. A. Mokos, B. D. Rogers, and P. K. Stansby, *A Multi-Phase Particle Shifting Algorithm for Sph Simulations of Violent Hydrodynamics with a Large Number of Particles*. Journal of Hydraulic

- Research, 2017. **55**(2): pp. 143-162.
6. D. Qinglin, G. Xin, W. Bingbing, L. Xikui, Z. Hongwu, B. Ted, and S. Yulong, *Consistent Element-Free Galerkin Method*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2014. **99**(2): pp. 79-101.
 7. Y. Y. Lu, T. Belytschko, and L. Gu, *A New Implementation of the Element Free Galerkin Method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1994. **113**(3): pp. 397-414.
 8. S. Beissel and T. Belytschko, *Nodal Integration of the Element-Free Galerkin Method*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1996. **139**(1): pp. 49-74.
 9. D. P. Recio, R. M. Natal Jorge, and L. M. S. Dinis, *On the Use of Element-Free Galerkin Method for Problems Involving Incompressibility*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2007. **31**(2): pp. 103-115.
 10. A. Khayyer, H. Gotoh, and Y. Shimizu, *Comparative Study on Accuracy and Conservation Properties of Two Particle Regularization Schemes and Proposal of an Optimized Particle Shifting Scheme in Isph Context*. Journal of Computational Physics, 2017. **332**: pp. 236-256.
 11. S. J. Lind, R. Xu, P. K. Stansby, and B. D. Rogers, *Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics for Free-Surface Flows: A Generalised Diffusion-Based Algorithm for Stability and Validations for Impulsive Flows and Propagating Waves*. Journal of Computational Physics, 2012. **231**(4): pp. 1499-1523.
 12. R. Xu, P. Stansby, and D. Laurence, *Accuracy and Stability in Incompressible Sph (Isph) Based on the Projection Method and a New Approach*. Journal of Computational Physics, 2009. **228**(18): pp. 6703-6725.
 13. S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. **59**(2).

第 3 章

混練機内部の充満率と滞留時間に関する数値計算

3.1. 緒言

前章では、Element-Free Galerkin method (EFGM) による混練機内の部分充満解析技術を開発した。本章では、開発した部分充満解析技術を用いて、混練機内部の流動状態についての検討を行う。

二軸押出機や連続混練機内部の流動状態（速度や温度、圧力分布）について、また流動状態と混練性能の関係についての数値解析を用いた検討は数多く取り組まれている。例えば、Ishikawa ら[1]は、Finite element method (FEM) を用いて、異方向回転連続混練機内部の温度や圧力分布についての計算を行い実験との検証を行っている。Nakayama ら[2]は、Finite volume method (FVM) を二軸押出機に適用し、ロータ形状と混練性能の関係についての検討を行っている。その他にも多数の報告があるが、そのほとんどは流路が熔融樹脂で満たされている完全充満を仮定している。しかし、実際の混練機内には部分充満状態の領域が多く含まれており、定量性の高い流動予測を行うためには、部分充満状態を考慮する必要がある。

一般的な流動解析技術である FEM, FVM などの格子法を部分充満状態の解析に適用する場合、回転に伴い変化する自由表面や流体の分離、合流の取り扱いが困難である。そこで、流れに沿って移動する計算点によって流体流動を表現する粒子法などのメッシュフリー法が近年よく用いられている。Fukuzawa ら[3]は Moving particle simulation[4]を基礎に副成分の濃度計算手法を開発し、同方向回転二軸押出機内の脱揮現象の予測を行っている。Eitzlmayr ら[5, 6] は Smoothed particle hydrodynamics[7]を同方向回転二軸押出機に適用し、搬送セグメントにおける操作条件と樹脂分配性の関係についての検討を行っている。

このようにメッシュフリー法による部分充満解析によって、従来の完全充満では考慮できなかった現象の解明が進んでいるが、未だ解明されていない現象も多い。その一つに部分充満状態における滞留時間分布が挙げられる。混練部での滞留時間分布は、樹脂の分配・分散特性や温度分布などに影響することが知られているが[8, 9]、これまで部分充満状態での滞留時間分布に関してはほとんど研究されていない。特に、完全噛合同方向回転二軸押出機は内部が完全に充満している領域が多く完全充満でも材料挙動の把握が可能であるのに対し、異方向回転連続混練機はロータ形状によって様々な充満状態に変化することが知られており、定量的な材料挙動の評価のために部分充満解析は必須の技術となる。

そこで本章では、第2章で開発した部分充満流動解析技術を用いて、異方向回転連続混練機内部の充満状態に対する、ロータ形状と操作条件の関係について明らかにするとともに、混練機が1回転ごとに同様の流動状態となる準定常状態を利用したマーカー粒子追跡[10-12]を行うことにより、熔融混練部での部分充満状態における滞留時間分布を把握し、ロータ形状と操作条件による影響について検討を行った。

3.2. 支配方程式

本研究では、等温で非圧縮の流れを仮定した。運動方程式は以下で与えられる。

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad \text{in } \Omega \quad (3-1)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{on } \Gamma_t \quad (3-2)$$

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } \Gamma_u \quad (3-3)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \left(\lambda - \frac{2}{3}\mu\right) \dot{\varepsilon}_v \mathbf{I} \quad (3-4)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (3-5)$$

$$\dot{\varepsilon}_v = \dot{\varepsilon}_{xx} + \dot{\varepsilon}_{yy} + \dot{\varepsilon}_{zz} \quad (3-6)$$

ここで、 Ω は影響領域、 Γ_t は表面力既定境界、 Γ_u は速度既定境界、 ρ は流体密度、 D/Dt はラグランジュ微分、 $\boldsymbol{\sigma}$ は応力テンソル、 \mathbf{b} は体積力ベクトル、 \mathbf{u} は速度ベクトル、 \mathbf{n} は単位法線ベクトル、 $\bar{\mathbf{t}}$ は表面力ベクトルである。 $\bar{\mathbf{u}}$ は境界速度ベクトルであり、速度境界条件はペナルティ法によって満足させた。また、 μ は流体粘度、 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 、 $\dot{\varepsilon}_v$ 、 \mathbf{I} はそれぞれひずみ速度テンソル、体積ひずみ速度、単位テンソルである。非圧縮性はペナルティ関数法により満足させた。ペナルティ係数 λ は粘度に対して十分大きい値とし、本研究では $\lambda = 10000\mu$ とした。この時、圧力 p は以下の式で近似することができる

$$p = -\lambda \dot{\varepsilon}_v \quad (3-7)$$

離散化手法は Element-free Galerkin Method [13]を基礎とし、第2章に示した。

3.3. 解析条件

計算対象は異方向回転連続混練機 LCM-100H (神戸製鋼所製) [14]の溶融混練部を模擬した Fig.3-1, Fig.3-2 に示すようなロータ形状とし、流量と回転速度を変化させた。Model-FF (以後、FF) および Model-FB (以後、FB) は3翼で同一の断面形状を有しており、FFは混練部全体が送り方向のねじれ角、FBは1対1の比率で送りと戻しのねじれ角を有する。混練部の上流には同形状の搬送スクリュ部を配置した。バレル直径は100 mmである。

初期計算点間隔は 2.0 mm とし、計算途中の計算点間隔の不均一性は計算点再配置[15]により抑制した、時間刻みは、1 ステップ当たりのロータの回転角度が 1 度になるよう各回転数に応じて設定した。計算領域入口の流入条件として体積流量を与え、時間刻みあたりの設定流量となるようスクリュ部端面中央に計算点を発生させた。なお、計算点の発生位置は中央に偏るが、今回評価対象とした熔融混練部には 3 つのフライトからほぼ均等に流入することを確認している。計算領域出口は自由流出とし、壁面境界は非すべり条件を与えた。

流体の密度は 750 kg/m^3 、流体はニュートン粘性とし $2000 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ を与えた。回転速度 n は $200, 300, 400 \text{ min}^{-1}$ (ロータ翼端速度はそれぞれ $0.94, 1.41, 1.88 \text{ m/s}$)、質量流量 Q は $200, 300, 400, 600 \text{ kg/h}$ (線速度はそれぞれ $8.8 \times 10^{-3}, 13.1 \times 10^{-3}, 17.5 \times 10^{-3}, 26.3 \times 10^{-3} \text{ m/s}$) とした。なお、 600 kg/h は 200 min^{-1} でのみ実施した。

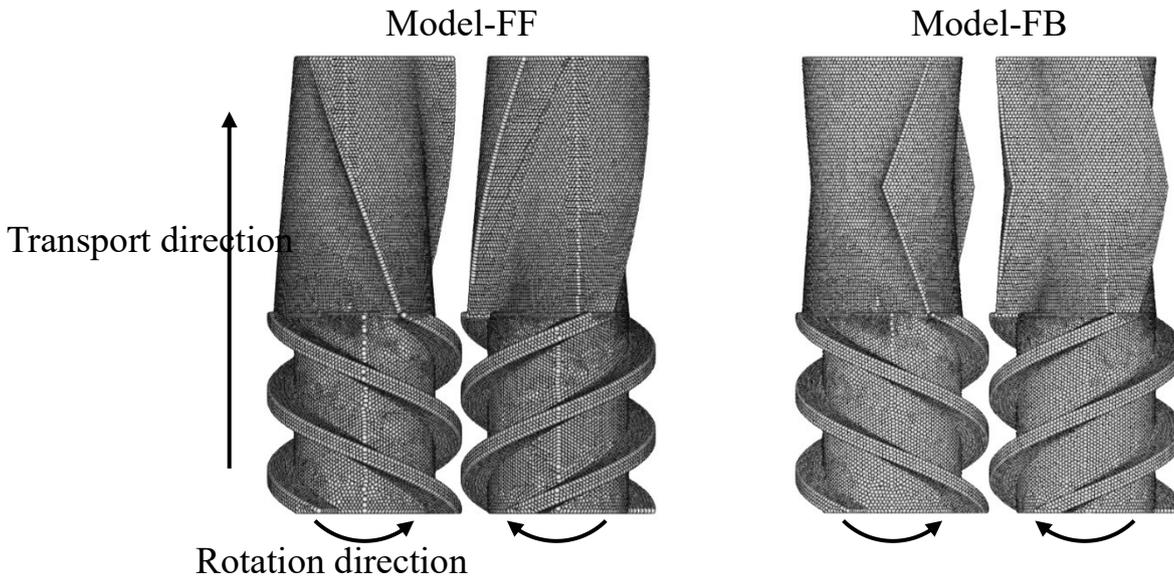


Fig. 3-1 Overall views of calculation models. Model-FF on left has only forward twist angle. Model-FB on right has forward and backward twist angle. The screw length and rotor length are the same for both models.

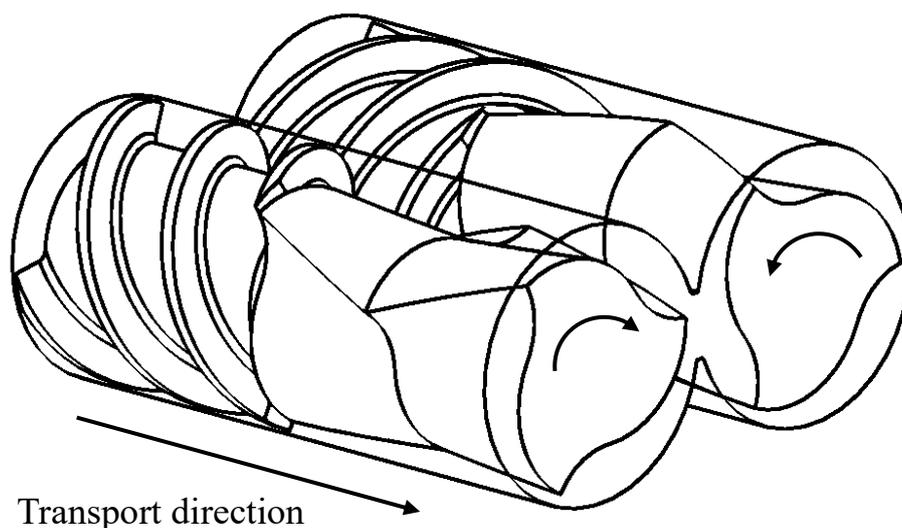


Fig. 3-2 Bird's eye view of Model-FB. The cross-sectional shape of rotor of Model-FF is the same as this.

3.4. 準定常状態でのマーカー粒子追跡方法

メッシュフリー法では計算点が流れに沿って移動するため、計算点を追跡することで滞留時間分布の算出が可能である。しかし、本解析対象は、30 core を用いた並列計算の場合でも1回転あたり約2-3時間の計算時間が必要であり、流入から流出までの追跡に1条件あたり200-400時間が必要となる。そこで本研究では、計算負荷低減のために、ロータの同位相において混練部充填率と軸方向断面充填率の変化がなく、周期的に同様の流動様式となる準定常状態であることを利用し、時刻歴データを周期的に速度場として用いたマーカー粒子追跡を実施することで、滞留時間分布を算出した。

本研究において混練機の準定常状態は「ロータの同位相において混練部充填率と軸方向の断面充填率の変化がなくなる」と定義し、充填率はそれぞれ以下の式により求めた。

$$\text{混練部充填率 (Filling ratio of mixing zone)} : f = V_r/V_f \quad (3-8)$$

$$\text{断面充填率 (Cross-sectional filling ratio)} : f_c = V_{rc}/V_{fc} \quad (3-9)$$

ここで V_r は混練部の樹脂体積、 V_f は混練部容積、 V_{rc} は軸方向の一定幅に滞留する樹脂体積、 V_{fc} は軸方向の一定幅の混練部容積である。以降の計算において V_{rc} 、 V_{fc} の算出に用いた軸方向の幅 (dx) は10 mm とし、本計算での計算点間隔2.0 mm に対し約5点分の幅を代表する充填率とした。なお、Fig. 3-3 に示すように、充填率を計算する軸方向の幅が8-12 mm の間

で断面充填率が大きく変化しないことを確認しており、10 mm 幅で近傍の断面充填率を十分に代表できると判断した。

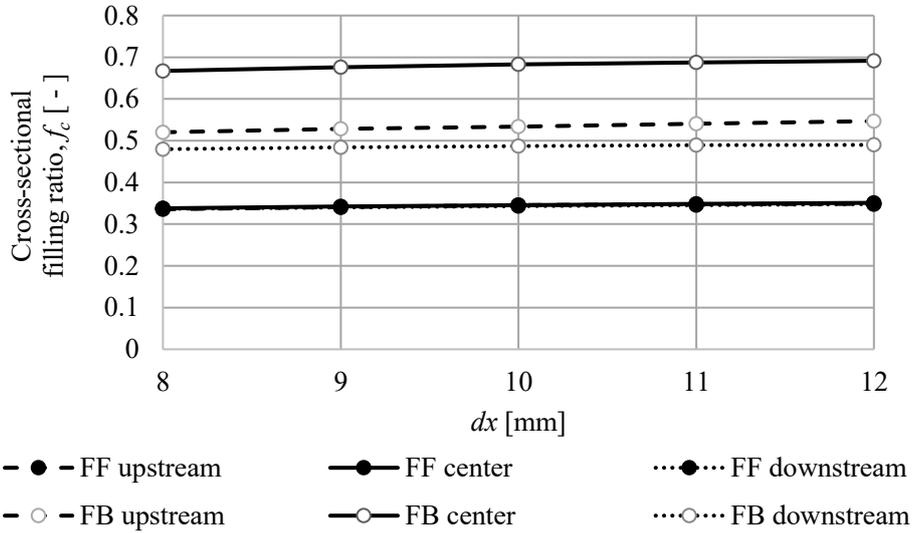


Fig. 3-3 Cross-sectional filling ratio, f_c , for the calculated width for Model-FF and Model-FB. In these cases, operating conditions of both models are 300 min^{-1} and 200 kg/h . The axial coordinate of center, upstream and downstream are 0.18, 0.22 and 0.14 m, respectively.

Fig. 3-4 は FF, FB それぞれの内部樹脂体積の推移である。樹脂の流入に伴い混練機内部の樹脂体積が増加し、FF, FB のどちらの形状でも流出と流入がバランスすることで全体の樹脂体積が一定になる。FF では累積回転数が 25 回転程度、FB では 55 回転程度で体積変化がほとんどなくなる。この状態を初期条件に 2 回転分の計算を行い、同位相における混練部の軸方向断面充填率を算出した。Fig. 3-5 はその結果であり、各部の断面樹脂体積 f_c はロータが同位相であればほとんど変化しないことが分かる。以上の結果から、周期的に同様の流動形態となる準定常状態であることが確認された。

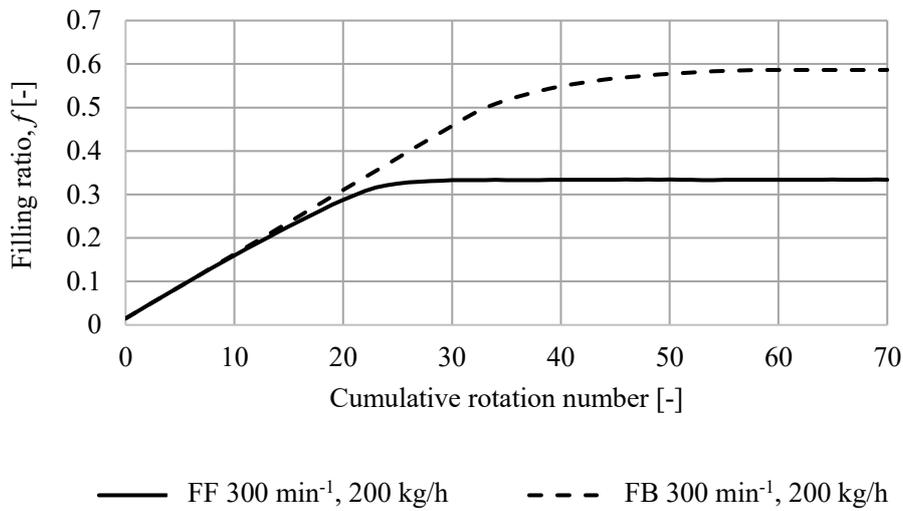


Fig. 3-4 Transition of filling ratio, f , as a function of cumulative rotation number for two operating conditions. Fluid volume is calculated from the number of calculated points in the melt mixing zone at the same rotor phase and the volume per calculated point.

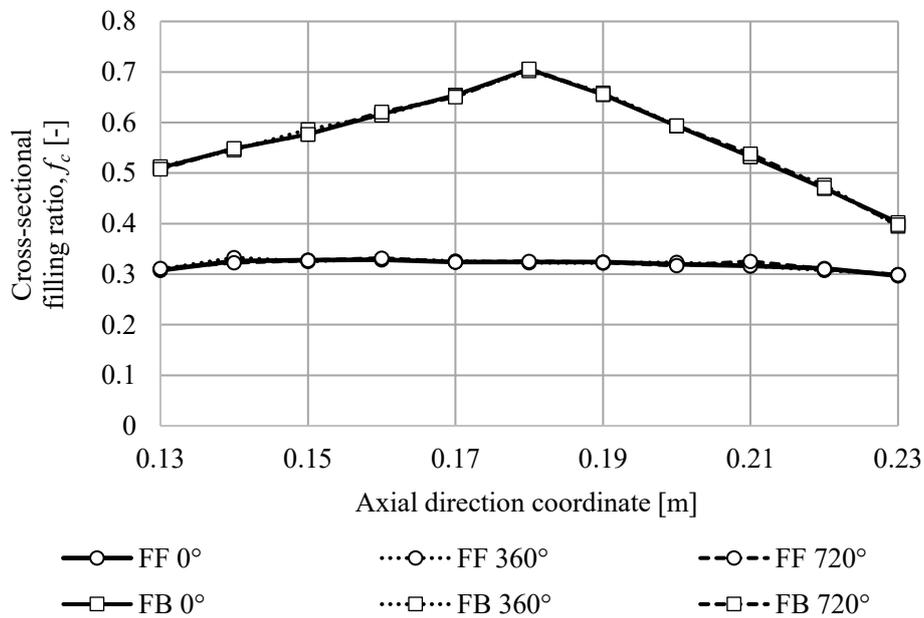


Fig. 3-5 Cross-sectional filling ratio, f_c , as a function of axial direction coordinate at the same rotor angle during two rotations from steady state.

マーカー粒子追跡は、準定常状態の時刻歴データを周期的に流速場として用いた。マーカー粒子の速度は、EFGM で用いる Moving Least Square 補間によって、準定常状態の流速場から算出し、座標更新には4次の Runge-Kutta 法を用いた。

マーカー粒子の初期位置は混練部始端から 10 mm の区間に存在する計算点位置に配置した。流体粒子と同座標 (Center), 流体粒子座標近傍に粒子間隔の 1/3 ずらした点を 120 度間隔に 3 点 (Center+3points), 90 度間隔に 4 点 (Center+4points) 追加した 4076, 16304, 20389 個のマーカー粒子追跡を行い、Fig. 3-6 に示すように同様の滞留時間分布が得られることが確認されたことから、以下の検討では 120 度間隔に 3 点追加した追跡結果を用いている。

なお、マーカー粒子追跡による滞留時間分布の算出に必要な計算時間は 4 時間程度 (1 core) であった。

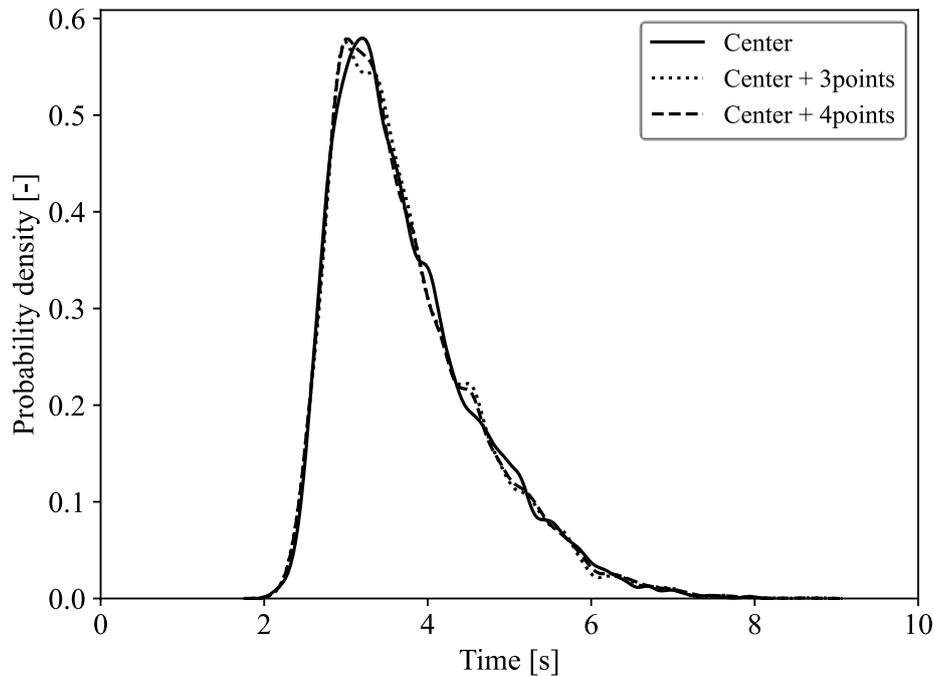


Fig. 3-6 Residence time distributions of 4076, 16304 and 20389 marker particles at 300 min⁻¹ and 300 kg/h for model-FF.

3.5. 解析結果

3.5.1. 充填状態とロータ形状および操作条件の関係

Fig. 3-7 に FF, FB の 200 min^{-1} における全体充填状態を示す。計算点を樹脂の滞在位置として直径 2.0 mm の球体として表示し、内部およびロータのエッジの観察を可能とするために、バレルおよびロータ直径よりも外側にあるバレルに貼り付いた計算点は非表示とした。球体表面の色は各計算点のせん断速度 $\dot{\gamma}$ を示す。せん断速度 $\dot{\gamma}$ はひずみ速度テンソル $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ を用いて以下のように定義した。

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\dot{\boldsymbol{\epsilon}}:\dot{\boldsymbol{\epsilon}}} \quad (3-10)$$

Fig. 3-8 は 200 min^{-1} , 200 kg/h の条件での FF の混練部中央断面の充填状態である。Fig. 3-8 に示す θ は、ロータのエッジ後端と前縁に樹脂が付着する位置がロータ中心でなす角度であり、Fig. 3-9 に流量に対する θ の変化を軸方向座標が $0.14, 0.18, 0.22 \text{ m}$ の混練部上流、中心、下流それぞれについて示す。FF, FB とともに、流量の増加に伴い θ の値が大きくなっており、ロータ前縁の滞留量が増加することがわかる。また、どの結果も θ が同程度の傾きで直線的に変化していることから、流量の増加に対し上流から下流までほぼ均等に前縁の滞留幅が増加し、局所的な充填状態の変化が起こらないことが分かる。

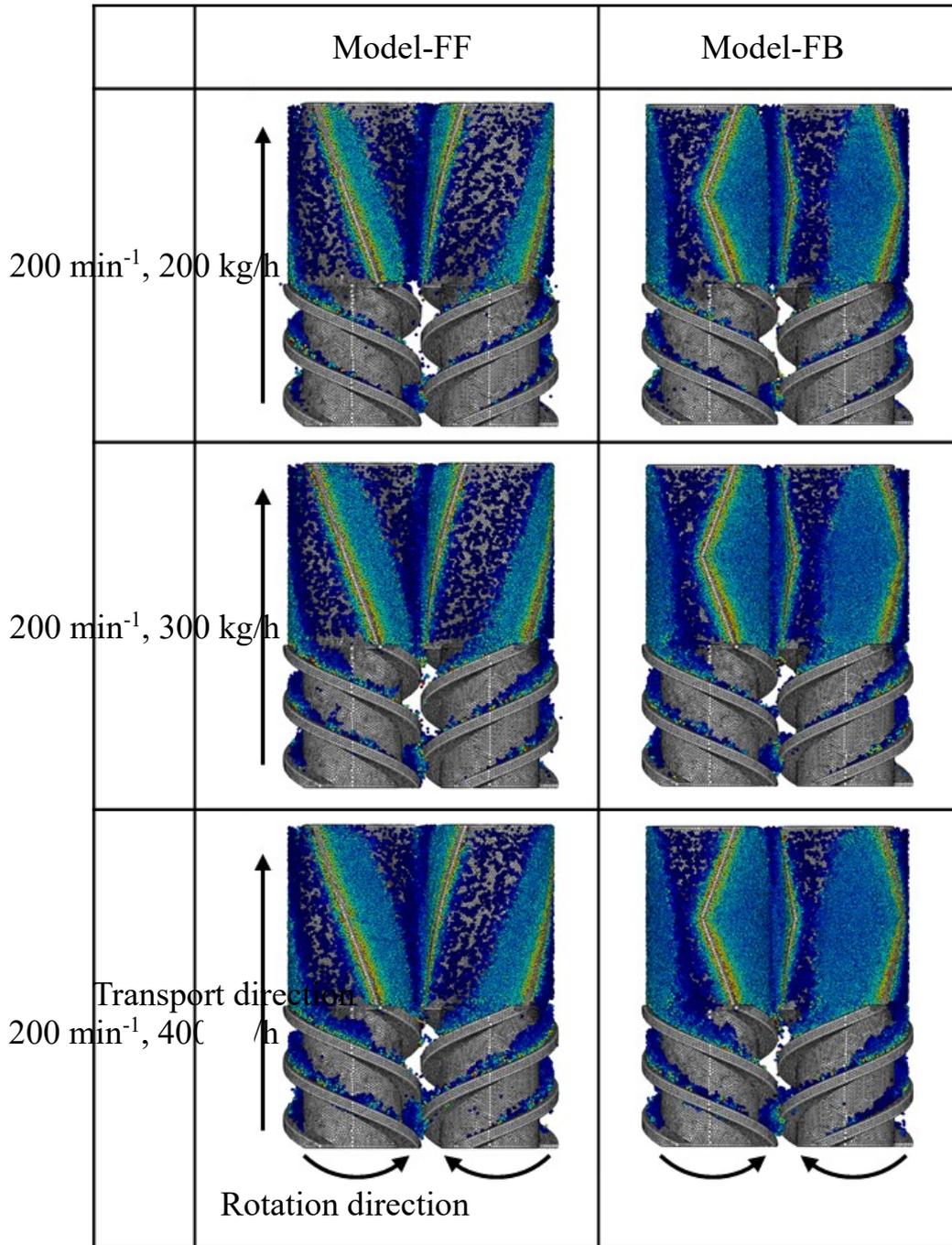


Fig. 3-7 Filling states of Model-FF (left) and Model-FB (right) at 200 min⁻¹. The contour represents shear rate.

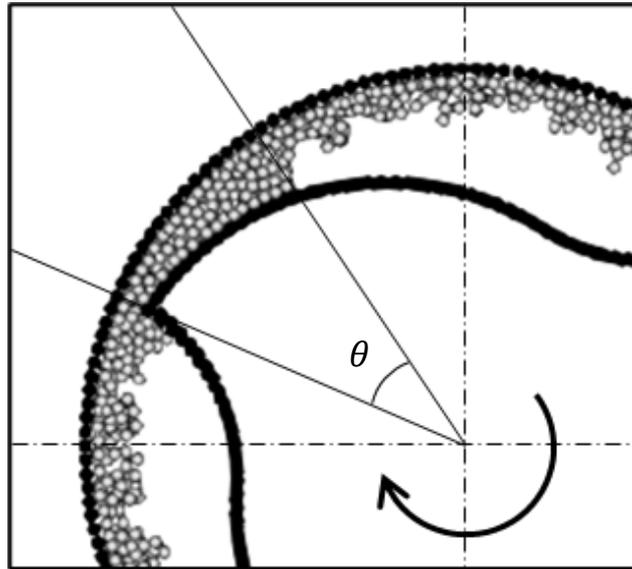


Fig. 3-8 Filling state of central cross section at 200 min^{-1} and 200 kg/h for FF. The angle θ is the central angle between the rear edge of the rotor and the position where the fluid adheres to the front edge.

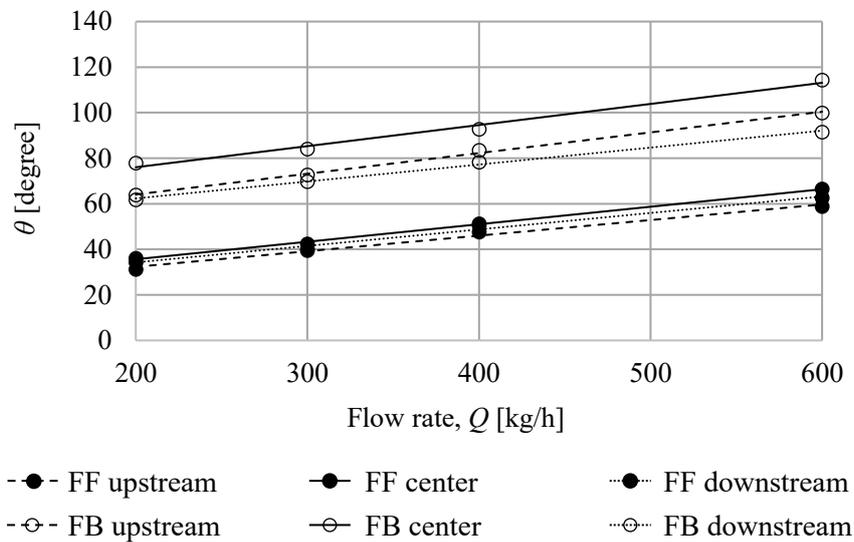


Fig. 3-9 Variation of central angle, θ , with flow rate at 200 min^{-1} for FF and FB. The lines indicate the regression line by the least squares method. The axial coordinate of upstream, center and downstream are 0.22 , 0.18 and 0.14 m , respectively.

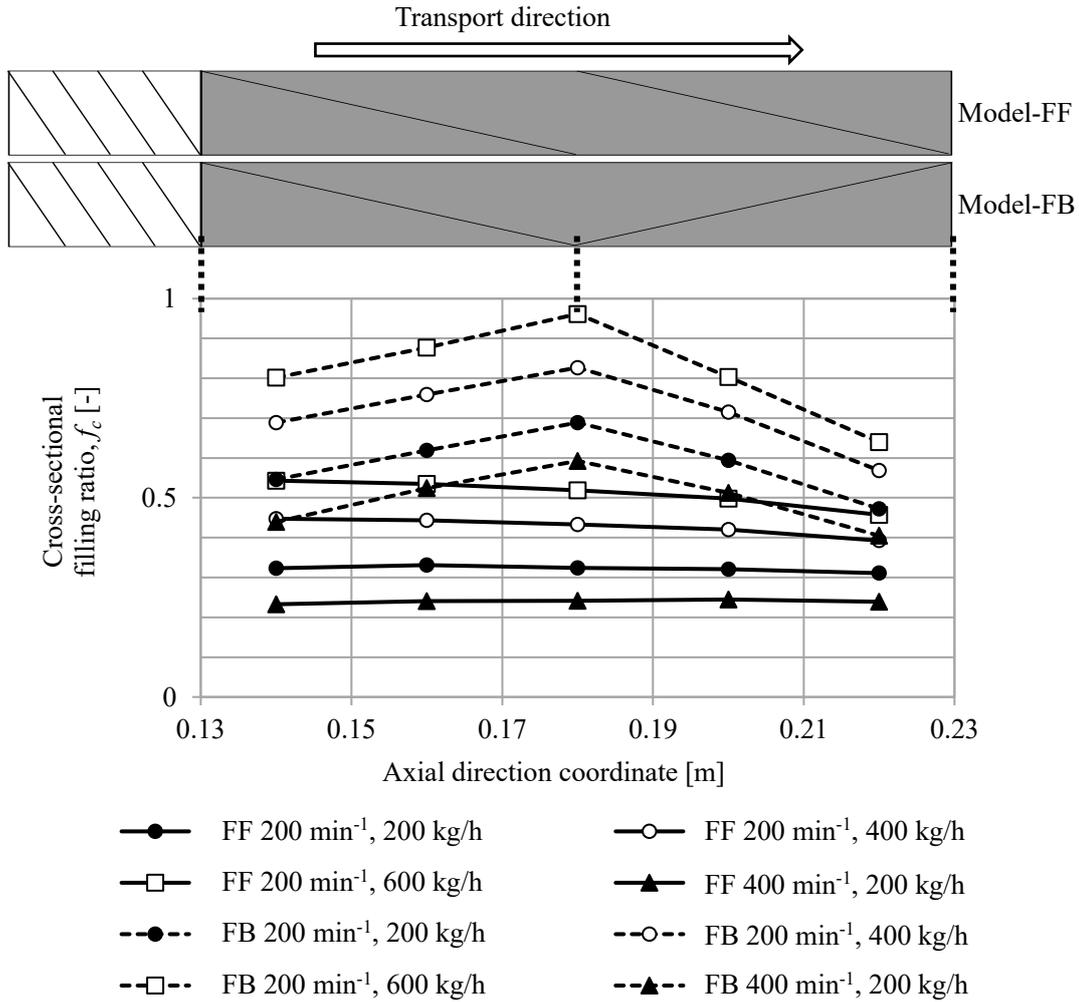


Fig. 3-10 Cross-sectional filling ratio in axial direction coordinate at Q/n of 0.5, 1.0, 2.0 and 3.0 ($\text{kg/h}/\text{min}^{-1}$) for FF and FB.

Fig. 3-10 は軸方向の断面充満率の変化を示しており、FF は上流から下流まで断面充満率がほぼ一定、FB は混練部中央の送り戻しの切り替え部で断面充満率が大きくなるのが分かる。この傾向は流量に関わらず同様であり、Fig. 3-9 の結果と同様に、局所的な充満状態の変化が起こらないことを示している。

次に、流量 Q と回転速度 n の比 Q/n [$(\text{kg/h})/\text{min}^{-1}$] と混練部の充満率の関係について調べた。Fig. 3-11 に Q/n と混練部の充満率 f の関係を示す。Fig. 3-11 から、両形状ともに混練部の充満率は Q/n と線形関係にあり、 $Q/n=0$ における充満率は、線形近似した場合、FF で 25% 程度、FB で 46% 程度になることが分かる。

Taki ら[16]や Lertwimolnun ら[17]は二軸押出機のフルフライトスクリュに対する実験的観察から内部の充満率は Q/n に比例すると報告しており、FF は Q/n に対して充満率が線形に

第3章 混練機内部の充填率と滞留時間に関する数値計算

変化するという点ではこれに一致しているが、 $Q/n=0$ での充填率が異なる。前記文献において二軸押出機の充填率は、クリアランスやロータ間の隙間が存在しないと仮定した内部容積と押出量から算出されており、 $Q=0$ において充填率が0%となる。一方、本モデルのバレルとロータのクリアランスに生じるロータによって掻き取られない部分（クリアランス部）の体積は混練部容積の24%程度を占めており、これが操作条件の影響を受けず充填率の下限値として存在する。

したがって、FFではこのクリアランス部以外の樹脂が全て掻き取られることから、 $Q/n=0$ における充填率が25%程度を示している。FBについては、クリアランス部に加え、戻しのねじれ角の効果によりローターエッジ前縁で増加した充填率が操作条件によらず20%程度存在すると考えることができる。以上のように $Q \rightarrow 0$ においても、クリアランス部とロータ形状に依存した充填率の発生が生じることがわかった。

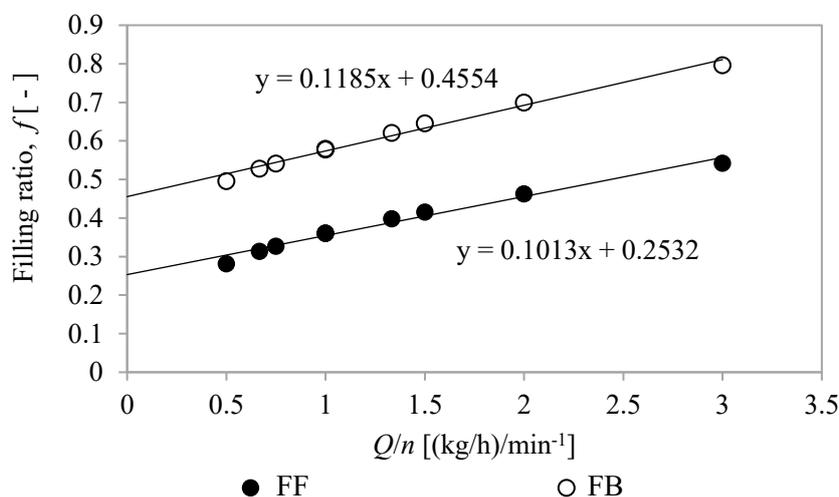


Fig. 3-11 Relationship between filling ratio and Q/n . The lines indicate the regression line by the least squares method.

3.5.2. 平均滞留時間と滞留時間分布の関係

次にロータ形状および操作条件の滞留時間分布への影響について、マーカー粒子追跡を実施し、その結果について検討する。

Fig. 3-12は Q/n に対する混練部中央の断面充填率である。この図から、本検討範囲である $0.5 \leq Q/n \leq 3.0$ で断面充填率は Q/n に対して線形に変化し、 $Q/n=3.0$ においても充填率が100%に達していないことが分かる。すなわち本検討の操作条件の範囲は全領域で非充填である。FBに関しては Q/n が3.2以上で断面充填率が100%となると想定され、充填状態が定性的に変化するため、滞留時間分布も定性的に異なってくることが考えられる。

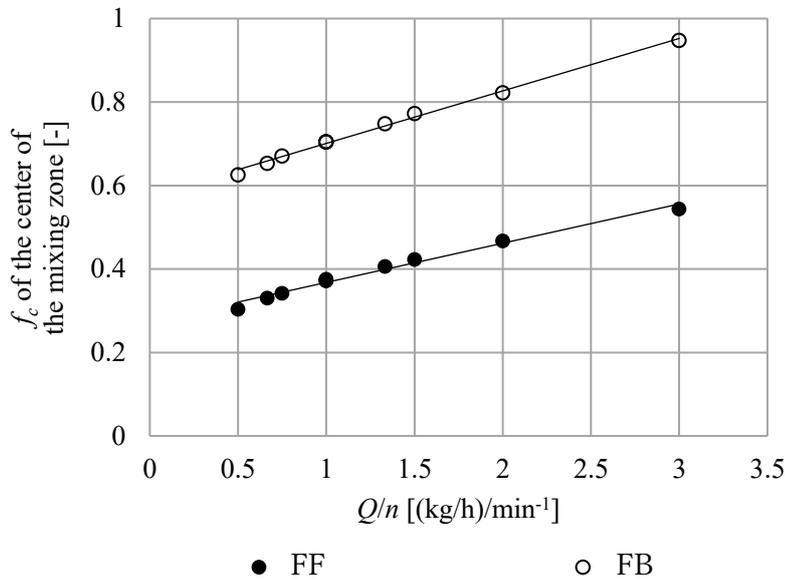


Fig. 3-12 Cross-sectional filling ratio of the center of the mixing zone as a function of Q/n .

Fig. 3-13, Fig. 3-14, Fig. 3-15, Fig. 3-16, Fig. 3-17, Fig. 3-18 は, FF, FB それぞれについて, 各条件の平均滞留時間で正規化した滞留時間 (以後, 正規化滞留時間) の確率密度関数を Q/n で整理した結果である. Q/n の範囲はそれぞれ $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$ (Fig. 3-13, Fig. 3-14), $Q/n > 1.5$ (Fig. 3-15, Fig. 3-16), $Q/n < 1.0$ (Fig. 3-17, Fig. 3-18) とした. それぞれの正規化滞留時間分布を比較するために 200 min^{-1} , 200 kg/h ($Q/n=1.0$) の条件での結果を各グラフにプロットした. また Fig. 3-19 は平均滞留時間に対する滞留時間の標準偏差の結果である.

Fig. 3-13, Fig. 3-14 が示すように, $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$ では, FF, FB それぞれで正規化滞留時間分布が単峰性であり, 正規化滞留時間が 1.0 近傍で確率密度の差はあるが, ピーク位置や分布幅がほぼ同等の結果となることが分かった. $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$ の条件は, Fig. 3-19 が示すように平均滞留時間と標準偏差がほぼ比例する結果が得られた.

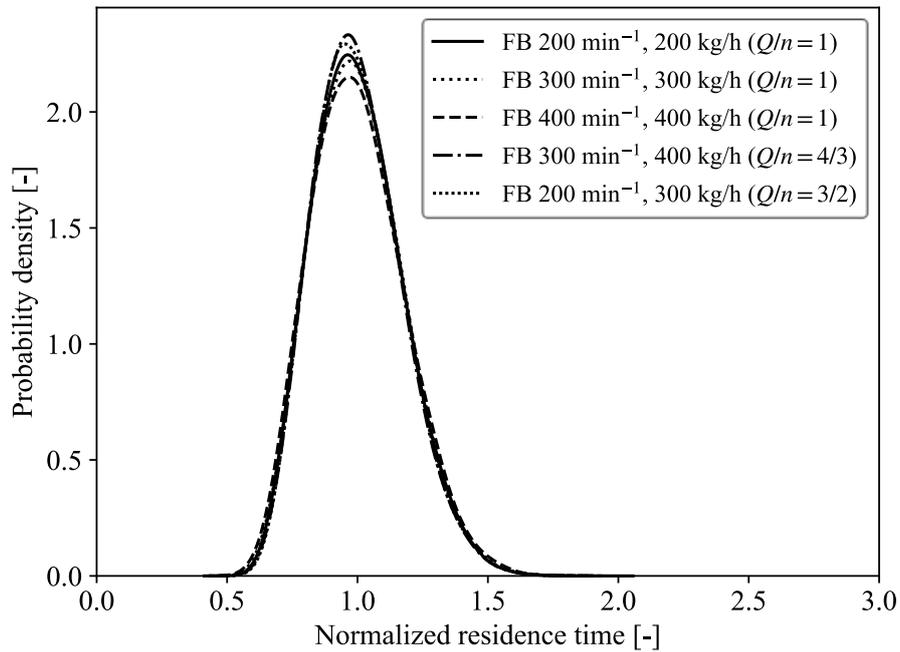


Fig. 3-13 Normalized residence time distribution of model-FB for the conditions of $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$. Residence time is normalized by the average residence time.

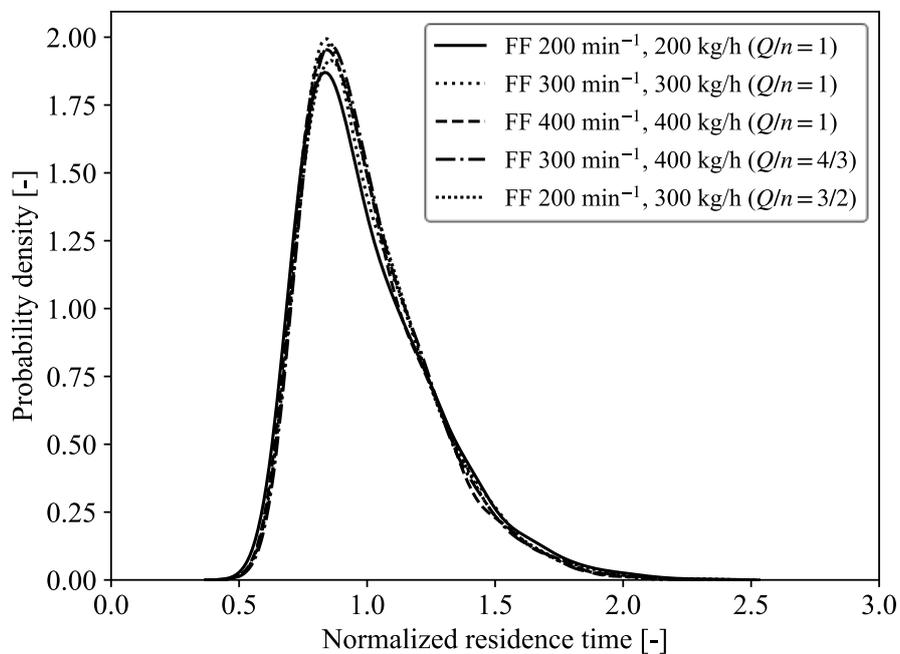


Fig. 3-14 Normalized residence time distribution of model-FF for the conditions of $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$. Residence time is normalized by the average residence time.

Fig. 3-15 に示す $Q/n > 1.5$ の条件では、FB の正規化滞留時間分布は単峰性であるが、 Q/n の増加に伴いピーク位置がやや左にずれ、正規化滞留時間が 0.7 以下、1.2 以上の領域で確率密度が増加してくることが分かった。また、Fig. 3-16 に示す FF については、 $Q/n=3$ の条件で、単峰から二峰への明らかな変化が生じた。 $Q/n=2$ の条件については、二峰性への変化は生じていないが、FB と同様にピーク位置のずれと正規化滞留時間 0.8 以下、1.3 以上の領域での確率密度の増加が確認できる。 Q/n が大きい条件では、ロータの回転による搬送能力以上の流量を保つために圧力勾配が増加する。この効果によって軸方向の移動の不均一性が強くなり滞留時間の長いものと短いものが生じていると考えられる。正規化滞留時間分布が二峰となる条件 ($Q=600$ kg/h, $Q/n=3$) においても、Fig. 3-19 が示すように、FF の平均滞留時間と標準偏差が $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$ での結果と同様にほぼ比例する結果が得られた。

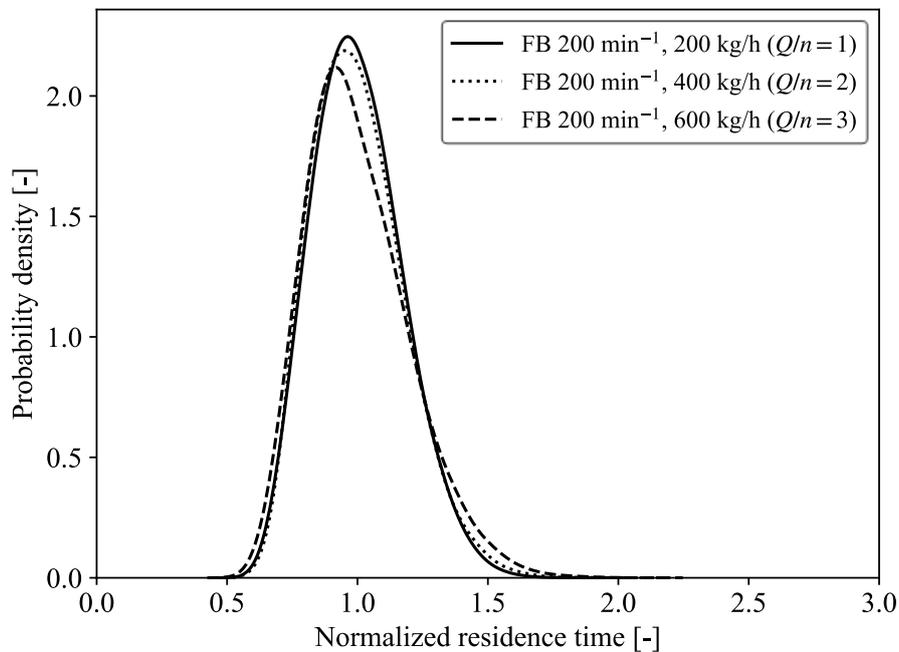


Fig. 3-15 Normalized residence time distribution of model-FB for the conditions of $1.5 < Q/n$. Residence time is normalized by the average residence time.

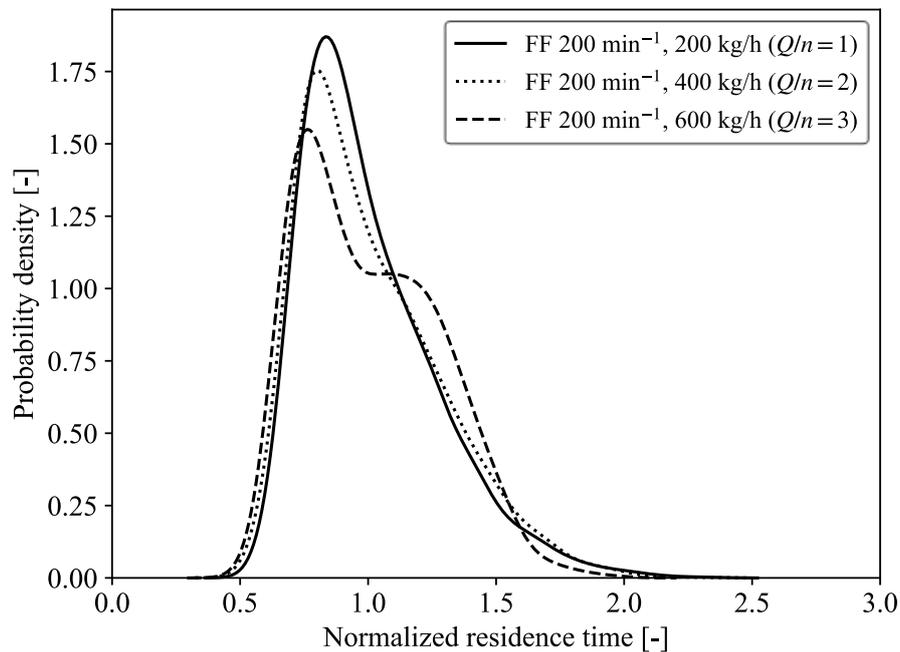


Fig. 3-16 Normalized residence time distribution of model-FF for the conditions of $1.5 < Q/n$. Residence time is normalized by the average residence time.

Fig. 3-17, Fig. 3-18 に示す $Q/n < 1.0$ では、両形状ともに単峰性であり、 Q/n の低下に伴い、正規化滞留時間のピークの確率密度が減少し、正規化滞留時間 0.8 以下、1.2 以上の領域での確率密度が増加すると分かった。 Q/n が低い条件は充填率が低いため、圧力勾配の影響は減少する一方で、ロータ前縁で搬送される樹脂体積に比べ、バレルへの張り付きなど混練機内で停止する樹脂体積が相対的に増加する。この効果によって搬送される樹脂とされない樹脂の差異が大きくなり滞留時間の長いものと短いものが生じていると考えられる

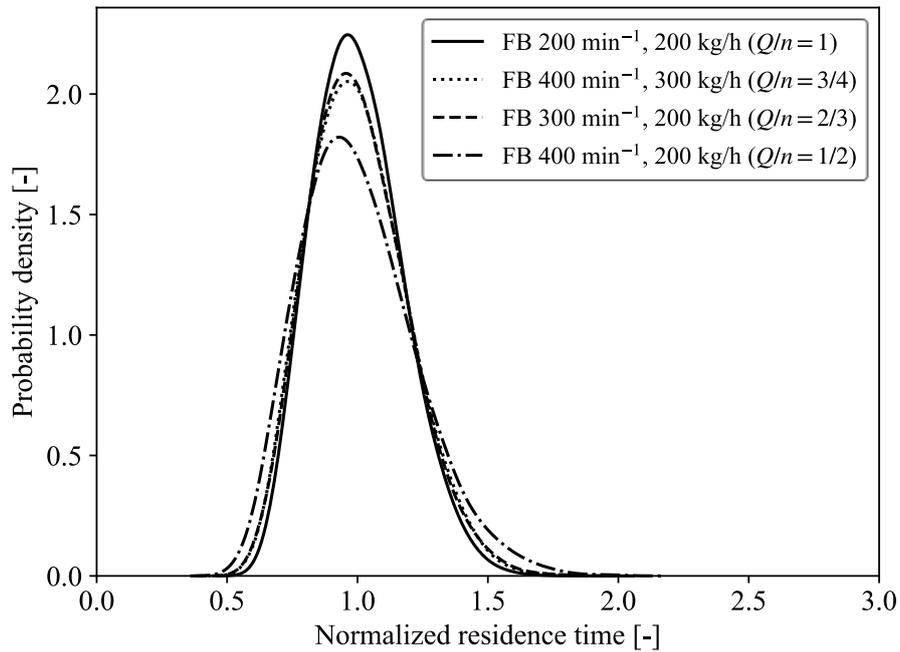


Fig. 3-17 Normalized residence time distribution of model-FB for the conditions of $Q/n < 1.0$. Residence time is normalized by the average residence time.

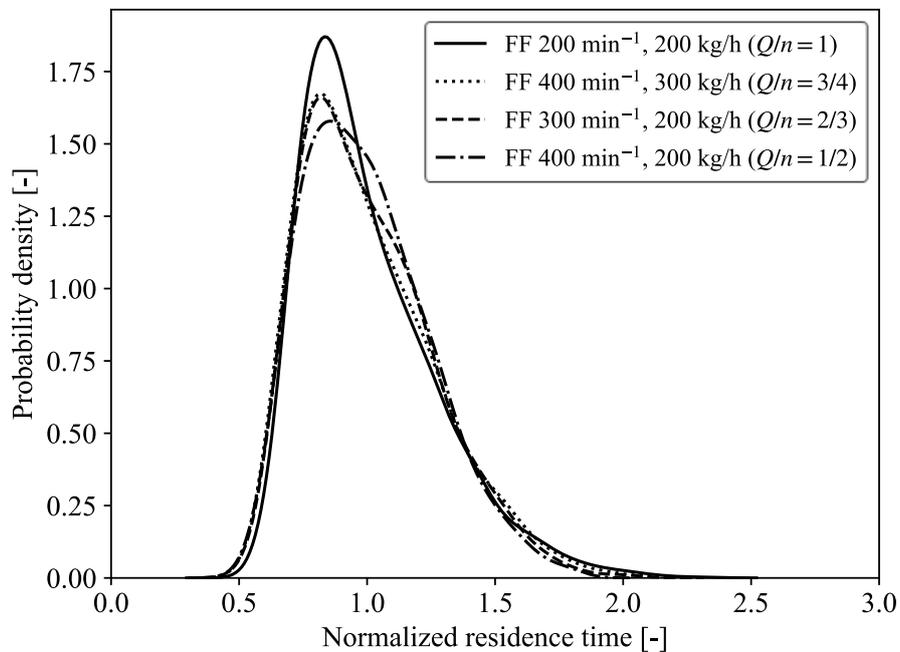


Fig. 3-18 Normalized residence time distribution of model-FF for the conditions of $Q/n < 1.0$. Residence time is normalized by the average residence time.

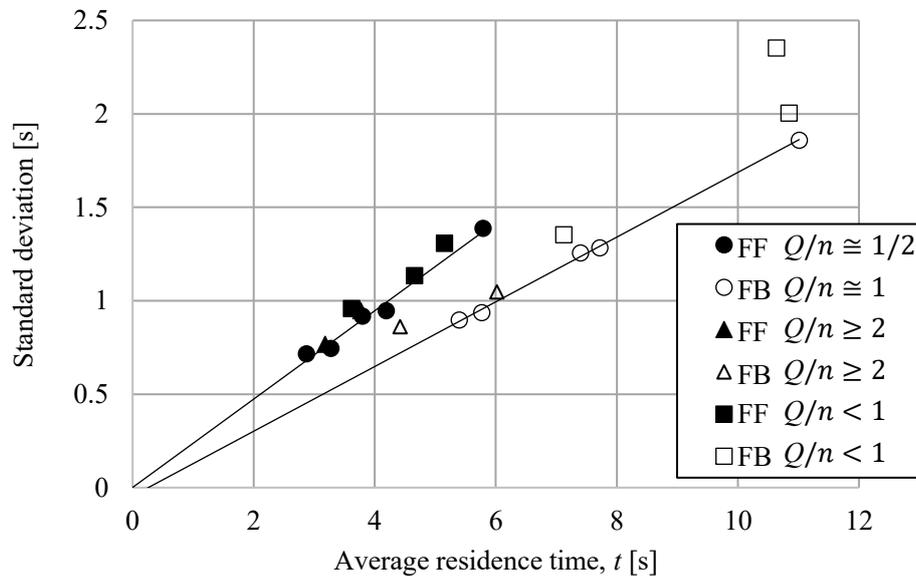


Fig. 3-19 Standard deviation of residence time as a function of average residence time. The lines indicate the regression lines of the conditions of $1.0 \leq Q/n \leq 1.5$.

3.5.3. 完全充填の平均滞留時間との差異

部分充填解析の実施により充填状態の変化が評価可能となったことから、本節では完全充填を仮定した場合の結果との差異について検討する。

一般に、完全充填の場合は平均滞留時間が $1/Q$ に比例することが知られている。Fig. 3-20 は $1/Q$ に対する各条件の平均滞留時間を示しており、この図から、部分充填の場合に、平均滞留時間は $1/Q$ に対し線形に変化するが比例はせず、FF に比べ FB の変化勾配が大きくなる結果が得られた。この結果は、FF に比べ FB の方が流量の変化に対して充填状態の変化が大きい可能性を示唆している。また、Fig. 3-20 から、流量 400 kg/h 以上で滞留時間が長い流体の増加があっても、同一の回転数において平均滞留時間の $1/Q$ に対する線形性が保たれていることが分かった。これらの結果から、 $0.5 \leq Q/n \leq 1.5$ の範囲と $1.5 < Q/n$ の範囲では正規化滞留時間分布が単峰から二峰に変化するが、それでも $0.5 \leq Q/n$ の範囲では、平均滞留時間は $1/Q$ に対して線形に依存することが分かった。

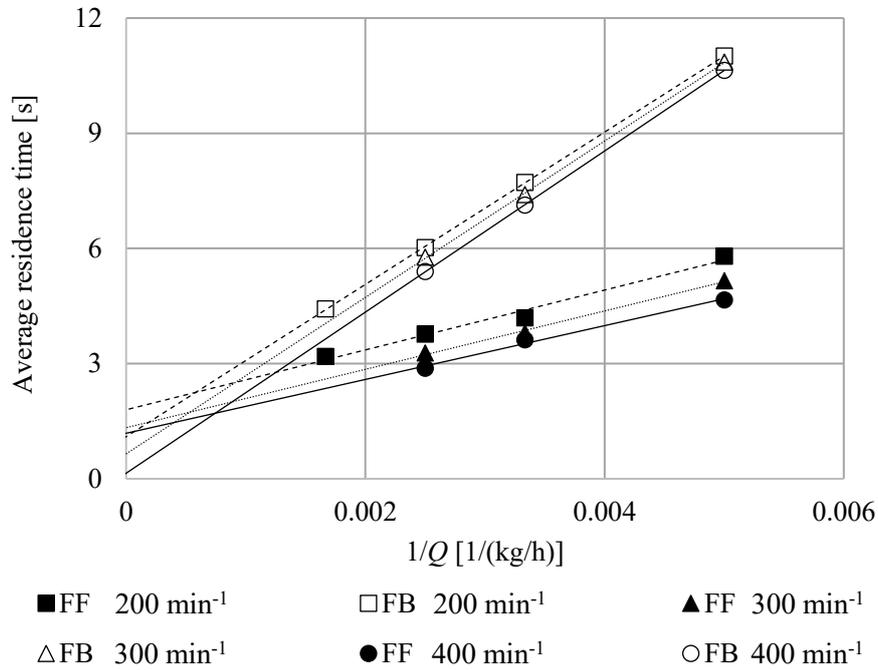


Fig. 3-20 Average residence time as a function of $1/Q$ of model-FF and model-FB. The straight lines indicate the regression lines at the respective rotation speeds.

Fig. 3-21 はマーカー粒子の滞留時間の相加平均から算出された平均滞留時間 t_a と、充満率から算出された平均滞留時間 t_f の比較結果である。 t_f は混練部充満率 f 、混練部容積 V_f 、質量流量 Q 、流体密度 ρ を用いて、以下の式により算出した。

$$t_f = fV_f\rho/Q \quad (3-11)$$

Eq.(3-11) は通常、実験においてマーカー粒子の滞留時間から充満率 f を推定するのに用いられる。Fig. 3-21 から、FF の場合は t_a と t_f が良い一致を示すことが分かる。一方、FB の場合は、各回転数において t_a が小さい (Q が大きい) 条件では t_a と t_f が良い一致を示すが、 t_a が大き (Q が小さく) になると t_f の回転数依存性が小さくなっている。この要因としては、Fig. 3-10 に示すように、FF は混練部全体で充満率が概ね一様であるのに対し、FB では充満率が軸方向に一様でないため、流れの状態が変化しているためと考えられる。この結果から、混練機内で充満率が軸方向に不均一な場合 (FB で Q が小さいとき)、Eq. (3-11) による f の推定は過大評価になっていることがわかった。

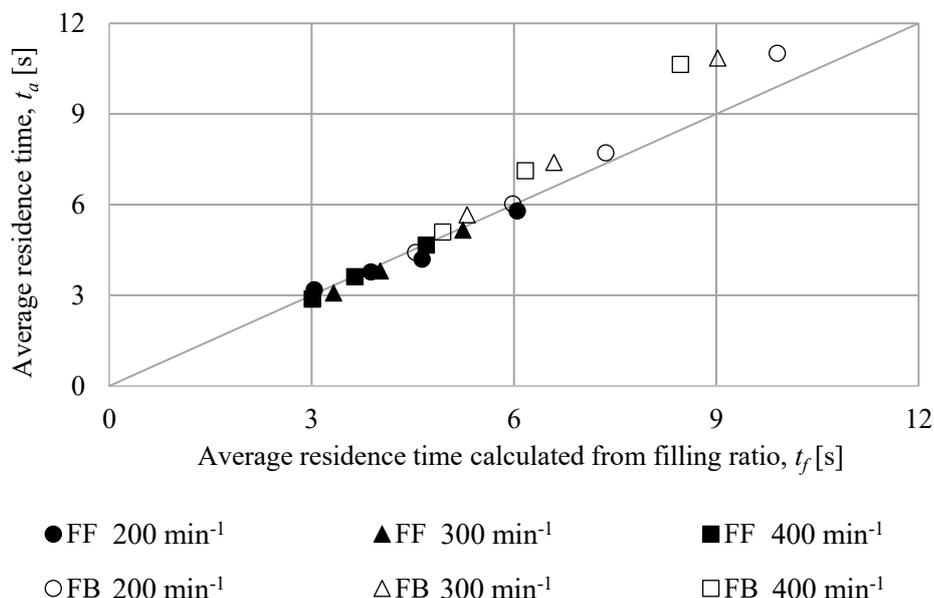


Fig. 3-21 Comparison of the average residence time calculated from the arithmetic average of maker particles and the average residence time calculated from the filling ratio.

3.5.4. マーカー粒子挙動と流動状態

次に、平均滞留時間が同程度となる条件の FF と FB に対し、正規化滞留時間分布およびマーカー粒子追跡結果から、流れ場としての特徴について検討する。

Fig. 3-22 に平均滞留時間が同程度の条件（約 6.0 s）である 200 min⁻¹, 200 kg/h での FF と 200 min⁻¹, 400 kg/h での FB の正規化滞留時間分布を示す。正規化滞留時間分布については、FB の 0.5-1.6 に対し FF は 0.4-2.5 程度に分布しており、FF の方が正規化滞留時間分布の幅が広く、正規化滞留時間 0.75 以下および 1.25 以上の範囲で FB に比べ FF の滞留時間の確率密度が大きいことが分かる。また FF の正規化滞留時間は 0.7-0.8 にピークを持ち、非対称性の大きい分布となっている。一方で、FB の正規化滞留時間は 1.0 の位置にピークを持ち、FF に比べ 1.0 を境に対称に近い分布になっている。以上のことから、FF に比べ FB は平均滞留時間近傍で多くの樹脂が排出されており、平均滞留時間を中心とした滞留時間のばらつきの小さい形状であることが分かる。

Yamada ら[18]は、上流に送りスクリュを持ち、ニーディングディスクの組み合わせ角度が送り方向に 45 度の R-KD および送りと戻しが中立の N-KD の同方向回転二軸押出機について、 Q/n が 0.2, 0.35 での完全充填解析の結果から、N-KD に比べ R-KD の正規化滞留時間の分布が広いこと、N-KD では正規化滞留時間のピークが 1.0 近傍にあること、N-KD の正規化滞留時間は 0.5-2.5 の領域に分布することを述べている。これは前述したように FB と

FF の送り能力の違いと正規化滞留時間分布の幅の結果と同様である。また、前節に示したように、FB の正規化滞留時間の分布範囲は操作条件によらずほぼ一定であり、異方向回転連続混練機の FB は比較的均一な滞留時間分布が得られる形状であることがわかる。

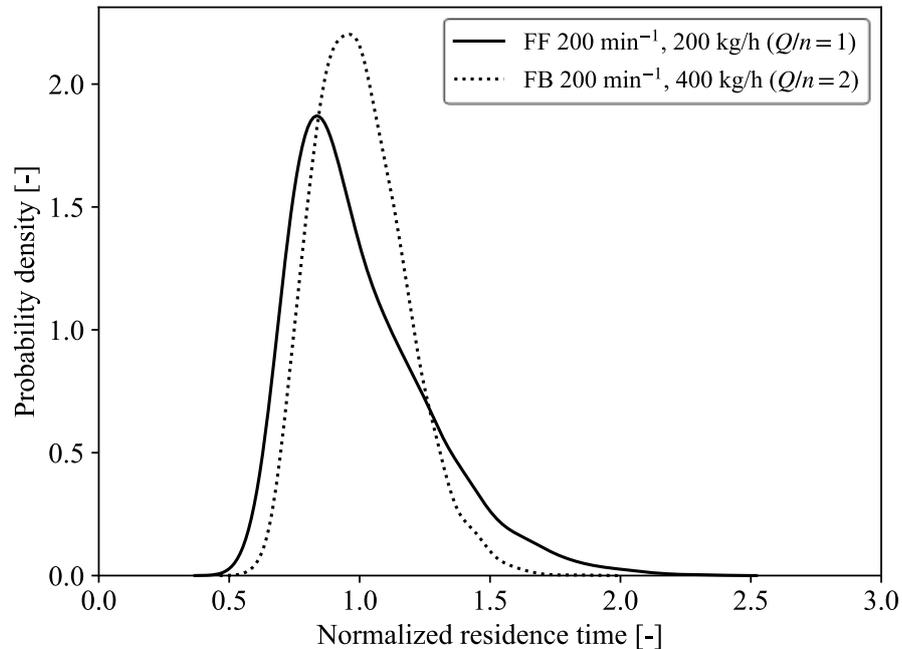


Fig. 3-22 Normalized residence time distribution of model-FF with a rotation speed of 200 min^{-1} and a feed rate of 200 kg/h and model-FB with a rotation speed of 200 min^{-1} and a feed rate of 400 kg/h which have almost same average residence time.

Fig. 3-23 は FF と FB について平均滞留時間が同程度の場合のマーカー粒子の挙動を可視化した結果である。図中の点線は、マーカー粒子の分布幅の端部5%を除外した範囲を示す。動き出し直後（1.0 s）から、FB に比べ FF は流出側に進むマーカー粒子が多く、3.5 s では、FF では一部で流出が開始しているのに対し、FB は混練部中央近傍に集中している。一方、流入側のマーカー粒子は全時刻において FF と FB でほぼ同等の位置に存在していることが分かる。3.1 節でロータが搔き取らない領域があると述べたが、Fig. 3-23 が示すようにこれらの領域にも残留するマーカー粒子は存在せず、樹脂の入れ替わりが生じていることが分かる。

Fig. 3-24 は、各時刻におけるマーカー粒子の軸方向位置のヒストグラムである。FB に比べ FF の流出側に進むマーカー粒子が多いことは Fig. 3-23 に示した通りであるが、マーカー粒子が下流側に集まる 6.0 s でのマーカー粒子は、その軸方向の分布が FF と FB でほぼ同等となる。このマーカー粒子の挙動を解釈するために、各断面における軸方向流速に着目した。

第3章 混練機内部の充填率と滞留時間に関する数値計算

Fig. 3-25, Fig. 3-26 はFB の各断面位置における軸方向流速の確率密度である。凡例の数値は軸方向座標を示しており、本モデルでは 0.18 が送り戻しの中央にあたる。Fig. 3-25 は中央より上流側の結果であり、上流から中央に向かってピークとなる速度が低下し、下流に押し出す正の速度の存在確率も低下する。上流に押し戻す負の速度については、中央位置で存在確率が低下するが、断面ごとに大きな違いがない。Fig. 3-26 に示す下流側の結果では、中央から下流に向かってピークとなる速度が上昇し、正の速度の存在確率も上昇する。負の速度については、上流側と異なり、中央から下流に向かって存在確率が上昇するが、正の速度ほどの変化は生じていない。つまり、FB は中央位置から離れるほど下流に押し出す力が強くなっていると言える。一般に、下流への押し出し流れはロータによる搬送流と、圧力流の影響によって決まることが知られている。今回の部分充填解析では Fig. 3-10 に示すように、上流下流の充填率が低く圧力が上昇しにくい。これは、Fig. 3-27 に示す軸方向の圧力分布でも確認できる。FF は、勾配の変化はあるものの、上流から下流に向かって圧力が低下しており、圧力勾配の効果は上流から下流に向かっている。一方 FB は、混練部中央の高い充填率によって圧力が高くなっている。圧力勾配の作用は、上流側では混練部中央から押し戻す方向に、下流側ではより下流に押し出す方向に働く。

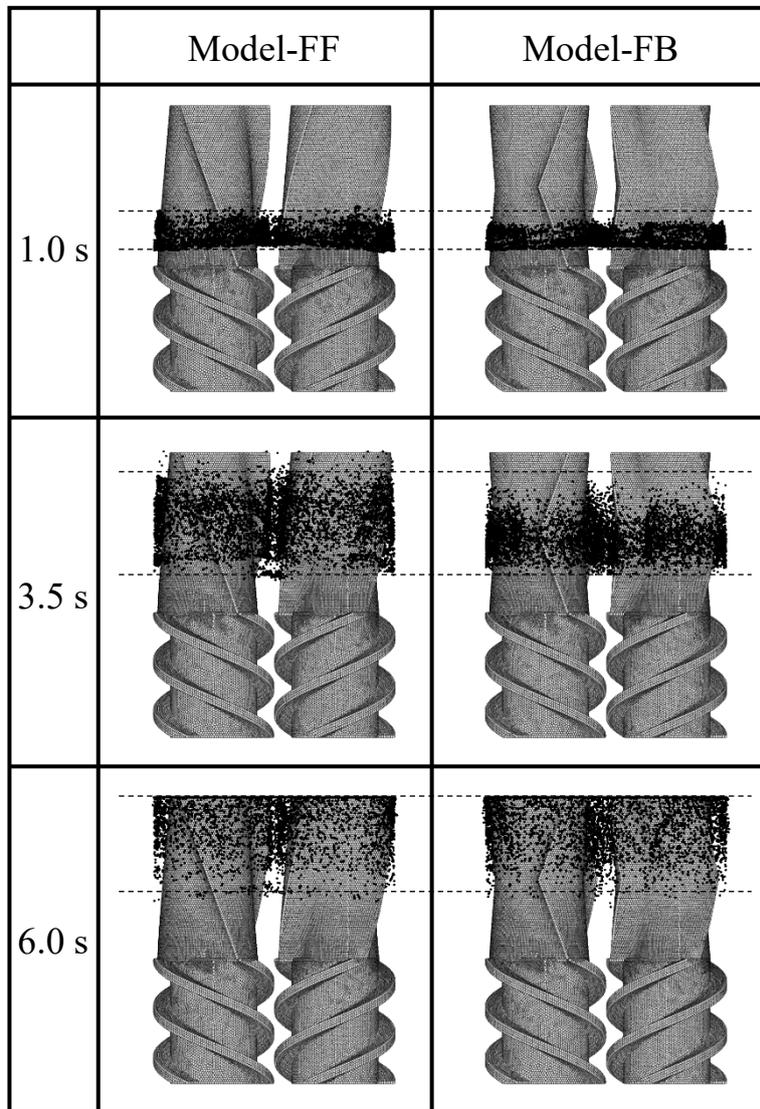


Fig. 3-23 Behaviors of maker particles of each rotor shape. The operating conditions are 200 min^{-1} and 400 kg/h for FF and 200 min^{-1} and 200 kg/h for FB. In both cases, the average residence times are nearly 6.0 s .

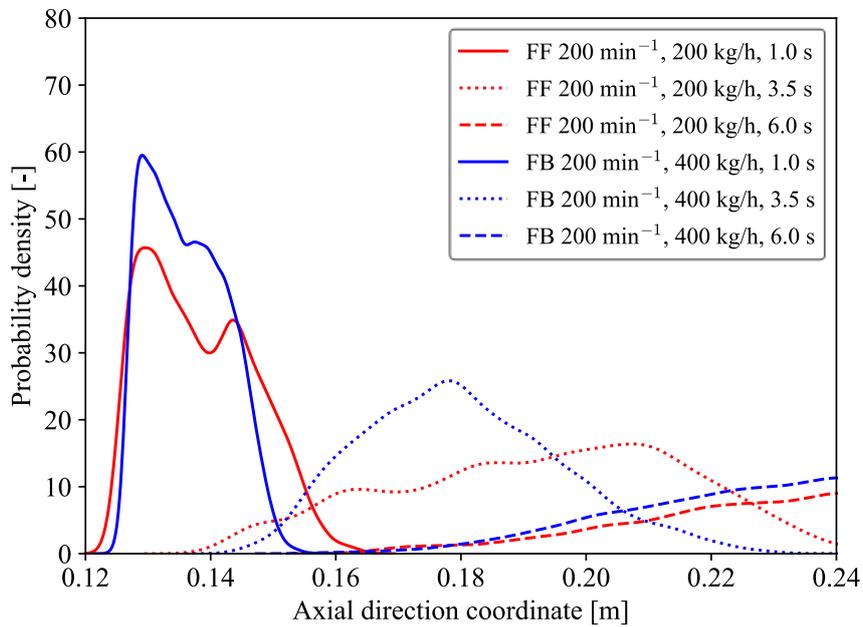


Fig. 3-24 Temporal variations of marker particles of the conditions which have almost same average residence time.

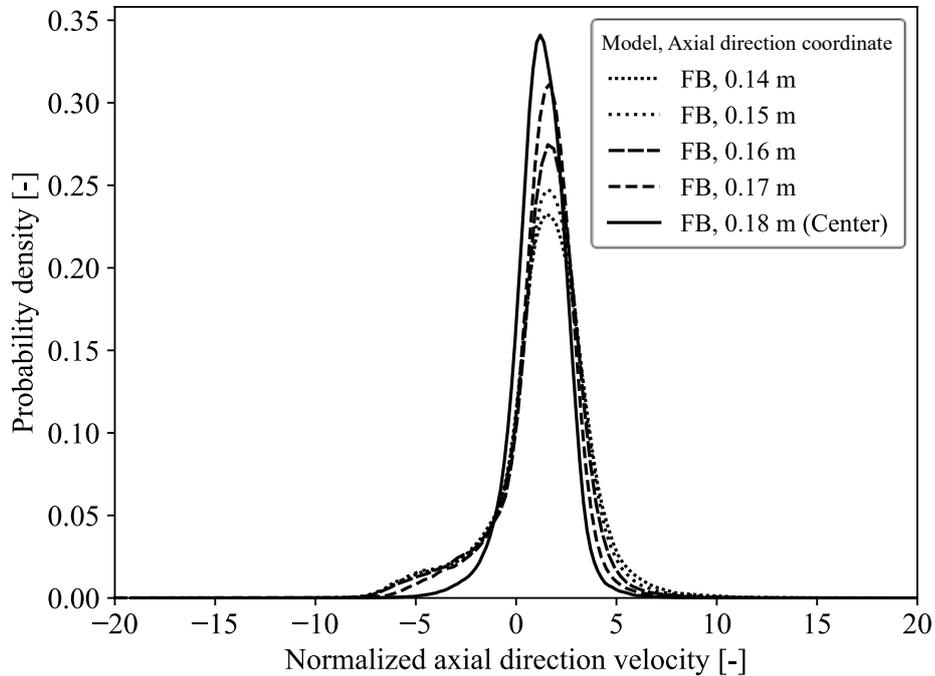


Fig. 3-25 Probability density of upstream side normalized axial direction velocity of model-FB with a rotation speed of 200 min^{-1} and a feed rate of 400 kg/h . Axial direction velocity is normalized by the linear velocity.

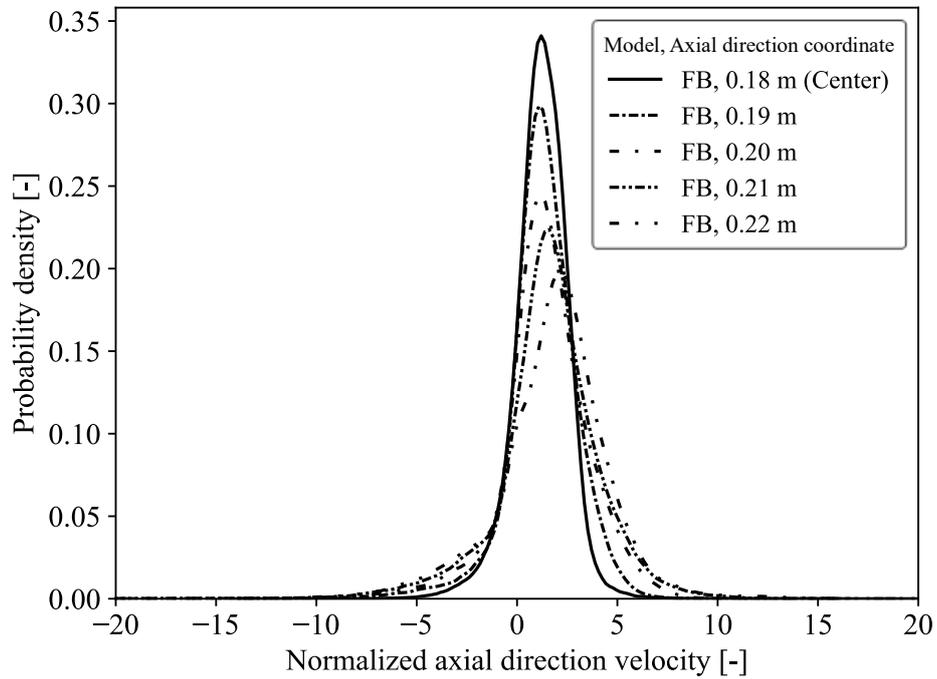


Fig. 3-26 Probability density of downstream side normalized axial direction velocity of model-FB with a rotation speed of 200 min^{-1} and a feed rate of 400 kg/h . Axial direction velocity is normalized by the linear velocity.

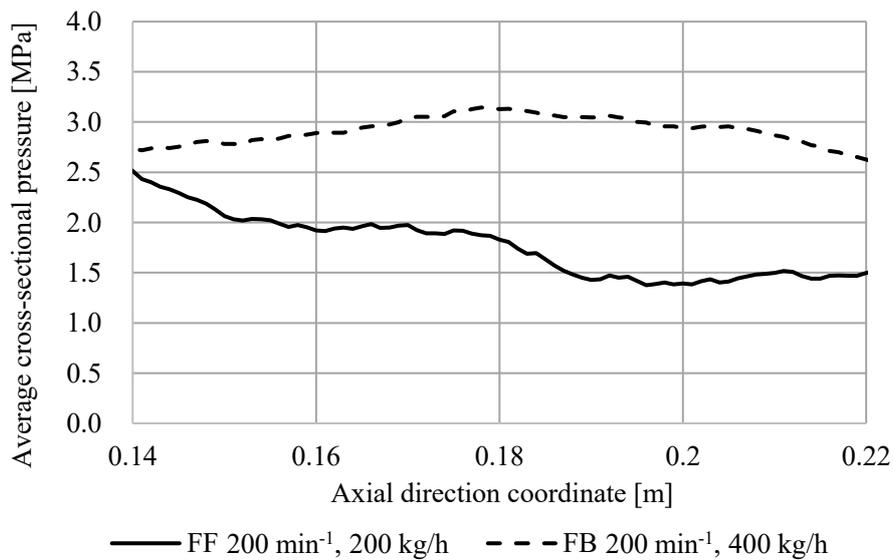


Fig. 3-27 Average cross-sectional pressure as a function of axial direction coordinate of model-FF and model-FB which have almost same average residence time.

Fig. 3-28 に、FF の各断面の軸方向流速の確率密度を示す。FB と異なり、上流から下流までほぼ同様の分布であり、流れの性質が変化していないことが分かる。Fig. 3-29 に FF の中央と、FB の上流、中央、下流の代表面の軸方向流速の確率密度を示す。線速度で正規化した軸方向流速が 5.0 以上の領域では、FF の確率密度が高く、全体領域で FF の下流への押し出し力が強いことがわかる。これは Fig. 3-27 で示した軸方向の圧力分布の影響であり、Fig. 3-23 で示した流出側に進むマーカー粒子が多い理由である。一方、滞留時間が長くなる要因である負の速度については、FF と FB の間に大きな差はなく、上流側に同程度押し戻される。したがって、上流側に滞留するマーカー粒子は形状によらず同程度存在しているため、滞留時間が 6.0 s におけるマーカー粒子の分布が同程度になるとわかった。

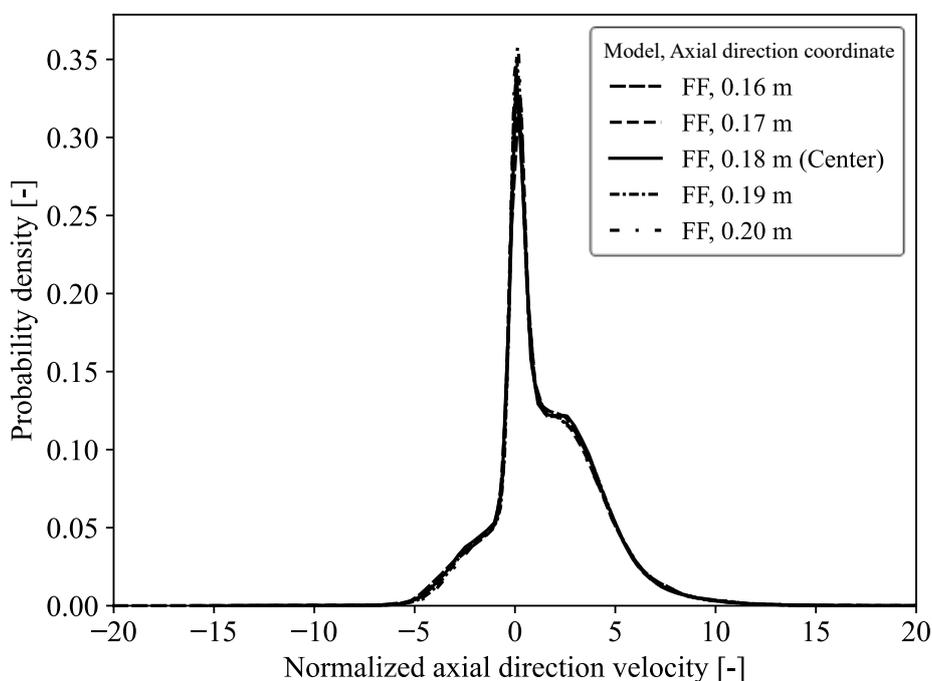


Fig. 3-28 Probability density of normalized axial direction velocity of model-FF with a rotation speed of 200 min^{-1} and a feed rate of 200 kg/h . Axial direction velocity is normalized by the linear velocity.

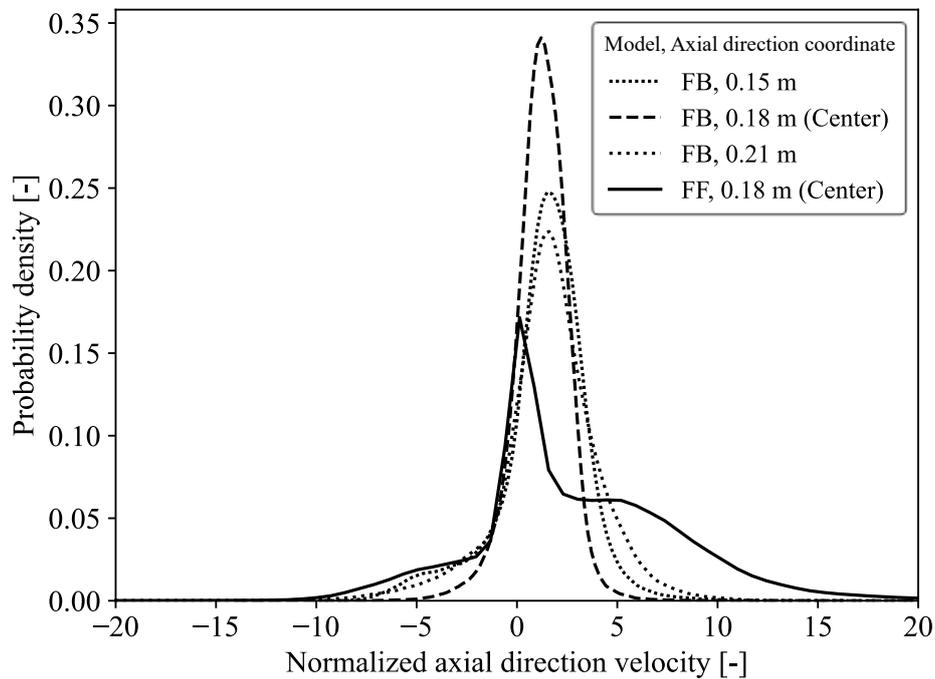


Fig. 3-29 Probability density of normalized axial direction velocity of model-FF and model-FB which have almost same average residence time. Axial direction velocity is normalized by the linear velocity.

3.6. 結言

本章では、部分充填状態を考慮した流動解析を用いて、異方向回転連続混練機内の充填率と滞留時間分布に対するロータ形状と操作条件の影響について検討した。

連続混練機の操作条件に対する充填率は、同方向回転二軸押出機と同様に流量とロータ回転速度の比 Q/n [(kg/h)/min⁻¹] に対して線形に増加することが確認された。一方で、クリアランス部の体積が無視できない連続混練機では、操作条件によらず充填率の下限値が存在する。軸方向に一樣な順送り能力をもつ FF では充填率の下限はクリアランス部の容積にほぼ等しい。一方、順送りと逆送り形状を組み合わせた FB では、クリアランス部の容積に加えて、ロータ中央部の断面充填率が高い領域が生じることによって、充填率の下限は FF のそれよりも大きくなることがわかった。

正規化滞留時間分布は、FF、FB ともに $0.5 \leq Q/n \leq 1.5$ の範囲で単峰的でほぼ同様であるが、それより大きな Q/n では次第に二峰的になる。つまり、長短の滞留時間を持つ流体の差が大きくなる。これはロータ回転の送り能力と流量の関係によって生じており、 Q が相対的

第3章 混練機内部の充填率と滞留時間に関する数値計算

に大きいときの圧力流効果である。一方で、平均滞留時間は検討した範囲で $1/Q$ に対して線形に増加することが分かった。さらに平均滞留時間から推定される充填率 $t_f Q / \rho V_f$ は、充填率の軸方向分布が一様である場合 (FF) はよい推定値となるが、軸方向充填率が不均一な場合 (FB) について過大評価となることがわかった。

また滞留時間分布の標準偏差とマーカー粒子の挙動分析から、送りロータ形状は下流に押し出す力が強い一方で、上流に押し戻す力は形状間に大きな差異がないことがわかった。この影響により、FF は滞留時間の短い流体の発生がある一方で、滞留時間の長い流体量は FF と FB でほぼ同程度になることが分かった。

今後の検討課題として、混練状態をより定量的に評価可能とするために、断面充填率が 100% に達する領域を含む操作条件での検討や、混練部下流の形状の考慮、非ニュートン粘性や温度分布の考慮を行っていく。これらを考慮した部分充填状態の混練機内流動を分析することにより、混練機実機の詳細な混練特性の評価や操作条件の限界点の検討への活用が可能と考えられる。

参考文献

1. T. Ishikawa, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, *Numerical Simulation and Experimental Verification of Nonisothermal Flow in Counter-Rotating Nonintermeshing Continuous Mixers*. *Polymer Engineering and Science*, 2000. **40**(2): pp. 365.
2. Y. Nakayama, H. Takemitsu, T. Kajiwara, K. Kimura, T. Takeuchi, and H. Tomiyama, *Improving Mixing Characteristics with a Pitched Tip in Kneading Elements in Twin-Screw Extrusion*. *AIChE Journal*, 2018. **64**(4): pp. 1424-1434.
3. Y. Fukuzawa, H. Tomiyama, K. Shibata, and S. Koshizuka, *Numerical Analysis of Polymer Devolatilization in a Twin Screw Extruder by the Particle Method*. *JSW Technical Review (in Japanese)*, 2017(68): pp. 43-48.
4. S. Koshizuka and Y. Oka, *Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid*. *Nuclear Science and Engineering*, 1996. **123**(3): pp. 421-434.
5. A. Eitzlmayr and J. Khinast, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Detailed Analysis of Conveying Elements Based on Smoothed Particle Hydrodynamics. Part 2: Mixing*. *Chemical Engineering Science*, 2015. **134**: pp. 880-886.
6. A. Eitzlmayr and J. Khinast, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Detailed Analysis of Conveying Elements Based on Smoothed Particle Hydrodynamics. Part 1: Hydrodynamics*. *Chemical Engineering Science*, 2015. **134**: pp. 861-879.
7. J. J. Monaghan, *Smoothed Particle Hydrodynamics*. *Annual review of astronomy and astrophysics*, 1992. **30**(1): pp. 543-574.

8. Y. Nakayama, E. Takeda, T. Shigeishi, H. Tomiyama, and T. Kajiwara, *Melt-Mixing by Novel Pitched-Tip Kneading Disks in a Co-Rotating Twin-Screw Extruder*. Chemical Engineering Science, 2011. **66**(1): pp. 103-110.
9. K. Kohlgrüber, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Fundamentals*. 2019: Carl Hanser Verlag GmbH Co KG.
10. X.-M. Zhang, L.-F. Feng, W.-X. Chen, and G.-H. Hu, *Numerical Simulation and Experimental Validation of Mixing Performance of Kneading Discs in a Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2009. **49**(9): pp. 1772-1783.
11. K. Alemaskin, I. Manas-Zloczower, and M. Kaufman, *Color Mixing in the Metering Zone of a Single Screw Extruder: Numerical Simulations and Experimental Validation*. Polymer Engineering & Science, 2005. **45**(7): pp. 1011-1020.
12. T. Ishikawa, T. Amano, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, *Flow Patterns and Mixing Mechanisms in the Screw Mixing Element of a Co-Rotating Twin-Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2002. **42**(5): pp. 925-939.
13. T. Belytschko, Y. Y. Lu, and L. Gu, *Element-Free Galerkin Methods*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1994. **37**(2): pp. 229-256.
14. S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. **59**(2).
15. T. Nakagawa, K. Sekiyama, and S. Yamada, *Development of Particle Method for the Simulation of High Viscosity Fluid Flow in Partially Filled Mixer*. Seikei-Kakou, 2015. **27**(9): pp. 380-387.
16. K. Taki, T. Sugiyama, M. Ohara, S. Umemoto, S.-i. Tanifuji, J.-i. Murata, I. Tsujimura, and S.-i. Kihara, *Online Monitoring of the Degree of Fill in a Rotating Full-Flight Screw of a Corotating Twin-Screw Extruder*. AIChE Journal, 2019. **65**(1): pp. 326-333.
17. W. Lertwimolnun and B. Vergnes, *Effect of Processing Conditions on the Formation of Polypropylene/Organoclay Nanocomposites in a Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 2006. **46**(3): pp. 314-323.
18. S. Yamada, K. Fukutani, K. Yamaguchi, H. Funahashi, K. Ebata, H. Uematsu, and S. Tanoue, *Dispersive Mixing Performance Evaluation of Special Rotor Segments in an Intermeshing Co-Rotating Twin-Screw Extruder by Using Weighted Probability Distributions*. International Polymer Processing, 2015. **30**(4): pp. 451-459.

第4章

連続混練機内部の混練状態の評価

4.1. 緒言

二軸押出機や連続混練機で混練される樹脂材料として、加工性と機械強度を両立させた Bi-modal 高密度ポリエチレン (HDPE) が普及してきている。Bi-modal HDPE は Fig. 4-1 に示すように分子量分布が 2 つのピークを持っており、低分子量成分と高分子量成分によって加工性と機械的強度が両立される材料である。このような材料を用いた成形では、低分子量成分の中に「ゲル」と呼ばれる高分子量成分の未分散クラスターが存在することがあり、ゲルが十分に除去されていないと、フィルムに加工した際に Fish eyes (フィルムの一部に球状の塊が存在する外観不良) が生じることや、黒に着色されたパイプの未着色部分として白色の斑点 (White Spot) が現れるなど、最終製品の品質の問題に繋がることが知られている。このゲルを除去することが二軸押出機や連続混練機の用途の一つである。

一般的な HDPE の製造プラントにおいては、異方向回転連続混練機の高い混練性能が評価され、半数以上のプラントで採用されている[1]。しかし、ポリプロピレンなどの製造プラントでは同方向回転二軸押出機が利用されることが多いが、この差異については明らかにされていない。

そこで本章では、異方向回転連続混練機と同方向回転二軸押出機の Bi-modal HDPE に対するゲル除去性能について混練実験を行い、実験結果および第 2 章で開発した部分充満解析を用いた流動解析結果の比較により、ゲルの分散性能についての評価を行った。

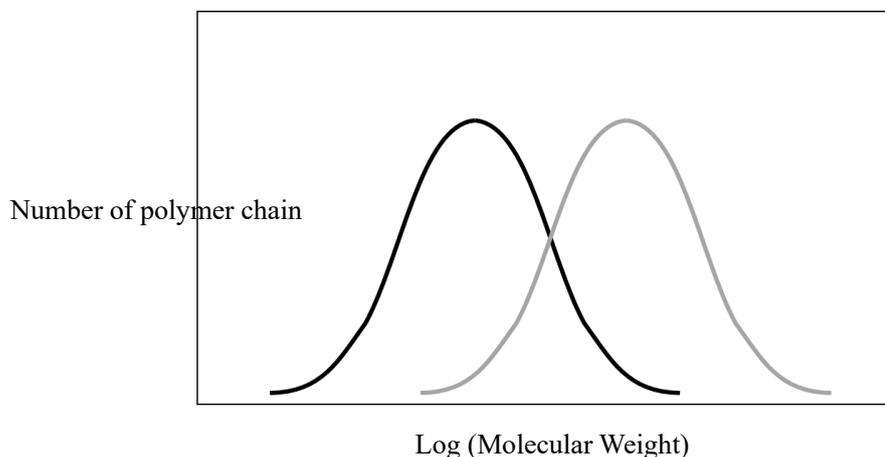


Fig. 4-1 Image of molecular weight distribution of bi-modal HDPE.

4.2. 連続混練機と二軸押出機による樹脂混練実験

4.2.1. 使用材料

カーボンパウダー (2.25wt%) と酸化防止剤 (少量) を添加した HDPE パイプグレード (MI5=0.25 kg/min, 密度=750 kg/m³) を使用した。

4.2.2. 実験装置

混練実験には、神戸製鋼所製の異方向回転連続混練機 LCM-100H[1]と同方向回転二軸押出機 KTX-30[2]を用いた。Fig. 4-2 に LCM-100H の軸方向の断面図と軸方向に垂直な断面図、Fig. 4-3 は、KTX-30 の軸方向の断面図および軸方向に垂直な断面図を示す。それらの機械的特性を Table 4-1 に示す。

Table 4-1 Configuration and dimension of LCM-100H and KTX-30.

	Barrel diameter (mm)	Rotation direction	Gear pump	L/D (-)
LCM-100H	100	Counter-rotation	With	8
KTX-30	30	Co-rotation	Without	32

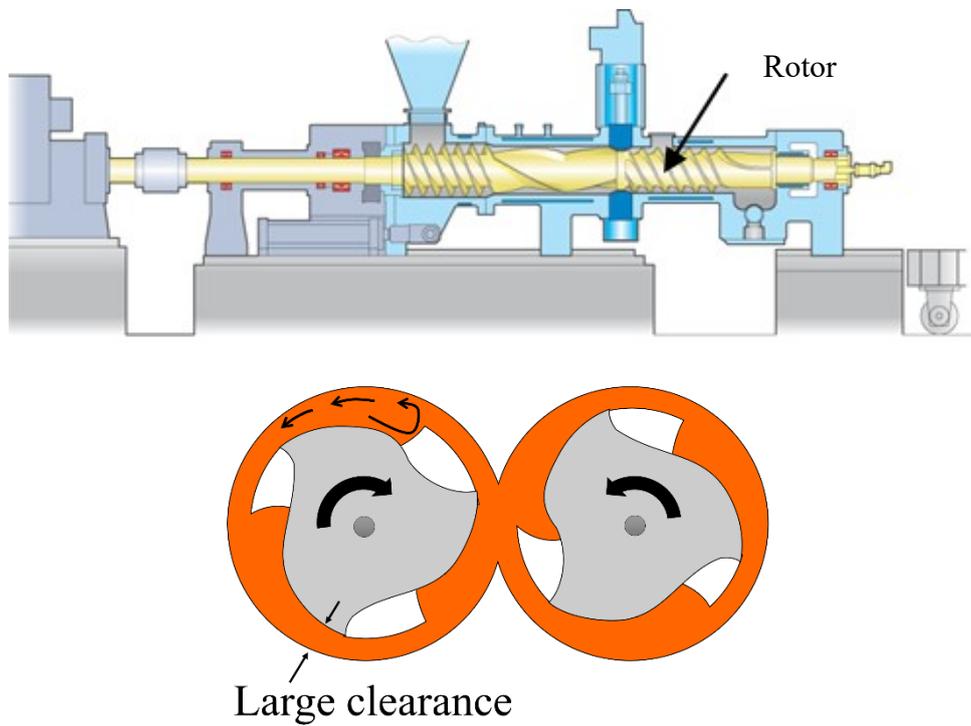


Fig. 4-2 Axial cross-sectional view and perpendicular cross-sectional view to screw axis for counter-rotating continuous mixer, LCM-100H.

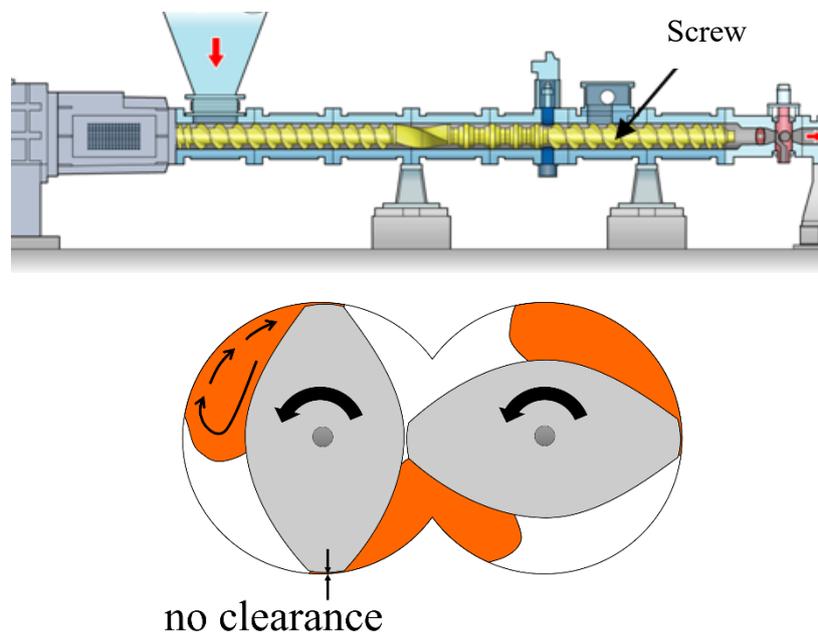


Fig. 4-3 Axial cross-sectional view and perpendicular cross-sectional view to screw axis for co-rotating twin screw extruder, KTX-30.

第4章 連続混練機内部の混練状態の評価

LCM-100H は、Fig. 4-2 に示すように、ロータとチャンバーの間に比較的大きなクリアランスが存在しており、このチップ先端のクリアランスを流れる際、およびその周囲を流動する際に樹脂材料にせん断力が作用する。KTX はチップ先端のクリアランスがほとんど存在せず、Fig. 4-3 に示すようにチップ手前の流動に加え、2つの軸間の相互作用により樹脂にせん断力が作用する。

4.2.3. 運転条件

LCM-100H および KTX-30 を用いて、種々の運転条件で混練実験を行った。運転条件を Table 4-2 に示す。本条件は、40-55 t/h 程度の HDPE 生産プラントを想定し、LCM-100H と KTX-30 にスケールダウンした条件である。

Table 4-2 Operating conditions of mixing experiment using LCM-100H and KTX-30.

	Rotation speed (min⁻¹)	Production rate (kg/h)
LCM-100H	330-460	320-450
KTX-30	170-380	25-35

4.2.4. 混練評価方法

本実験の混練状態を評価する指標として高分子ゲルの存在量を用いる。高分子ゲルは低分子量成分中に高分子量成分の塊として存在しており、カーボンブラックと共に混練した場合に、高分子ゲルの領域は着色されず白く残る。この着色されていない領域を White Spot と呼び、材料の観察断面中に存在する White Spot の専有面積比 (White Spot Area Percentage, WSA [%]) によって評価することとした。

WSA 評価サンプルは機械の出口で採取された黒色ペレットを用い、マイクロームでスライスしたフィルムの断面を観察した。Fig. 4-4 は光学顕微鏡で観察したフィルム断面画像の一例であり、画像中の白い領域が高分子ゲル領域 (White Spot) である。これらの断面画像から無作為に選んだ 12 枚の画像解析から、White Spot の平均面積を算出し、観察面積に対する White Spot の大きさによって WSA を算出した。

なお、本計測では、ISO18553-2002, JISK6812 で規定されるマイクローム方法によって作成されたフィルムを観察しており、JISK6774:2013 6.10 カーボンブラック分散試験に則った観察を行っている。

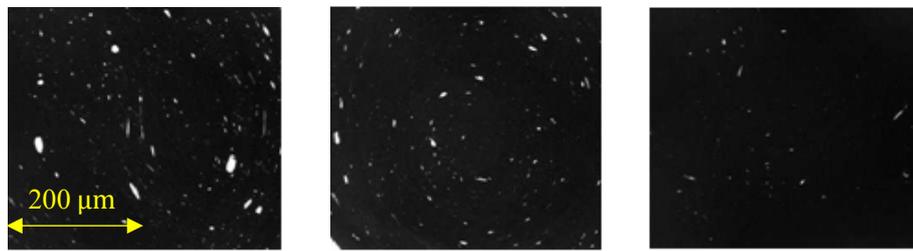


Fig. 4-4 Examples of microscope photos of white spot. White areas in these photos are “White spot”.

4.2.5. 実験結果

Fig. 4-5 は、異方向連続混練機 LCM-100H と完全嚙合同方向二軸押出機 KTX-30 の比投入エネルギー（Specific Energy Input, SEI [kWh/kg]）に対する WSA の結果を示している。どちらの機種も、定性的には SEI が大きくなるほど WSA が小さくなっていることが分かる。同じ SEI で比較した場合、KTX-30 に比べ LCM-100H はより低い WSA を達成できたことが分かる。SEI の増加に対する WSA の減少率については、KTX よりも LCM のほうが大きい。また、LCM は同じ SEI でも WSA の数値が大きく変化しており、運転条件が WSA に与える影響が大きいことがわかる。

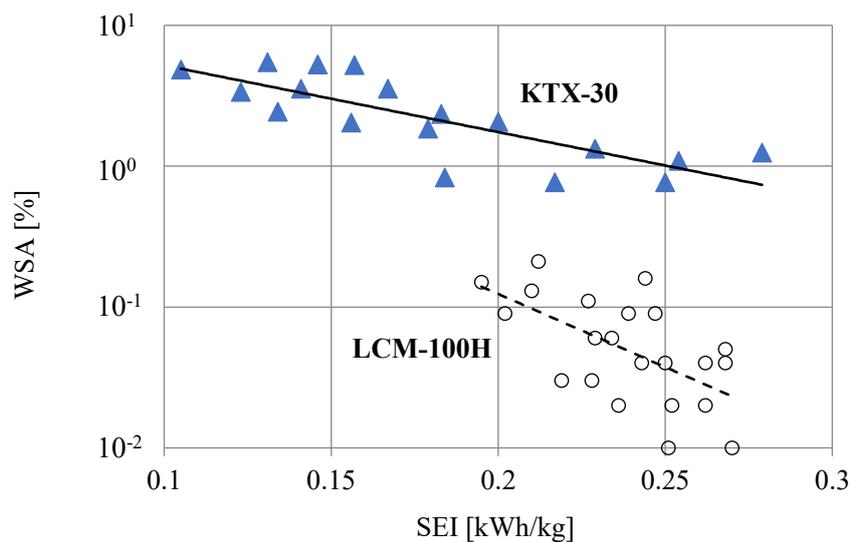


Fig. 4-5 Effect of specific energy input on white spot area of LCM-100H and KTX-30.

4.3. 数値解析による混練挙動の解釈

WSA の減少挙動, すなわちゲルの分散挙動については種々の研究がなされており, 分散の支配因子は明確になっていない. 本節では, 前節までに示した実験結果を数値解析結果と比較し, 相関する混練指標から分散の支配因子について検討する.

4.3.1. 解析手法

本章で用いた解析手法は, 第2章に示した EFGM に基づいた解析手法を用いている.

4.3.2. 解析条件

4.2.5 節で示した混練実験結果から, 各機種種の混練状態と流動状態の関係性を把握するために, 溶融混練部周辺の流動について調べた. Fig. 4-5 に示した結果は, 種々のロータ形状や運転条件の結果を示している. その中からそれぞれ機種種で WSA が大きい条件, 小さい条件を選び, Fig. 4-6 中に赤丸で示した次の4ケースを選択した.

- ・ LCM-FF : LCM-100H, 送りのねじり角度のみ, 高 WSA ケース
- ・ LCM-FB : LCM-100H, 送りと戻しの比率が 1:1, 低 WSA ケース
- ・ KTX-short : KTX-30, 送り・中立・戻しセグメントが各1つずつ, 高 WSA ケース
- ・ KTX-long : KTX-30, 送り・中立・戻しセグメントが各2つずつ, 低 WSA ケース

それぞれの解析モデルを Fig. 4-7, Fig. 4-8 に示す. LCM-FF と LCM-FB は, LCM-100H の溶融混練部を取り出したモデルで, 上流側に同一の送りスクリュを有しており, ロータ部については断面形状, 長さが同一で, ロータのねじり角のみが異なる. KTX-short と KTX-long は, KTX-30 の混練セグメントの一部であり, 上流側に同一の長さのスクリュを有している. このスクリュ形状は LCM のものと異なる. ニーディングディスク (KD) 部は, 同一の断面形状と軸方向幅の KD を複数枚持つ. KTX-short は上流側から送り, 中立, 戻しの方向にずらされた KD が5枚ずつ, KTX-long はそれぞれ10枚ずつ配置されており, KTX-long の KD 部軸方向長さは KTX-short の2倍となる. 各部寸法, 操作条件, 境界条件, 樹脂物性をそれぞれ Table 4-3, 4-4, 4-5, 4-6 に示す. 本解析は等温・ニュートン粘性で実施した.

初期の計算点間隔は LCM-FF と LCM-FB は 3.0 mm, KTX-short と KTX-long では 0.7 mm とし, 第2章で示した計算点の再配置により初期の計算点間隔が維持されるようにした. 時間刻みは1ステップ当たりのロータの回転角度が1度になるようにそれぞれの回転速度に応じて決定し, LCM-FF, LCM-FB では $\Delta t = 3.788 \times 10^{-4}$ s とし, KTX-short, KTX-long では $\Delta t = 6.173 \times 10^{-4}$ s とした.

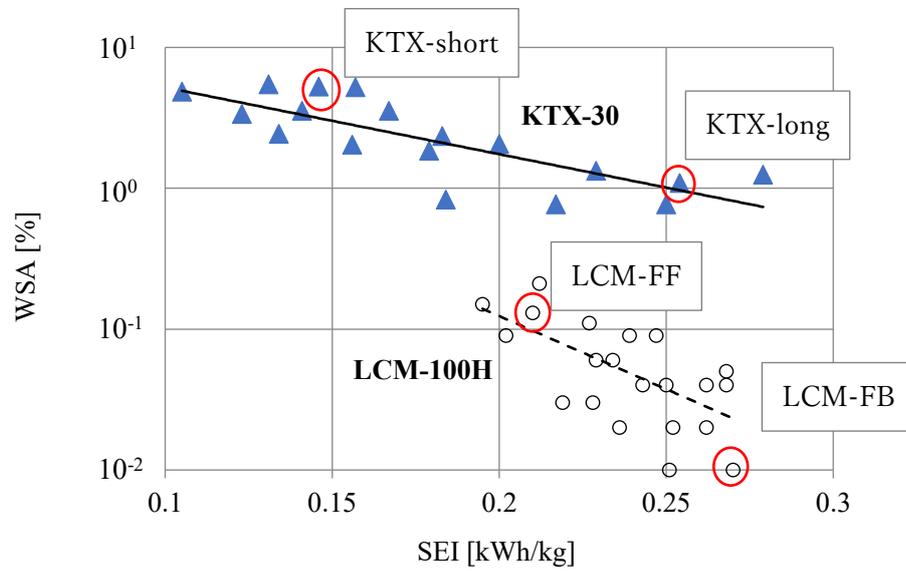


Fig. 4-6 Calculation conditions for mixing evaluation selected from the experimental results of LCM-100H and KTX-30.

Table 4-3 Dimensions of the models in the numerical analyses.

	Nominal Barrel diameter (mm)	Mixing zone length (mm)	Barrel length (mm)
LCM-FF, FB	100	144	254
KTX-short	30	84	120
KTX-long	30	168	204

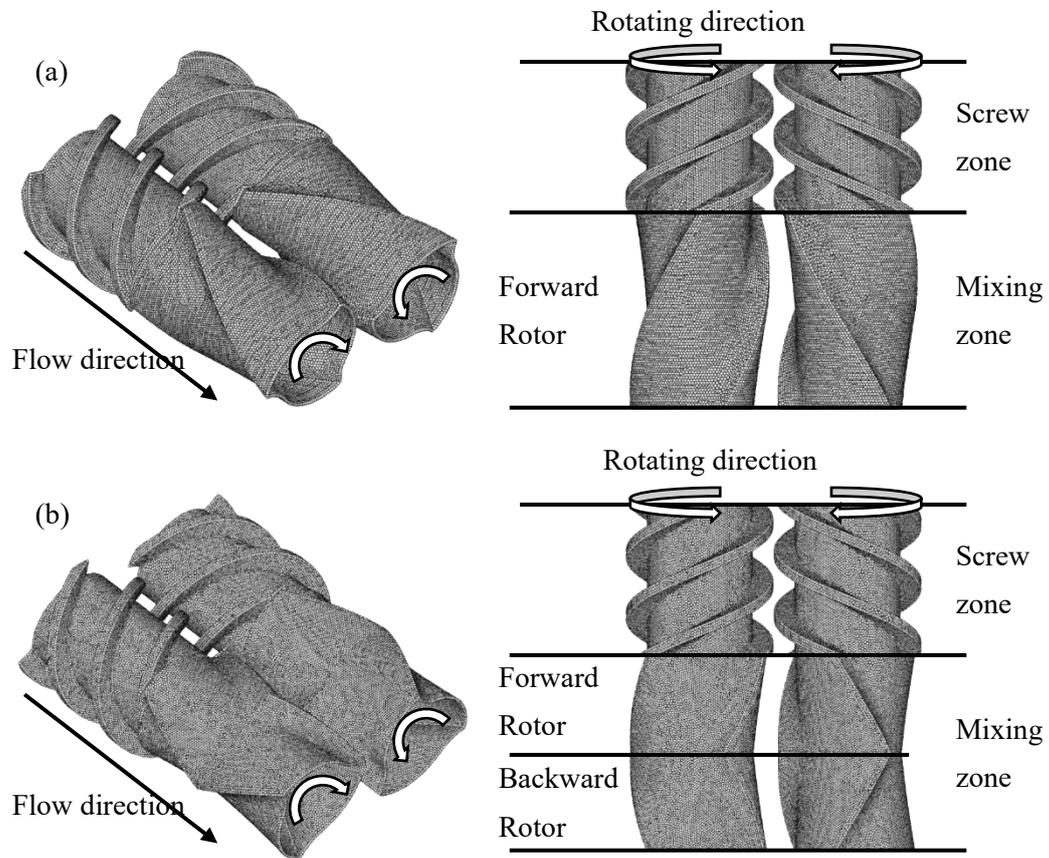


Fig. 4-7 Computational Domain of LCM-FF (a) and LCM-FB (b).

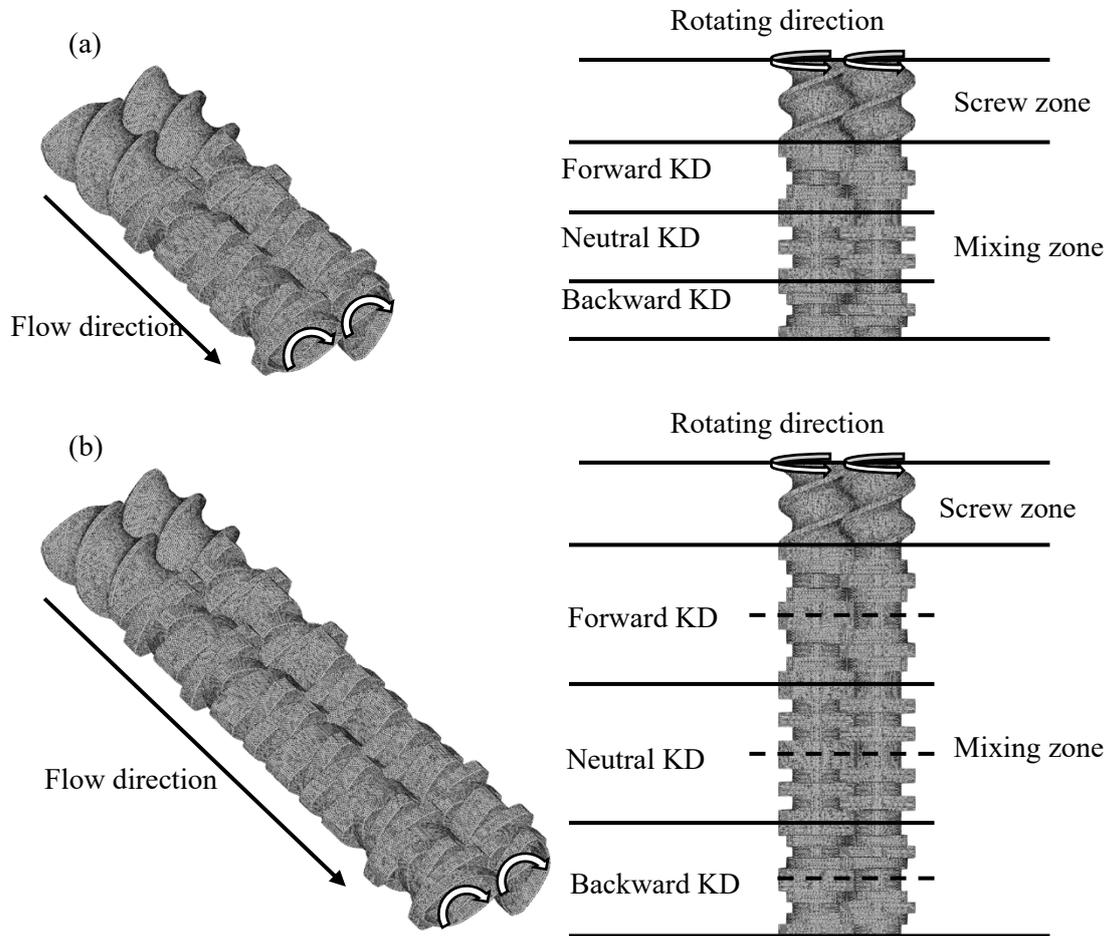


Fig. 4-8 Computational Domain of KTX-short (a) and KTX-long (b).

Table 4-4 Operating Conditions in the numerical analyses.

	Rotation speed (min⁻¹)	Production rate (kg/h)
LCM-FF, FB	440.0	398.3
KTX-short, long	270.0	26.0

Table 4-5 Flow Boundary Conditions in the numerical analyses.

Barrel inner surface	No slip
Rotor surface	No slip
Outlet cross section	Outflow

Table 4-6 Fluid Properties in the numerical analyses.

	Newtonian viscosity (Pa·s)	Density (kg/m³)
LCM-FF, FB	500	750
KTX-short, long	500	750

4.3.3. 評価指標

樹脂混練機内部での混合には 2 つのモードがあることはよく知られている[3]。一つは分配混合であり、もう一つは分散混合である。これらの混合モードのイメージを Fig. 4-9 に示す。分配混合は、第一成分相に凝集した第二成分相が、混合流動の影響により全体に拡散する挙動である。一方、分散混合は、第一成分相に存在する第二成分相の塊が、せん断応力等の影響により小さく分裂（分散）する挙動である。本章で扱う高分子ゲルは低粘性流体中に存在する高粘度流体の塊と考えられることから、分散混合に着目する。分散混合の挙動については、Manas-Zloczower ら[4, 5]によって、Fig. 4-10 に示すような液体中の液滴の分散挙動にはせん断応力の大きさが重要であると報告されている。また、Yang ら[6]によっても、せん断応力の大きさがゲル分散に重要であることが示されている。さらに、分散混合には滞留時間が重要であることが報告されている[7-10]。以上のことから、混練中の「応力（せん断応力）」と「滞留時間」に着目して評価を行った。

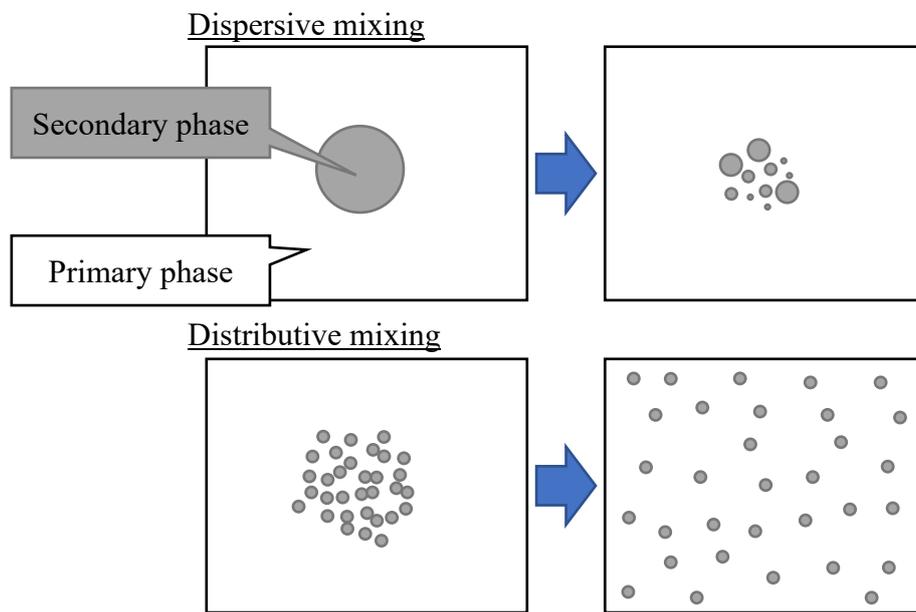


Fig. 4-9 Image of dispersive and distributive mixing modes.

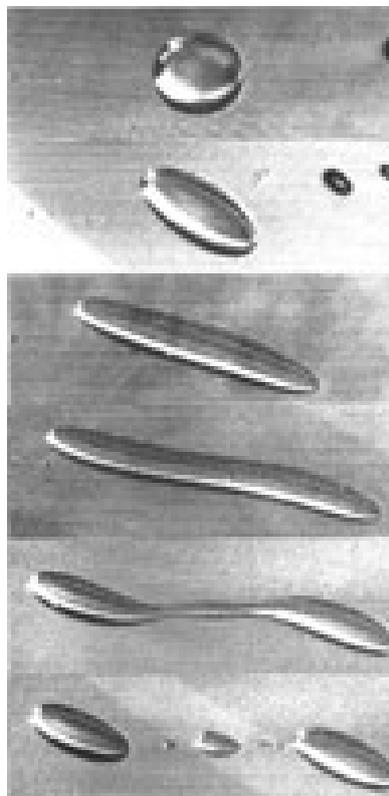


Fig. 4-10 Picture of gel dispersion of liquid-liquid system. The cluster in center is high viscosity fluid. The matrix is low viscosity fluid[5].

4.3.4. 数値解析の結果

数値解析により得られた LCM-FF, LCM-FB の充填状態を Fig. 4-11 に, KTX-short, KTX-long の充填状態を Fig. 4-12 に示す. Fig. 4-11(a)は LCM-FF, Fig. 4-11(b)は LCM-FB の結果であり, Fig. 4-12(a)は KTX-short, Fig. 4-12(b)は KTX-long の結果である. 図中に示す色はせん断応力 σ の値を示しており, せん断速度テンソル $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$, 粘度 μ を用いて次式で表される.

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}:\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} \quad (4-1)$$

$$\sigma = \mu\dot{\gamma} \quad (4-2)$$

Fig. 4-11, Fig. 4-12 のせん断応力は流体属性の計算点のみに示しており, 境界近傍の応力状態は表示していない. それぞれの形状に対する流動状態の特徴は, 前章と同様に, 送りのみの LCM-FF の場合, 樹脂はロータの先端付近のみに存在しており, 送り-戻しの LCM-FB では混練部中央での充填率が高くなる. LCM-FB は戻しの効果により, LCM-FF に比べ混練部全体での樹脂充填率が高いことが分かる. 一方, KTX の場合は, 中立セグメント領域が樹脂でほぼ完全に充填していることがわかる. Kim ら[11]や White ら[12, 13]は, 戻しのねじり角を持つスクリュの上流側に送りのスクリュが存在する場合, 戻しスクリュは完全に樹脂で充填すると述べており, 戻しスクリュと送りスクリュに挟まれた中立セグメントが完全に充填するという点で, この結果に一致する. しかし, 特に KTX-long では, 戻し KD セグメント全体では充填していない. これは, Kim らの検討では, 戻しスクリュの下流側のセグメントも解析領域に含まれていることに対し, 本解析では戻し KD セグメント下流側は自由流出境界としており, 計算点が消失する. したがって, 出口面近傍での樹脂が軸の回転によって逆流する挙動や滞留するような挙動が考慮されないため, 出口面近傍での流出が過大評価されているためと考えられる.

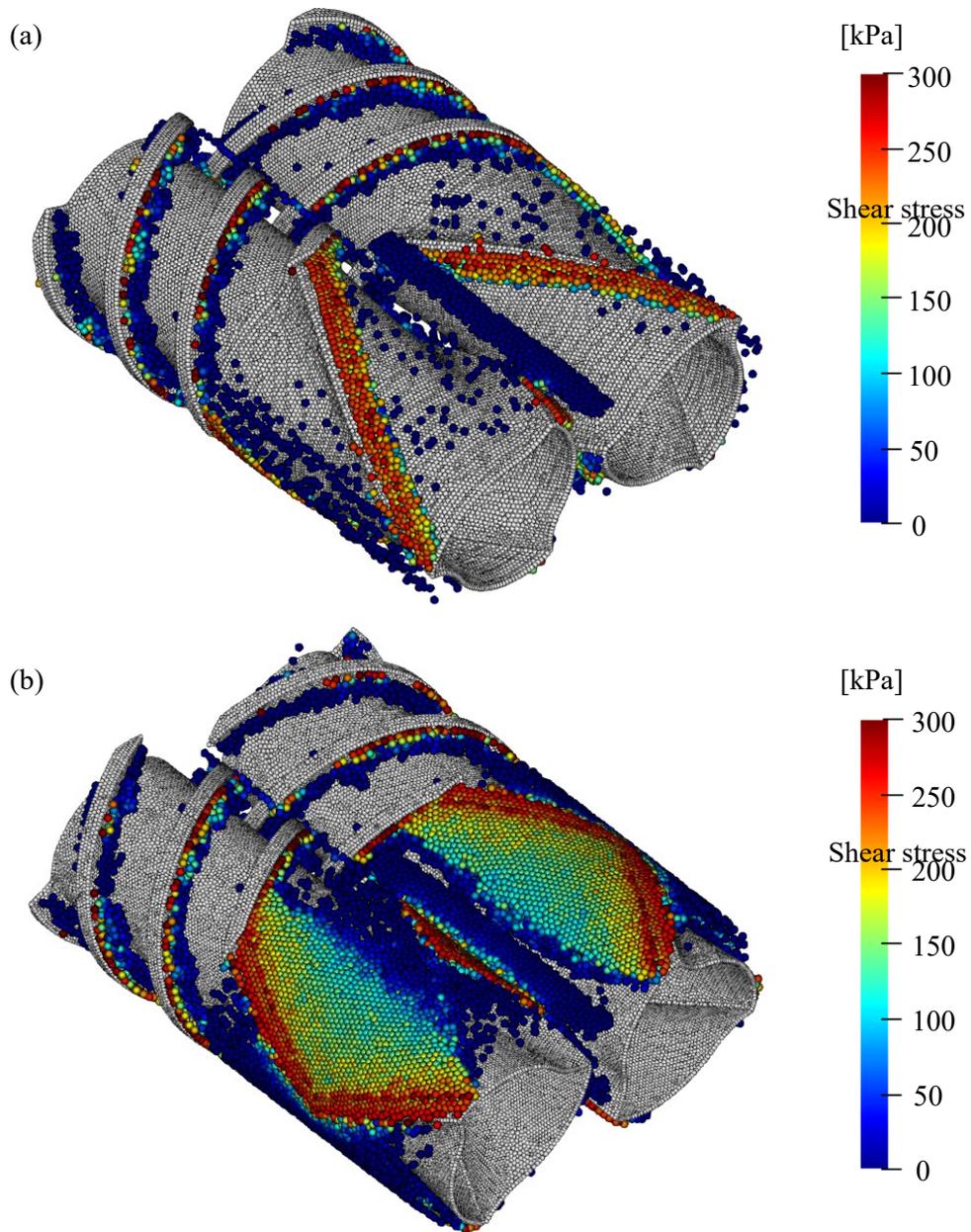


Fig. 4-11 Calculation results of filling state and shear stress distribution. These are the results of counter-rotating continuous mixer models for (a) LCM-FF and (b) LCM-FB.

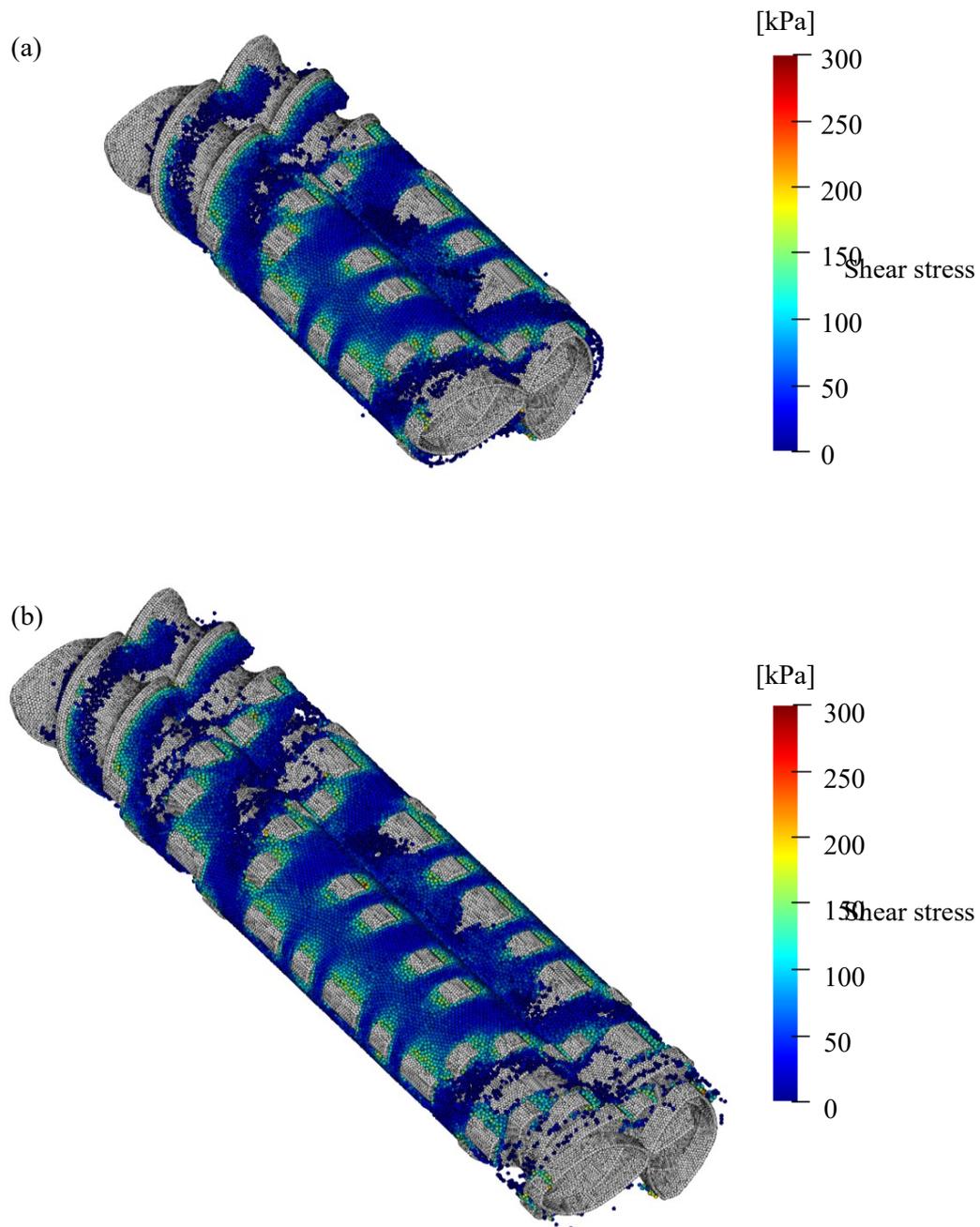


Fig. 4-12 Calculation results of filling state and shear stress distribution. These are the results of co-rotating twin screw extruder models for (a) KTX-short and (b) KTX-long.

Table 4-7 に各条件での混練部充満率, Fig. 4-13 に充満率から算出された平均滞留時間, Fig. 4-14 に各応力の体積分率を示す. 充満率, 平均滞留時間はそれぞれ, 混練部容積を V_f , 樹脂体積を V_r とした時に以下の式で算出した.

$$\text{混練部充満率 (Filling ratio of mixing zone)} : f = V_r/V_f \quad (4-3)$$

$$\text{平均滞留時間 (Average residence time)} : T_{\text{mix,ave}} = L_{\text{mix}}A/V \quad (4-4)$$

ここで, L_{mix} は Table 4-3 に示す混練部長さ, A は軸に対し垂直方向の流路断面積, V は樹脂の体積流量を示す.

Fig. 4-13 に示す平均滞留時間の結果から分かるように, 平均滞留時間は LCM-FF が最も小さく, 次いで LCM-FB, KTX-short の順であり, KTX-long が最も長いという結果になった. KTX-short に対して KTX-long は 2 倍の混練部長さを持つが, 滞留時間は約 1.7 倍である. これが 2 倍にならない理由としては, 前述のように出口近傍の戻し KD 領域で, 充満率が低下しているためである.

Table 4-7 Filling ratio of mixing zone and average residence time of each condition.

	LCM-FF	LCM-FB	KTX-short	KTX-long
Filling ratio (-)	24%	67%	88%	74%

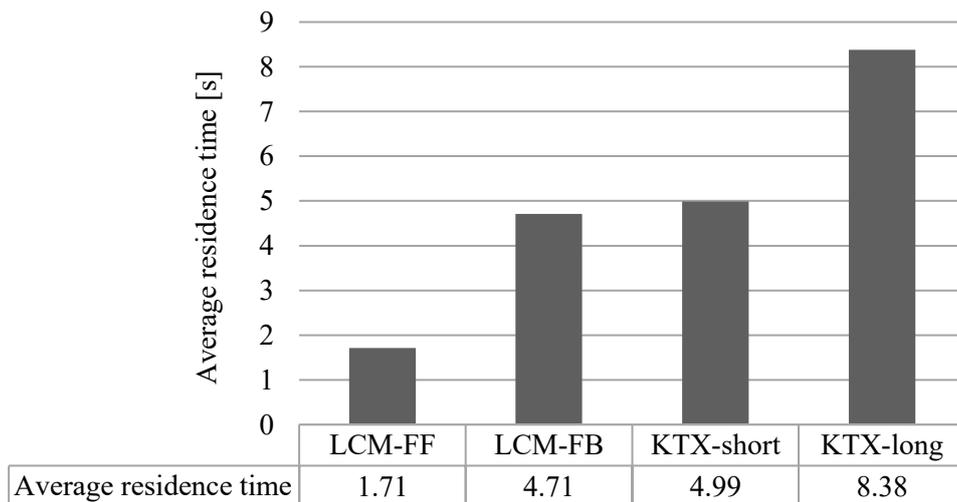


Fig. 4-13 Comparison of average residence time of each model.

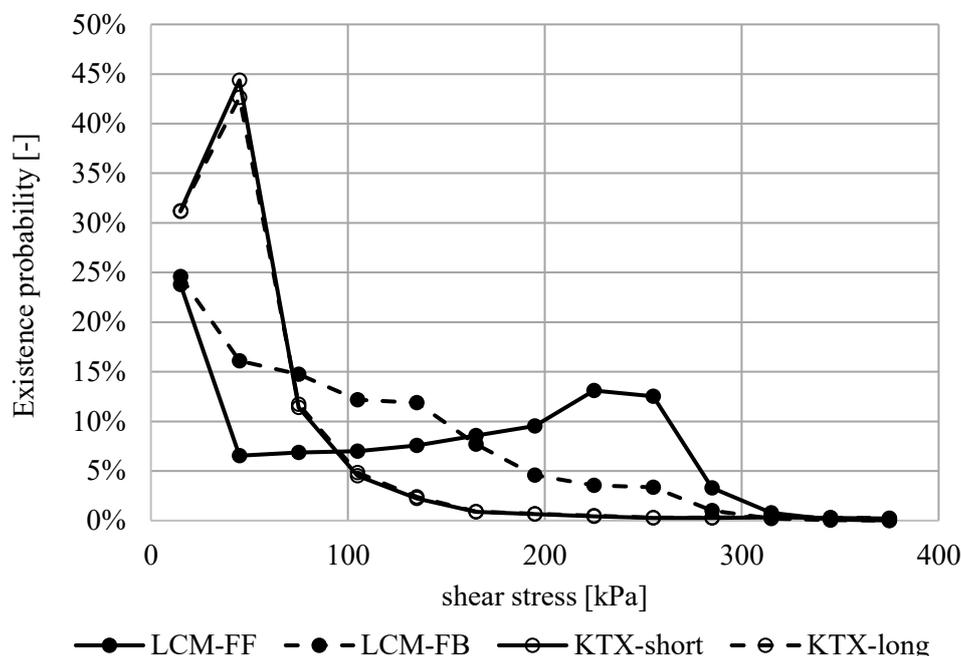


Fig. 4-14 Comparison of stress distributions of each model against shear stress.

Fig. 4-14 の応力分布から読み取れる各条件の特徴は以下の通りである。

LCM-FF については、100 kPa 以下の応力が小さい範囲の体積分率が小さく 160 kPa 以上の応力が大きい範囲の体積分率が大きい。これは Fig. 4-11 で示されるように、LCM-FF は全体の充填率が低く、チップ近傍にしか樹脂が存在しないため、せん断速度が大きい領域が相対的に多いためである。本解析でのチップクリアランス部の平均せん断応力は約 260 kPa であり、体積分率の大きい領域と一致する。

LCM-FB については、200 kPa 以上の応力の領域の体積分率が少なく、150 kPa 以下の領域の体積分率が大きい。これは Fig. 4-11 で示されるように、LCM-FB は全体の充填率が高く、チップからの距離に応じて徐々に応力が小さくなっていることが分かる。これは、ロータ壁面とバレル壁面の距離が離れてくることに起因しており、応力が小さいほど壁面間の距離が大きくその体積が増加するため、Fig. 4-14 のような応力分布になると考えられる。

KTX-short および KTX-long については、この 2 つの応力分布が一致するという結果が得られた。すなわち、KD 部の長さを変化した場合でも、各セグメントにおいては同様の応力分布になっていると分かる。KD の場合、チップクリアランス部に比べ、それ以外の部分でのロータとバレルの間の距離は大きく、またその距離の変化率も LCM に比べ小さい。したがって、KTX-short および KTX-long では、60 kPa 以下の体積分率が高く、200 kPa を超える領域がほぼ存在しない。KTX でのチップクリアランスでの平均せん断応力は 840 kPa 程度

であるが、隙間の体積が大きくないため、応力分布とした場合には、わずかに存在する程度となることが分かる。

4.4. 混練指標の検討

前節までに、各条件の応力分布と平均滞留時間を算出した。本節ではそれらと混練状態の相関を確認し、WSAの値を適切に予測できる混練指標の検討を行う。

4.4.1. せん断応力と混練指標の関係

一般に、混練指標としてせん断応力が用いられることが多いことを4.3.3節で示した。ただし、せん断応力はFig. 4-14で示したように連続的に分布するため、混練機全体での代表化が必要となる。本節では、Yangら[6]の文献を参考に、平均せん断応力と最大せん断応力に着目し、Fig. 4-6に示したWSAとの比較を行った。

Fig. 4-15は各形状の混練部における平均せん断応力を示す。Fig. 4-16は各形状の平均せん断応力とWSAの実験結果との相関を示す。Fig. 4-15から平均せん断応力が最も大きいのはLCM-FFであることが分かる。これはFig. 4-11が示すように、LCM-FFは充填率が低く、チップ周辺にしか樹脂が存在しておらず、せん断応力が高い樹脂しか存在していないためである。また、LCM形状に比べKTX形状は平均せん断応力の値が小さい結果が得られた。これは、Fig. 4-11、Fig. 4-12が示すように、LCMはチップ先端およびその周囲にせん断応力が200kPa以上の領域が広く分布しているのに対し、KTXはチップから離れるとせん断応力の値が急激に小さくなっていることが分かる。このため、KTXは高せん断応力の占める割合が小さく、平均値としては小さくなると考えられる。WSAと平均せん断応力の相関については、Fig. 4-16が示すように、LCMとKTXを比較すると大まかには逆相関の関係があるが、LCM-FFが大きく乖離しており、WSAを予測する混練指標としては不十分であることがわかる。

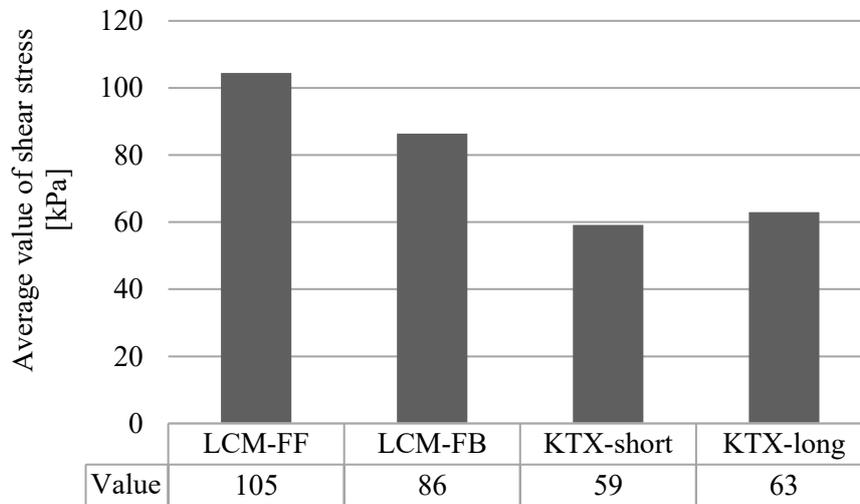


Fig. 4-15 Comparison of average value of shear stress of each model.

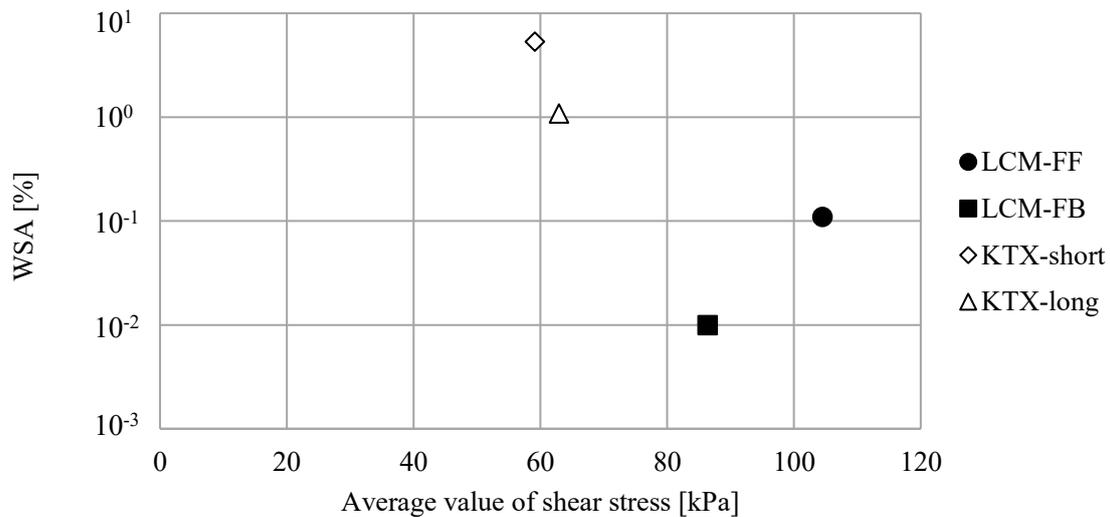


Fig. 4-16 Correlation between WSA and average value of shear stress.

Fig. 4-17 は各形状の混練部の最大せん断応力を示す。Fig. 4-18 は各形状の混練部の最大せん断応力と WSA の実験結果との相関を示す。Fig. 4-17 から最大せん断応力は KTX 形状が大きく LCM 形状が小さくなるということが分かる。本モデルにおける最大せん断応力はチップクリアランス部であるため、チップクリアランスの大きい LCM の最大せん断応力の値が小さく、チップクリアランスの小さい KTX では大きくなっているためである。WSA と

の相関については、Fig. 4-18 が示すように、LCM と KTX を比較すると大まかには順相関の関係であることがわかるが、LCM-FF と LCM-FB、KTX-short と KTX-long の差異は再現できておらず、こちらも混練指標としては不十分であることが分かる。

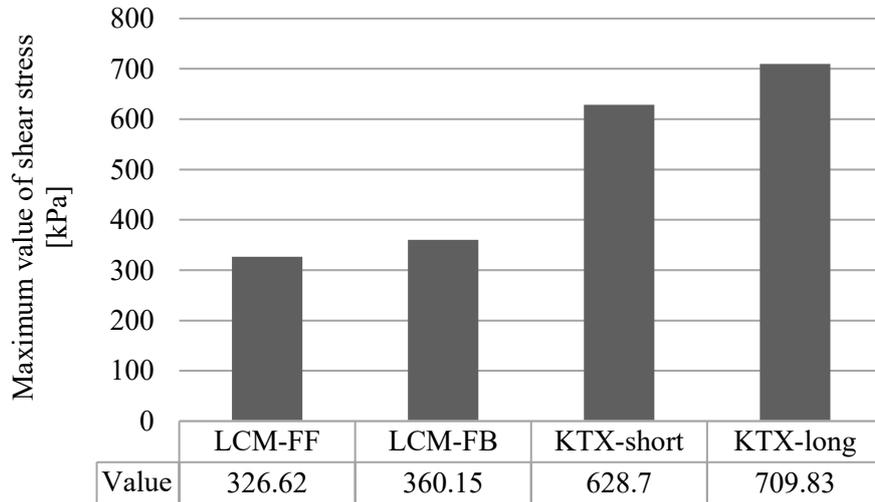


Fig. 4-17 Comparison of maximum value of shear stress of each model.

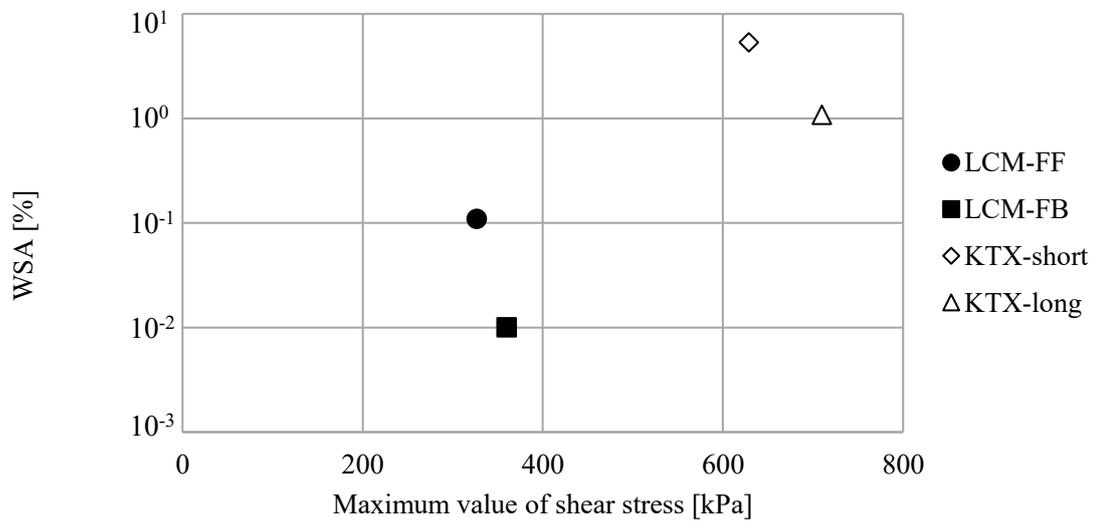


Fig. 4-18 Correlation between WSA and maximum value of shear stress.

4.4.2. 平均滞留時間と混練指標の関係

次に、平均滞留時間と Fig. 4-6 に示した WSA との比較を行った。平均滞留時間は 4.3.4 節の Fig. 4-13 に示した。Fig. 4-19 に各形状の平均滞留時間と WSA の実験結果との相関を示す。LCM 形状と KTX 形状を比較すると、大まかには順相関の関係があることが分かるが、各形状の差異は再現できておらず、平均滞留時間は混練指標として不十分であることが分かる。

それぞれのモデルが完全充満とした場合、平均滞留時間は流量から算出することができる。Fig. 4-20 に完全充満とした時の平均滞留時間と WSA の相関を示す。こちらも相関はなく、充満率の考慮の有無に関わらず、平均滞留時間は混練指標として不十分であることがわかる。

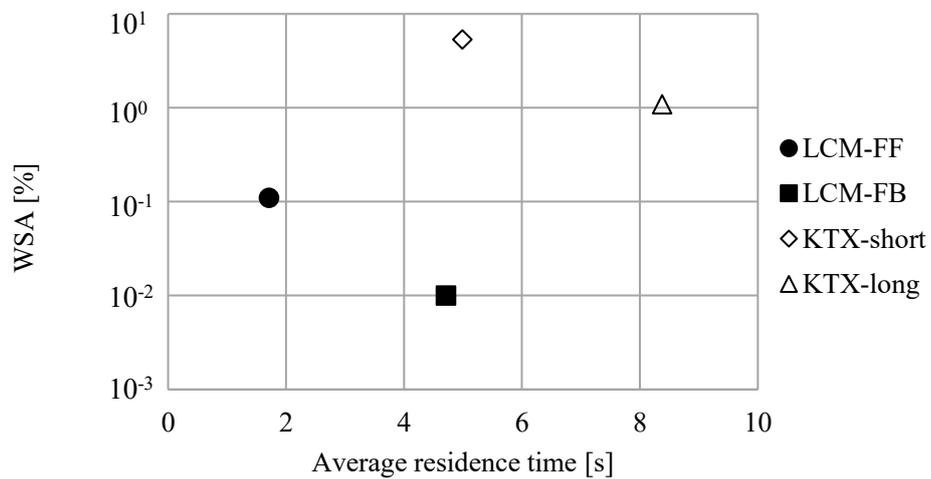


Fig. 4-19 Correlation between WSA and average residence time of each model.

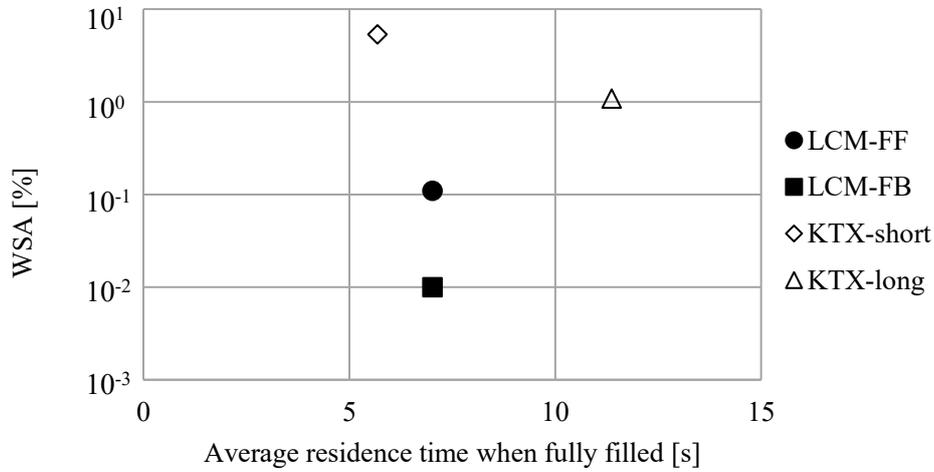


Fig. 4-20 Correlation between WSA and average residence time when the space inside mixer is fully filled.

4.4.3. 応力と平均滞留時間を組み合わせた指標と混練指標の関係

前節までに、一般的な混練指標である平均せん断応力や最大せん断応力、平均滞留時間では WSA の予測ができないことを示した。本節では、新たな混練指標として両者を組み合わせることを試みる。ここでは、White spot の分散に影響を与える応力にはしきい値が存在すると考え、特定のしきい値以上の応力が加わっている時間だけが White spot の分散に有効であると考えた。そこで、以下の式で計算される有効滞留時間 T_e を提案する。

$$T_e = T_{\text{mix,ave}} P_{\text{th}} \quad (4-5)$$

ここで、 P_{th} は混練部に存在する樹脂体積に対するせん断応力がしきい値を超える樹脂体積の割合である。 T_e が大きくなるほど、White spot の分散能力が高いと考える。White spot が分散するしきい値を実験的に明らかにすることは困難であるため、しきい値応力を変化させ、有効滞留時間 T_e と WSA の実験結果が相関を確認した。

Fig. 4-21 は、90 kPa から 210 kPa までしきい値応力を変化させた有効滞留時間 T_e と WSA の実験結果の相関を示す図である。Fig. 4-21 から、しきい値が 140-150 kPa の場合、 T_e と WSA が相関することが分かる。このことから、White spot の分散には、一定の応力（本研究では 140 kPa 以上）を長時間加えることが重要であることが分かる。

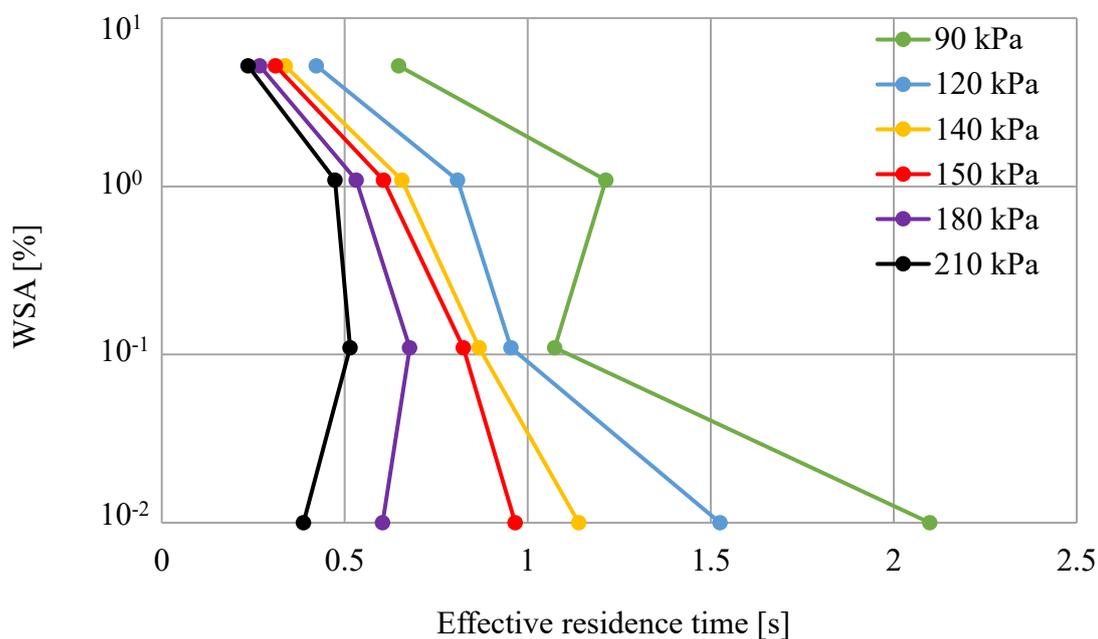


Fig. 4-21 Comparison of effective residence time for different threshold stresses.

KTX 形状の滞留時間は長く、最大せん断応力が大きいですが、チップクリアランスが小さいためその専有体積が小さく、チップクリアランス以外のせん断応力の小さい領域に滞留する時間が長いため、White spot の分散に寄与できる時間が短いと考えられる。一方、LCM 形状の滞留時間は KTX 形状に比べ短く、最大せん断応力も小さいが、チップクリアランスが大きく、その周辺でもしきい値応力以上となっている領域が大きいため、White spot の分散に寄与する時間が長いと考えられる。

以上のことから、LCM 形状は KTX 形状に比べ、必要なせん断応力を長時間与えることが可能となり、White spot の分散能力が高くなっていると考えられる。特に、送り戻し形状の LCM-FB はしきい値以上のせん断応力を比較的長時間得ることができるという点で、本研究で評価した形状の中で最も分散能力の高い形状となった。

4.5. 結言

本章では、Bi-modal HDPE を対象とした異方向回転連続混練機 LCM と同方向回転二軸押出機 KTX を用いた混練実験を行い、カーボンブラックで着色されていない領域である White spot の分散性能について評価を行った。LCM と KTX を用いた混練実験結果から、LCM は KTX に比べ Bi-modal HDPE の比消費エネルギーに対する分散性能が優れていることがわか

った。また、部分充満を考慮した数値解析により、分散性能と相関する混練指標について検討した結果、一般的な指標である平均せん断応力や最大せん断応力、平均滞留時間では実験結果を説明することができないことがわかった。相関する混練指標の検討の結果、White spotの分散には必要なせん断応力のしきい値が存在しており、そのしきい値以下では分散が進行しないと考えることができ、しきい値応力以上の滞留時間をあらたな混練指標である“有効滞留時間”として提案した。チップクリアランスの大きい LCM は、チップクリアランス部およびその周辺の広い範囲で White spot の分散に必要なしきい値以上のせん断応力を得ることができ、特に順送りと逆送りを組み合わせた LCM-FB は比較的長い滞留時間を有することから、高い分散性能が得られることがわかった。順送りのみの LCM-FF は、しきい値を超える割合は大きいものの、充満率が低く滞留時間が短いため、LCM-FB よりも分散能力が低い。一方、KTX は、しきい値を超えない領域が多く、混練部に滞留時間は相対的に長い、White spot の分散に寄与する時間が短いことがわかった。以上のように、部分充満状態を考慮することが可能となることで、充満率の変化による分散性能を定量的に評価することが可能であることがわかった。

より定量的な WSA 予測のためには、せん断応力の定量的な評価が必要であり、今後はせん断応力に影響を与える非等温条件や壁面すべりを考慮した条件での解析が必要であると考えられる。

参考文献

1. S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. **59**(2).
2. 宝谷 晋, 黒田 好則, *ポリオレフィン用連続混練機及び二軸押出機 (特集 産業機械)*. R&D 神戸製鋼技報, 2008. **58**(2): pp. 74-80.
3. K. Kohlgrüber, *Co-Rotating Twin-Screw Extruders*, in *Co-Rotating Twin-Screw Extruder*, Klemens Kohlgrüber, Editor. 2008, Hanser. pp. I-XIII.
4. I. Manas-Zloczower, *Mixing and Compounding of Polymers*, in *Mixing (Second Edition)*, Ica Manas-Zloczower, Editor. 2009, Hanser. pp. I-XXIV.
5. I. Manas-Zloczower, A. Nir, and Z. Tadmor, *Dispersive Mixing in Rubber and Plastics*. Rubber Chemistry and Technology, 1984. **57**(3): pp. 583-620.
6. H.-H. Yang and I. Manas-Zloczower, *Flow Field Analysis of the Kneading Disc Region in a Co-Rotating Twin Screw Extruder*. Polymer Engineering & Science, 1992. **32**(19): pp. 1411-1417.
7. D. Todd, *Residence Time Distribution in Twin-Screw Extruders*. Polymer Engineering & Science, 1975. **15**(6): pp. 437-443.
8. J. Gao, G. C. Walsh, D. Bigio, R. M. Briber, and M. D. Wetzel, *Residence-Time Distribution Model*

- for Twin-Screw Extruders*. AIChE Journal, 1999. **45**(12): pp. 2541-2549.
9. J.-P. Puaux, G. Bozga, and A. Ainsler, *Residence Time Distribution in a Corotating Twin-Screw Extruder*. Chemical Engineering Science, 2000. **55**(9): pp. 1641-1651.
 10. X. M. Zhang, L. F. Feng, S. Hoppe, and G. H. Hu, *Local Residence Time, Residence Revolution, and Residence Volume Distributions in Twin-Screw Extruders*. Polymer Engineering & Science, 2008. **48**(1): pp. 19-28.
 11. P. J. Kim and J. White, *Flow Visualization and Residence Time Distributions in a Modular Co-Rotating Twin Screw Extruder*. International Polymer Processing, 1994. **9**(2): pp. 108-118.
 12. J. White, J. Keum, H. Jung, K. Ban, and S. Bumm, *Corotating Twin-Screw Extrusion Reactive Extrusion-Devolatilization Model and Software*. Polymer-Plastics Technology and Engineering, 2006. **45**(4): pp. 539-548.
 13. J. White and Z. Chen, *Simulation of Non-Isothermal Flow in Modular Co-Rotating Twin Screw Extrusion*. Polymer Engineering and Science, 1994. **34**(3): pp. 229.

第 5 章

連続体近似の構成則による可塑化 現象の数値解析

5.1. 緒言

第1章で示したように、混練機は主に可塑化混練部と熔融混練部に大別され、混練される樹脂材料はパウダーやペレットの状態でも可塑化混練部に投入される[1]。可塑化混練部での熔融状態は、混練機の機械負荷や、熔融混練部での混練挙動に影響を与えることから、熔融状態を把握することは混練機設計において重要な要素である。

可塑化混練部内部での樹脂の挙動については、単軸押出機を中心に実験による観察結果をベースにしたモデル化が発展している[2, 3]。しかし、二軸押出機や連続混練機では同様にモデル化に関する検討が進められているものの、未だ発展途上である[4, 5]。

そこで近年では、数値解析による直接的な可塑化挙動の予測にも取り組まれており、Tripeら[6]は Discrete Element Method (DEM) を用いた検討により、ペレット形状が異なる場合の混練軸への負荷や温度変化の違いについて検討を行っている。しかし、一般的には DEM の計算負荷は高いことが知られており、特にパウダーやペレットの形状や接触状態の考慮方法[7]、複数の粒状体を1つの計算点として扱う粗視化[8]などに課題が存在している。

可塑化挙動の予測方法として、固体を高粘度物体として扱い、可塑化時の固体から液体への相変化を構成則として表現する方法も存在する。Altinkaynakら[9]は ABS 樹脂の可塑化挙動を固体から液体への粘度変化として表現し、単軸押出機内の可塑化挙動を連続体の運動方程式を用いた三次元 Finite Element Method (FEM) によって解析することで、壁面温度や材料粘度、流量などの影響について検討している。このように、可塑化挙動を材料の構成則として表現する場合、固体と液体の状態を同じ連続体の運動方程式で扱うことが可能であり、計算上の複雑な処理を要しないメリットがある。

そこで本章では、パウダーやペレット状の固体樹脂材料を連続体として捉え、構成則によって固体の変形挙動および液体の流動挙動を再現する方法について検討を行う。

5.2. 固相および固液二相流の連続体構成則

可塑化混練部において、樹脂材料の可塑化は壁面からの伝熱およびせん断発熱によって進展する。可塑化の初期段階では、固体樹脂の一部が熔融することで部分的な固液二相流となり、その後、せん断発熱および液体樹脂からの熱伝導によって熔融部が拡大していく。

この固体樹脂から熔融していく過程における流動性の変化を連続体の構成則で表現する上で、一般的なパウダーレオメータによる粉体流動性の評価方法[10]やジェニケ法による圧縮化で変化する流動性の評価方法[11]を参考に、構成則の影響因子としてせん断速度、圧力、温度の3つを挙げ、その影響を以下のように考えた。

1) せん断速度による流動性の変化

熔融樹脂はせん断速度が大きくなることで粘度が低下する非ニュートン性を示すことが知られている。同様に、粉体や粒状体の流動性についても、せん断速度の影響を受けることが知られており、パウダーレオメータでは、せん断速度が大きくなることによる流動性の低下が計測される。固液二相流においても、固相と液相と同様の特性をもつことが予想されることから、本研究では、固相、固液二相、液相の全てでせん断速度依存性があるとした。

2) 圧力変化による流動性の変化

樹脂が粉体または粒状体の状態における流動性は、各固体粒子が固体粒子間の空隙を移動することで生じる。この移動の抵抗力として固体粒子間の摩擦が考えられ、固体粒子層の圧縮力（圧力）が大きくなると摩擦係数が大きくなり、移動させるために必要な力が大きくなる。すなわち、同じせん断速度における抵抗力が大きくなると考えられる。一方、固液二相、液相については非圧縮流体と考えることができ、圧力の影響を受けない。したがって、本研究では、固相についてのみ圧力依存性が存在するとした。

3) 温度変化による流動性の変化

温度変化による流動性変化は、固相から液相への相変化、および液相の粘度変化によって生じると考えられ、可塑化途中に生じる固液二相流では、液体単相の一般的な温度依存性とは異なる挙動を示すと考えられる。

樹脂の一部が溶融した固液二相状態では、固体間に高粘性の液体が流れ込んだ場合の影響を正確に把握することは難しい。固体粒子間の空隙に液体樹脂が流れ込み、固体粒子が空隙移動する抵抗となることが考えられる一方で、液体が潤滑の要素を果たし抵抗が小さくなる可能性も考えられる。また液体によって固体粒子間の付着力が大きくなることで、摩擦抵抗が大きくなるとも考えられる。したがって、流動性は材料によって様々な傾向を示すと考えられる。

以上の内容を Fig. 5-1 に温度に対するせん断応力の概念図として表した。図に示した関係を明らかにすることができれば、連続体近似した可塑化構成則が構築できる。

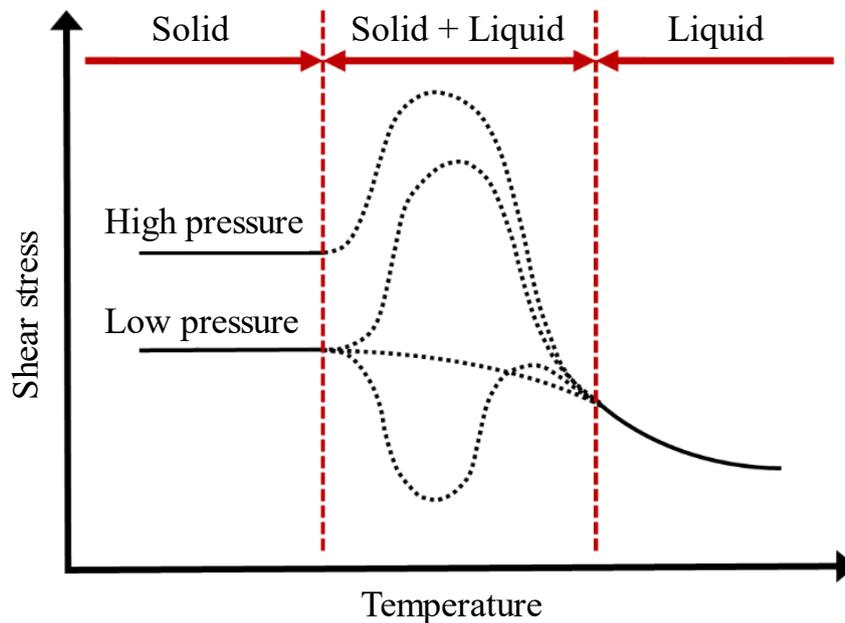


Fig. 5-1 Image of constitutive laws of continuum model.

5.3. 固相における構成則

前節に示したように、相状態によって構成則が異なると考えられる。そこで本節では、全体が固相である融点以下での構成則について検討を行う。

5.3.1. 実験手法と実験装置

固相における構成則を構築するために、樹脂材料を加圧可能な内筒が回転する共軸二重円筒装置による実験を行った。実験装置の外観図を Fig. 5-2 に示す。内筒（ロータ）外径は 40 mm、外筒（バレル）内径は 60 mm であり、10 mm のクリアランスを持つ。共軸二重円筒内部に室温の固体樹脂材料を投入した状態で内筒を回転させ、軸負荷から樹脂材料に加わるせん断応力の測定を行う。内筒の回転速度の違いによるせん断速度依存性の評価に加え、軸方向に設置された押し込み装置（Ram）により樹脂材料を加圧し、圧力依存性についても同時に評価を行う。圧力調整は Ram 上部に設置した複動型エアシリンダ(SMC 製 CS1FN200-150)で行う。

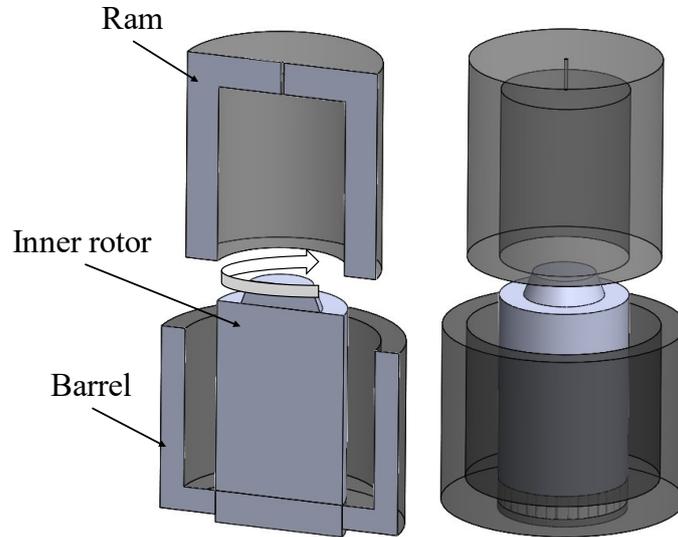


Fig. 5-2 Overview of the coaxial double cylinders for the torque measurement experiment.

せん断応力 τ は次式で表される.

$$\tau = \frac{2T_r}{DS} \quad (5-1)$$

ここで、 D はロータ直径、 T_r はロータにかかるトルク、 S は樹脂とロータの接触面積である.

さらに、固体粒子群としての運動のしにくさを表す値として k を定義し、運動抵抗率と呼ぶこととする. 単位は $[\text{Pa}\cdot\text{s}]$ であり液相の粘度と同じ次元を有する. 運動抵抗率 k はせん断速度 $\dot{\gamma}$ [1/s]とせん断応力 τ [Pa]の比として、次式で表すことができる.

$$k = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} = \frac{2T_r}{DS\dot{\gamma}} \quad (5-2)$$

なお、クリアランス全体でせん断速度 $\dot{\gamma}$ は一定と仮定することで、以下で定義される.

$$\dot{\gamma} = \frac{\pi DN}{60C} \quad (5-3)$$

ここで、 N は内筒の回転速度 $[\text{min}^{-1}]$ 、 C はクリアランスサイズ $[\text{m}]$ である.

5.3.2. 実験条件

本実験では Fig. 5-3 に示す溶融時の粘度特性をもつポリプロピレン (PP) ペレットを使用した。Eq.(5-4)の Carreau モデルでの近似式を以下に示す。

$$\eta = \frac{\eta_0 e^{-b(T-T_a)}}{[1 + (\beta\dot{\gamma})^2]^{\frac{1-n}{2}}} \quad (5-4)$$

ここで、 T は材料温度であり、本材料において各係数は $\eta_0 = 1256.9$ [Pa·s], $b = 0.0187$ [1/°C], $T_a = 210$ [°C], $\beta = 1.654$ [s], $n = 0.681$ である。

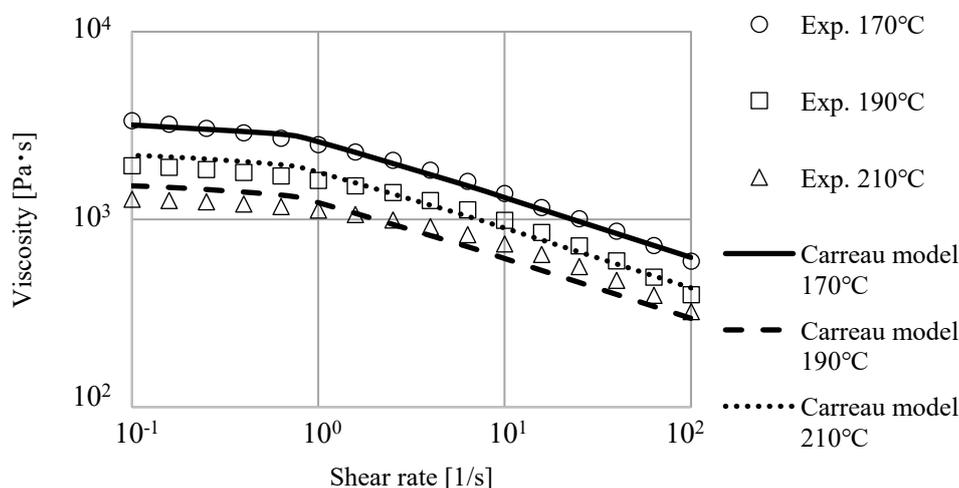


Fig. 5-3 Viscosity of the material using plasticizing experiment. Circular plots show experimental results, and the lines are their regression curve.

PP ペレットの平均粒径は 3.87 mm であり、50 粒のペレット粒径の平均値である。融点は 155 °C であった。充填量は 40 g とし、本装置での充填高さは約 45 mm となった。ロータの回転速度は 50, 100, 200, 300 min⁻¹ とした。エアシリンダの設定圧力を 0.05, 0.1, 0.2 MPa とした。シリンダ直径は 200 mm であり、シリンダ推力効率 は約 70% であることから、Ram によるペレットの押し込み圧力は 0.7, 1.4, 2.8 MPa となる。

同条件での計測は 3-5 回実施し、条件ごとの平均値を計測値とした。全ての条件で試行ごとの差異は 5% 以内であり、安定状態での計測ができていることを確認した。

5.3.3. 実験結果と連続体構成則

Fig. 5-4, Fig. 5-5 に圧力およびせん断速度で整理したトルクと Eq.(5-2)から求めた運動抵抗率を示す. Fig. 5-4 が示すように, 圧力が 0 MPa の条件においては, 回転速度によらず有意なトルクは計測されず, 運動抵抗率としては 0 Pa·s となる. Fig. 5-6 は 0.7 MPa を基準とした圧力の増加に対するトルクの変化率を示す. この図から, 圧力の増加に伴いトルクは大きくなるが, 回転速度が異なる場合でもその変化率は同程度であることがわかる. すなわち, せん断速度によらず圧力の運動抵抗率に与える影響は一定であり, 構成則として圧力依存性は定数で表すことが可能であることがわかる.

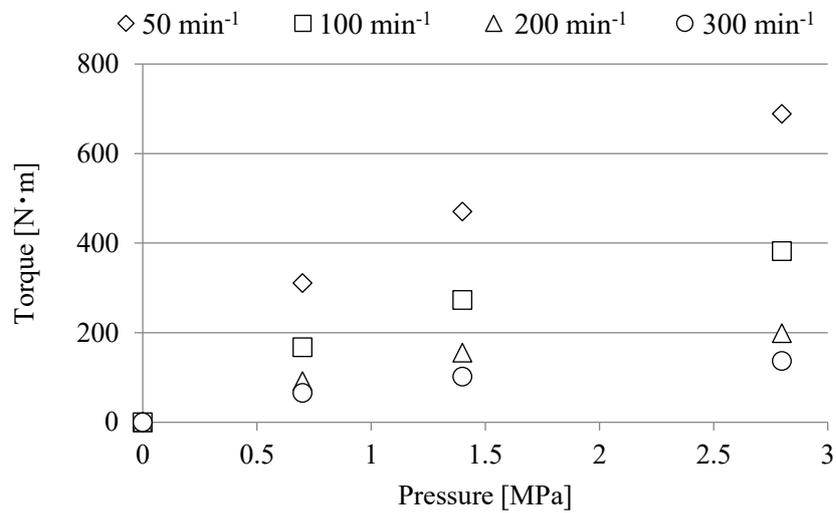


Fig. 5-4 Measurement result of torque acting on inner cylinder against pressure of the pellets.

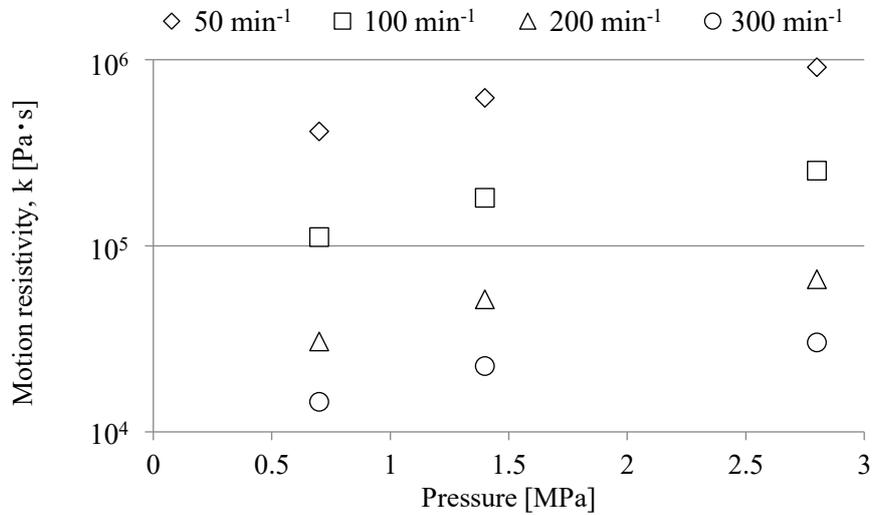


Fig. 5-5 Calculation results of motion resistivity of the pellets against pressure of the pellets.

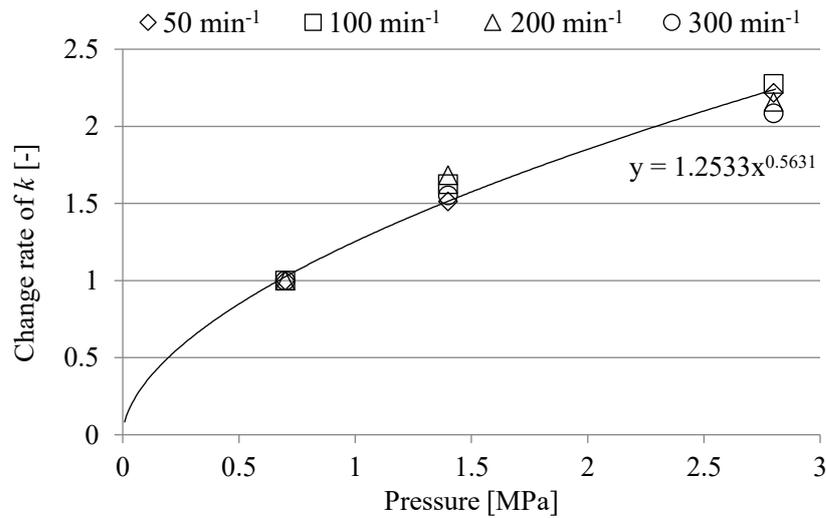


Fig. 5-6 Change rate of the motion resistivity of the pellets against pressure of the pellets.

次に、Fig. 5-7, Fig. 5-8 が示すせん断速度依存性については、せん断速度が大きくなることで、べき乗則に従いトルクが小さくなる傾向が確認された。Fig. 5-9 は 50 min^{-1} を基準としたせん断速度の増加に対するトルクの変化率を示す。この図から、せん断速度の増加に伴いトルクは小さくなるが、圧力が異なる場合でもその増加率は同程度であることがわかる。圧力依存性と同様に、構成則としてせん断速度依存性も定数で表すことが可能であることがわかった。

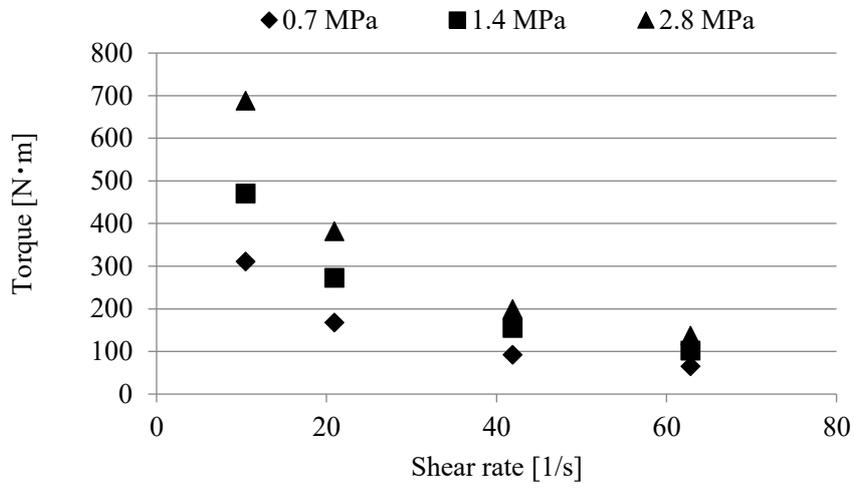


Fig. 5-7 Measurement result of torque acting on inner cylinder against shear rate of the pellets.

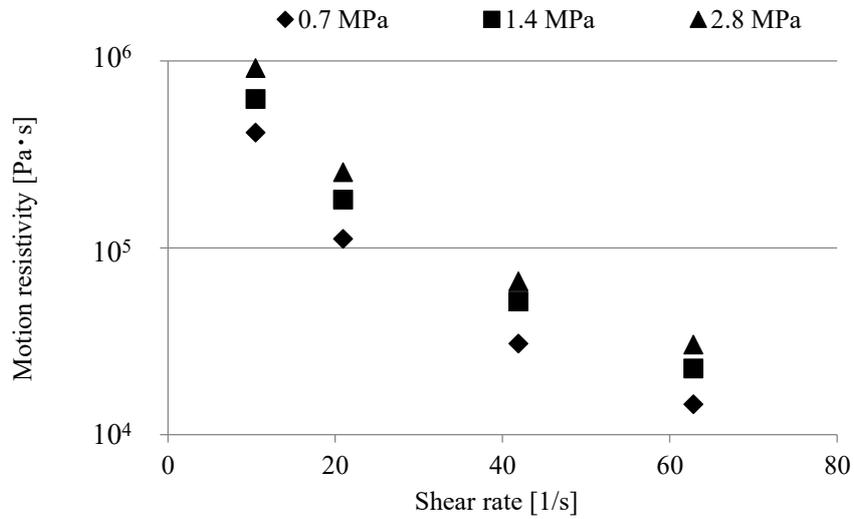


Fig. 5-8 Calculation results of motion resistivity of the pellets against shear rate of the pellets.

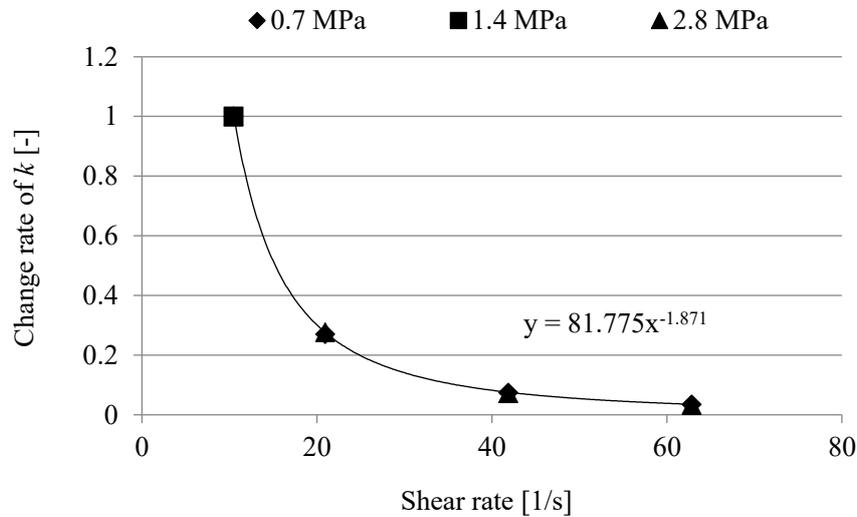


Fig. 5-9 Change rate of the motion resistivity of the pellets against shear rate of the pellets.

以上のことから、加圧された固体粒子群を連続体近似する場合、圧力、せん断速度それぞれに独立の依存性を有しており、条件によらず一定の依存係数を持つことがわかった。以上の結果を定式化することで、以下に示す固体領域での運動抵抗率式および連続体近似の構成則を得ることができる。

$$k = 17227\dot{\gamma}^{-1.871}p^{0.563} \quad (k [\text{Pa}\cdot\text{s}], \dot{\gamma} [\text{s}^{-1}], p [\text{Pa}]) \quad (5-5)$$

$$\tau = 17227\dot{\gamma}^{-0.871}p^{0.563} \quad (\tau [\text{Pa}], \dot{\gamma} [\text{s}^{-1}], p [\text{Pa}]) \quad (5-6)$$

5.4. 固液二相における構成則

前節までに、固相における連続体近似の構成則を示した。本節では、一部が溶融している固液二相での構成則について検討を行う。

5.4.1. 実験手法と実験装置

5.3.1 節と同じ実験手法、実験装置を用いる。

5.4.2. 実験条件

5.3.2 節で示したのと同じ材料，実験条件を用いる．材料が可塑化しやすい状態とするために，温度調整機構として，外筒周囲には断熱材に覆われたセラミックヒータを配置し，温調器により初期温度 180 °C となるよう制御した．PP ペレットは，130 °C 環境に 60 分保持した後に装置に投入した．

5.4.3. トルクの時間変化

回転速度が 300 min⁻¹，樹脂圧力が 0.7 MPa，初期温度 130 °C の実験条件でのトルクの時間変化を Fig. 5-10 に示す．トルクは回転開始直後に 50 s 付近でピークを持ち，その後，急速にトルクが低下する．150 s 付近，250 s 付近，400 s 付近で急激なトルク増加が計測され，また，150 s 以降は計測値の振動が大きくなるが，平均的な値としては 150 s 付近の値で安定することが分かる．

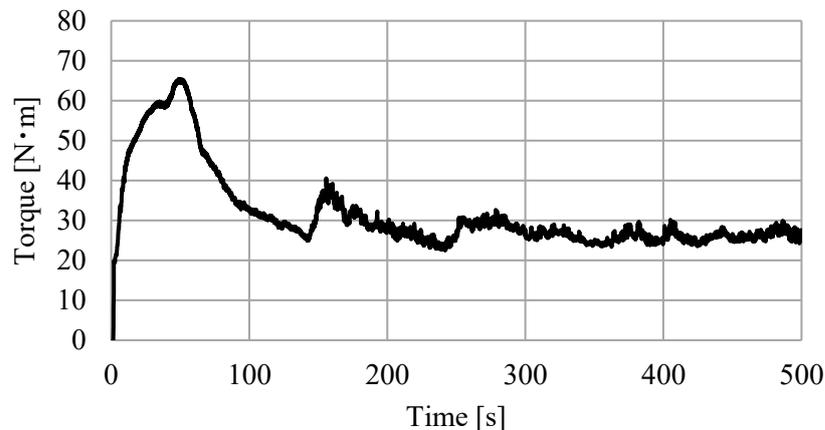


Fig. 5-10 Time variation of torque acting on inner rotor. The rotation speed is 300 min⁻¹ and the pressure of pellets is 0.7 MPa.

これらのトルクの時間変化と可塑化の様子を観察するために，Fig. 5-11 に 50, 100, 200, 300, 400 s で回転を停止し，内部の樹脂の状態を観察した結果を示す．50 s の段階では，ロータ最近傍のペレット表面が溶融し，ペレット間の隙間に流れ込むことで，それぞれのペレットがフィルム状の溶融樹脂で接続されている様子が確認できる．ただし，ロータ最近傍のペレットはほとんどがその形を維持している．この時，トルクは最大値を計測する．100 s の段階では，溶融量が増加し，ペレット 1 層分程度に溶融樹脂が流れ込んでいることが分か

第5章 連続体近似の構成則による可塑化現象の数値解析

る。溶融樹脂層が形成されてはいるが、この段階では、ロータ最近傍のペレットの形がまだ確認できる。200 s の段階では、さらに溶融が進行し、ペレット 1 層分程度の溶融樹脂層が確認できる。ロータ最近傍のペレットの形はなくなり、ロータ表面の溶融樹脂層の外側にペレットの 2 層目が接触しているという状態である。300 s 以降は、溶融樹脂層の厚みが増してくる。溶融樹脂層の厚みが増加した場合においても、200 s と同様に、溶融樹脂層の外側にペレット層が接触しており、全体が均等、またはランダムに溶融するわけではなく、ロータ近傍に液相が存在し、固液二相、固相と分離していることが分かった。

以上の結果から、可塑化の進行メカニズムを以下のように考えた。概念図を Fig. 5-12 に示す。まず、ロータの回転によってせん断を受けたロータ表面の固体粒子はせん断発熱によって一部溶け出し、メルトフィルムを形成する。薄いメルトフィルム内でのせん断速度は大きく、トルクが大きくなる。溶融した樹脂がロータ近傍の空隙に充填され、固体ペレットの移動が阻害されることから、固体層にはせん断が伝わらなくなり、ソリッドベッドが形成される。その後、メルトフィルムからの熱伝導やせん断流れによる発熱によってメルトフィルムとソリッドベッドの界面で可塑化が進行し、メルトフィルムがメルトプールへと変化する。メルトプールと接触する固体粒子はせん断発熱および熱伝導により徐々に溶融し、メルトプールの厚みを増加させ、ソリッドベッドとの界面がバレル側へと移動する。最終的に、溶融領域がバレル表面へ到達してソリッドベッドが消失することで全体が溶融状態となって可塑化が完了する。

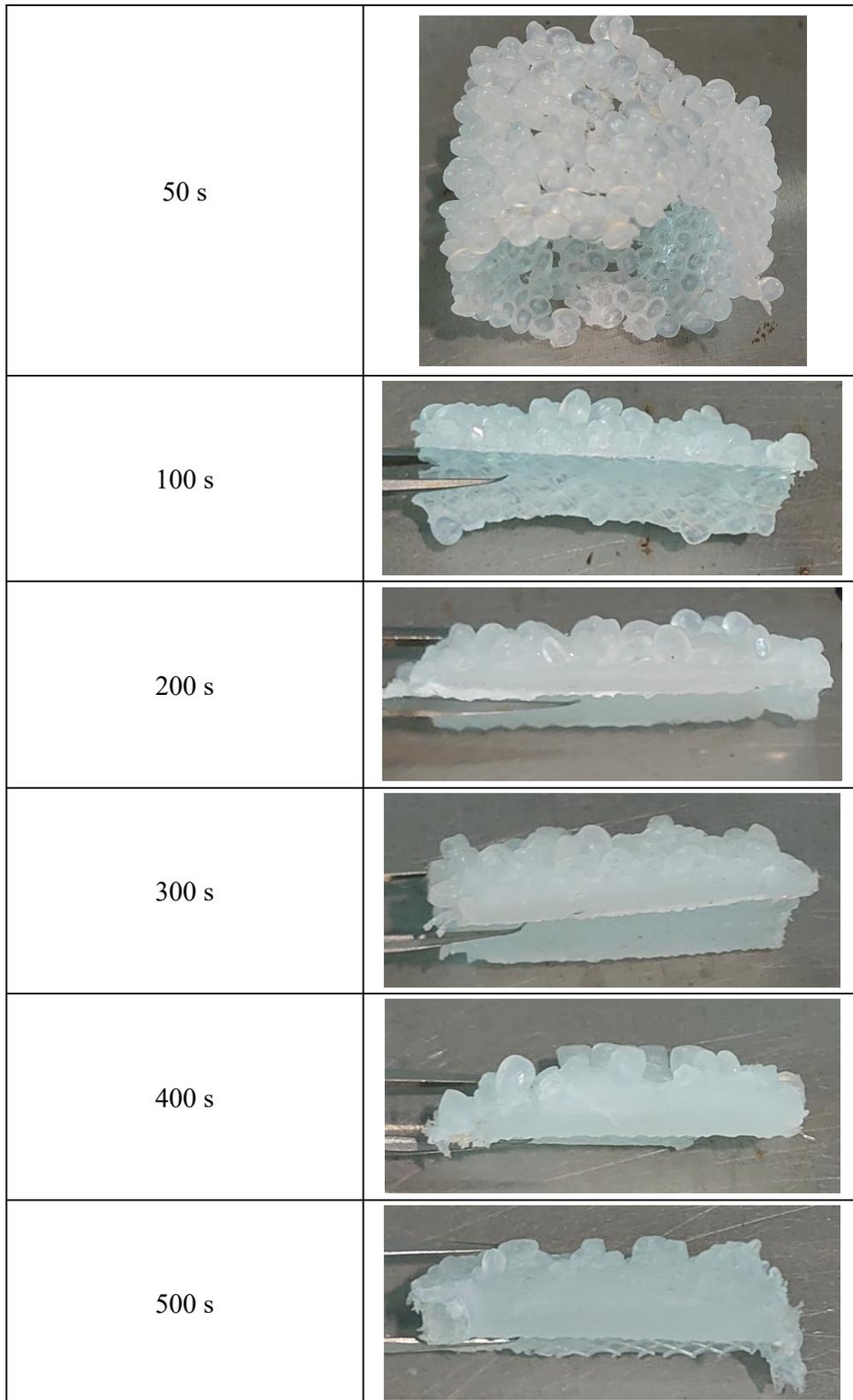


Fig. 5-11 Cross-sectional pictures of the plasticizing experiment.

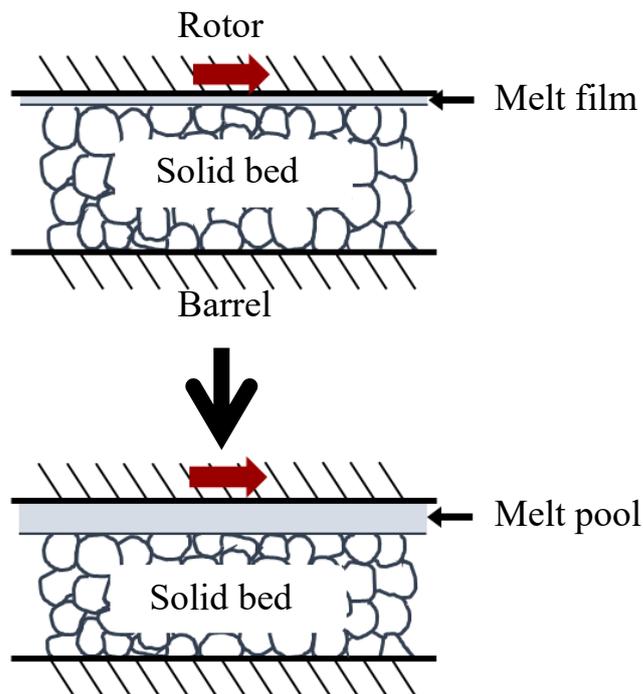


Fig. 5-12 Image of plasticization procedure inside coaxial double cylinders.

5.4.4. 固液二相流域での連続体構成則

前節までに示した結果から、固液二相における連続体近似の構成則について検討する。前節での観察結果を元に、固液二相の構成則は以下の特徴を持つと考えた。

- ・せん断流れは液単相（完全に熔融）および固液二相（空隙が熔融樹脂で充填）の領域のみで生じ、固相（ソリッドベッド）では回転方向および軸方向に流動しない。
- ・ロータ表面から熔融した樹脂が固体ペレット間の空隙に充填されている距離までをせん断流れが生じる領域とし、その内部を液相と固液二相に分割する。
- ・固液二相の領域は、液相と接触しているペレットの最外縁からロータ側にペレット半径分を固液二相とし、それよりもロータ側を液相とする。

Fig. 5-11 の観察結果から、100 s, 200 s, 300 s の状態を用いてモデル化を行った。100 s ではロータ最近傍のペレットの半径分ほどが熔融していたため、液相は存在せず、固液二相のみが存在するものとした。200 s ではロータ最近傍のペレットの直径分ほどに熔融樹脂が充填されていたため、ペレット 1 層分のロータ側を液相、バレル側を固液二相とした。300 s ではペレット 2 層目の中心位置まで熔融が見られたため、ペレット 2 層目中心からロータ側に液相、バレル側の半径分を固液二相とした。Fig. 5-13 にこれらの模式図を示す。

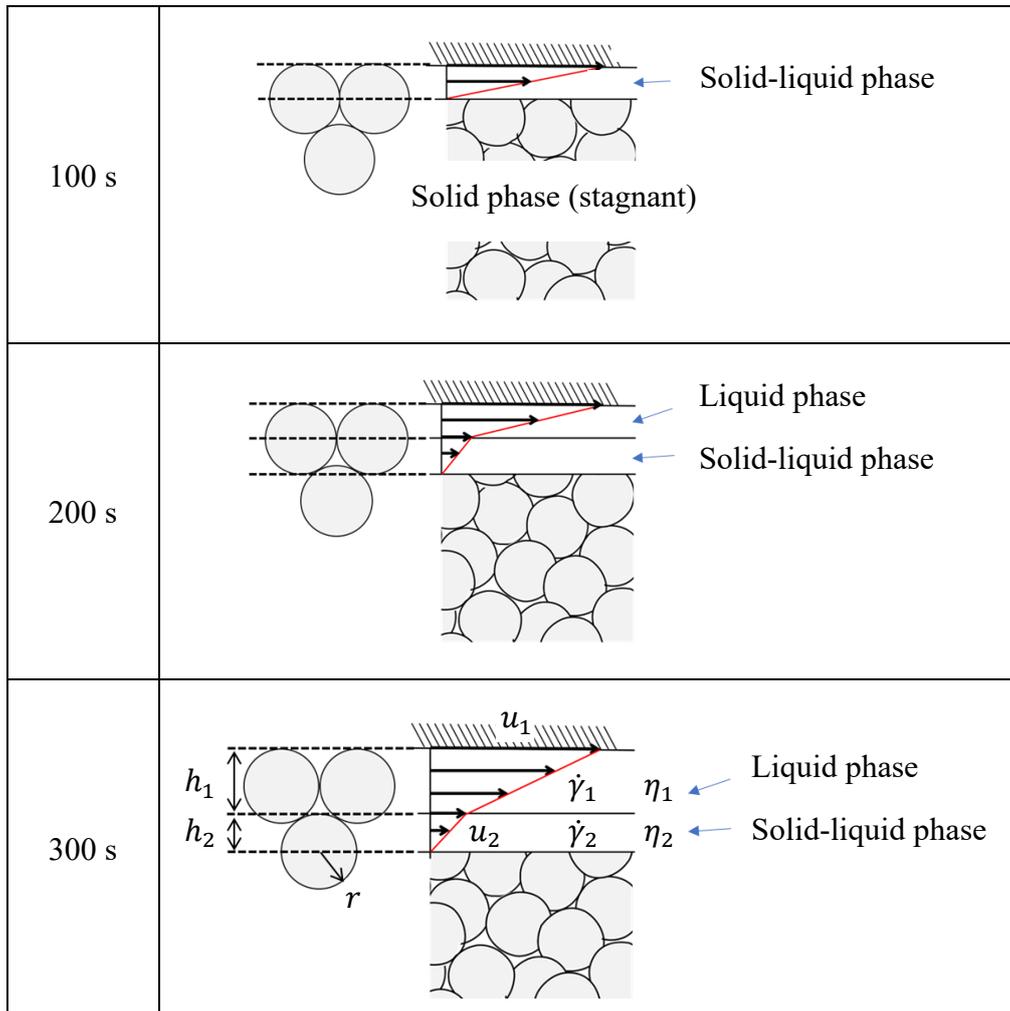


Fig. 5-13 Pattern diagrams of states of plasticization at 100, 200 and 300 s.

本結果から，固液二相状態の粘度 η_2 について，以下の手順により定式化を行った．

- Step1 : それぞれの時刻のトルクの結果からせん断応力を算出
- Step2 : Eq.(5-4)の粘度式およびせん断応力から液相の粘度 η_1 および液相のせん断速度 $\dot{\gamma}_1$ を算出
- Step3 : 液相のせん断速度 $\dot{\gamma}_1$ と液相の厚さ h_1 から，固液二相領域と液相の界面速度 u_2 を算出
- Step4 : 界面速度 u_2 と固液二相の厚さ $h_2 = r$ から，固液二相のせん断速度 $\dot{\gamma}_2$ を算出
- Step5 : 固液二相のせん断速度 $\dot{\gamma}_2$ とせん断応力の比から固液二相の粘度 η_2 を算出

上記の Step1-5 により，各時刻で算出した固液二相の粘度 η_2 を Table 5-1 に示す．

Table 5-1 Viscosity of solid-liquid phase at 100 s, 200 s and 300 s.

	Character	unit	100 s	200 s	300 s
Particle diameter	d	mm	3.87	3.87	3.87
Rotation speed of rotor	u_1	m/s	0.838	0.838	0.838
Thickness of liquid phase	h_1	mm	0	1.94	3.35
Thickness of solid-liquid phase	h_2	mm	1.94	1.94	1.94
Shear stress	τ	Pa	255384	206750	183454
Shear rate of liquid phase	$\dot{\gamma}_1$	1/s	-	268	226
Viscosity of liquid phase	η_1	Pa·s	-	772	811
Velocity at boundary surface between liquid and solid-liquid phase	u_2	m/s	0.838	0.318	0.080
Shear rate of solid-liquid phase	$\dot{\gamma}_2$	1/s	431.9	164.1	41.3
Viscosity of solid-liquid phase	η_2	Pa·s	591	1260	4439

時間経過に伴う液相厚みの増加により、液相のせん断速度が低下する。それに従い、液相と固液二相の界面速度が変化することで、固液二相のせん断速度依存性を把握することが可能となる。Table 5-1 の $\dot{\gamma}_2$ および η_2 の結果より以下の固液二相の粘度および構成則が得られた。

$$\eta_2 = 107708\dot{\gamma}_2^{-0.862} \quad (\eta_2 \text{ [Pa}\cdot\text{s]}, \dot{\gamma}_2 \text{ [s}^{-1}\text{)}) \quad (5-7)$$

$$\tau = 107708\dot{\gamma}_2^{0.138} \quad (\tau \text{ [Pa]}, \dot{\gamma}_2 \text{ [s}^{-1}\text{)}) \quad (5-8)$$

5.4.5. 樹脂の状態による流動性の比較

これまでに得られた固相の運動抵抗率 Eq.(5-5)および固液二相の粘度 Eq.(5-7)、液相の粘度 Eq.(5-4)について、せん断速度に対する関係を示す。液相については 155°Cにおける粘度を示す。

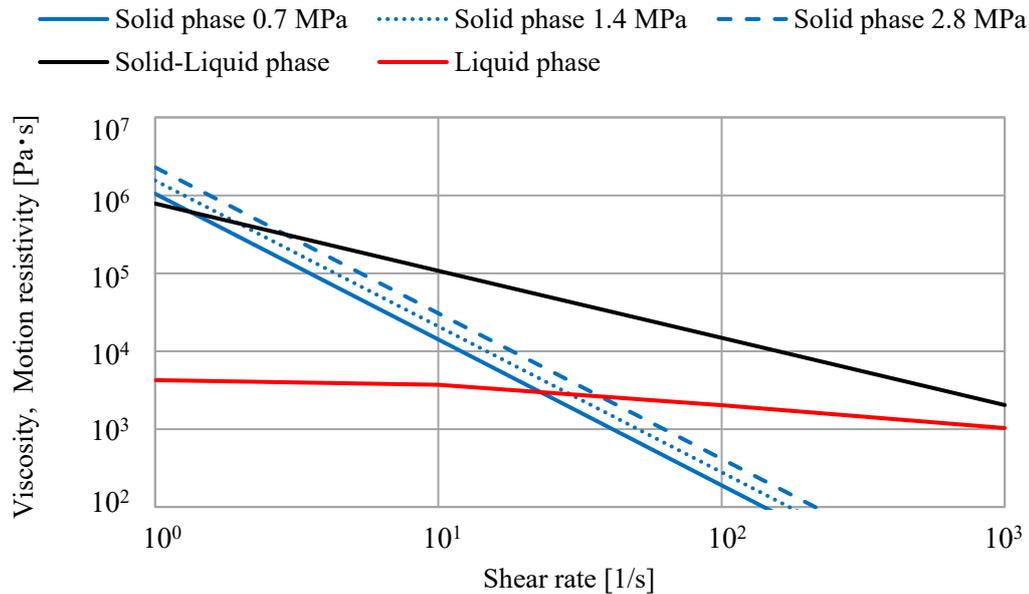


Fig. 5-14 Viscosity models of liquid phase and solid-liquid phase and motion resistivity of solid phase against shear rate.

固液二相の粘度はせん断速度の増加に伴い低下するが、その傾きの絶対値は固相の運動抵抗率に比べて小さいことが分かった。液相のせん断速度依存性が、固液二相よりも小さいことを考慮すると、液相率の増加によってせん断速度依存性が小さくなっていくことが示唆される。

せん断速度が低い領域 (1 s^{-1} 程度) では、固相の運動抵抗率が最も大きくなる。せん断速度が低い場合は、ペレットの時間当たりの空隙間の移動量が小さく、液体が空隙に充填されることによってペレットの移動が阻害されるのに比べ、ペレット間の潤滑作用が大きかったと考えられる。この領域では、運動抵抗率および粘度は、固相、固液二相、液相の順に小さくなっており、液相率の増加によって、同じせん断速度におけるせん断応力は小さくなっていくことが示唆される。

せん断速度が大きくなると (2 s^{-1} 以上)、固相の運動抵抗率に比べて固液二相の粘度が大きくなる。このような場合は、可塑化の開始に伴い、ロータ軸に加わるトルクが増加することが想定され、Fig. 5-10 の 50 s 付近で計測されたトルクの急増の要因だと考えられる。ある程度、せん断速度が大きい場合は、ペレットが空隙を移動する量が増加するため、粘度の高い液相がペレット間に充填されると、その運動を阻害するようになるものと考えられる。

上記に示した固相の運動抵抗率および固液二相の粘度は、固相で $10\text{-}60 \text{ s}^{-1}$ 程度、固液二相で $40\text{-}400 \text{ s}^{-1}$ 程度の範囲での実験結果をべき乗則近似することでモデル化を行っている。実際の混練機内部では今回の実験の計測範囲外のせん断速度領域も多く存在しており、今回のようなべき乗則近似で十分にモデル化できているかについては今後検討が必要である。

5.5. 連続体近似の可塑化構成則を用いた数値解析

5.5.1. 支配方程式

非圧縮流れの運動方程式は第 2 章で示した手法を用いる。エネルギー方程式を以下に示す。

$$\frac{DH}{Dt} = -\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}\right) + Q_g \quad \text{in } V \quad (5-9)$$

$$q_n = h(T_s - T_b) \quad \text{on } S \quad (5-10)$$

$$Q_g = \eta \dot{\gamma}^2 \quad (5-11)$$

ここで H はエンタルピー、 q_x 、 q_y 、 q_z はそれぞれ x 、 y 、 z 方向の熱流束、 Q_g は単位体積当たりの発熱量である。 q_n は境界の外向き法線方向の熱流束、 h は熱伝達率、 T_s は境界近傍樹脂温度、 T_b は境界温度である。 η は前節までに示した運動抵抗率または粘度であり、 $\dot{\gamma}$ はせん断速度である。温度解析は、初期温度 T_0 および比熱 C_p から以下の式により初期エンタルピー H_0 を求め計算を開始する。

$$H_0 = C_p T_0 \quad (5-12)$$

以降の計算では、以下に示すエンタルピーと温度の関係を多直線近似した補間式を用いてエンタルピーから温度 T を求める。

$$T = \frac{H}{C_p} \quad \text{if } H \leq C_p T_{mp} \quad (5-13)$$

$$T = T_{mp} \quad \text{if } C_p T_{mp} < H < C_p T_{mp} + H_f \quad (5-14)$$

$$T = \frac{H - H_f}{C_p} \quad \text{if } H \geq C_p T_{mp} + H_f \quad (5-15)$$

ここで、 T_{mp} は材料の融点、 H_f は融解潜熱である。

離散化手法は Sekiyama ら[12]の手法と同様に、完全陰解法を適用した Element-free Galerkin Method [13]を用いた。

5.5.2. 共軸二重円筒モデルによる固体領域での運動抵抗率の検証

5.5.2.1. 解析条件

計算対象は 5.3.1 節で示した共軸二重円筒実験装置の二次元モデルを用いた。初期計算点間隔は 0.5 mm とし、計算途中の計算点間隔の不均一性は計算点再配置[14]により抑制した、時間刻みは、1 ステップ当たりのロータの回転角度が計算点間隔の 50%以下になるよう各回転速度に応じて設定した。壁面境界は非すべり条件を与えた。材料は、融点 (155 °C) 以下の連続体とみなし、密度は 900 kg/m³、運動抵抗率として Eq.(5-5)に示した式を用いた。回転速度は 50, 100, 200, 300 min⁻¹ (クリアランス平均せん断速度はそれぞれ 10.5, 20.9, 41.9, 62.8 s⁻¹) とし、共軸二重円筒モデルの解析では圧力が発生しないため、全領域に均一圧力として 0.7, 1.4, 2.8 MPa を与えた。

5.5.2.2. 解析結果

Fig. 5-15, Fig. 5-16 は解析結果から算出されたトルクと 5.3.3 節で示した実測結果の圧力とロータの回転速度に対する比較結果である。両図から、圧力の上昇およびロータ回転速度の増加に対するトルクの変化挙動が定性的に再現できていることがわかる。定量性については、低回転速度条件 (50 min⁻¹, 100 min⁻¹) は良く一致する結果が得られたが、高回転速度条件 (200 min⁻¹, 300 min⁻¹) では実測結果と解析結果の乖離が大きい。

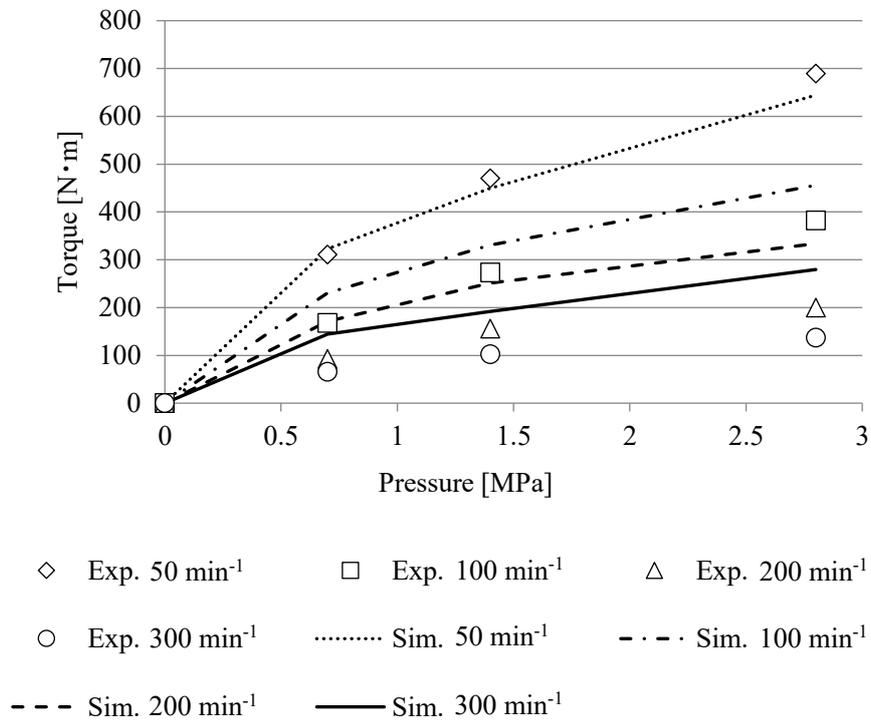


Fig. 5-15 Comparison of experimental and simulation results of torque against pressure of the pellets.

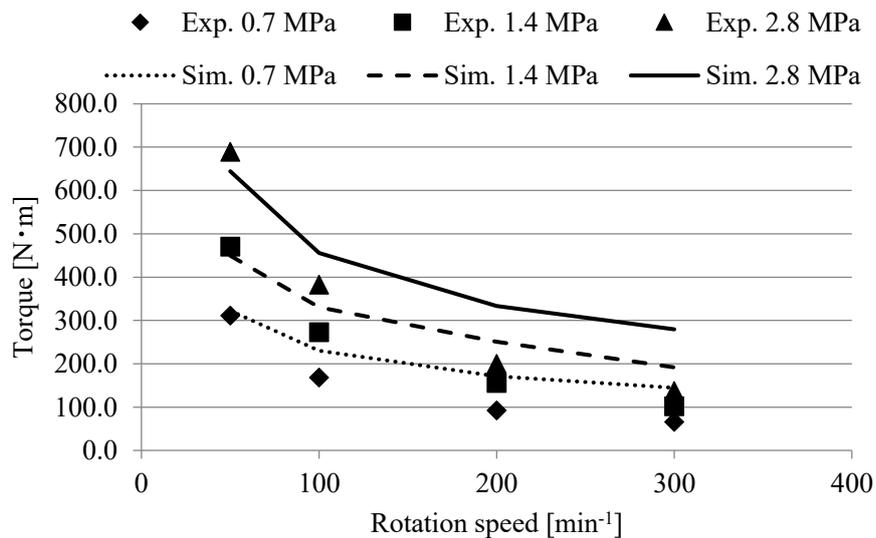


Fig. 5-16 Comparison of experimental and simulation results of torque against rotation speed of inner cylinder.

Fig. 5-17 は圧力の変化に対する各回転速度条件の実測結果に対する解析結果の乖離率を示す。圧力の変化に対しては乖離率がほぼ一定であるが、回転速度の増加に伴い乖離率が大きくなることがわかる。

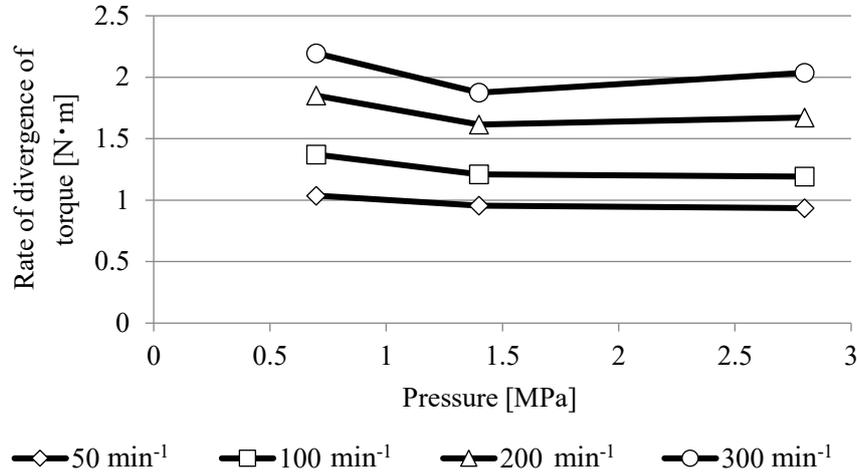


Fig. 5-17 Rate of divergence between of experimental results and simulation results.

トルク予測の定量性を向上させるために解析結果の分析を行った。Fig. 5-18 は 50 min⁻¹ と 300 min⁻¹ の 2.8 MPa の圧力条件におけるせん断速度分布である。固相の運動抵抗率は、共軸二重円筒内の見かけのせん断速度により算出しているが、共軸二重円筒の曲率の影響により、内筒近傍はせん断速度が大きくなる。せん断速度差が生じることで、内筒側の運動抵抗率は小さくなり、外筒側は大きくなる。このような運動抵抗率の差が生じると、せん断速度分布は内筒側がさらに大きくなり、外筒側は小さくなる。これが連続することで、Fig. 5-18 のようなせん断速度分布に収束する。

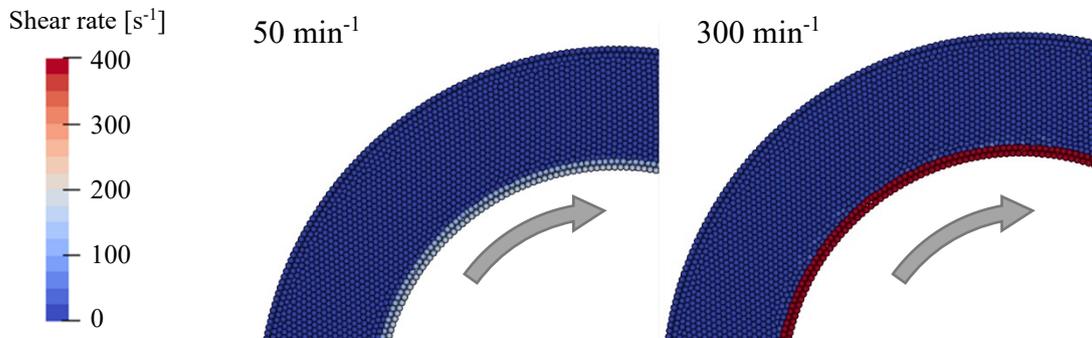


Fig. 5-18 Shear rate distributions of the conditions of 50 min⁻¹ and 300 min⁻¹. The pressures of both cases are set at 2.8 MPa.

本計算例では、流れが生じる範囲が内筒表面から約 1.0 mm であった。Eq.(5-5)は内筒と外筒の距離を 10 mm として一定の平均せん断速度から運動抵抗率を算出していることから、Eq. (5-5)を次のように修正する。

$$k = 17227(\dot{\gamma}/10)^{-1.871}p^{0.563} \quad (k \text{ [Pa}\cdot\text{s]}, \dot{\gamma} \text{ [s}^{-1}], p \text{ [Pa]}) \quad (5-16)$$

Eq.(5-16)を用いて、同条件でトルクを算出した。Fig. 5-19, Fig. 5-20 はそれぞれ、修正後の運動抵抗率を用いて算出したトルクを、圧力およびロータ回転速度について実験結果と比較した結果である。50 min⁻¹の結果でやや乖離率が大きくはなったが、圧力および回転数によらず良く一致する結果が得られた。

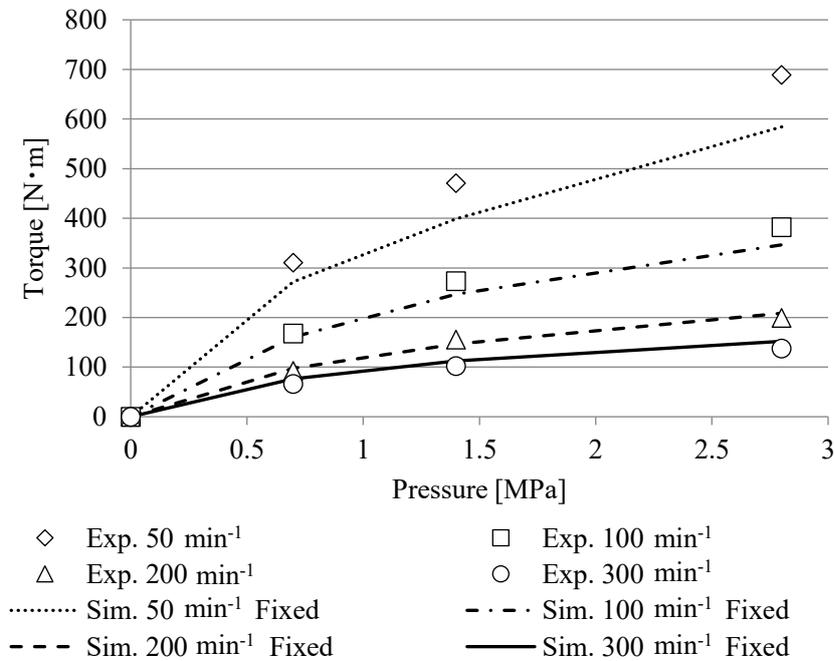


Fig. 5-19 Comparison of experimental and simulation results of torque against pressure. Simulation results are based on the fixed motion resistivity.

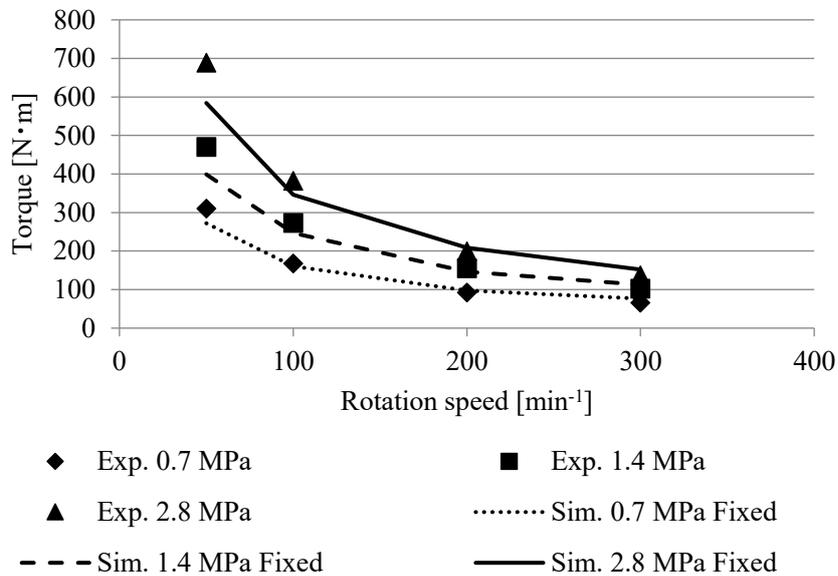


Fig. 5-20 Comparison of experimental and simulation results of torque against rotation speed of inner rotor. Simulation results are based on the fixed motion resistivity.

今回、解析結果から約 1.0 mm で固相におけるせん断流れが起こるとしたが、この厚みは計算点間隔の大きさにも依存する。より詳細で、汎用性の高い運動抵抗率のモデルを構築するためには、特にロータ近傍の解像度が高い解析を行うことにより、正確なせん断速度分布を取得する必要があると考える。

5.5.3. 共軸二重円筒モデルによる可塑化を伴う流動場の計算

5.4 節で実施した可塑化を伴う共軸二重円筒実験について、前節までで得られた固相、固液二相および液相の構成則を適用し、可塑化挙動の比較を行う。

5.5.3.1. 解析条件

計算対象は 5.4.1 節で示した共軸二重円筒単純せん断モデルの二次元モデルを用いた。初期計算点間隔は 0.5 mm とし、計算途中の計算点間隔の不均一性は計算点再配置[14]により抑制した、時間刻みは、1 ステップ当たりのロータの回転角度が計算点間隔の 50 %以下になるよう各回転速度に応じて設定した。壁面境界は非すべり条件を与えた。

材料は、融点が 155 °C の連続体とみなし、エンタルピーと温度の関係を多直線近似した補間式を Fig. 5-21 に示す。初期温度を 130 °C、融解潜熱は 73.0 J/kg、比熱は 2000 J/kgK とした。流体の密度は、固体領域で 900 kg/m³、液体領域で 750 kg/m³、155 °C の場合には 825 kg/m³ とした。流体粘度は、温度が 155 °C 未満は Eq.(5-5) に示す固相での運動抵抗率、155 °C においては Eq.(5-7) に示す粘度、155 °C 以上では Eq.(5-4) に示す Carreau 粘度モデルを用いた。

回転速度は 300 min⁻¹ (クリアランス平均せん断速度はそれぞれ 62.8 s⁻¹) とし、共軸二重円筒モデルの解析では圧力が発生しないため、全領域に均一圧力として 0.7 MPa を与えた。

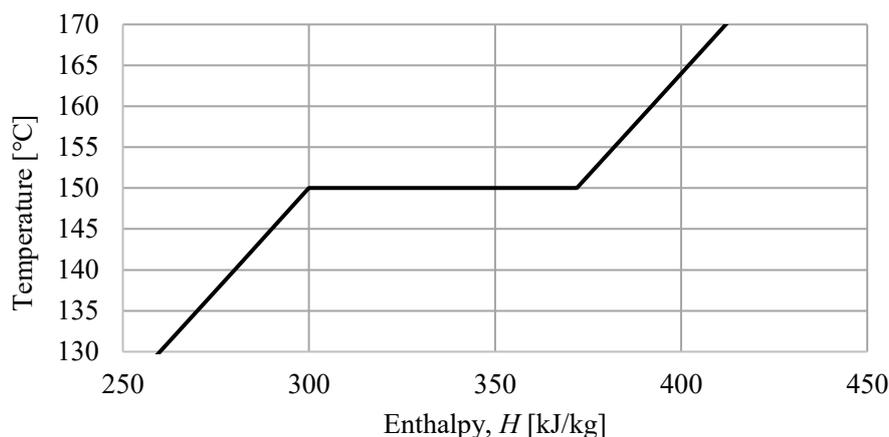


Fig. 5-21 Multilinear approximation model of the relationship between enthalpy and temperature.

5.5.3.2. 解析結果

全体の温度分布の時刻経過を Fig. 5-22 に示す。発熱はロータ近傍から始まり、熱が伝播する以上に発熱が大きいことから、ロータ近傍の温度が徐々に上がり、60 s において融点 (155 °C) を超える計算点が生じた。その後、融点以上の領域が徐々に広がっていく様子が確認された。時間ごとに、Fig. 5-11 の溶融状態の観察結果と比較する。

実験では 50 s の段階でロータの近傍でメルトフィルムが生じており、これは解析で 60 s の段階でロータ近傍の計算点が融点を超える結果と一致した。実験の 100 s の段階ではロータの接触するペレットの半径分程が溶融しており、Table 5-1 に示したように、液相および固液二相流れとなっている厚みは約 1.9 mm となっている。解析の 100 s の結果では、融点を超えた計算点のロータ表面からの平均距離は 1.88 mm となり、実験結果と良い一致を示した。同様に 200 s においては、実験が約 3.9 mm に対し、解析では 4.1 mm。300 s においては、実験が約 5.3 mm に対し、解析では 5.5 mm となっており、時間に対する液相および固液二相流の範囲の予測が精度良く可能であることが分かる。

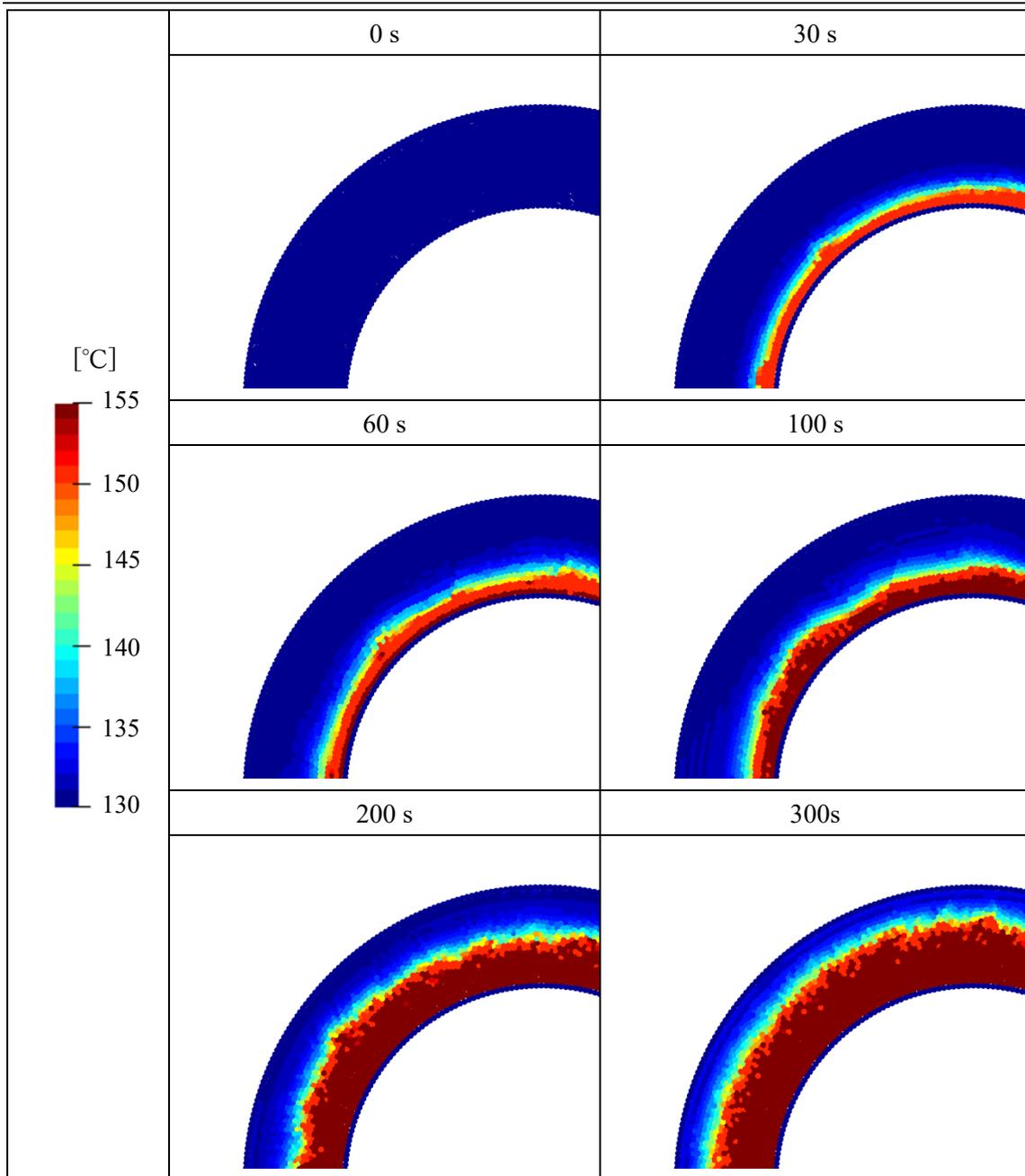


Fig. 5-22 Calculation results of plasticizing inside coaxial double cylinders. The rotation speed is 300 min^{-1} and the pressure acting on solid phase is 0.7 MPa .

以上の結果から、連続体近似の可塑化モデルによって、共軸二重円筒内部の可塑化進行挙動が高精度に予測可能であることが確認された。なお、流動場の計算時間に対して、温度場の計算時間は約 1/30 程度であり、計算負荷としては極めて小さい。すなわち、固相の計算を連続体近似した可塑化モデルを用いることで、通常の流動計算とほぼ同程度の計算負荷で可塑化状態の予測が可能であり、複雑な処理を必要とせず、計算負荷の小さいリーズナブルな可塑化状態の予測手法を構築することができたといえる。

5.6. 結言

本章では、固体のパウダー状およびペレット状の固体樹脂材料を連続体として捉え、構成則によって固体の変形挙動および液体の流動挙動を再現する方法についての検討を行った。

固体粒子を加圧した状態でせん断を与えることが可能な共軸二重円筒実験装置を用いて固相の運動抵抗率を計測した結果、圧力およびせん断速度に対して独立の依存性を示すことがわかり、圧力に対しては指数関数的な増加、せん断速度についてはべき乗則に従い減少することがわかった。

熔融を伴う共軸二重円筒実験結果から、固液二相の粘度についてもせん断速度依存性を示し、固相と液相の中間的な性質を持つことがわかった。共軸二重円筒内部の可塑化は、回転軸近傍から熔融し、液相と固液二相および固相が分離し、液相領域が徐々に拡大するよう可塑化が進行することがわかった。

得られた連続体の構成則を用いた検証解析の結果、全体が固相の場合、運動抵抗率の分布が生じることから、せん断流れが発生するのはロータ近傍のみであることがわかった。本結果を元に、構成則を修正することで、共軸二重円筒実験の内筒にかかるトルクを高精度に予測することが可能な連続体構成則を得ることができた。また、熔融潜熱を考慮した可塑化解析の結果、時間に応じて変化する熔融範囲を高精度に予測することが可能であることがわかった。以上の結果から、連続体近似による可塑化解析が可能であることがわかった。また本計算に要する計算時間は通常の流動解析とほぼ同程度であり、連続体近似の構成則によって複雑な処理を必要とせず、可塑化状態を予測することが可能であるとわかった。

参考文献

1. S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. **59**(2).
2. Z. Tadmor and C. G. Gogos, *Principles of Polymer Processing*. 2013: John Wiley & Sons.
3. Z. Tadmor, *Fundamentals of Plasticating Extrusion. I. A Theoretical Model for Melting*. Polymer Engineering & Science, 1966. **6**(3): pp. 185-190.
4. H. Potente and U. Melisch, *Theoretical and Experimental Investigations of the Melting of Pellets in Co-Rotating Twin-Screw Extruders*. International Polymer Processing, 1996. **11**(2): pp. 101-108.
5. B. Vergnes, G. Souveton, M. L. Delacour, and A. Ainsier, *Experimental and Theoretical Study of Polymer Melting in a Co-Rotating Twin Screw Extruder*. International Polymer Processing, 2001. **16**(4): pp. 351-362.
6. J. Trippe and V. Schöppner, *Investigation of the Influence of Material and Pellet Shape on the Dissipation in the Solids Conveying Zone of Single-Screw Extruders Based on the Discrete*

-
- Element Method (Dem)*. Vol. 1914. 2017. 080002.
7. S. Fujioka and S. Ushijima, *An Evaluation Method of Normal Contact Force with Energy Conservation in Distinct Element Method*. *Journal of applied mechanics*, 2005. **8**: pp. 287-294.
 8. 酒井 幹夫, 山田 祥徳, 茂渡 悠介, *付着力を考慮した Dem 粗視化モデルによる流動層の数値解析*. *粉体工学会誌*, 2010. **47**(8): pp. 522-530.
 9. A. Altunkaynak, M. Gupta, M. A. Spalding, and S. L. Crabtree, *Melting in a Single Screw Extruder: Experiments and 3d Finite Element Simulations*. *International Polymer Processing*, 2011. **26**(2): pp. 182-196.
 10. 平村 行慶, *粉体のレオロジー評価と流動性に関する考察*. *粉体工学会誌*, 2017. **54**(9): pp. 604-608.
 11. 村田 博之, 若林 稔, 江草 忠人, *ジェニケセルによる石炭の流動物性測定結果*. *粉体工学会誌*, 1983. **20**(9): pp. 558-563.
 12. K. Sekiyama, S. Yamada, T. Nakagawa, Y. Nakayama, and T. Kajiwara, *Partially Filled Flow Simulation Using Meshfree Method for High Viscosity Fluid in Plastic Mixer*. *International Polymer Processing*, 2019. **34**(2): pp. 279-289.
 13. T. Belytschko, Y. Y. Lu, and L. Gu, *Element-Free Galerkin Methods*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1994. **37**(2): pp. 229-256.
 14. T. Nakagawa, K. Sekiyama, and S. Yamada, *Development of Particle Method for the Simulation of High Viscosity Fluid Flow in Partially Filled Mixer*. *Seikei-Kakou*, 2015. **27**(9): pp. 380-387.

第 6 章

結論

本研究では、樹脂混練機内での材料挙動の把握を目的に、混練機内での材料挙動の特徴を考慮した数値解析技術について検討した。従来、流路の変形や自由表面の追跡が困難であることから、混練機内部は完全充満を仮定した解析が行われていた。しかし、粒子法を中心としたメッシュフリー法の発展、また計算機性能の向上や並列計算技術の発展により、部分充満状態を考慮した数値解析の検討が進められてきている。そこで本研究では、Element-Free Galerkin method (EFGM) による溶融混練部の自由表面流動解析技術を構築し、これを用いた溶融混練部での混練挙動解析、また連続体近似した可塑化構成則による可塑化挙動解析を実施し、メッシュフリー法による混練機内の材料挙動の解析技術について検討した。以下に本研究から得られた成果を要約し、本論文の結論とする。

第1章では、本研究の位置付けと、混練機内の材料挙動に関する既往の研究のレビューを行い、本研究の目的と構成を示した。

第2章では、混練機内の材料挙動の数値解析に用いた Element-Free Galerkin Method について、部分充満解析のための計算点配置の修正アルゴリズムを提案し、二重円筒内の速度分布の厳密解との比較から、計算精度および計算の安定性が向上することを示した。また、せん断や回転の影響が大きい高粘性流体特有の流動現象について、剛体回転問題等での検証から、提案した手法は角運動量の保存性が高く、計算精度および計算の安定性の観点から高粘性流体の数値解析に適していることを示した。さらに、二重円筒や三角形ロータでの部分充満流動の実験と解析の比較から、自由表面形状や軸負荷の予測が高精度に可能であり、提案手法が混練機内の部分充満状態に適していることを示した。

第3章では、提案した解析手法を用いて、異方向回転連続混練機の溶融混練部全体での部分充満流動解析を行い、従来の完全充満を仮定した数値解析では明らかにすることができない充満率および滞留時間分布について、ロータ形状や操作条件の影響を評価した。滞留時間分布の算出には、周期的に同様の流動状態となる準定常状態を利用したマーカー粒子追跡手法を用いた。充満率については、クリアランスの大きい連続混練機では充満率の下限値が存在しており、順送り形状のみをもつロータ形状では、クリアランス部の容積にほぼ等しいことがわかった。順送りと逆送り形状を組み合わせたロータ形状では、クリアランス部の容積に加えて、順送りと逆送りの中央部で断面充満率の高い領域が生じ、全体の充満率が大きくなることがわかった。平均滞留時間で正規化した滞留時間分布については、流量と回転速度の比である Q/n が増大により、単峰的な分布から次第に双峰的な分布に変化することがわかった。平均滞留時間については、本論文で検討した範囲では、 $1/Q$ に対して線形に増加することがわかった。平均滞留時間から推定される充満率は、充満率が軸方向に一様である順送りのみのロータ形状では良い推定値となるが、軸方向充満率が不均一となる順送りと逆送りをもつロータ形状では、過大評価となることがわかった。滞留時間分布については、順送りのロータ形状は下流に押し出す力が強い一方で、上流に押し戻す力は順送りと逆送りの間に大きな差異がなく、順送りのみのロータ形状の場合は、滞留時間の短い流体の発生

第6章 結論

がある一方で、滞留時間の長い流量はどちらのロータ形状でも同程度になることがわかった。

第4章では、実際の樹脂材料（Bi-modal HDPE）を対象とした異方向回転連続混練機と同方向回転二軸押出機の混練実験および提案した解析手法によって、カーボンブラックでの未着色領域である White spot に分散性能に関する混練指標の検討を行った。混練実験の結果、対象とした材料に関しては二軸押出機に比べ連続混練機の分散性能が優れていることが確認された。同条件での部分充満流動解析の結果、White spot の分散にはせん断応力のしきい値が存在しており、そのしきい値以下では分散が進行しないと考えられることがわかった。ここから、新たな混練指標として、しきい値以上のせん断応力で混練機内部に滞留している時間=有効滞留時間を提案した。部分充満解析結果の分析により、チップクリアランスの大きい連続混練機は、チップクリアランス部およびその周辺の広い範囲で White spot の分散に必要なしきい値以上のせん断応力を得ることができ、かつ比較的長い滞留時間を有することから、高い分散性能が得られることを明らかにすることができた。

第5章では、可塑化混練部の材料挙動を把握することを目的に、固体粒子および固液二相を連続体近似した可塑化構成則を構築し、連続体の流動解析技術によって可塑化挙動を再現する方法について検討した。加圧可能な二重円筒装置を用いた実験結果から、固体粒子状態では圧力とせん断速度に独立の依存性を有しており、再現性の高い実験結果から依存係数を算出することができた。この固相での構成則を用いた二重円筒の検証解析の結果、円筒の半径方向のせん断速度差から運動抵抗率の差異が拡大し、ロータ近傍にしか速度を持たない分布に収束することがわかった。本結果をもとに、固相での構成則を修正することで、圧力およびロータ回転速度が異なる条件においても、二重円筒実験のロータ軸トルクを高精度に予測することが可能となった。上記の二重円筒実験装置を用いて、一部が溶融する固液二相の状態での構成則についても検討した。固相と固液二相、液相の構成則をせん断速度について整理すると、固相が存在することで、同じせん断速度において液単相よりもせん断応力が大きくなることがわかった。せん断速度が小さい場合、固相のみに比べ固液二相のせん断応力は小さく、液相が潤滑の効果を果たすことがわかった。一方、せん断速度が大きくなると、固相に比べ固液二相のせん断応力が大きくなることから、液相が、固体粒子が空隙間を移動することを阻害する効果をもつことが示唆された。これらの固相から液相までの構成則を適用した二重円筒の数値解析の結果、溶融範囲の時間変化を予測することが可能であることが確認され、連続体近似の可塑化構成則について一定の有効性が示された。

以上のように、本研究を通じて、メッシュフリー法による混練機内の部分充満流動解析の有効性、および可塑化挙動予測に対する連続体近似の可塑化構成則の有効性が明らかにされたが、実際の混練機開発に活用していくためには、より多くの現象を取り扱うモデルや技術が必要となる。例えば、混練機の機械信頼性を向上させるためには軸負荷の定量予測が必要であり、そのためには壁面すべりの考慮が必要と考えられる。また混練機の機能の一つである脱揮のためには、表面の高精度捕捉モデルや材料内部の副生成物濃度解析技術が必要

となる。より定量的な可塑化現象の予測を行うためには、固体粒子と壁面の摩擦発熱や、ペレットの弾塑性変形の考慮なども必要となる。取り扱う現象が増加することで、計算負荷も増大してくるため、並列化といった計算の高速化技術の開発も、今後はより一層重要となる。計算点自体が移動するメッシュフリー法の特徴から、計算点ごとのミクロスケール解析から物性を算出しマクロスケールの計算を行うマルチスケール解析などとの親和性も高いと考えられる。このような技術により定量性の高い混練機全体の材料挙動予測技術を構築することで、新たな混練現象の解明に貢献できると考える。

謝辞

本研究に取り組むにあたり、お忙しい中を丁寧なご指導と多大なご助言をしてくださった九州大学大学院工学研究院化学工学部門 梶原稔尚教授に深く感謝致します。また、本研究の細部に至るまで様々なご助言をしてくださった九州大学大学院工学研究院化学工学部門 名嘉山祥也准教授に深く感謝致します。御多忙の中、本論文の審査をしていただき、貴重なご助言、ご鞭撻を賜りました九州大学大学院工学研究院化学工学部門 深井潤教授、渡邊隆行教授に厚くお礼申し上げます。盛建凱氏、千歳皓平氏とは、共同で研究を進め、実験の遂行において多大なご助力をいただいたことに感謝致します。お世話になった研究室の皆様にも感謝致します。

また本研究の遂行と本論文の作成にあたっては、株式会社神戸製鋼所の関係各位にもお世話になりました。中川知和氏、山田紗矢香氏には、共同で研究を進めながら本論文の計算手法や実験手法に関する貴重なご助言をいただき、多くの知見を得ることができました。山口和郎氏、船橋秀夫氏、黒田好則氏には樹脂機械の実験に関する貴重な実験データをご提供いただくなど様々なご協力、ご意見をいただきました。上田宏樹氏、秋山勝哉氏には博士後期課程への入学を承認していただきました。流熱技術研究室、化学技術研究室の諸氏には、日々研究を進める上で、多大なご助力をいただきました。ここに深く感謝致します。