

二軸押出シミュレーションソフトウェア "TEX-FAN" の新機能開発 ～ 2D-3D 連成解析による局所混練評価機能～

Development of Newest Feature of Twin Screw Extrusion Simulation Software "TEX-FAN"

～ Local Mixing Evaluation Feature by 2D-3D Coupling Analysis ～



博士 (工学) 富山 秀樹
Dr. Hideki Tomiyama



博士 (工学) 福澤 洋平
Dr. Youhei Fukuzawa

要 旨

FAN 法 (Flow Analysis Network Method) を用いた二軸押出機内の流動解析では、従来二次元解析手法をベースとしたプログラムを開発してきたが、今回は同様の演算手法による三次元解析プログラムを開発した。プログラムの開発では、従来の二次元解析を実施した後に解析領域を一部ピックアップし自動的に三次元解析を実施する連成解析機能を搭載することで、三次元解析の条件設定の手間を省略することができた。二次元および三次元解析結果をそれぞれ比較したところ物理的にはほぼ一致する結果が得られ、今回開発した解析手法の妥当性が確認できた。

— Synopsis —

In a twin screw extruder flow analysis using FAN (Flow Analysis Network) method, we have developed a program which is based on a two-dimensional analysis technique in the past years. This time, we had developed a three-dimensional analysis program using the same calculation method. This program has a coupled function, by which after performing two-dimensional analysis for whole region, three-dimensional analysis is performed for the limited region selected automatically. This function enables to omit the troubles in setting the three-dimensional analysis condition. Compared with 2D and 3D simulation results, both data were almost the same physically. So, we confirmed the validity of newly developed analysis methods.

1. 緒 言

二軸スクリュウ押出機では、スクリュウ回転に伴う樹脂の混練状態や速度・圧力分布などを予測するために、Flow Analysis Network Method (FAN 法) や有限要素法 (Finite Element Method: FEM) などの CAE 手段を用いる。

FAN 法では、計算条件として押出機の装置構成と運転条件および樹脂物性を与えることにより、押出機内部の充填率、圧力、温度、固相占有率、滞留時間、トルク、動力等の物理量を求めることができる。この計算にて得られ

る値は、スクリュウ断面方向の平均値として軸方向に沿った分布が得られる。この解析は以下の手順で行う。①スクリュウとシリンダとの間で形成される流路を、シリンダの円周方向に沿って切り開いた2枚の平板と見なす。②スクリュウ回転速度で平行移動する単純剪断流動場で着目要素そのものが有する流体の搬送量と上流からの流入バランスを解く。③着目要素内の流体圧力、滞留時間や下流側へ流出される流体量を算出する。この演算をシリンダ内軸方向の要素へ順次実施することで最終的に押出機内の流路領域全体の各種物理量を求めることが可能となる^{1)～6)}。

FEM 解析ではスクリュウ形状を実際の形状へ詳細にモ

デル化し、解析の対象となる領域の流路全体を三次元 (3D) の格子要素に分割する。要素内の計算点に対し運動方程式やエネルギー方程式を連立させて解くことで、全計算点の物理量が求まる^{7)~11)}。FEM では、要素数 (計算点数) が増すと連立方程式の元数が増すため、その方程式を解くアルゴリズムの容量が増す。計算領域の拡張または要素分割の詳細化をするためには、コンピュータメモリの容量や演算時間の膨大化を招く。このため、現在でも押出機全領域を対象とした解析は非常に困難である。

以上の実情を踏まえ、二軸スクリュウ押出機の流動解析では、押出機全体の温度・圧力等の分布を予測するためには処理が迅速な 2D 解析が用いられる。一方、スクリュウ個々の混練特性把握や混練部位の物理量分布を予測するためには 3D 解析を用いることが一般的である。これら解析はそれぞれ異なるソフトウェアを用いるため、統計的に見ると条件設定や演算結果の処理に多くの煩雑性を有する。

本研究では、演算負荷を下げながら 3D 解析を可能とするため、FAN 法をベースとした 3D 解析手法を新たに開発し、従来の 2D ソフトウェア "TEX-FAN" に融合させることで、2D と 3D 解析を自動連成させることを試みた。これにより、解析条件設定の煩雑性を解消し、さらには押出機全体と局所解析の双方を可能とし、より効率的な CAE 活用法の提案を目的とする。

2. 解析手法

2.1 二次元 FAN 法

2D-FAN 法に基づく "TEX-FAN" の演算手法は既報¹⁾で述べているため、ここでは概略的な説明のみを行う。2D-FAN 法では、スクリュウピース個々の押出特性と粘性発熱特性をあらかじめデータベース化し、スクリュウ回転数や押出量などの設定値を代入することでそのスクリュウピース領域で生じる圧力損失や粘性発熱量の演算が行われる。スクリュウの押出特性式は (1) 式で表すことができ、スクリュウの各形状因子によって α' と β' の変数が定まる。

$$\bar{Q} = \alpha' - \beta'(\Delta\bar{P} / \bar{L})$$

$$\bar{Q} = \frac{Q}{ND^3}, \quad \Delta\bar{P} = \frac{\Delta P}{\eta N}, \quad \bar{L} = \frac{L}{D} \quad (1)$$

ここで、 Q は体積流量 [m^3/s]、 N はスクリュウ回転数 [rps]、 ΔP はエレメント長 $L[m]$ における圧力差 [Pa]、 D はスクリュウ外径 [m]、 η は見かけの熔融粘度 [Pas] である。図 1 に TEX65 a III のフルフライトスクリュウの特性曲線を示す。縦軸の切片が輸送特性 (スクリュウ 1 回転あ

たりの樹脂の搬送量) で傾きが昇圧特性 (同樹脂の昇圧量) の大きさを意味する。各スクリュウにおいて α' と β' をデータベースから引用し押出条件を (1) 式に代入すると ΔP のみが未知数となるため、圧力損失を求めることができる。

粘性発熱量は、(2) 式に示すとおり \bar{Q} の二次関数で表現することができ、押出機サイズ D が既知の条件では Q/N つまりスクリュウ回転あたりの吐出量に対する関数で求めることができる。

$$\bar{E}_V = \varepsilon_1 \bar{Q}^2 + \varepsilon_2 \bar{Q} + \varepsilon_3 \dots \dots \dots (2)$$

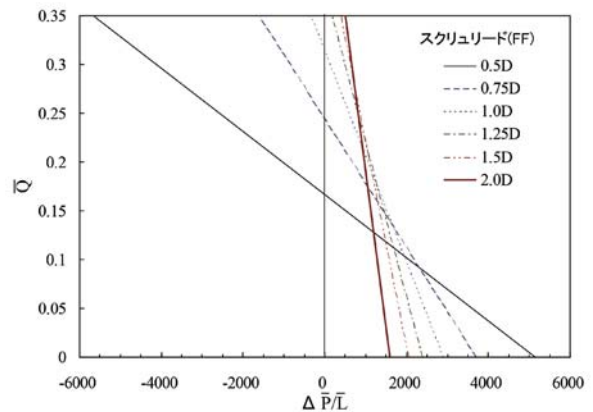


図1 フルフライトスクリュウの押出特性

式中の ε_1 から ε_3 はスクリュウ毎に定まるパラメータである。図 2 に TEX65 a III のフルフライトスクリュウの粘性発熱曲線を示す。リードが長くなるほど形状はロータに近くなり、樹脂のフライト通過量が増すため発熱量は増加する傾向を示す。

2D-FAN 法では樹脂の熔融可塑性が予測できることも大きな特徴の一つである。可塑化開始位置は、固体のみが存在する完全充满領域で、内部圧力が上昇を開始した部位と仮定する。その条件下で、軸方向の各微小区間で生じる剪断エネルギーと伝熱エネルギーが樹脂に与えられることで可塑化が進行するアルゴリズムを採用する。

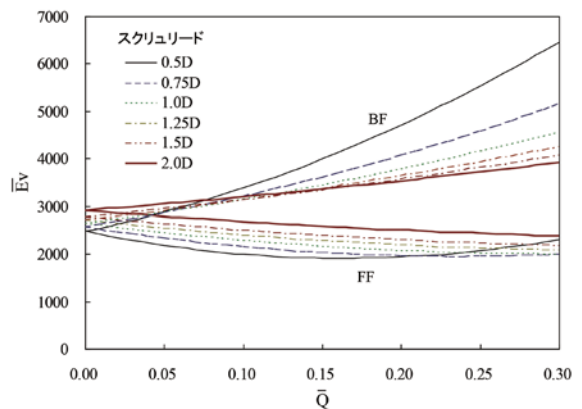


図2 フルフライトスクリュウの粘性発熱特性 (FF: 順送りフライト、BF: 逆送りフライト)

2.2 三次元 FAN 法

3D 解析では、スクリュ形状を具体的に三次元形状にモデル化し流路を要素分割することで演算を実施する。このため、(1)および(2)式のスクリュ特性パラメータを予め算出してデータベース化する必要はない。本解析では、スクリュ軸(z)方向の着目断面(x,y 座標面)において予め入力したシリンダ外径、フライトクリアランス、軸間距離から Booy の理論¹²⁾に基づいてスクリュ表面形状を描画する。そのスクリュをシリンダ内の左右軸上に配置することでスクリュとシリンダの表面を形成する。

上記の通り 3D 解析においてはスクリュ特性パラメータの算出は不要であり、スクリュの詳細形状を元に作成した流体要素を対象に、スクリュ回転や溝深さなどから流量および圧力損失の演算を行う。押出機の軸方向座標を z、軸断面での上下方向座標を x、左右軸を結ぶ方向座標を y とした三次元場では、(1)式のスクリュによる押出特性式は(3)式で表せる。

$$Q = \frac{AHN}{2} - \frac{H^3L}{12\eta} \frac{dp}{dz} \dots\dots\dots(3)$$

A はシリンダ表面およびスクリュ表面側に相当する要素面積 [m²]、L は z 軸方向の要素長さ [m] である。溝深さ方向に要素分割を行う場合、H は溝深さ方向の要素長さ [m] となる。(3)式においては Q と dp/dz が未知数となるが、3D 解析では(1)式の a'、β' のスクリュ特性パラメータが具体的に求まらず充満率の予測が行えないため、完全充満を前提とした解析を行う必要がある。この場合、全ての要素に流入および流出する流量は同一つまりは Q 定数となり、(3)において dp/dz のみが未知数となるため、要素内の圧力場の演算が可能になる(図3)。

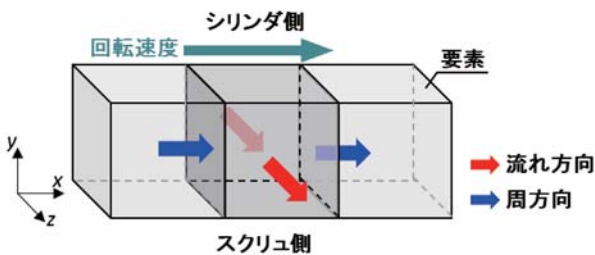


図3 3D 解析における要素間の流量バランス

樹脂温度計算においては、軸方向の流れに沿ってシリンダからの伝熱とスクリュ回転による剪断発熱とのエネルギー収支があるため、系全体の物理量のバランスを均一化させることを前提とする FAN 法の考え方は適用できない。そのため、今回は三次元要素において(4)式のエネルギー方程式を有限体積法(FVM 法)にて算出することにした。

(28)

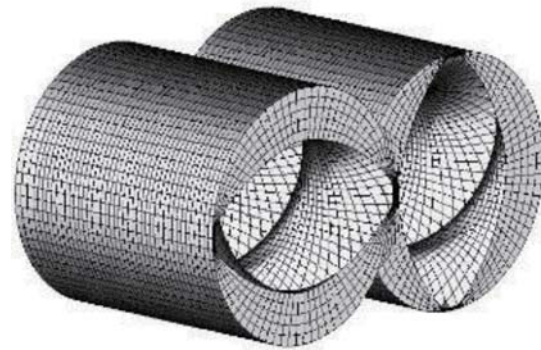
$$\rho C_p (\nabla \cdot \mathbf{u}\phi) = \lambda \nabla \cdot \nabla \phi + \eta \dot{\gamma}^2 \dots\dots(4)$$

ρ は溶融密度、C_p は比熱、λ は熱伝導率、γ̇ は剪断速度である。

要素分割に関しては、(3)式に基づく圧力計算については、これまでの研究にてスクリュの高速回転場においては溝深さ方向には圧力分布がほとんど生じない結果が得られているため、溝深さ方向には単一要素とし、回転方向および軸方向のみに詳細分割を行うこととした(図4(a))。また左右軸の噛み合い部分においては、左右軸のスクリュ表面座標からそれぞれ円周方向に描画した要素ラインの中間点を左右軸間の中心座標とし、その中心座標から左右スクリュ表面で構成される流体要素を作成した。ただ、この軸間に存在する左右要素間においては統合させた流量収支計算を行うことが妥当と考え、図5に示すようにそれぞれ個別要素ながら圧力計算においては同一要素と見なした演算を行った。(4)式に基づく温度計算では、シリンダからの伝熱およびスクリュのフライトクリアランス部で生じる高い剪断発熱により、溝深さ方向に対する樹脂温度分布を予測する必要があるため、溝深さ方向へも要素分割を行った(図4(b))。分割数に関しては、溝深さ方向に5要素構成することで定性的に妥当な温度分布が得られ、かつ比較的短い計算時間で演算が終了することを確認したため(図6)、以降5要素分割にて検証解析を実施した。



(a) 圧力計算 (溝深さ方向に単一要素)



(b) 温度計算 (溝深さ方向に5分割要素)

図4 3D 解析における演算要素形状

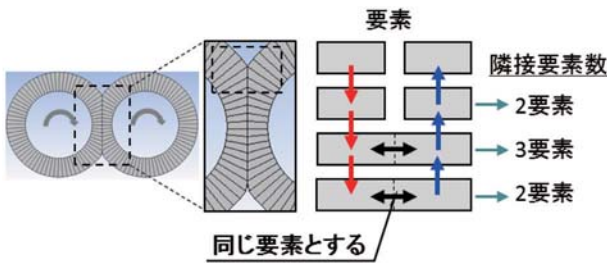


図5 軸間噛合部の要素分割およびその取扱い

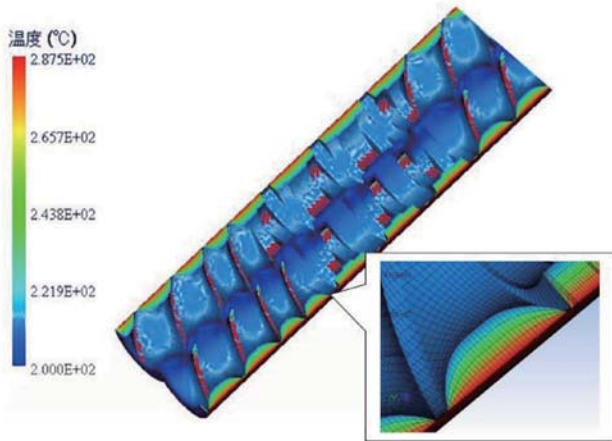


図6 溝深さ5分割要素による温度分布予測例

3. 2D と 3D 解析との連成手法

2D、3D 解析のいずれでも、押出機の解析を行うには押出機の寸法やスクリー構成などの押出機データ、スクリー回転数や吐出量などの押出条件データ、および粘度モデルデータや密度、比熱などの樹脂物性データを入力条件とする。さらに、少なくとも一点の樹脂圧力や樹脂温度などの物理量を境界条件に設定した上で解析を実施する必要がある。2D 解析における演算手順は既報¹⁾に準じるためここでは省略し、3D 解析の演算手順のみを図7に従って述べる。まず、設定したスクリー形状に従いスクリー軸方向各断面におけるスクリー断面形状を描画し、事前設定した周方向の要素分割数にもとづきスクリーおよびシリンダ表面に節点を設ける。その節点間を直線で結ぶことで圧力計算用の流体要素が作成できるが、温度計算のためにその溝深さ方向に5等分割し要素を微細化する。要素分割が終了すると、入力設定値に従い初期条件や境界条件を設定し、圧力計算のための FAN 法演算および温度計算のための FVM 演算を実施する。

今回の2D と 3D との連成解析の開発においては、2D 解析で得た押出機全領域の演算結果をもとに、一部の領域だけを抽出し、3D 解析を追加実施する機能とした。この機能の狙いは、3D 解析は軸方向断面の平均値を解析結果として出力するのに対し、3D 解析では、混練

領域等での温度や圧力分布を詳細に評価できることである。ただし、2D 解析前提として、3D 解析を実施することが必要である。そのため、3D 解析のアルゴリズムでは、解析領域の出入口の樹脂温度や樹脂圧力の境界条件は2D 解析の結果をそのまま用いる。さらには、樹脂データや押出機データなども2D 解析時に設定した条件を用いることができる。このため、3D 解析で実質的に設定する項目は解析するスクリー領域のみである。連成解析では、① 2D 解析は従来の“TEX-FAN”と同様の手法で実施、② 2D 解析結果が出力された後に3D 解析のためのスクリー領域を選択、③ 3D 解析の実行ボタンを押す。以上のステップで自動的に解析を開始する機能とした。図8は2D 解析結果画面であり、3D 解析を行うためのスクリー領域を選択した状態を示す。

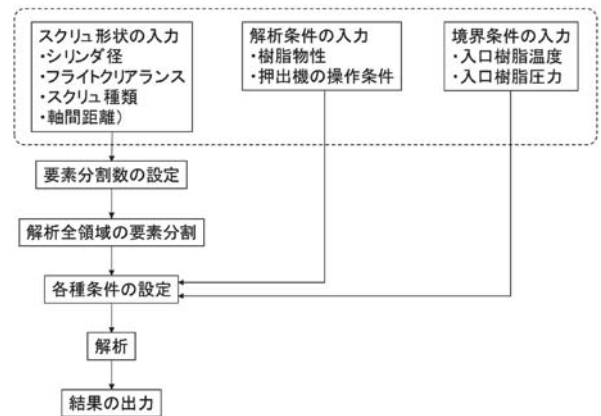


図7 3D 解析のフローチャート (点線枠内は連成解析時では2D 結果から自動転送されるデータ)

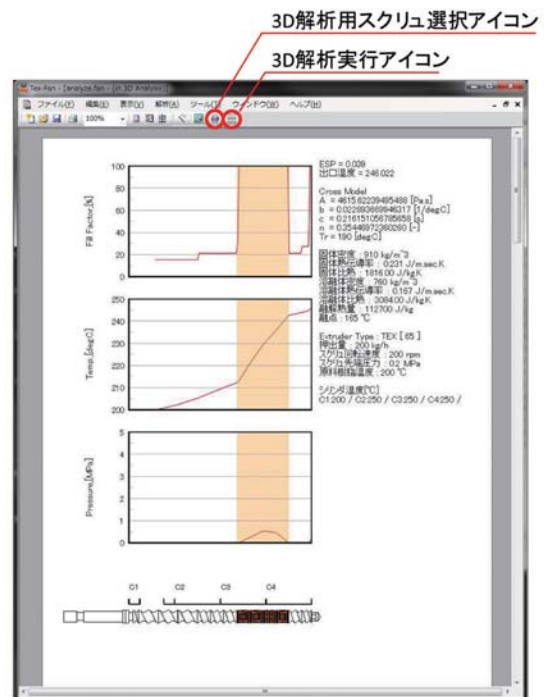


図8 2D 結果表示後の3D 解析実行メニュー画面

4. 検証解析

図9は、TEX30 aでポリプロピレン(PP)樹脂を混練した場合の押出機先端の樹脂温度を示す。2D解析を基本機能とした“TEX-FAN”の計算値は、実測値から±10℃以内であり比較的良好な精度である。本報では、3D解析の妥当性評価と、2Dと3Dとの連成手法の確からしさの評価を目的とするため、実験結果との定量的な比較は行わず、2D解析結果との比較を行うこととした。

解析の対象はTEX65aⅢによるPP樹脂(MFR=9)の押出プロセスとした。解析に用いた樹脂粘度式は(5)式のCarreauモデルである。式中のパラメータを見かけの熔融粘度の測定値にフィッティングした場合の近似曲線を図10に示す。

$$\eta = \frac{\eta_0 \alpha}{[1+(c\alpha\dot{\gamma})^2]^{\frac{1-n}{2}}} \dots \dots \dots (5)$$

$$\alpha = \exp\{-\beta(T - T_r)\}$$

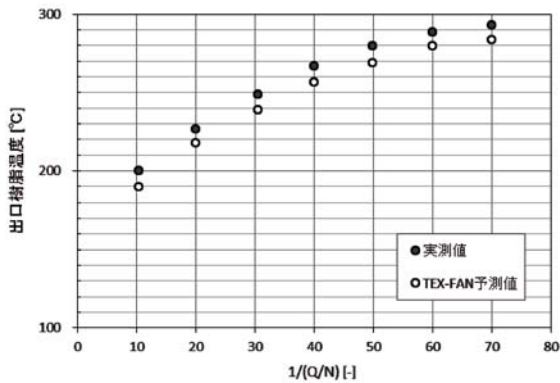


図9 2DのTEX-FANによる押出樹脂温度の予測精度

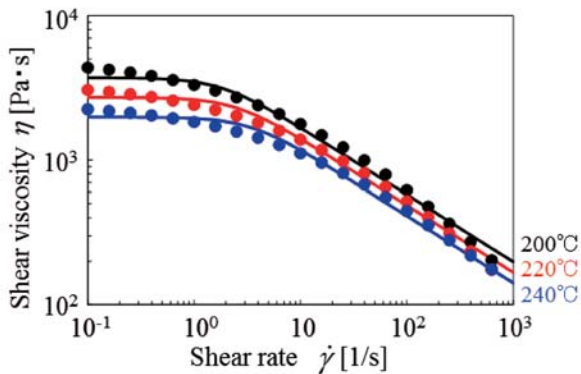


図10 2DのTEX-FANによる押出樹脂温度の予測精度

η_0 はゼロ剪断粘度 [Pa·s]、 T は樹脂温度 [°C]、 T_r は参照温度 [°C]、 $\dot{\gamma}$ は剪断速度 [1/s]、 c 、 β 、 n はモデルパラメータである。押出機のスクリュ構成は図11に示す系とし、混練領域のニーディングディスクの構成は、 $L/D=1$ (L は軸方向長さ、

(30)

D はシリンダの公称径で本報の解析では $D=65\text{mm}$ の45°ずらし順ねじれタイプを2組、90°ずらしを1組、45°ずらし逆ねじれタイプを1組の計 $L/D=4$ で構成した。押出量は200kg/h、スクリュ回転数を200rpm、押出機への供給樹脂温度は200℃、シリンダ設定温度はC1(図12参照)が200℃でそれ以外は250℃として解析を実施した。この系の解析時間は、core-i7のCPUで4GBのメモリを搭載したwindows7のコンピュータを用い、2D解析は5秒弱、3D解析は25秒であった。

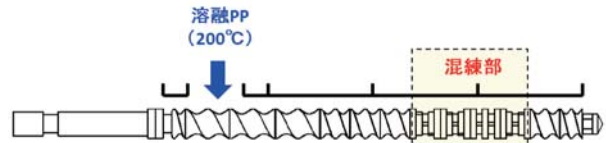


図11 検証解析を行ったスクリュ構成

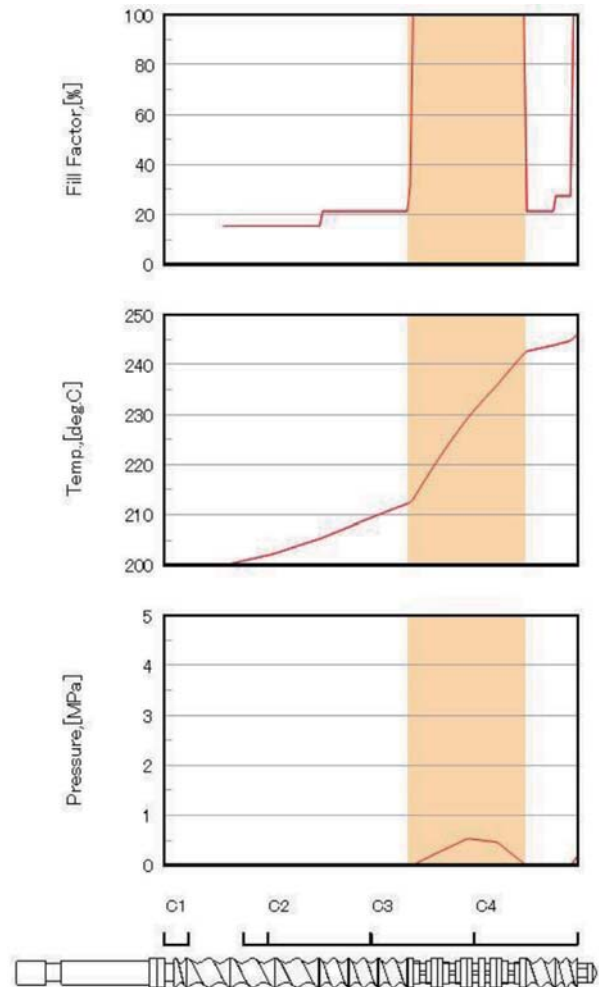


図12 2D解析結果(充填率・温度・圧力)

5. 結果と考察

図12は、2D解析結果を示す。フルフライトスクリュで構成される非充填の輸送部位ではシリンダからの伝熱により樹脂温度が上昇する。一方、混練部位では完全充填による樹脂圧力の上昇と、剪断発熱による急激な樹脂温度上昇とが見られる。いずれも従来の経験に照らして妥当な結果が得られている。この結果をもとに、図12で完全充填の結果が得られている、ニーディングディスクで構成されるL/D=4の混練部位を対象に3D解析を実施した。図13に2Dと3Dとの断面平均温度計算結果を示す。図14は、流路下側断面の3D樹脂温度分布図を示す。3D解析における温度境界条件は混練部最上流部(212℃)のみであり、図13を見ると3Dでは混練部中央の樹脂温度が2Dと比較し高くなっているものの混練部終端では2Dとほぼ同様の242℃を示している。図14は、混練領域で262℃と最も平均樹脂温度が高い順送りニーディングディスクを経た直後のL/D=2の位置での断面温度分布を示す。フライト頂部近辺のフライト押し側に存在する樹脂温度は236℃であるが、フライトクリアランスを通過直後の樹脂温度は298℃を示した。この部位は最も混練圧力が高いため、樹脂の漏洩が比較的少なく

効率的にフライト頂部での混練が促進されている。樹脂はその後、直交ニーディングディスクと逆送りニーディングディスク領域で均質化が図られ、またシリンダによる吸熱作用も働くことで樹脂温度が若干低下しながら242℃にて混練領域を流出する予測結果となった。

図15は2D解析と3D解析により求めた混練領域の断面平均圧力を示す。ニーディングディスクの昇圧特性から、L/D=2の位置で混練圧力が最大値を示すことは、双方の解析で一致している。最大圧力値は3D解析結果の方が低く計算されている。これは、図13に示した樹脂温度の違いによる粘度の差異から生じるものであり、樹脂温度が同等であれば、3D解析は2D解析とほぼ同等の圧力分布が得られると考えられる。

2D解析では、スクリュの押出特性と樹脂の供給量とのバランスにより充填率を予測することができる。3D解析では、微小な流体要素単位での計算となるため、対象スクリュ部位全体の充填率を予測することは難しい。ただし、連成解析を用いる本報の手法の場合、2D解析から実際の押出機内圧力値を境界条件として受け渡しを行うため、3D解析で得られた圧力値はより厳密に近い数値と判断することができる。一方、3D解析では、前述の通り完全充填系と仮定した連続体の流動解析を行う。

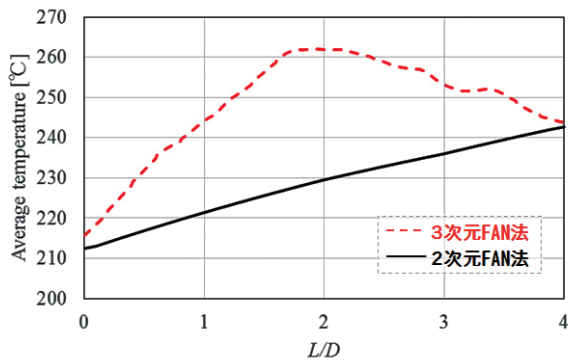


図13 2Dと3D解析による樹脂温度結果

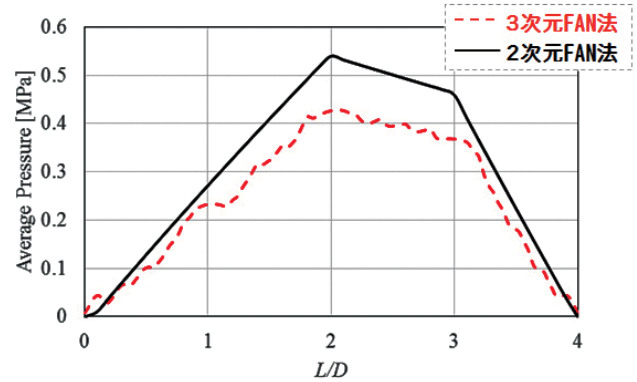


図15 2Dと3D解析による樹脂圧力結果

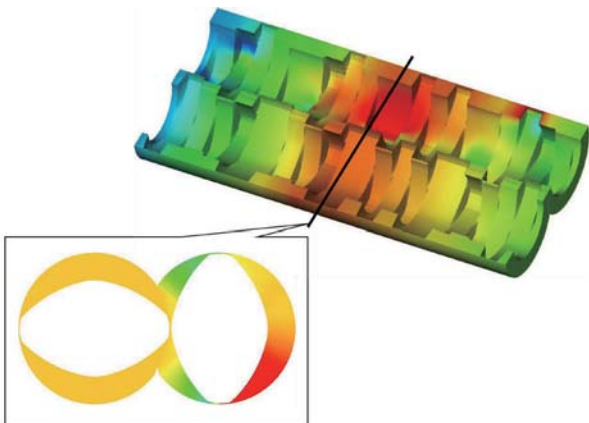


図14 3D解析による樹脂温度分布結果

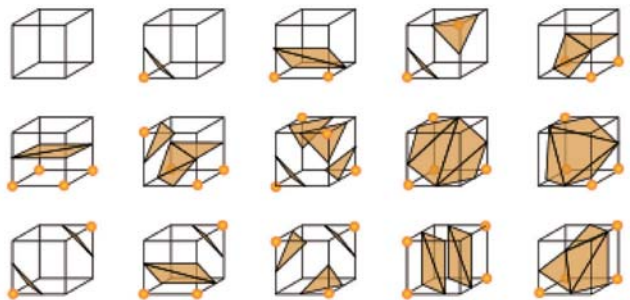


図16 Marching Cube法による面の生成パターン

その結果、連続性を維持するために負圧にて出力される節点が生じる。本 3D 解析は、基本的に、常圧以上を前提とした解析のため、この負圧部分は、実際には樹脂が存在しない領域と見なすことができる。そのため、本 3D 解析においては、節点上の圧力が大気圧以上か否かで樹脂の存在可否を判断することとした。結果の画像出力で、正圧節点を対象として Marching Cube 法¹³⁾に基づく充満率の 3D 表示を試みた。Marching Cube 法とは、6 面体 8 節点要素の各節点での樹脂の有無によって、自由表面形状を決定するボリュームレンダリング手法であり、図 16 に示すとおり、面の生成パターンを 15 通りに集約できる手法である。この手法に基づいて、充満状態を描画した 3D 結果結果を図 17 に示す。また、断面平均の充満率の解析結果を図 18 に示す。今回の解析で得られた混練圧力の絶対値は、1MPa 以下と比較的低く、3D 解析ではフライト背面で負圧になる部位が存在した。この結果、部分的に充満できていない領域が表示される結果となった。また、2D 解析結果と比較しても 3D 解析の予測では充満長がやや短くなる結果となった。この 3D 解析の結果は、実際の押出現象から見て妥当である。本 3D 解析の結果は、樹脂の充満状態を視覚的に理解する上で有用であり、従来の 2D 解析だけでは得られない利点であると判断できる。

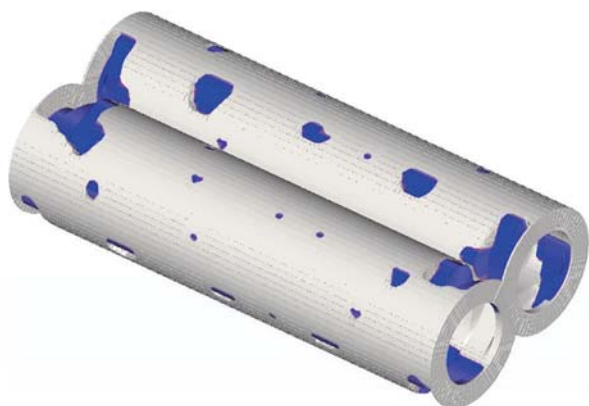


図 17 Marching Cube 法による充満率の描画

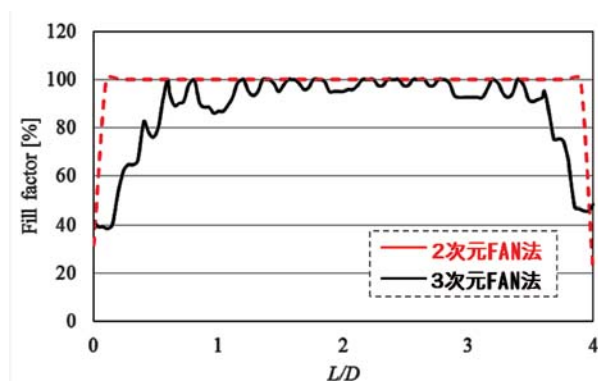


図 18 2D と 3D 解析による充満率予測結果

6. 結 言

FAN 法をベースとした 3D 解析手法を開発し、従来の 2D 解析ソフトウェアに搭載し自動連成による解析手段の構築を行った。3D 解析結果は 2D の解析結果に対し、樹脂温度は局所的な発熱による温度上昇をより厳密に予測することが可能となった。一方、樹脂圧力はほぼ同等の精度による予測が行えた。さらには、圧力結果をもとに充満率のレンダリング手法を導入することにより、充満挙動の評価が行えるようになった。すなわち、従来の 2D 解析結果では得られなかった局所的な樹脂挙動や軸方向断面の物理量分布の評価が可能となった。

今後は温度や圧力だけでなく、3D 解析による利点を活かした滞留時間分布の予測やベントアップ限界条件の予測など、さらなる演算機能の拡張を図る所存である。

参 考 文 献

- 1) 富山秀樹, 石橋正道, 井上茂樹: 日本製鋼所技報, 55, 32, 2004
- 2) H. Potente, J. Ansahi, B. Klarholz: Intern. Polym. Proc., 9, 11 (1994)
- 3) H. Potente, U. Melisch: Intern. Polym. Proc., 11, 101 (1996)
- 4) S. Bawiskar, J. L. White: Intern. Polym. Proc., 10, 105 (1995)
- 5) S. Bawiskar, J. L. White: Polym. Eng. Sci., 38, 727 (1998)
- 6) C. G. Gogos, Z. Tadmor, M. H. Kim: Adv. Polym. Tech., 17, 285 (1998)
- 7) 梶原稔尚, 中野祥生, 二之宮慎一, 船津和守, 成形加工, 5, 557 (1993)
- 8) 二之宮慎一, 中野祥生, 梶原稔尚, 船津和守, 日本製鋼所技報, 49, 20 (1993)
- 9) 富山秀樹, 梶原稔尚, 船津和守, 日本製鋼所技報, 57, 18 (2006)
- 10) T. Ishikawa, S. Kihara and K. Funatsu, Polym. Eng. Sci., 42, 840 (2002)
- 11) K. Funatsu, S. Kihara, M. Miyazaki, S. Katsuki and T. Kajiwara, Polym. Eng. Sci., 42, 707 (2002)
- 12) M.L.Booy: Polym. Eng. Sci., 18, 12 (1978) 973
- 13) W. E. Lorensen and H. E. Cline: Computer Graphics, 21, 163 (1987)