九州大学学術情報リポジトリ Kyushu University Institutional Repository

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:

博士学位論文

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.	樹朋	- 言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.	溶鬲	・混練部の数値解析に関する既往の研究	5
1.4.	溶鬲	虫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.	可莮	型化混練部の数値解析に関する既往の研究	7
1.6.	本研	千 究の目的	7
1.7.	本論文の構成		8
参考文	【献		8
笛ヶ音	亯	粘性流休の部分充満状能に関すス三次元流動解析技術	13
<i>⊼ 4</i> *	IEU		13
2.1.	緒言		14
2.2.	支西	已方程式	14
2.3.	数值	值解析手法	15
2.3.1	1.	Element-Free Galerkin Method	15
2.3.2	2.	速度の近似関数	15
2.3.3	3.	重み関数	17
2.3.4	4.	離散化手法	17
2.3.4	5.	積分法	20
2.3.0	6.	時間進行手法	21
2.3.7	7.	計算精度向上のための再配置手法	21
2.4.	解材	f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	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	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	4.	三角形状ロータ回転実験による解析精度検証	34
2.5.	結言	<u></u>	38
参考文	て献		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
31	紶∃	-	/1
J.I. 3 1	「古日	7.5.2.3	۲۲۲۱ ۱۷
5.2.	XI	レノJ 1エ レ 、	42

3.3.	解析	行条件	42
3.4.	準定	ミ常状態でのマーカー粒子追跡方法	44
3.5.	解析	f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	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	4.	マーカー粒子挙動と流動状態	60
3.6.	結言	Î	67
参考文	て献		68
第4章	連	続混練機内部の混練状態の評価	
4.1.	緒言	*	71
4.2.	連緩	記線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	2.	実験装置	72
4.2.	3.	運転条件	74
4.2.4	4.	混練評価方法	74
4.2.	5.	実験結果	75
4.3.	数値	直解析による混練挙動の解釈	76
4.3.	1.	解析手法	76
4.3.2	2.	解析条件	76
4.3.	3.	評価指標	80
4.3.4	4.	数値解析の結果	82
4.4.	混練	東指標の検討	
4.4.	1.	せん断応力と混練指標の関係	
4.4.2	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	て献		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	
5.1.	緒言	Î	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	目における構成則	98
5.3.	1.	実験手法と実験装置	98
5.3.2	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	5二相における構成則	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. 連絡	を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	Î	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,溶融状態で混練が 行われる.この過程では,固体粒子群の流動,固体粒子の一部が溶融した固液二相流,完全 な液体単相流が含まれ,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 繋がることが期待できる.よって,本研究では,混練機内の可塑化挙動および溶融混練挙動 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となる技術

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,液単相の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 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. 第1章 序論

·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満状態により、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出特性式に基づい 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 出条件の設定により、軸方向の樹脂圧力や充満率、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、押出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、解析が完全充満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満を仮定している.前述の Ishikawa らの検討のように,完全充満に近い条件の場合は解析と実験で良い一致を示すが,部分充満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,部分充満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満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満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 充満率,すなわち充満状態は,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.混練機内部の充満状態を把握するためには,部分 充満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,混練機内が完全充満であると 仮定した流動の特徴評価や,詳細な流動解析は行わず充満率の変化を一次元的に評価する 第1章 序論

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, Boltzsmann 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(10²-10⁴ 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溶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 解析で溶融挙動を再現するものである。Altınkaynak 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溶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,溶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,溶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.
- K. Kohlgrüber, Co-Rotating Twin-Screw Extruders: Fundamentals. 2019: Carl Hanser Verlag GmbH Co KG.
- 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.
- L. Wang, S. Smith, and C. Chessari, *Continuous-Time Model Predictive Control of Food Extruder*. Control Engineering Practice, 2008. 16(10): pp. 1173-1183.
- 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.
- 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.

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.

- 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.
- P. S R, S. K. Arumugam, R. Gangradey, S. Mukherjee, S. Kasthurirengan, 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- E. E. Acur and J. Vlachopoulos, *Numerical Simulation of a Single-Screw Plasticating Extruder*. Polymer Engineering & Science, 1982. 22(17): pp. 1084-1094.
- T. Ishikawa, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, Numercial Simulation and Eperimental Verification of Nonisothermal Flow in Counter-Rotating Nonintermeshing Continuous Mixers. Polymer Engineering and Science, 2000. 40(2): pp. 365.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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
	<i>討</i> . 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, <i>物体壁面の表面性状を考慮した流れのシ</i>
	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. Matić, 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

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.

Element Method (Dem). Vol. 1914. 2017. 080002.

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.
- B. Vergnes, G. Souveton, M. L. Delacour, and A. Ainser, *Experimental and Theoretical Study of Polymer Melting in a Co-Rotating Twin Screw Extruder*. International Polymer Processing, 2001. 16(4): pp. 351-362.
- A. Altınkaynak, 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

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.

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

- $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{t}} \qquad \text{on } \Gamma_t \qquad (2-2)$
- $\mathbf{u} = \overline{\mathbf{u}}$ on Γ_u

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + (\lambda - \frac{2}{3}\mu)\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\nu}\mathbf{I}$$
⁽²⁻⁴⁾

(2-3)

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

$$\dot{\varepsilon}_{v} = \dot{\varepsilon}_{xx} + \dot{\varepsilon}_{yy} + \dot{\varepsilon}_{zz} \tag{2-6}$$

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、 σ は応力テンソル、bは体積力ベクトル、uは速度ベクトル、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、 $\dot{\mathbf{e}}$ 、 $\dot{\mathbf{e}}_v$ 、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.

$$p = -\lambda \dot{\varepsilon}_{v} \tag{2-7}$$

2.3. 数值解析手法

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xの速度成分u(x)を次のような多項式で定義する.

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

ここで,添字 T は転置を示し, **p**(**x**)は次数 m の多項式の基底ベクトル, **a**(**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:
$$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) = [1], \ \mathbf{a}(\mathbf{x}) = [a_1(\mathbf{x})]$$
 (2-9)

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

次に、aを決定するために、残差J(x)を次のように定義する.

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

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

$$\mathbf{u}^{\mathrm{T}} = [u_1, u_2, \cdots, u_N] \tag{2-13}$$

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

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = [w_1(\mathbf{x})\mathbf{p}(\mathbf{x}_1), \cdots, w_n(\mathbf{x})\mathbf{p}(\mathbf{x}_n)]$$
(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.

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

ここで

$$\mathbf{N}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{B}(\mathbf{x})$$
(2.17)

であり、N(x)は FEM における形状関数に相当する. Eq.(2-16)をxに関して微分すると、次の式が得られる.

$$u_{,i} = \mathbf{N}_{,i} \mathbf{u} \tag{2-18}$$

$$\mathbf{N}_{,i} = \mathbf{p}_{,i}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{p}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_{,i}^{-1} \mathbf{B} + \mathbf{p}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_{,i}$$
(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.

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

$$r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_I| \tag{2-21}$$

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.

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{I=1}^{n} N_{I}(\mathbf{x})\tilde{u}_{I}$$
(2-22)

ここで、 N_I は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.

 $\mathbf{K}\widetilde{\mathbf{u}} = \mathbf{f} \tag{2-23}$

$$\mathbf{K}_{IJ} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_{I}^{\mathrm{T}} \mathbf{D} \mathbf{B}_{J} \, d\Omega + \kappa \int_{\Gamma_{u}} \mathbf{N}_{I}^{\mathrm{T}} \mathbf{N}_{J} \, d\Gamma$$
(2-24)

$$\mathbf{f}_{I} = \int_{\Omega} N_{I} \mathbf{b} \, d\Omega + \int_{\Gamma_{t}} N_{I} \bar{\mathbf{t}} \, d\Gamma + \kappa \int_{\Gamma_{u}} N_{I} \bar{\mathbf{u}} \, d\Gamma$$
(2-25)

ここで、**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.

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

$$\mathbf{N}_{I} = \begin{bmatrix} N_{I} & 0\\ 0 & N_{I} \end{bmatrix}$$
(2-27)

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

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

$$\boldsymbol{\sigma}_{c} = \begin{bmatrix} \sigma_{x} \\ \sigma_{y} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix}$$
(2-29)

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

$$\boldsymbol{\sigma}_{c} = \mathbf{D}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{c} \tag{2-31}$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{c} = \mathbf{B}\widetilde{\mathbf{u}} = \sum_{I}^{n} \mathbf{B}_{I}\widetilde{\mathbf{u}}_{I}$$
(2-32)

$$\widetilde{\mathbf{u}}_{I} = \begin{bmatrix} \widetilde{u}_{I} \\ \widetilde{\nu}_{I} \end{bmatrix}$$
(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.

$$\mathbf{p}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) = [1, x, y, z], \ \mathbf{a}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) = [a_1(\mathbf{x}), a_2(\mathbf{x}), a_3(\mathbf{x}), a_4(\mathbf{x})]$$
(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.

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

$$\mathbf{N}_{I} = \begin{bmatrix} N_{I} & 0 & 0\\ 0 & N_{I} & 0\\ 0 & 0 & N_{I} \end{bmatrix}$$
(2-36)

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

$$\boldsymbol{\sigma}_{c} = \begin{bmatrix} \sigma_{x} \\ \sigma_{y} \\ \sigma_{z} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix}$$
(2-38)

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{c} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_{xx} \\ \dot{\varepsilon}_{yy} \\ \dot{\varepsilon}_{zz} \\ \dot{\varepsilon}_{yz} \\ \dot{\varepsilon}_{zx} \\ \dot{\varepsilon}_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u/\partial x}{\partial v/\partial y} \\ \frac{\partial v/\partial y}{\partial w/\partial z} \\ \frac{1/2(\partial v/\partial z + \partial w/\partial y)}{1/2(\partial w/\partial x + \partial u/\partial z)} \\ \frac{1/2(\partial u/\partial y + \partial v/\partial x)}{1/2(\partial u/\partial y + \partial v/\partial x)} \end{bmatrix}$$
(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.

$$\mathbf{K}_{IJ} \cong \sum_{a}^{n} \mathbf{B}_{I}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_{a}) \mathbf{D}(\mathbf{x}_{a}) \mathbf{B}_{J}(\mathbf{x}_{a}) V_{a} + \kappa \sum_{l}^{n_{u}} \mathbf{N}_{I}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}_{a}) \mathbf{N}_{J}(\mathbf{x}_{a}) S_{a}^{u}$$
(2-40)

$$\mathbf{f}_{I} \cong \sum_{I}^{n} N_{I}(\mathbf{x}_{a}) \mathbf{b}(\mathbf{x}_{a}) V_{a} + \sum_{I}^{n_{t}} N_{I}(\mathbf{x}_{a}) \overline{\mathbf{t}}(\mathbf{x}_{a}) S_{a}^{t} + \kappa \sum_{I}^{n_{u}} N_{I}(\mathbf{x}_{a}) \overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_{a}) S_{a}^{u}$$
(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.

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

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

Step1-2: Eq.(2-22)により計算点の速度U_tを求める

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

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

Step1-5: Eq.(2-22)により計算点の速度U_{t+Δt/2}を求める

Step1-6:
$$\mathbf{X}_{t+\Delta t} = \mathbf{X}_t + \Delta t \boldsymbol{U}_{t+\Delta t/2}$$
 (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.

Step2-1:
$$\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \ \mathbf{X}_{\overline{t}=0} = \mathbf{X}$$
 (2-48)

Step2-2: 次式により節点に作用する座標修正力Qを計算する.

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

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

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

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.

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

$$\mathbf{X}_{\bar{t}+\Delta\bar{t}} = \mathbf{X}_{\bar{t}} + \Delta\bar{t}u_{\bar{t}+\Delta\bar{t}}$$
(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を繰り返し、計算点同士が既定値以下に近接しないよう計算 点座標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·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 (= $\sqrt{2\dot{\epsilon}:\dot{\epsilon}}$)、 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.

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

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

$$T = 2\pi(\xi R)^2 \tau(\xi R) \tag{2-56}$$

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。

Fluid A (Newton) : $\mu_0 = 1000$ [Pa·s] n = 1.0 (2-57)

Fluid B (non-Newton) : $\mu_0 = 11320$ [Pa·s^{1.7}] n = 0.3 (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

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

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.

$$\mathbf{R}_{I} = \kappa \{ \mathbf{U}_{I} - \overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_{I}) \}$$
(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、 $\overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_I)$ 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 %

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

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,部分充満 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)を充満率が 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 mm, $\Delta t = 0.0556$ s,流 体密度 1000 kg/m³,重力加速度 9.8 m/s²,粘度 100 Pa·s とし,すべての時間ステップで再配
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

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 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/m³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.

$$\mu [Pa \cdot s] = \begin{cases} 2491 \dot{\gamma}^{-0.4186} & \text{if } \mu > 1000 & (\dot{\gamma} [s^{-1}]) \\ 1000 & \text{if } \mu \le 1000 \end{cases}$$
(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. 2-17 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対し、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,簡単のため三角形状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.

$$T_{\rm gap} = \int_0^l \frac{r\omega_0}{b} 2\pi r dr \tag{2-61}$$

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、完全充満流動場の厳密解およびシリコンオイルを用いた部分充満流動 場の実験結果との比較を行った.以下に要点をまとめる.

- 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満 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満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.
- 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.
- 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.
- 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.

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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溶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,溶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.

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

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

 $\mathbf{u} = \overline{\mathbf{u}} \qquad \qquad \text{on } \Gamma_u \tag{3-3}$

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + (\lambda - \frac{2}{3}\mu)\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\nu}\mathbf{I}$$
(3-4)

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

$$\dot{\varepsilon}_{v} = \dot{\varepsilon}_{xx} + \dot{\varepsilon}_{yy} + \dot{\varepsilon}_{zz} \tag{3-6}$$

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、σは応力テンソル、bは体積力ベクトル、uは速度ベクトル、nは単位法線 ベクトル、t̄は表面力ベクトルである. ū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、έ、 $έ_v$ 、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

$$p = -\lambda \dot{\varepsilon}_{\nu} \tag{3-7}$$

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溶融混練部には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/m³, 流体はニュートン粘性とし 2000 Pa・s を与えた. 回転速度 n は 200, 300, 400 min⁻¹ (ロータ翼端速度はそれぞれ 0.94, 1.41, 1.88 m/s), 質量流量 Q は 200, 300, 400, 600 kg/h(線速度はそれぞれ 8.8× 10⁻³, 13.1× 10⁻³, 17.5× 10⁻³, 26.3× 10⁻³ 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満率と軸方向断面充満率の変化がなく、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満率と軸方向 の断面充満率の変化がなくなること」と定義し,充満率はそれぞれ以下の式により求めた.

混練部充満率(Filling ratio of mixing zone):
$$f = V_r/V_f$$
 (3-8)

断面充満率(Cross-sectional filling ratio) : $f_c = V_{rc}/V_{fc}$ (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 充満率とした. なお、Fig. 3-3 に示すように、充満率を計算する軸方向の幅が 8-12 mm の間

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

で断面充満率が大きく変化しないことを確認しており, 10 mm 幅で近傍の断面充満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満率を算出した。Fig. 3-5 はその結果であり,各部の断面樹脂体積 fc 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. 充満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における全体充満状態を示す.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ýを示す.せん断速度ýはひずみ速度テンソルをを用い て以下のように定義した.

$\dot{\gamma} = \sqrt{2\dot{\epsilon}:\dot{\epsilon}}$

(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満状態である. 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 m の混練部上流, 中心, 下流それぞれについて示す. FF, FB 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, 局所的な充満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 (kg/h)/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ことが分 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* [(kg/h)/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

変化するという点ではこれに一致しているが, Q/n=0 での充満率が異なる.前記文献におい て二軸押出機の充満率は,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 において充満率が 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満率の下 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 における充満率が 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満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→0においても、クリアランス部とロータ 形状に依存した充満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満率である. この図から,本検討範囲である 0.5 $\leq Q/n \leq 3.0$ で断面充満率は Q/n に対して線形に変化し, Q/n=3.0 においても充満率が 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満で ある. FB に関しては Q/n が 3.2 以上で断面充満率が 100%となると想定され,充満状態が定 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 $1.0 \le Q/n \le 1.5$ (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, $1.0 \le Q/n \le 1.5$ 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. $1.0 \le Q/n \le 1.5$ 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 $1.0 \le Q/n \le 1.5$. Residence time is normalized by the average residence time.



Fig. 3-14 Normalized residence time distribution of model-FF for the conditions of $1.0 \le Q/n \le 1.5$. 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 $1.0 \le Q/n \le 1.5$ 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 が低い条件は充満率が低いため,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 $1.0 \le Q/n \le 1.5$.

3.5.3. 完全充満の平均滞留時間との差異

部分充満解析の実施により充満状態の変化が評価可能となったことから、本節では完全 充満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、完全充満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、部分充満の場合に、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満状態の変化 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.

 $t_f = f V_f \rho / Q \tag{3-11}$

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 $t_a \ge t_f$ 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 $t_a \ge t_f$ が良い一致を示すが, t_a が大きく (Qが小さく)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 での完全充満解析の結果から、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 節でロータが掻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 ベ 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 6.0s 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 混練機内部の充満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.今回の部分充満解析では Fig. 3-10 に示すように, 上流下流の充満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満 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、部分充満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満 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満率は、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満率の下限値が存在 する.軸方向に一様な順送り能力をもつ FF では充満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満率が高い領域が生じることによって、充満率の下限は 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 混練機内部の充満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満率t_fQ/pV_fは,充満 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,軸方向充満率が不均一な場 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,断面充満率が 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満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

- T. Ishikawa, S.-I. Kihara, and K. Funatsu, Numercial Simulation and Eperimental Verification of Nonisothermal Flow in Counter-Rotating Nonintermeshing Continuous Mixers. Polymer Engineering and Science, 2000. 40(2): pp. 365.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. 59(2).
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.



Log (Molecular Weight)

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.

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

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



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 m	nixing exper	iment using L	CM-100H a	and KTX-30.
···· · · · · · · · · · · · · · · · · ·		8 ° 1° °			

	Rotation speed	Production rate	
	(min ⁻¹)	(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, ミクロトームでスラ 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 で規定されるミクロト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 と完全噛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.

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

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



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).

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

 Table 4-4 Operating Conditions in the numerical analyses.

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

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

	Newtonian viscosity	Density
	(Pa·s)	(kg/m^3)
LCM-FF, FB	500	750
KTX-short, long	500	750

Table 4-6 Fluid Properties in the numerical analyses.

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 の充満状態を Fig. 4-11 に, KTX-short, KTXlong の充満状態を 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 ϵ , 粘度 μ を用いて次式で表される.

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

 $\sigma = \mu \dot{\gamma}$

(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満率が高くなる. LCM-FB は戻しの効果により、LCM-FF に比べ混練 部全体での樹脂充満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満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 脂で充満すると述べており、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 全に充満するという点で、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満していない. 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.

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

平均滞留時間 (Average residence time) : $T_{\text{mix ave}} = L_{\text{mix}}A/V$ (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 体の充満率が低く, 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 は全体の充満率が高く, 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 部の長さが変化した場合でも,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 は充満率が低く, 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 形状が小さい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.

$$T_{\rm e} = T_{\rm mix,ave} P_{\rm th}$$

(4-5)

ここで、 $P_{\rm th}$ 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. $T_{\rm e}$ 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 $T_{\rm e}$ 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 いが,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

- S. Hotani and Y. Kuroda, *Continuous Mixers for Resin*. Kobe Steel Engineering Reports, 2009. 59(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.
- I. Manas-Zloczower, Mixing and Compounding of Polymers, in Mixing (Second Edition), Ica Manas-Zloczower, Editor. 2009, Hanser. pp. I-XXIV.
- I. Manas-Zloczower, A. Nir, and Z. Tadmor, *Dispersive Mixing in Rubber and Plastics*. Rubber Chemistry and Technology, 1984. 57(3): pp. 583-620.
- 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.
- 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. Ainser, *Residence Time Distribution in a Corotating Twin-Screw Extruder*: Chemical Engineering Science, 2000. **55**(9): pp. 1641-1651.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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溶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可塑化混練部に投入される[1]. 可塑化混練部での 溶融状態は,混練機の機械負荷や,溶融混練部での混練挙動に影響を与えることから,溶融 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, Trippe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、固体樹脂の一部が溶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溶融部が拡大してい く.

この固体樹脂から溶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

溶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.





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.

$$\tau = \frac{2T_r}{DS} \tag{5-1}$$

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[Pa・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γ [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.

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

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

$$\dot{\gamma} = \frac{\pi DN}{60C} \tag{5-3}$$

ここで, Nは内筒の回転速度[min-1], Cはクリアランスサイズ[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.

$$\eta = \frac{\eta_0 e^{-b(T-T_a)}}{\left[1 + (\beta \dot{\gamma})^2\right]^{\frac{1-n}{2}}}$$
(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 ℃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.

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

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

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 節で示したものと同じ材料,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 ℃となるよう制御した. PP ペレットは,130 ℃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 ℃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 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(完全に溶融)および固液二相(空隙が溶融樹脂で充填)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。
- ・ロータ表面から溶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溶融していたため,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溶融樹脂が充 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溶融が見られたため,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η2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η₁および液相のせん断速度γ₁ 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ý2とせん断応力の比から固液二相の粘度η2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.

	-				
	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	Ϋ́1	1/s	-	268	226
Viscosity of liquid phase	η_1	Pa•s	-	772	811
Velocity at boundary surface between liquid and solid-liquid phase	<i>u</i> 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

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

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ý₂およびη₂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.

$$\eta_{2} = 107708\dot{\gamma}_{2}^{-0.862} \qquad (\eta_{2} \text{ [Pa} \cdot \text{s]}, \dot{\gamma}_{2} \text{ [s}^{-1}]) \qquad (5-7)$$

$$\tau = 107708\dot{\gamma}_{2}^{0.138} \qquad (\tau \text{ [Pa]}, \dot{\gamma}_{2} \text{ [s}^{-1}]) \qquad (5-8)$$

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℃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(1s⁻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10-60 s⁻¹程度,固液二相 で40-400 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.

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

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

$$Q_g = \eta \dot{\gamma}^2 \tag{5-11}$$

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.

$$H_0 = C_p T_0 \tag{5-12}$$

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.

$$T = \frac{H}{C_p} \qquad \qquad \text{if} \quad H \le C_p T_{\text{mp}} \tag{5-13}$$

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

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

ここで、 $T_{\rm mp}$ 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 \circ)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.

$$k = 17227(\dot{\gamma}/10)^{-1.871}p^{0.563}$$
 (k [Pa·s], $\dot{\gamma}$ [s⁻¹], p [Pa]) (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1.0mm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 ℃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 ℃, 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 ℃の場合には 825 kg/m³ とした. 流体粘度は, 温度が 155 ℃未満は Eq.(5-5)に示す固相での運動抵抗率, 155 ℃にお いては Eq.(5-7)に示す粘度, 155 ℃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℃)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.



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

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.

溶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 転軸近傍から溶融し,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,溶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溶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

- 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.
- Z. Tadmor, Fundamentals of Plasticating Extrusion. I. A Theoretical Model for Melting. Polymer Engineering & Science, 1966. 6(3): pp. 185-190.
- 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.
- B. Vergnes, G. Souveton, M. L. Delacour, and A. Ainser, *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.

- 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.
- 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.
- A. Altınkaynak, 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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/O 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,滞留時間の長い流体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、固相にくら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性から,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 邉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.