

二軸スクリュ押出機内の樹脂熱流動現象を 予測する数値解析技術

株式会社HASL

依藤(よりふじ) 大輔

〒177-0041 東京都練馬区石神井町3-30-23 石神井ウエスト201

E-mail: yorifuji@hasl.co.jp

URL: <https://www.hasl.co.jp>

目次

はじめに	2
1. 二軸スクリュ押出機内数値解析の技術背景	3
1.1 既往解析技術(1D/2D FAN, 3D FEM/FVM)の特徴	3
1.2 新規解析技術(2.5D FEM)の開発方針	5
1.3 スクリュ内樹脂流動の基礎理論	6
2. 二軸スクリュ押出機内成形現象の定量化法	11
2.1 二軸スクリュモデリング技術	11
2.2 Hele-Shaw薄肉流れの定式化に立脚した有限要素解析技術	16
2.3 樹脂充満状態の定量化法	26
3. 数値シミュレーション例	34
3.1 樹脂充満状態評価シミュレーション	34
3.2 混練性評価シミュレーション	43
3.3 複合材料の繊維破断シミュレーション	48
3.4 脱揮シミュレーション	56
おわりに	62

はじめに

- 二軸スクリュ押出機内には、樹脂充満状態や混練状態など、一般的な解析技術では定量化が難しい諸現象が内在しています。
- 本講座では、これらの諸現象を実用的に分析可能な解析技術(2.5D FEM)を提案し、その定量化法と適用例について解説します。

1. 二軸スクリュ押出機内数値解析の技術背景 (pp.3~10)
2. 二軸スクリュ押出機内成形現象の定量化法 (pp.11~33)
3. 数値シミュレーション例 (pp.34~61)

1. 二軸スクリュ押出機内数値解析の技術背景

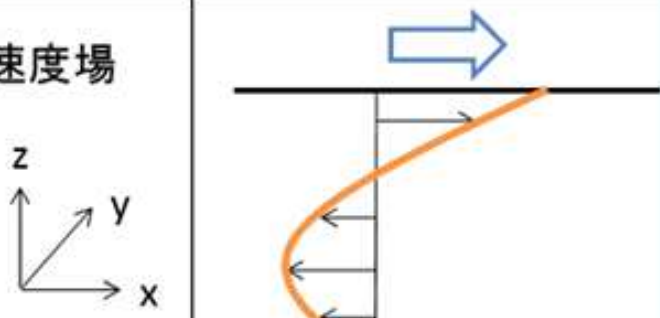
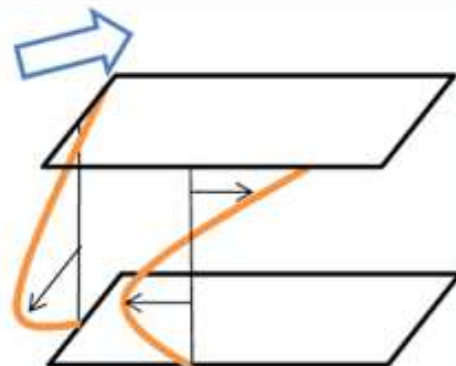
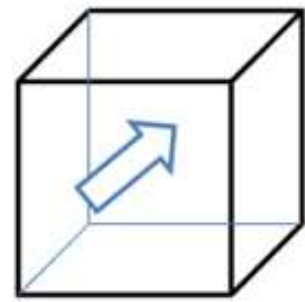
1.1 既往解析技術 (1D/2D FAN, 3D FEM/FVM) の特徴

Table. Commercially available simulation software for twin screw extruder

FAN: Flow Analysis Network
FEM: Finite Element Method
FVM: Finite Volume Method

Software	Developer/Vendor	Numerical Method	Reference (URL)
Akro-Co-Twin Screw®	University of Akron, USA	FAN (2D)	http://www.temarex.com/extrus.htm
WinTXS™	Poly Tech, Polymer Processing Institute, USA	FAN (2D)	http://www.b4uextrude.com/wintxssimulation.html
Ludovic®	Sciences Computers Consultants, France	FAN (2D)	https://www.sccconsultants.com/en/ludovic-twin-screw-simulation-software.html
Sigma	University of Paderborn, Germany	FAN (2D)	https://ktp.uni-paderborn.de/en/foerderverein/software/sigma
TEX-FAN	The Japan Steel, Works, Ltd., Japan	FAN (2D)	https://www.jsw.co.jp/ja/product/plastics_machinery/news/COPY-news6883460791915119466.html
Polyflow	Ansys Inc., USA	FEM (3D)	https://www.ansys.com/ja-jp/products/fluids/ansys-polyflow
SCREWFLOW-MULTI	R-flow Corporation, Ltd., Japan	FVM (3D)	http://www.rflow.co.jp/screwflow-multi.html
Twin Screw Simulator	HASL Co., Ltd., Japan	FEM (2.5D)	https://www.hasl.co.jp/indexn.html

数値解析技術の特徴

	2D	2.5D	3D
計算手法	FAN法	2.5D FEM法 (Hele-Shaw流れ)	直接数値計算 粒子法など
計算負荷	軽い	中程度	重い
解析対象	押出機全体	押出機全体	一部のエレメント
速度場			
ブランド	Akro-co, Ludvic, TEX-FAN etc.	HASL TSS	Polyflow particle works etc.

1.2 新規解析技術(2.5D FEM)の開発方針

- Robust to use, Easy to use, User-friendly (2D FANメリット踏襲)
- Short computational time: 数分～数時間以内 (2D FANメリット踏襲)
- Integrated simulation: 全域解析 (2D FANメリット踏襲)
- Detailed & User customized analysis: (close in on 3D FEM, FVM)

1.3 スクリュ内樹脂流動の基礎理論

参考文献: “Principles of Polymer Processing” second edition, Zehev Tadmor, Costas G. Gogos, Wiley-Interscience (2013)

- ・ 輸送現象の収支方程式 (直角座標系, ニュートン流体)

- 質量保存則 (連続の式)
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z) = 0$$

- 運動量保存則 (Navier-Stokes の式)
$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho g_y$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z$$

- エネルギー保存則
$$\rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + 2\eta \left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \eta \left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right\}$$

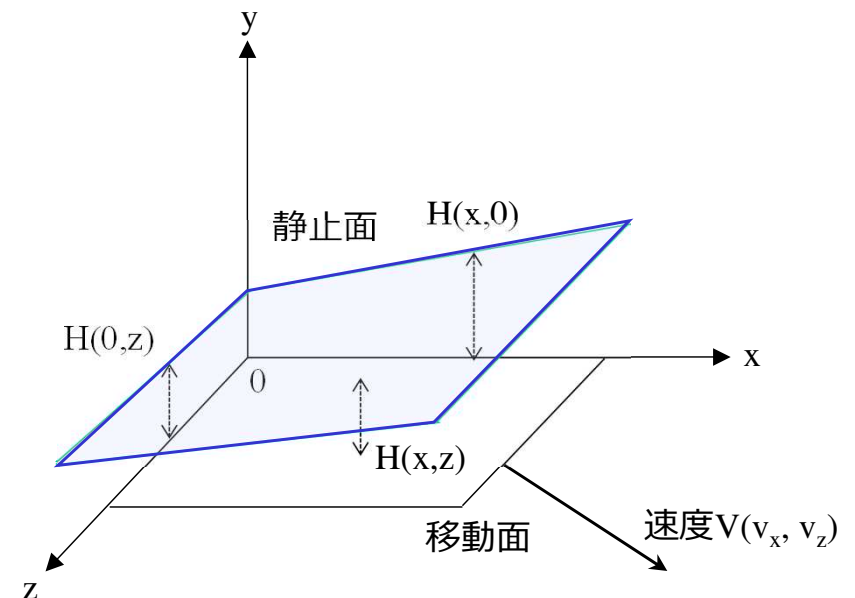
・ Reynolds方程式：薄いフィルム層における流体力学的挙動

潤滑近似理論

- 流れは薄い層状である.
- 流体の慣性力は粘性せん断力に比べて無視できる.
- 表面に垂直な方向の流体の運動は表面に平行な運動に比べて無視できる.
- 壁で滑らない.

Reynolds基礎方程式導出のための仮定条件

- 流体はNewton流体である.
- 流体は非圧縮性である.
- 流れは時間的に定常である.
- 流れは等温である.



直行座標系での連続の式ならびに運動方程式

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial P}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \eta \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} \right) \quad (4)$$

境界条件

$$v_x(H) = v_z(H) = 0 \quad (5)$$

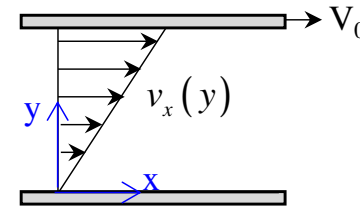
$$v_z(0) = V_z \quad (6)$$

$$v_x(0) = V_x \quad (7)$$

【参考】 (2)式の導出

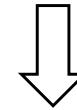
$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) + \rho g_x$$

ニュートンの粘性法則:



$$\tau_{yx} = -\eta \left(\frac{\partial v_x(y)}{\partial y} \right)$$

~~$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x$$~~



$$\frac{\partial P}{\partial x} = \eta \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right)$$

(2)式を y について積分すると,

$$\eta \left(\frac{\partial v_x(y)}{\partial y} \right) = \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) y + C_1, \quad C_1: \text{積分定数} \quad (8)$$

さらに (8)式を y について積分すると,

$$v_x(y) = \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) y^2 + C_1 y + C_2, \quad C_2: \text{積分定数} \quad (9)$$

(9)式に境界条件 (5), (7)式を代入して C_1 と C_2 を求めると,

$$C_1 = -\frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) H + \frac{V_x}{H} \quad (10)$$

$$C_2 = V_x \quad (11)$$

(9)式に(10), (11)式を代入して整理すると, x 方向の速度分布が得られる.

$$v_x(y) = \boxed{V_x \left(1 - \frac{y}{H} \right)} + \boxed{\frac{yH}{2\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) \left(\frac{y}{H} - 1 \right)} \quad (12)$$

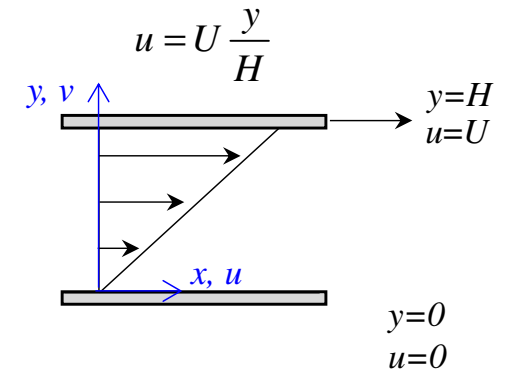
クエット流れ ハーゲンポアズイユ流れ

(4)式についても同様の計算を行うと, z 方向の速度分布が得られる.

$$v_z(y) = V_z \left(1 - \frac{y}{H} \right) + \frac{yH}{2\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) \left(\frac{y}{H} - 1 \right) \quad (13)$$

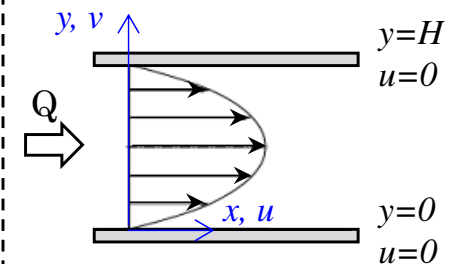
(参考)

クエット(Couette)流れ



ハーゲンポアズイユ流れ
(Hagen-Poiseuille)

$$u = \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right) (y - H) y$$



(12), (13)式を y について積分すると, 単位幅当たりの流量 q_x と q_z が得られる.

$$\underbrace{\int_0^H v_x(y) dy}_{q_x} = \left[V_x y - \frac{V}{2H} y^2 + \frac{1}{6\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) y^3 - \frac{H}{4\eta} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) y^2 \right]_0^H \quad (14)$$

$$\therefore q_x = \frac{V_x H}{2} + \frac{H^3}{12\eta} \left(-\frac{\partial P}{\partial x} \right) \quad (15)$$

$$q_z = \frac{V_z H}{2} + \frac{H^3}{12\eta} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) \quad (16)$$

連続の式(1)を y について積分すると,

$$\int_0^H \left(\frac{\partial v_x(y)}{\partial x} + \frac{\partial v_z(y)}{\partial z} \right) dy = 0 \quad (17) \quad \therefore \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \quad (18)$$

(18)式に(15), (16)式を代入すると以下の関係が得られる.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(H^3 \left(-\frac{\partial P}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(H^3 \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) \right) = 6\eta \frac{\partial H}{\partial x} V_x + 6\eta \frac{\partial H}{\partial z} V_z \quad (19)$$

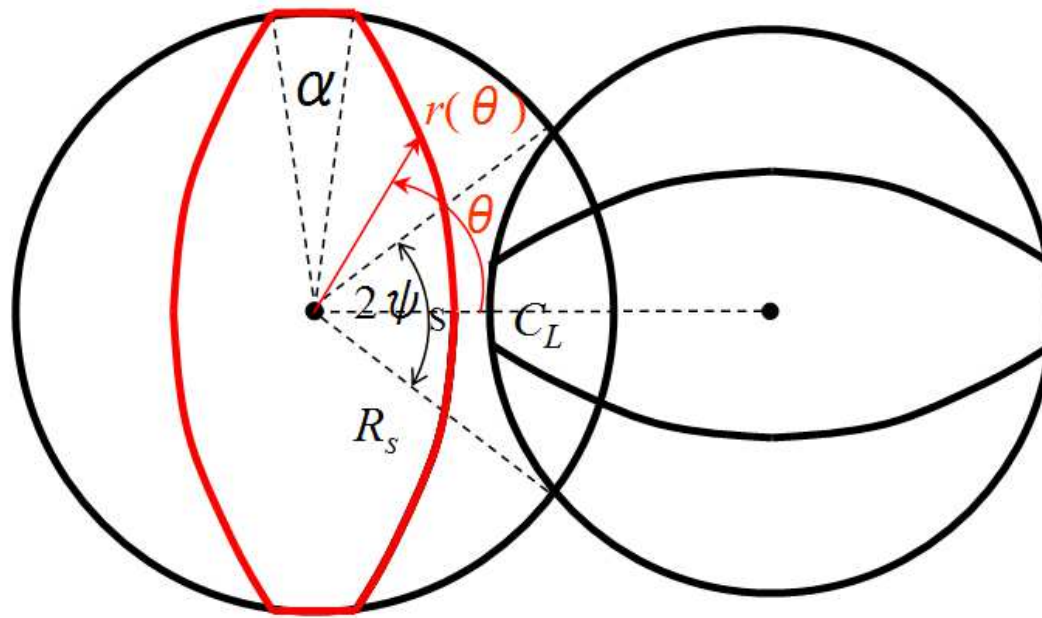
非圧縮流体についての
Reynolds基礎方程式

⇒ 肉厚分布 $H(x,z)$ および境界条件から圧力分布 $P(x,z)$ が求まると, (12), (13)式から 速度分布 v_x と v_z , (15), (16)式から単位幅当たりの流量 q_x と q_z を計算することができる.

2. 二軸スクリュ押出機内数値解析の技術背景

2.1 二軸スクリュモデリング技術

Self Wiping Twin Screw & Kneading disk^{*)}



^{*)}参考文献:

M. L. Booy, *Polym. Eng. Sci.*, **18**,973(1978)

$$\psi_s = \cos^{-1} \left(\frac{C_L}{2R_s} \right)$$

$$\alpha = \frac{\pi}{n_t} - 2\psi_s$$

$$r(\theta) = \sqrt{C_L^2 - R_s^2 \sin^2 \theta} - R_s \cos \theta$$

$$z = \frac{L_p \theta}{2\pi}$$

C_L : 軸間距離

R_s : スクリュ半径

α : チップ角

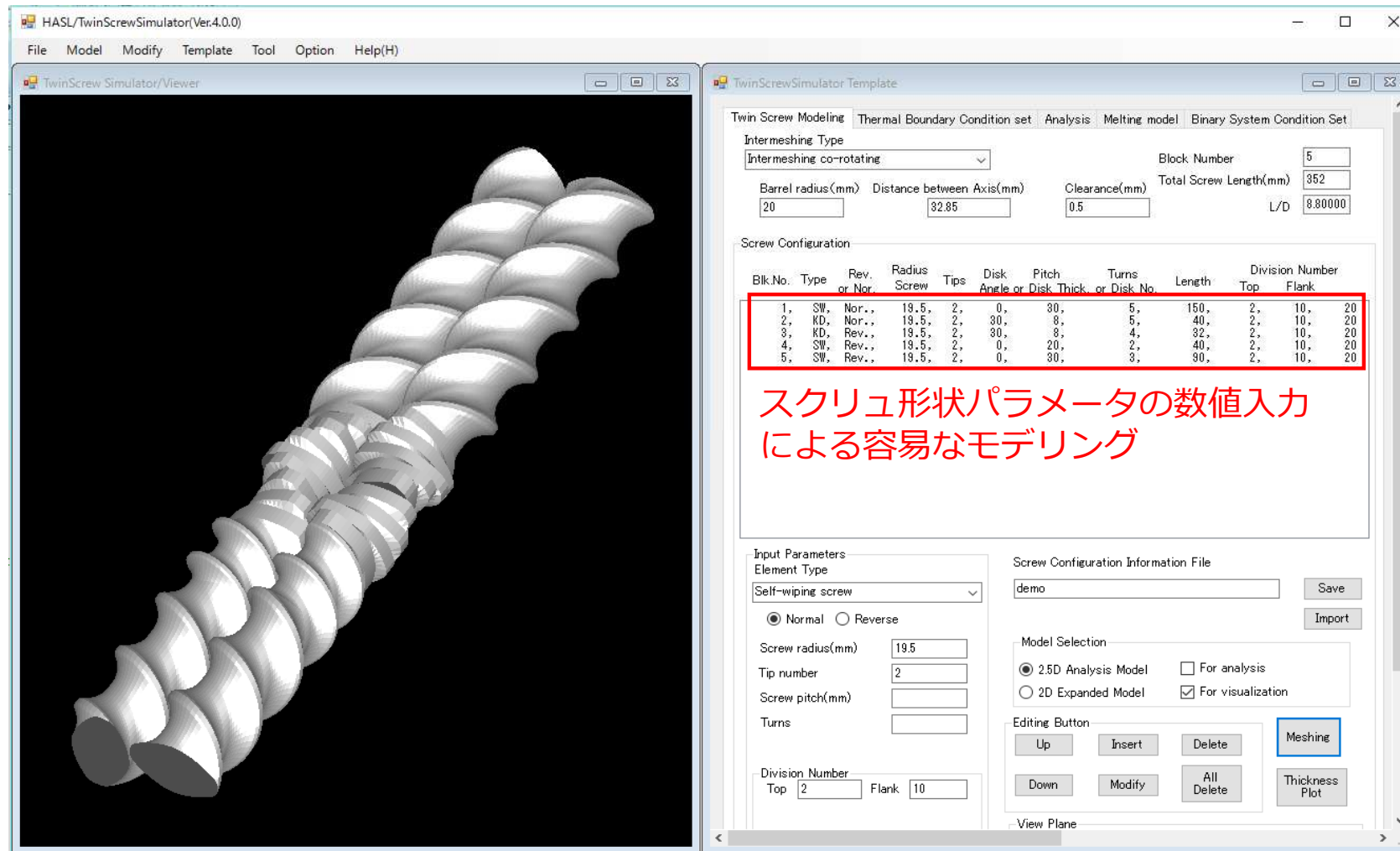
$2\psi_s$: 噛合角

n_t : 条数

L_p : スクリュピッチ

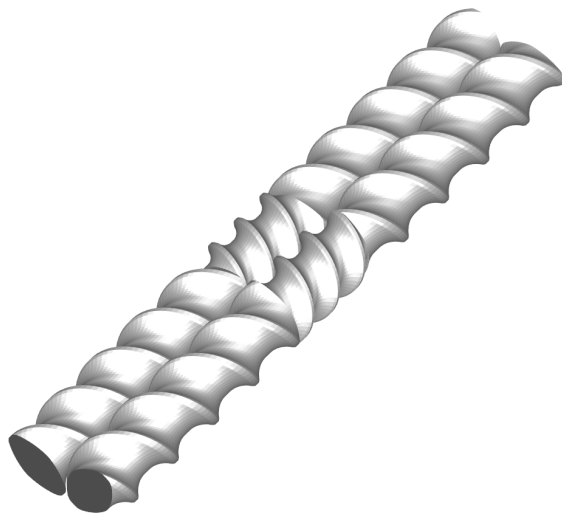
z : スクリュ長

Screw Modeling Template of 2.5D Hele-Shaw FEM Mesh

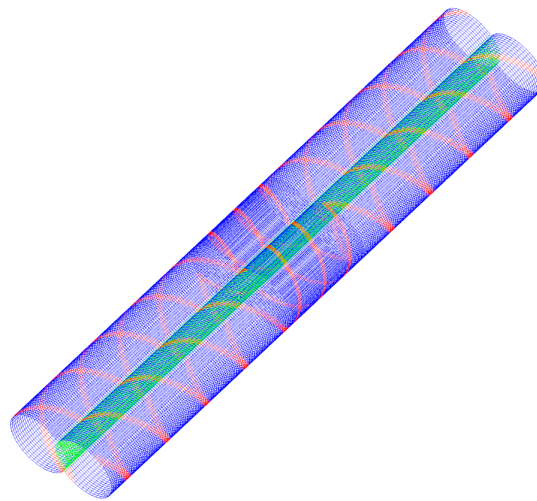


スクリュ形状パラメータの数値入力
による容易なモデリング

2.5D Hele-Shaw FEM Mesh



Co rotating intermeshing
self wipe type twin screw

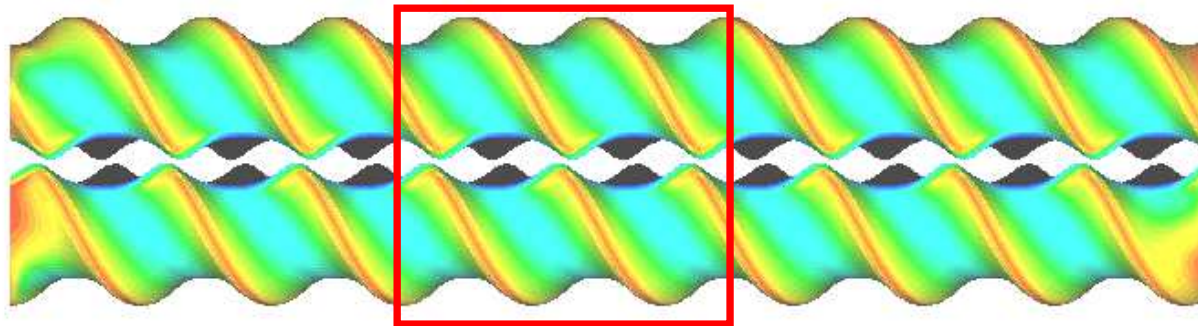


2.5D Hele-Shaw FEM meshes

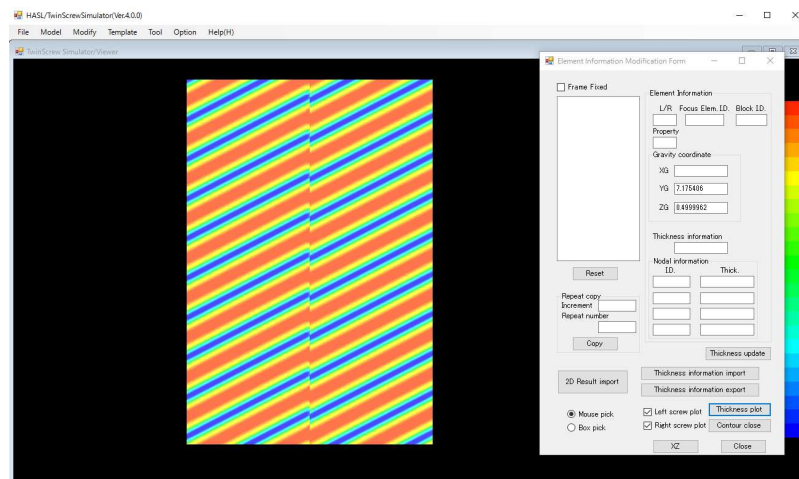


Thickness information
mapped on 2.5D Hele-Shaw
FEM meshes

UV mapping technology of 2.5D Hele-Shaw FEM Mesh



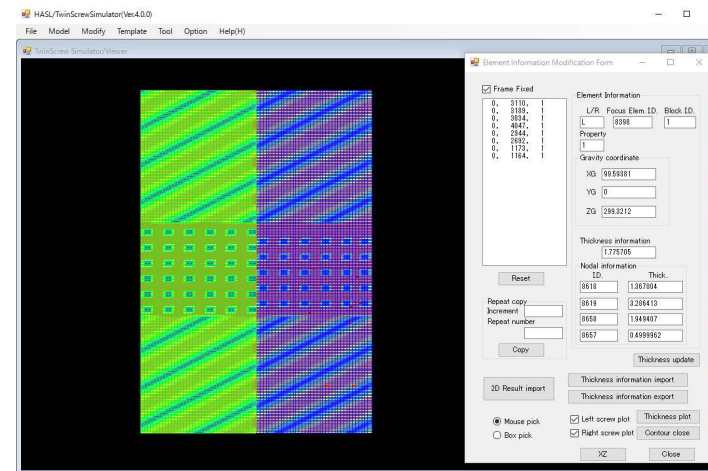
部分的にピンミキシング
エレメントを配置する場合



2.5D 解析モデルのUV展開モデル
(Unwound model)のインポート



編集

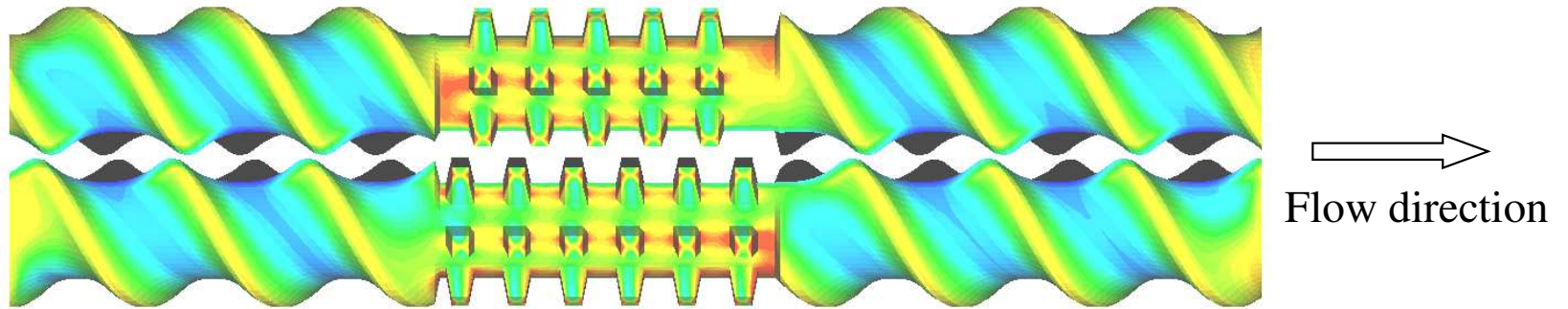


要素単位で肉厚（流路深さ）を任意に
編集可能（当情報を2.5D解析モデルに写像）

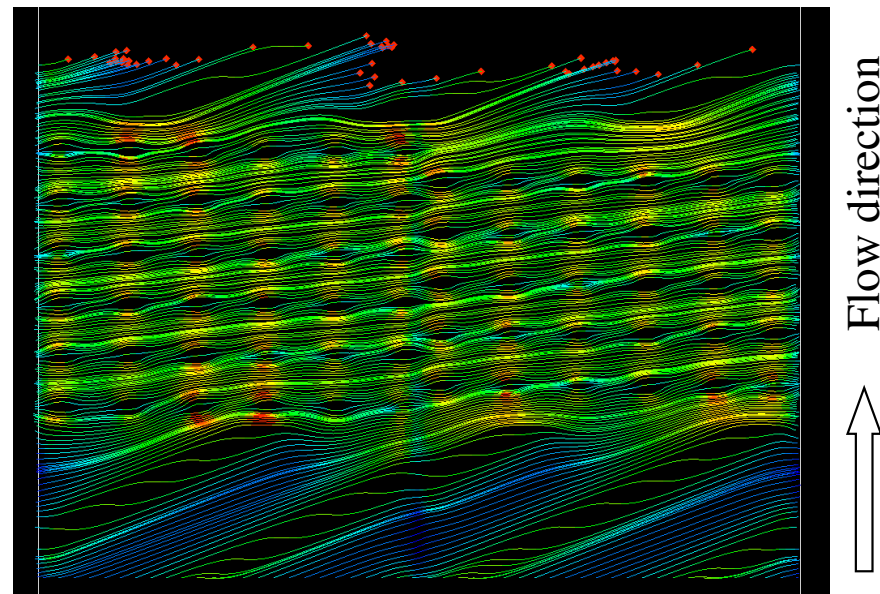


解析

Velocity Distribution by 2.5D Hele-Shaw FEM Analysis



Velocity distribution in a twin screw extruder with pin mixing element



Stream lines around pin mixing element
(Unwound display)

2.2 Hele-Shaw薄肉流れの定式化に立脚した有限要素解析技術

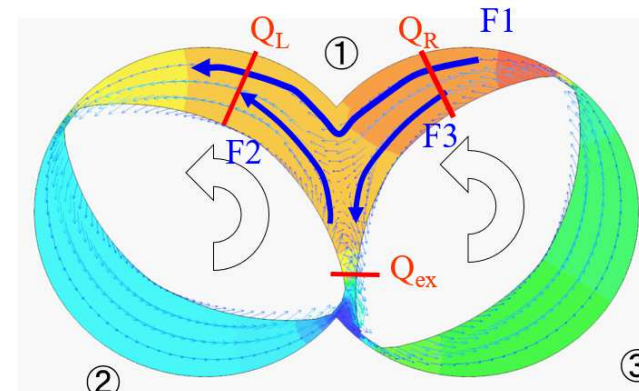
参考文献: “Resin distribution along axial and circumferential directions of self-wiping co-rotating parallel twin-screw extruder”,
M. Ohara, S. Tanifuji, Y. Sasai, T. Sugiyama, S. Umemoto, J. Murata, I. Tsujimura, S. Kihara, K. Taki, *AIChE J.* **66**, 11, e17018 (2020)

Hele-Shaw薄肉流れ（潤滑近似理論）

- 流れは薄い層状である.
- 流体の慣性力は粘性せん断力に比べて無視できる.
- 表面に垂直な方向の流体の運動は表面に平行な運動に比べて無視できる.
- 壁で滑らない.

当定式化の仮定条件

- 流体は非圧縮性である.
- 流体は非Newton粘性流体である.
- 流れは時間的に定常である.
- 流れは非等温である.



F1:right to left flow
F2:left to left flow
F3:right to right flow

$Q_{ex} \div 0$ on the average estimation
in the thickness direction

$Q_L = Q_R$

Self wipe intermeshing co-rotating twin screw

円柱座標系での連続の式

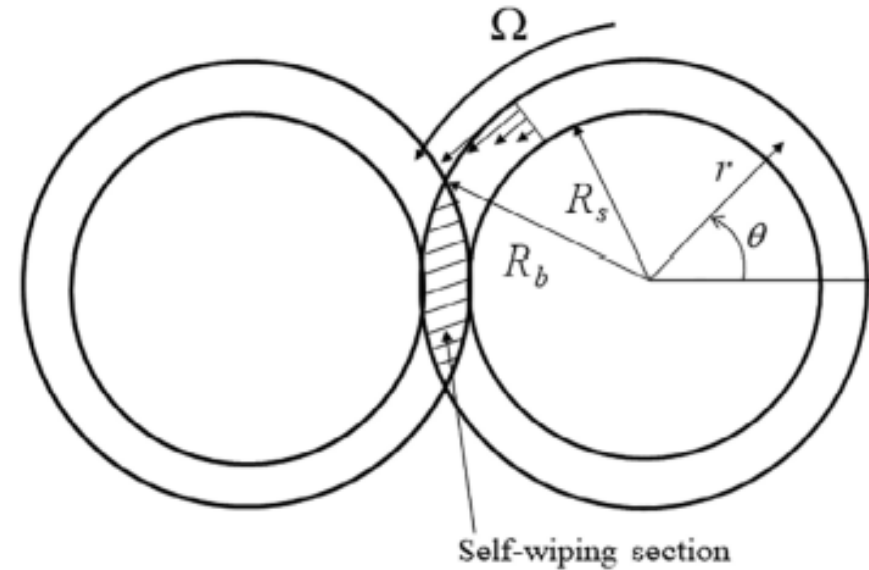
$$\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

円柱座標系での運動量保存則

$v_r \ll v_\theta, v_z$ を仮定

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \eta \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{v_\theta}{r} \right) \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \quad (2)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \eta \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) = \frac{\partial p}{\partial z} \quad (3)$$



境界条件

$$v_\theta = 0 \quad \text{at} \quad r = R_s \quad (4)$$

$$v_z = 0 \quad \text{at} \quad r = R_s$$

$$v_\theta = R_b \Omega \quad \text{at} \quad r = R_b \quad (5)$$

$$v_z = 0 \quad \text{at} \quad r = R_b$$

速度分布

$$v_{\theta} = \frac{r}{2} \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right) \left(\int_{R_s}^r \frac{1}{\eta r} dr - \left(\frac{\beta_c}{\gamma_c} \right) \int_{R_s}^r \frac{1}{\eta r^3} dr \right) + \left(\frac{\Omega r}{\gamma_c} \right) \int_{R_s}^r \frac{1}{\eta r^3} dr \quad (6)$$

$$v_z = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right) \left(\int_{R_s}^r \frac{r}{\eta} dr - \frac{\alpha_c}{\beta_c} \int_{R_s}^r \frac{1}{\eta r} dr \right) \quad (7)$$

非Newton粘性流体では、肉厚方向に対して生じる流速勾配(歪速度)や温度勾配により、同方向に粘度分布が生じる。

歪(ひずみ)速度分布

$$\dot{\gamma}_{\theta r} \equiv r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_{\theta}}{r} \right) = \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right) \left(1 - \frac{1}{r^2} \left(\frac{\beta_c}{\gamma_c} \right) \right) + \frac{1}{\eta r^2} \left(\frac{\Omega r}{\gamma_c} \right) \quad (8)$$

$$\dot{\gamma}_{zr} \equiv \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{1}{2\eta} \left(\frac{\partial p}{\partial z} \right) \left(r - \frac{1}{r} \left(\frac{\alpha_c}{\beta_c} \right) \right) \quad (9)$$

流速分布

$$q_{\theta} = \int_{R_s}^{R_b} v_{\theta} dr = -\frac{1}{4} \frac{\partial p}{\partial \theta} \left(\alpha_c - \frac{\beta_c^2}{\gamma_c} \right) + \frac{\Omega}{2} \left(R_b^2 - \frac{\beta_c}{\gamma_c} \right) \quad (10)$$

$$q_z = \int_{R_s}^{R_b} v_z r dr = -\frac{1}{4} \frac{\partial p}{\partial z} \left(\delta_c - \frac{\alpha_c^2}{\gamma_c} \right) \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \alpha_c &= \int_{R_s}^{R_b} \frac{r}{\eta} dr \\ \beta_c &= \int_{R_s}^{R_b} \frac{1}{\eta r} dr \\ \gamma_c &= \int_{R_s}^{R_b} \frac{1}{\eta r^3} dr \\ \delta_c &= \int_{R_s}^{R_b} \frac{r^3}{\eta} dr \end{aligned} \quad (12)$$

エネルギー方程式（温度分布）

$$\underbrace{\rho \bar{C}_p \left(\frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_{\text{熱対流項}} = \underbrace{\lambda \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right]}_{\text{熱伝導項}} + \underbrace{\eta \left[\left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right)^2 \right) + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} \right)^2 \right]}_{\text{粘性発熱項}} \quad (13)$$

T : 温度, ρ : 密度, $\bar{C}_p$: 比熱, λ : 熱伝導率, η : 溶融粘度

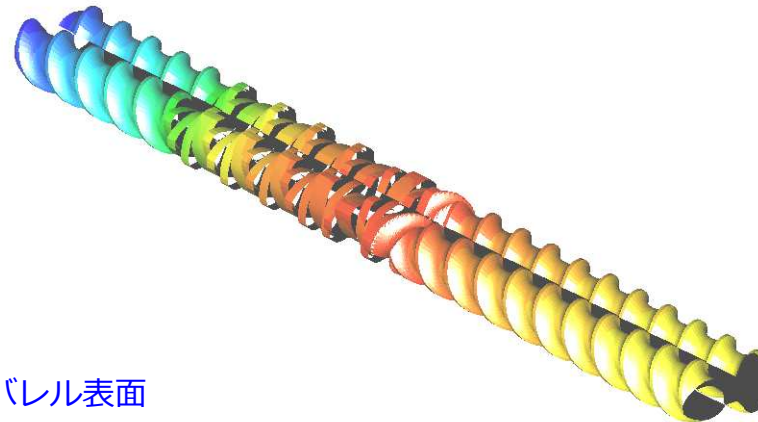
境界条件 (14)

$$T = T_{in} \quad \text{at } z = 0 \quad \text{スクリュ入口}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{at } r = R_s \quad \text{スクリュ表面}$$

$$T = T_b \quad \text{or} \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial r} = h(T_b - T) \quad \text{at } r = R_b \quad \text{バレル表面}$$

T_b : バレル壁面温度、 h : 熱伝達係数



有限要素法(2.5D FEM)による離散化手法

圧力変数/座標要素内補間

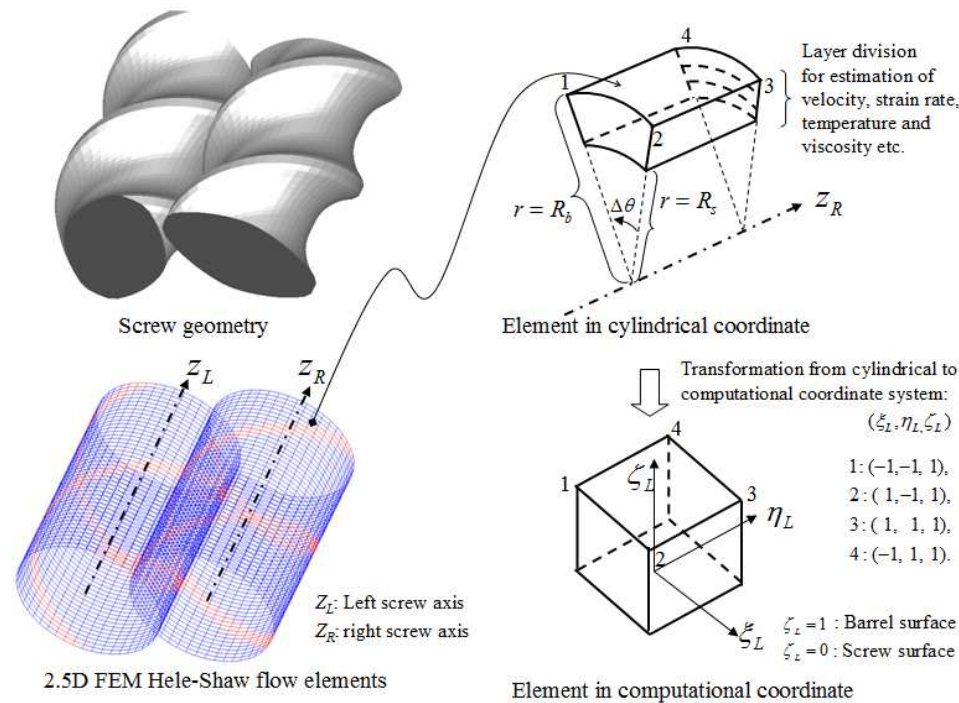
$$p = \sum_{\alpha=1}^4 \phi_{\alpha} p_{\alpha},$$

$$\theta = \sum_{\alpha=1}^4 \phi_{\alpha} \theta_{\alpha}, \quad z = \sum_{\alpha=1}^4 \phi_{\alpha} z_{\alpha}, \quad r = (R_b - R_s) \zeta_L + R_s$$

補間関数

$$\phi_1 = \frac{1}{4}(1 - \xi_L)(1 - \eta_L), \quad \phi_2 = \frac{1}{4}(1 + \xi_L)(1 - \eta_L),$$

$$\phi_3 = \frac{1}{4}(1 + \xi_L)(1 + \eta_L), \quad \phi_4 = \frac{1}{4}(1 - \xi_L)(1 + \eta_L)$$



2.5D FEM Hele-Shaw flow element for the twin screw extruder

$$Q_{\alpha}^e = - \left(S_{\alpha\beta}^{e\theta} + S_{\alpha\beta}^{ez} \right) p_{\beta}^e + D_{\alpha}^e$$

節点を通過
する流量

圧力勾配流れの
流量寄与

牽引流れの
流量寄与

$$Q_{\alpha}^e = \int_{\Gamma_e} \phi_{\alpha} (n_{\theta} q_{\theta} + n_z q_z) d\Gamma,$$

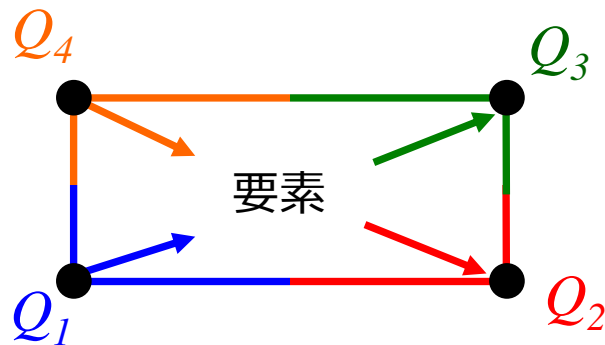
$$S_{\alpha\beta}^{e\theta} = S^{\theta} \int_{S_e} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \theta} \frac{\partial \phi_{\beta}}{\partial \theta} dS, \quad S_{\alpha\beta}^{ez} = S^z \int_{S_e} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial z} \frac{\partial \phi_{\beta}}{\partial z} dS, \quad S^{\theta} = \frac{1}{4} \left(\alpha_c - \frac{\beta_c^2}{\gamma_c} \right), \quad S^z = \frac{1}{4} \left(\delta_c - \frac{\alpha_c^2}{\beta_c} \right),$$

$$D_{\alpha}^e = D^{\theta} \int_{S_e} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \theta} dS, \quad D^{\theta} = \frac{\Omega}{2} \left(R_b^2 - \frac{\beta_c}{\gamma_c} \right)$$

$$\alpha_c = \int_{R_s}^{R_b} \frac{r}{\eta} dr, \quad \beta_c = \int_{R_s}^{R_b} \frac{1}{\eta r} dr, \quad \gamma_c = \int_{R_s}^{R_b} \frac{1}{\eta r^3} dr, \quad \delta_c = \int_{R_s}^{R_b} \frac{r^3}{\eta} dr$$

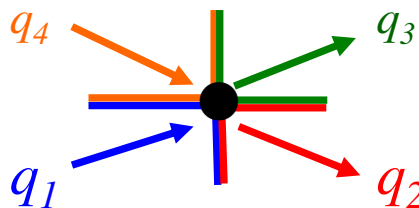
当定式化の特長

- ・ 連立方程式により求めるべき変数が圧力と温度変数になるため計算負荷が小さい。
- ・ 圧力と温度が求められれば、肉厚方向の線積分で流速、ひずみ速度、粘度分布などの諸量が容易に算出可能。
- ・ 流入出収支（連続方程式）を高精度に表現。



どのような圧力計算値を用いても、要素内節点流量の総和は0

$$\sum_{\alpha=1}^4 Q_{\alpha} = 0 \quad \because \sum_{\alpha=1}^4 \phi_{\alpha} = 1$$

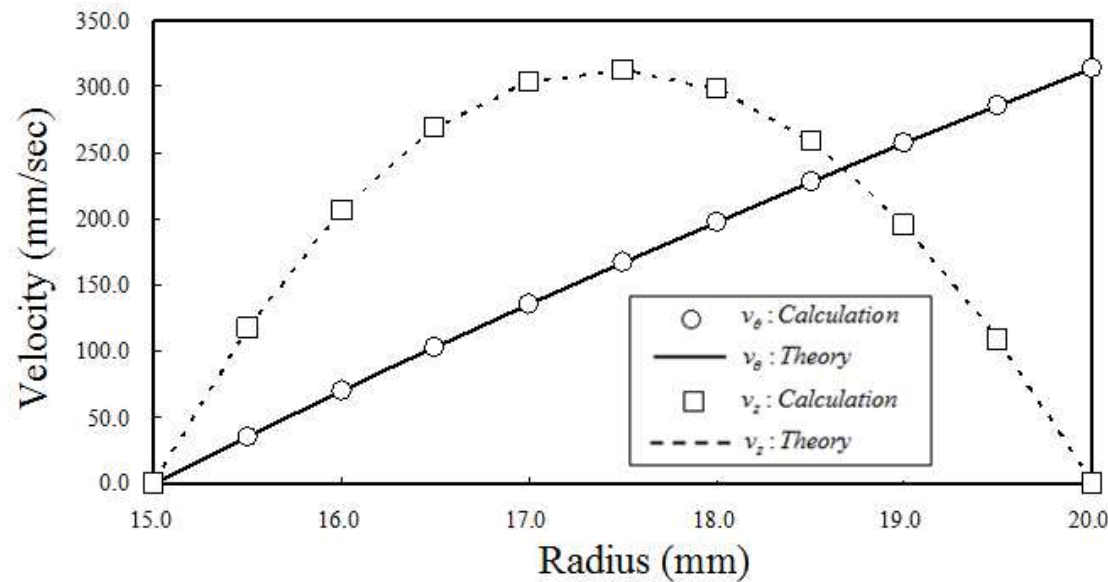
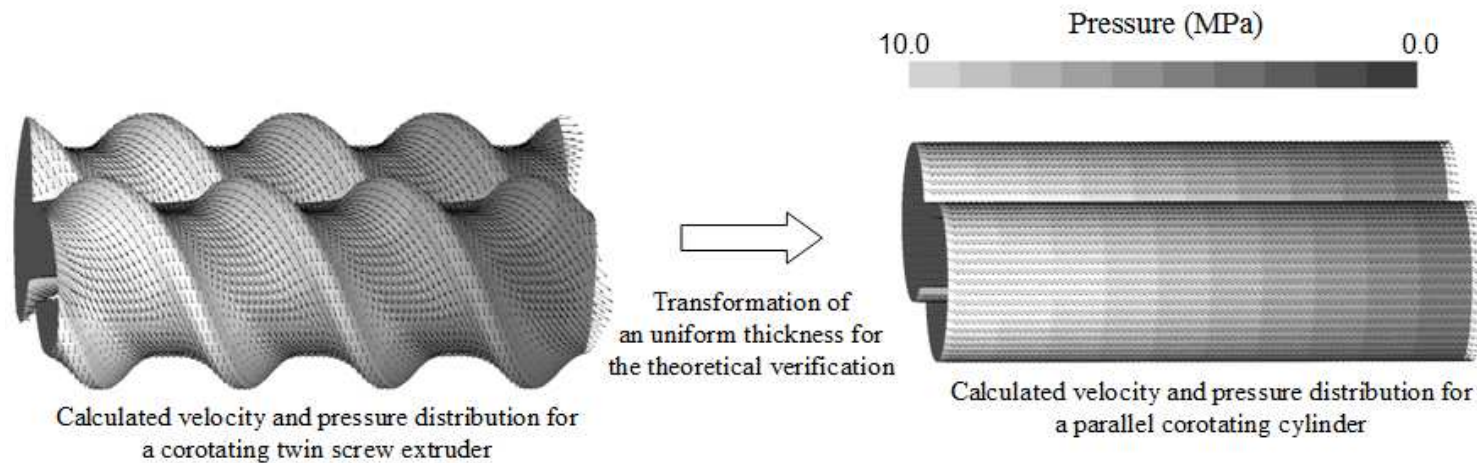


● 内部節点

連立方程式より求められる圧力計算値を用いれば、内部節点流量の総和は0

$$\sum_{\alpha=1}^4 q_{\alpha} = 0$$

Theoretical Verification for a Concentric Annular Flow



$$v_\theta = \Omega r \left(\frac{1}{r^2} - \frac{1}{R_s^2} \right) / \left(\frac{1}{R_b^2} - \frac{1}{R_s^2} \right)$$

$$v_z = \frac{1}{4\eta} \frac{\partial p}{\partial z} (r^2 - R_s^2) - \frac{1}{4\eta} \frac{\partial p}{\partial z} (R_b^2 - R_s^2) \frac{(\log r - \log R_s)}{(\log R_b - \log R_s)}$$

材料物性のモデリング

高分子溶融体の粘度は、温度及びひずみ速度に依存して変化する。その特性を正確にシミュレーションで考慮することが重要あり、現状、粘度特性の表現に適した様々な粘度モデルが提案されている。

The screenshot displays the HASL (Hyper Advanced Simulation Laboratory) website. The top navigation bar includes links for 'HOME' and '問合せ/資料請求' (Inquiry/Request for Materials). The main content area features a sidebar with a list of software tools: FlowSimulator3D, Single Screw, Twin Screw, Flat Simulator, Spiral Simulator, HyperBlow, Materialfit, and NAPLES. The central part of the page is dedicated to 'Materialfit', titled 'レオロジーモデルフィッティングツール' (Rheology Model Fitting Tool). It includes a list of features and applications, such as fitting experimental data for various polymer models and calculating rheological parameters. The bottom right corner shows two graphs illustrating the fitting process for cross-models.

会社情報 業務内容 ソフトウェア Gallery Video Tutorial

FlowSimulator3D
Single Screw
Twin Screw
Flat Simulator
Spiral Simulator
HyperBlow
Materialfit
NAPLES

レオロジーモデルフィッティングツール
Materialfit

Materialfit の特長・機能

特長・機能
適用事例

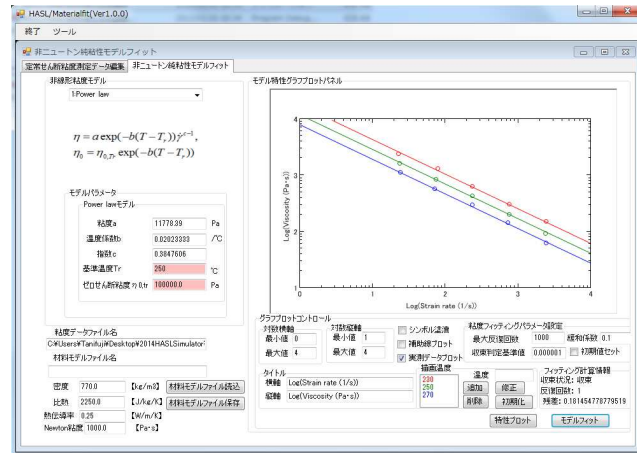
- ① 溶融樹脂の各種レオロジー実験データより解析用モデルパラメータを算出するツール
- ② 非ニュートン粘性流体のせん断粘度フィッティング機能
- ③ 粘性流体のレオロジー特性のフィッティング機能
- a) 貯蔵/損失弾性率の周波数、温度依存性実験データより、マスターカーブ作成、離散型緩和スペクトル算出
- b) せん断粘度、第1法線応力差のひずみ速度、温度依存性、過渡1軸伸長粘度のひずみ速度依存性データより EPPTモデルの非線形パラメータの算出

実測せん断粘度のフィッティング例 (Crossモデル)

図: 粘度フィッティングツールMaterialfit

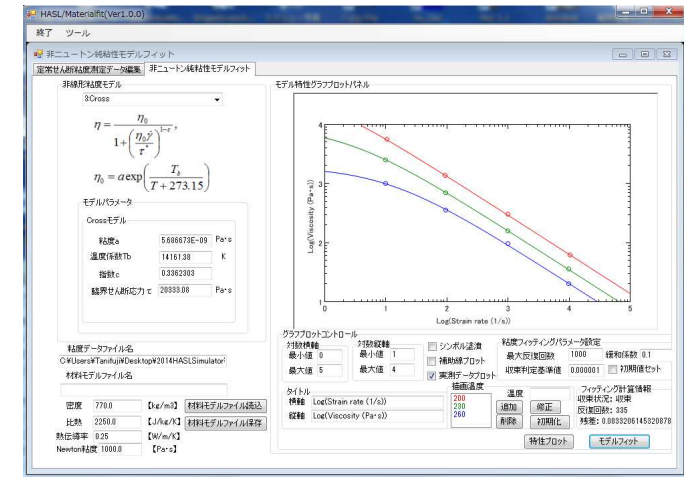
Power law model:

フローカーブを一定勾配の直線で表現。



Cross model:

フローカーブの曲率を表現可能。
利用頻度高い。



Carreau model:

フローカーブのゼロせん断領域とずり流動領域の両特性を表現可能。

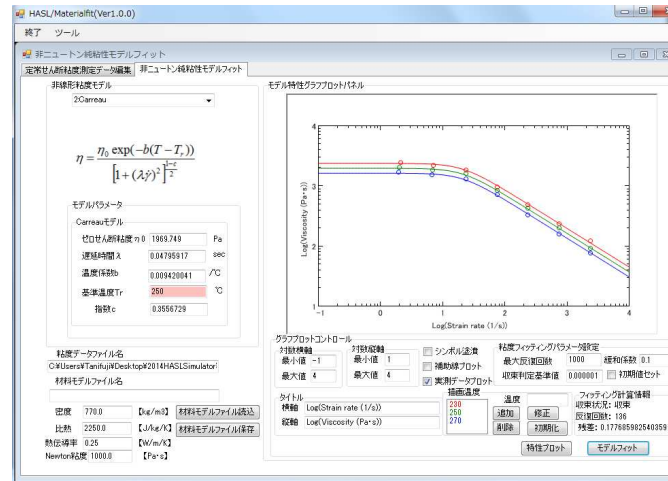
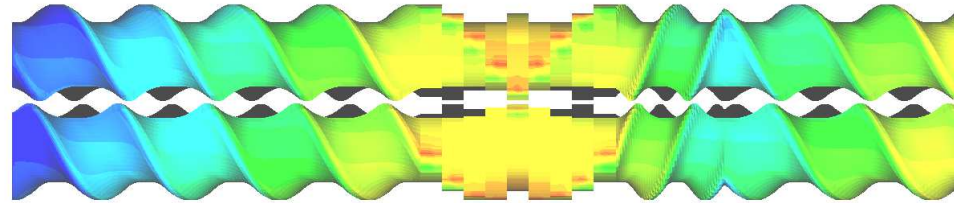


図: Materialfitを利用した非線形粘度モデルフィット

2.3 樹脂充満状態の定量化法

充満解析

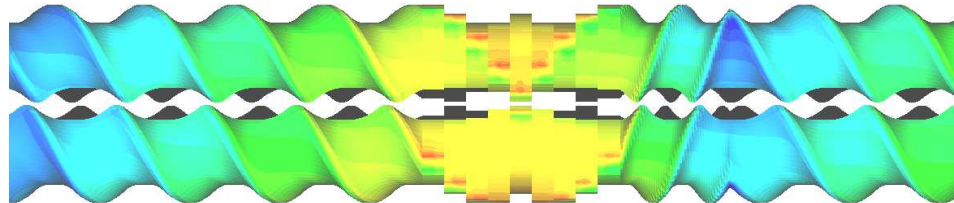
大気圧
0MPa (指定)



出口圧力
10MPa (指定)

→ 押出量20kg/h(計算値)

大気圧
0MPa (指定)

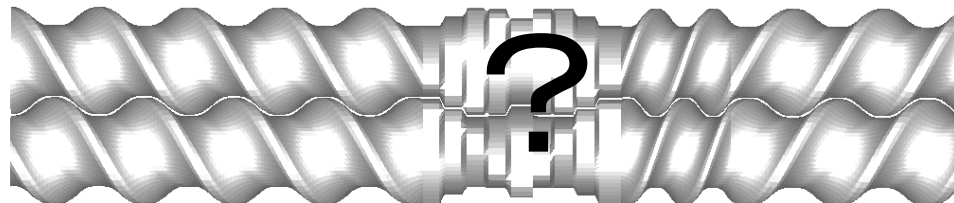


出口圧力
5MPa (指定)

→ 押出量40kg/h(計算値)

未充満解析

大気圧
0MPa (指定)



出口圧力
5MPa (指定)

→ 押出量20kg/h(指定)

スクリュ内流量バランス式（任意流路断面）

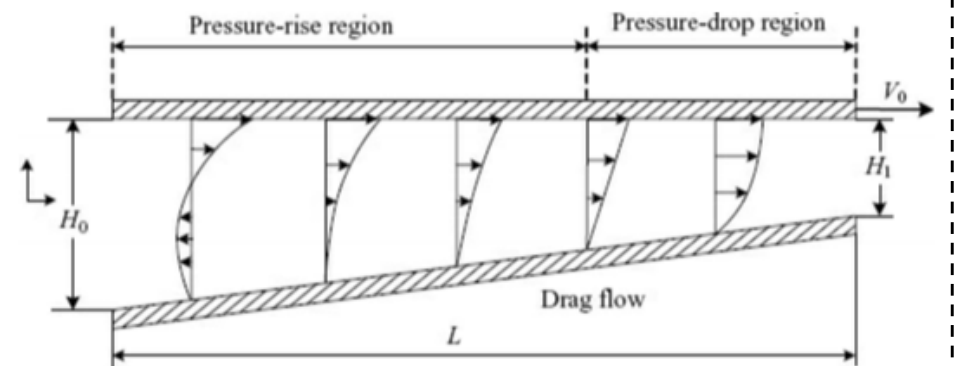
$$Q = \underbrace{\frac{WV_b H}{2} \sin(2\theta)}_{\text{牽引流量 } Q_d} - \underbrace{\frac{WH^3}{12\eta} \left(\frac{dp}{dx} \right)}_{\text{圧力勾配流量 } Q_p}$$

Q : チャネル内流量
 W : チャネル幅
 H : チャネル深さ
 V_b : バレル相対速度
 θ : 螺旋角
 p : 圧力
 η : 流体粘度
 x : スクリュ長さ

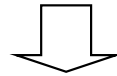
- ・ 牽引流量 Q_d は、スクリュ形状パラメータと回転数のみによって決定される。
- ・ $dp/dx > 0 \rightarrow Q < Q_d$, $dp/dx < 0 \rightarrow Q > Q_d$
- ・ スクリュ形状、回転数、流量、材料物性に变化が無ければ、当バランス方程式は、 $p \rightarrow p + \Delta p$ (一定値) の変換に対して不変。

Two non-parallel plates in relative motion, with schematic velocity profiles corresponding to a pressure-rise zone followed by a pressure-drop zone when entrance and exit pressures are equal.

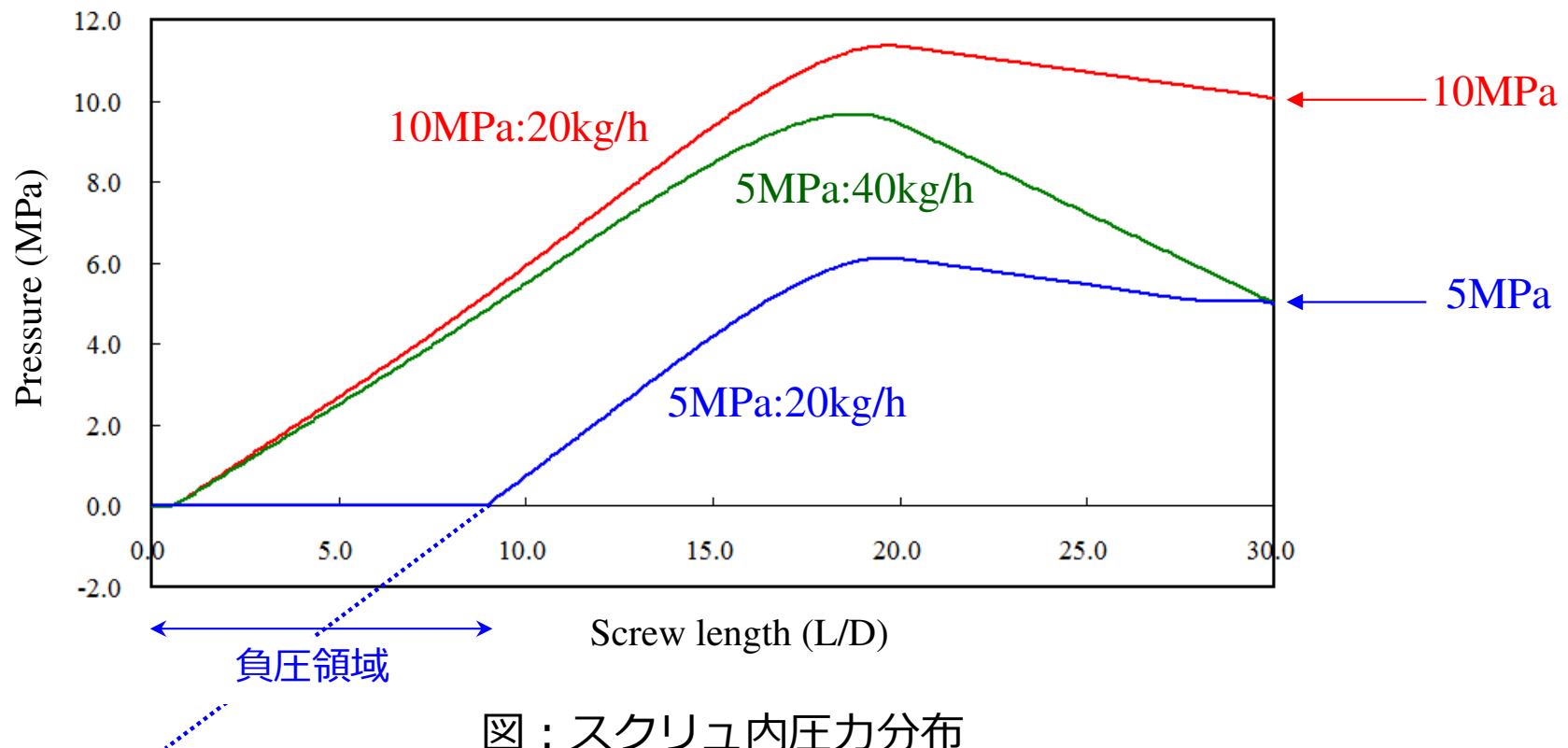
参考文献: “Principles of Polymer Processing” second edition, Zehev Tadmor, Costas G. Gogos, Wiley-Interscience (2013), Fig.2.8.



- ・ スクリュ形状、回転数、流量、材料物性に変化が無ければ、当バランス方程式は、 $p \rightarrow p + \Delta p$ (一定値) の変換に対して不変。



10MPa: 20kg/hの特性は、 $\Delta p = -5\text{MPa}$ とすることで5MPa : 20kg/hの特性と一致



未充満状態判定法

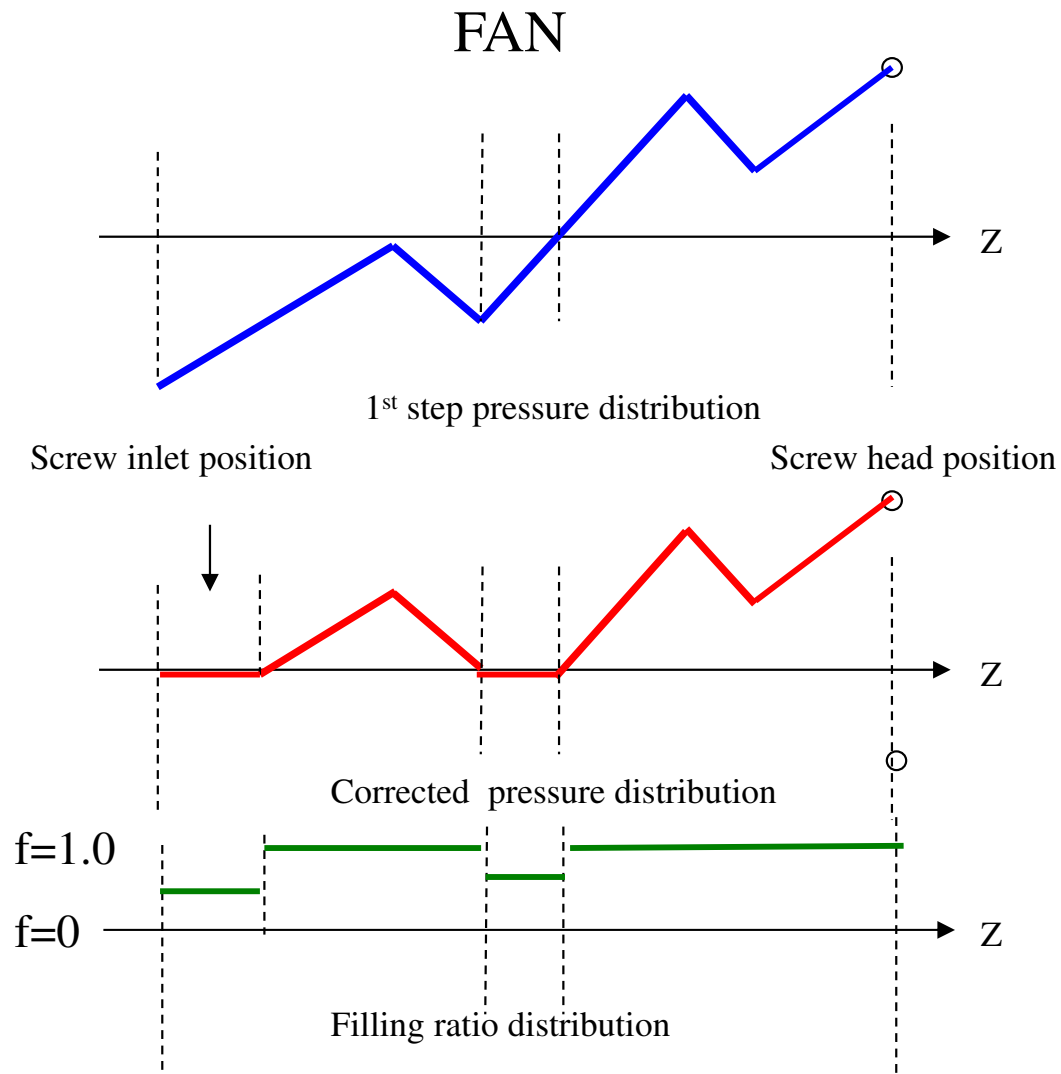
圧力勾配	流量バランス	圧力	状態
$dp/dx < 0$	$Q > Q_d$	必然的に $p > 0$	充満 ¹⁾
$dp/dx > 0$	$Q < Q_d$	$p > 0$	充満 ²⁾
$dp/dx > 0$	$Q < Q_d$	$p < 0$ を $p = 0$ に補正	未充満 ³⁾

1) $Q > Q_d$ で未充満状態は有り得ない。

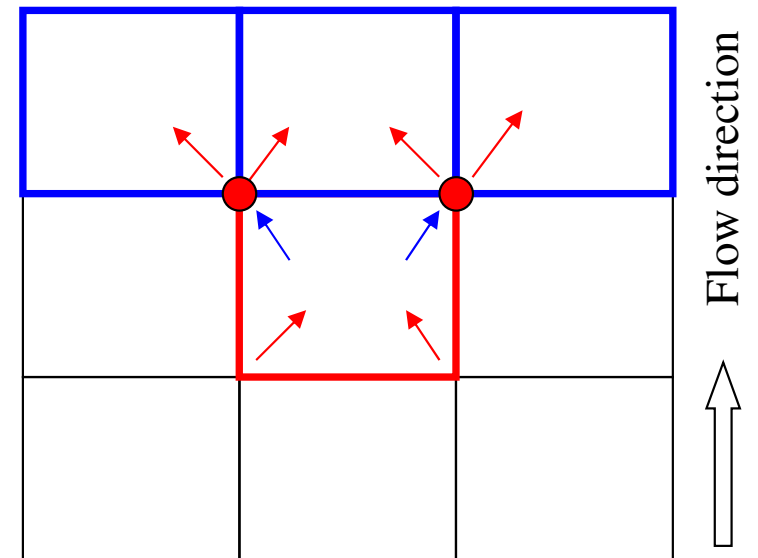
2) $Q < Q_d, p > 0$: 充満状態にあり、圧力勾配流量(バックフロー)が、流量を牽引流量から減じている状態。

3) $Q < Q_d, p < 0$: 未充満状態と判定し、 $p = 0, W = fW$ に補正、 $f = Q/Q_d$: 充満率と定義(FAN法の場合)。

未充満領域を想定した圧力計算法



2.5D FEM



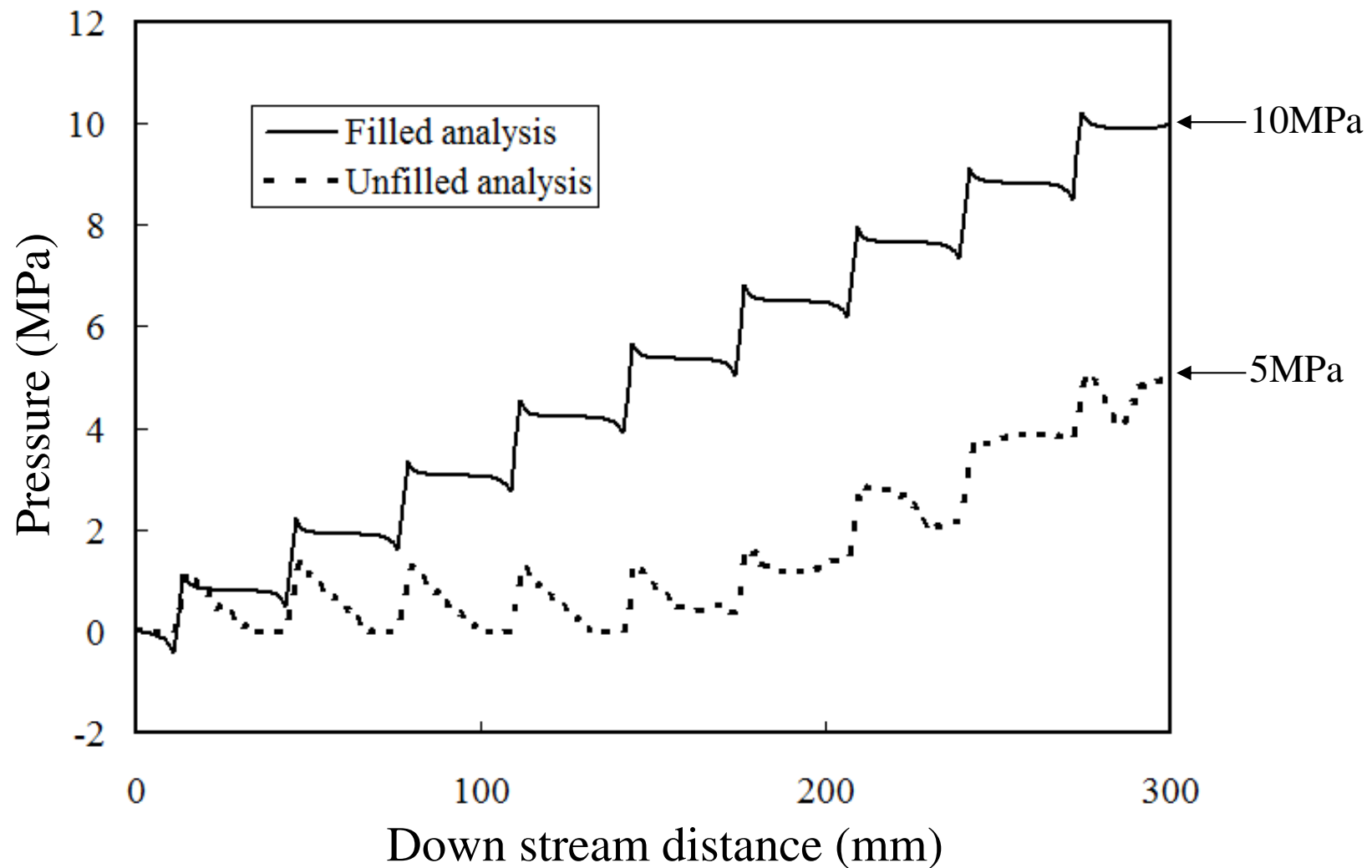
□ : 圧力更新の着目要素

□ : 風下要素

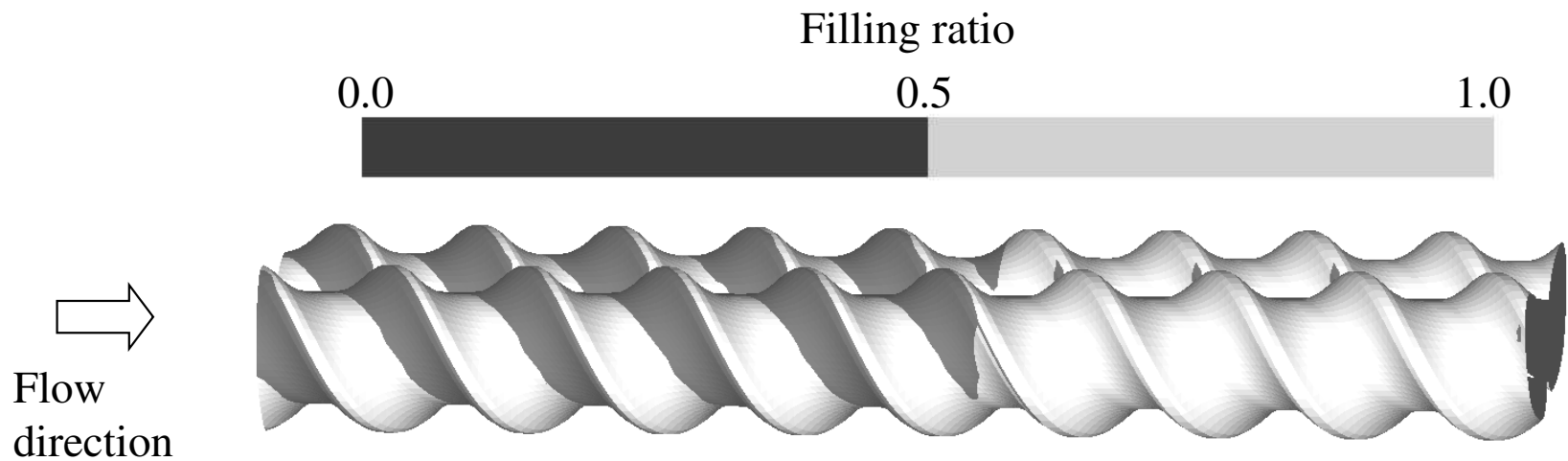
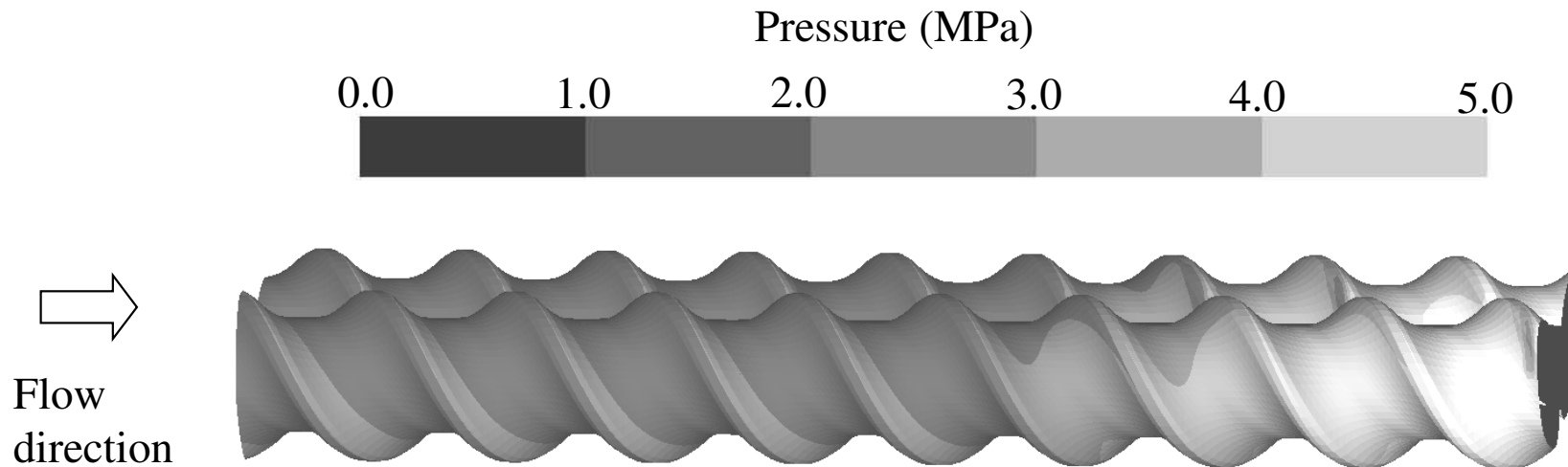
$$p(z - \Delta z, \theta - \Delta \theta) = p(z, \theta) - \frac{\partial p}{\partial z} \Delta z - \frac{\partial p}{\partial \theta} \Delta \theta$$

Pressure downstream update scheme

Comparison of Predicted Pressure Distribution between Filled and Unfilled Analysis

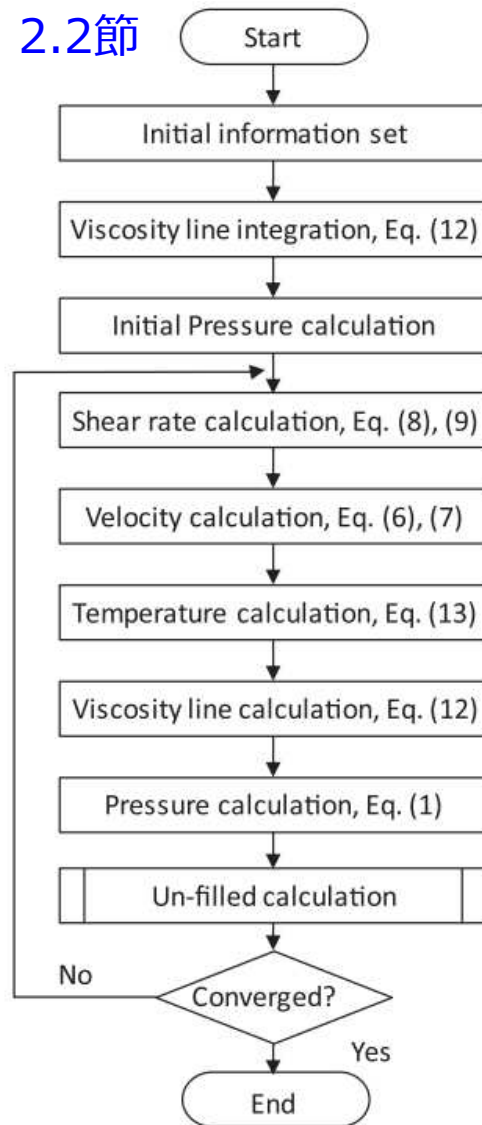


Predicted Pressure and Filling Ratio Distribution

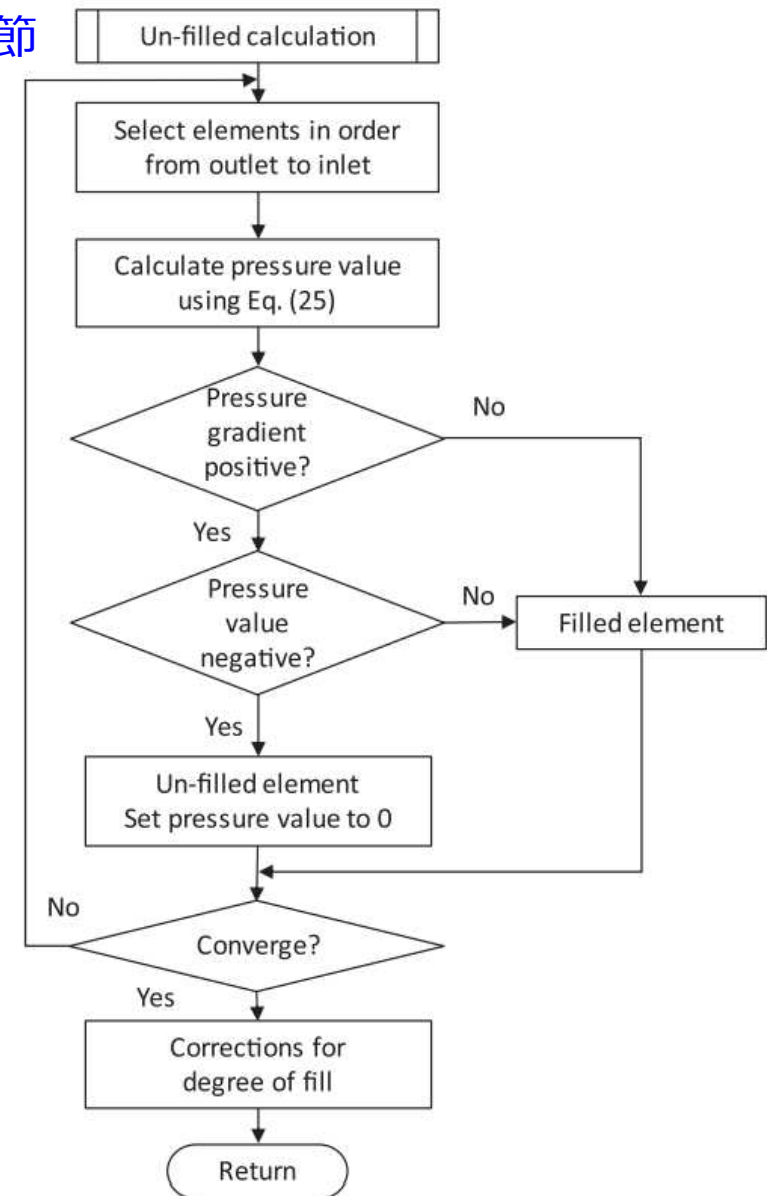


Flowcharts of Hele-Shaw flow 2.5D FEM analysis

2.2節



2.3節



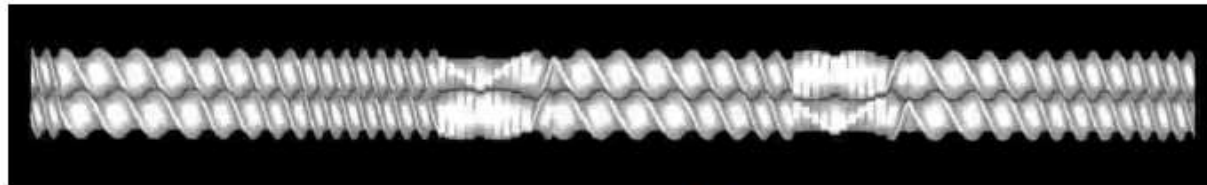
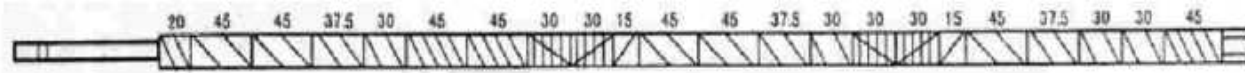
3. 数値シミュレーション例

3.1 樹脂充満状態評価シミュレーション

【検証事例1】 成形条件が充満率および温度分布に与える影響確認

参考文献：二軸スクリュ押出機の一般化Hele-Shaw流れ定式化に基づくFEM解析(II),
谷藤眞一郎, 村田隼一, 辻村勇夫, 瀧健太郎, プラスチック成形加工学会第26回年次大会 (B203,2015)

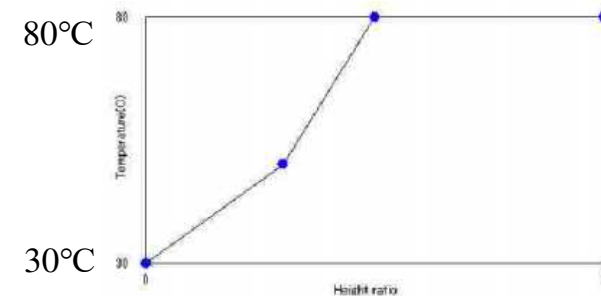
○解析モデル（実験に使用したφ32二軸スクリュをモデル化）



Twin screw model

○成形条件

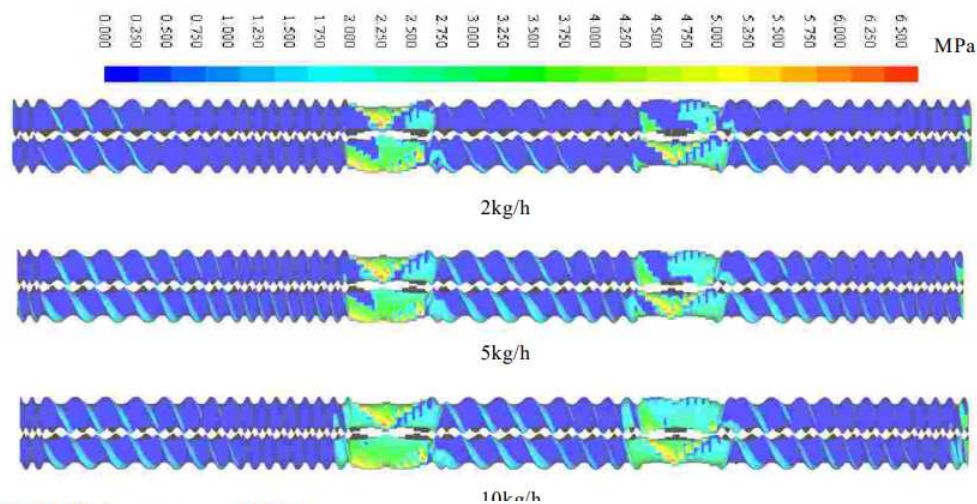
- ・成形樹脂：アクリル系樹脂
- ・押出量：2, 5, 10 kg/h
- ・回転数：50,100,200rpm
- ・バレル温度：右図
- ・バレル/樹脂間熱伝達係数：3000W/m²K



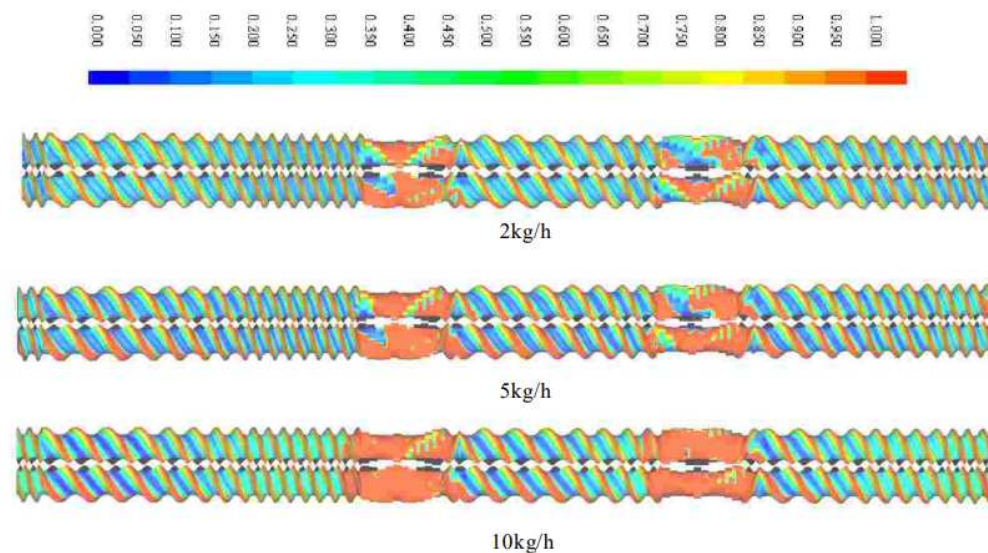
バレル環境温度設定条件

○解析結果 (100rpm)

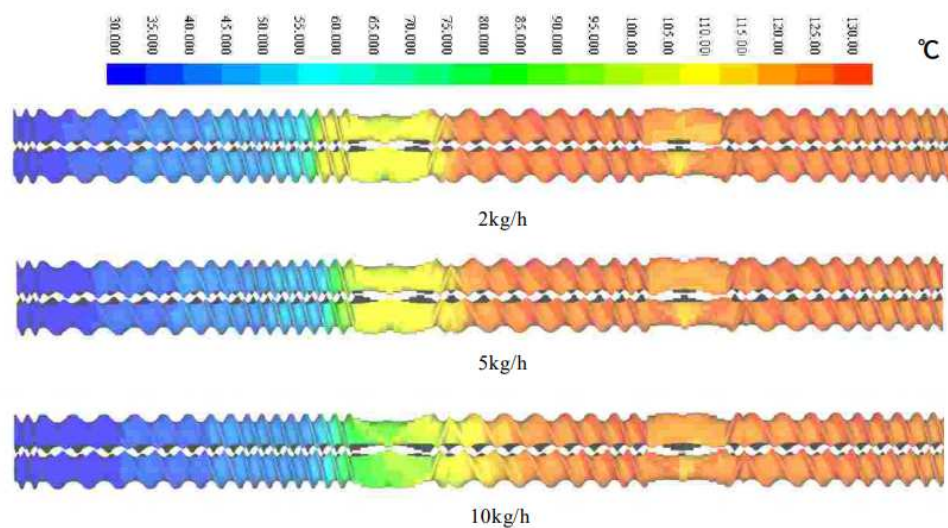
圧力分布(100rpm共通)



充満率分布(100rpm共通)

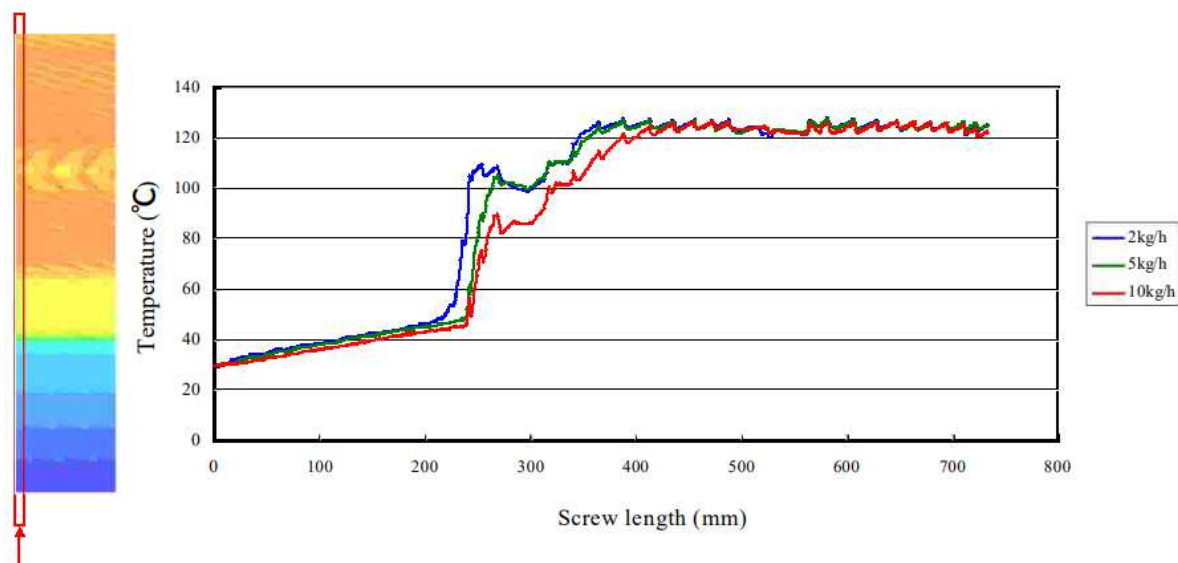


温度分布(100rpm共通)



○解析結果／温度分布の精度検証

- 温度分布比較
(解析結果)



温度分布の比較(100rpm共通)

- 出口温度比較
(実測 vs. 解析)

押出量 (kg/h)	スクリュ回転数(rpm)	出口温度(°C) 実測	出口温度(°C) 計算
2	100	127	125.3
5	50	109	107.9
	100	126	125.1
	200	146	140.9
10	100	125	122.7

【検証事例2】 二軸押出機の充満率測定と理論検証

参考文献：二軸押出機の充満率測定と理論検証：スクリュ回転数とフィード量の影響

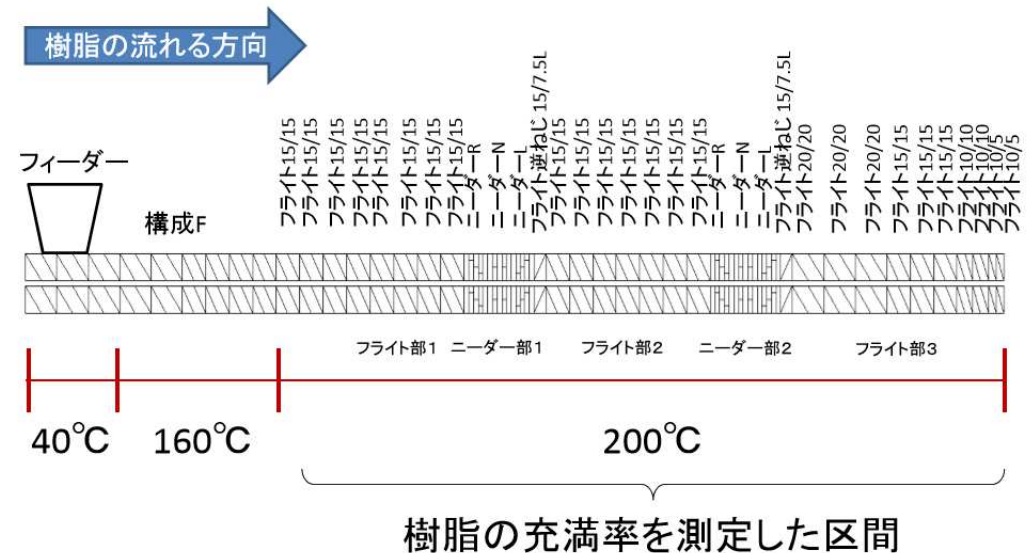
杉山武雅, 谷藤眞一郎, 村田隼一, 辻村勇夫, 瀧健太郎, プラスチック成形加工学会第27回年次大会 (A201,2016)

○実験装置およびスクリュレイアウト(Φ15)



テクノベル社製
完全噛合型同方向回転
平行二軸押出機

仕様
L/D = 90, D = 15 mm
(L/D=40~90を実験に使用)
最大回転数 600 rpm
重量フィーダー付

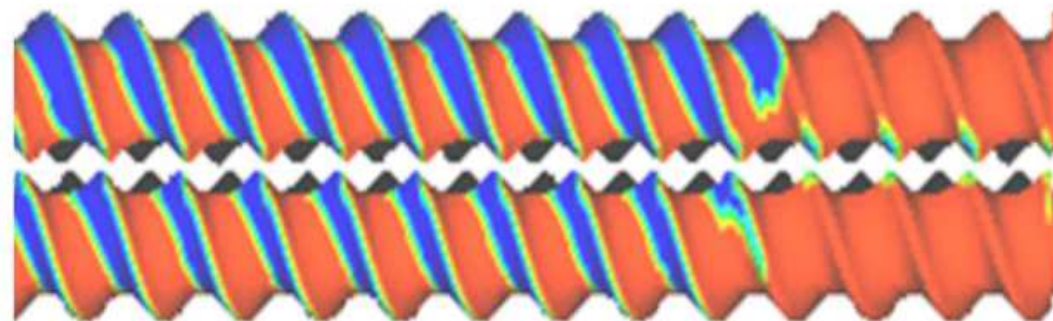


・成形樹脂：ホモポリプロピレン(F-300SP, プライムポリマー製)

○充満率の精度検証結果

30 rpm
0.5 kg/h

HASL TSSによる充満率の計算結果(赤が充満率1, 青が充満率0)



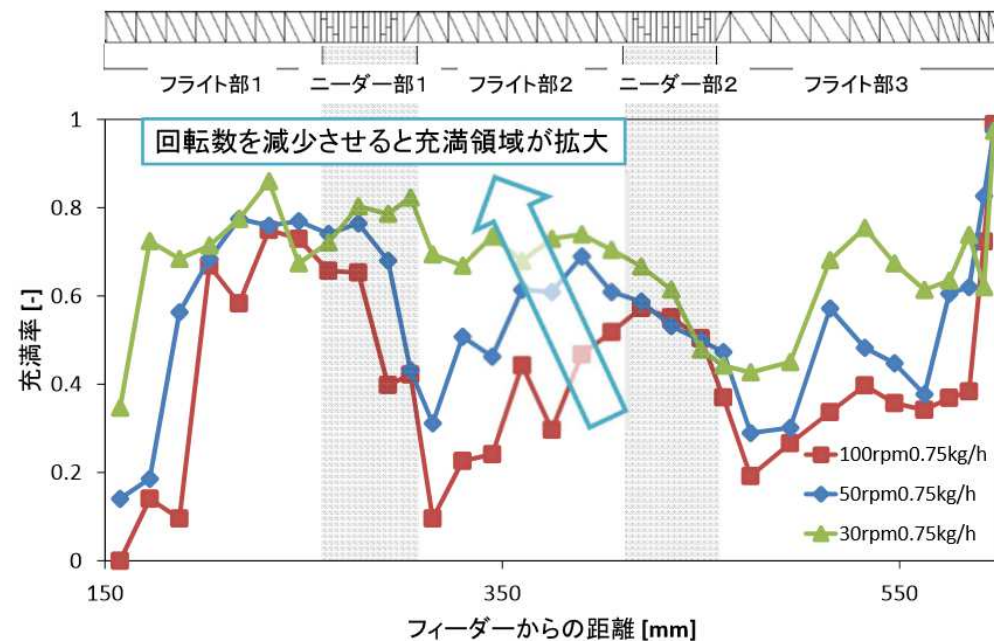
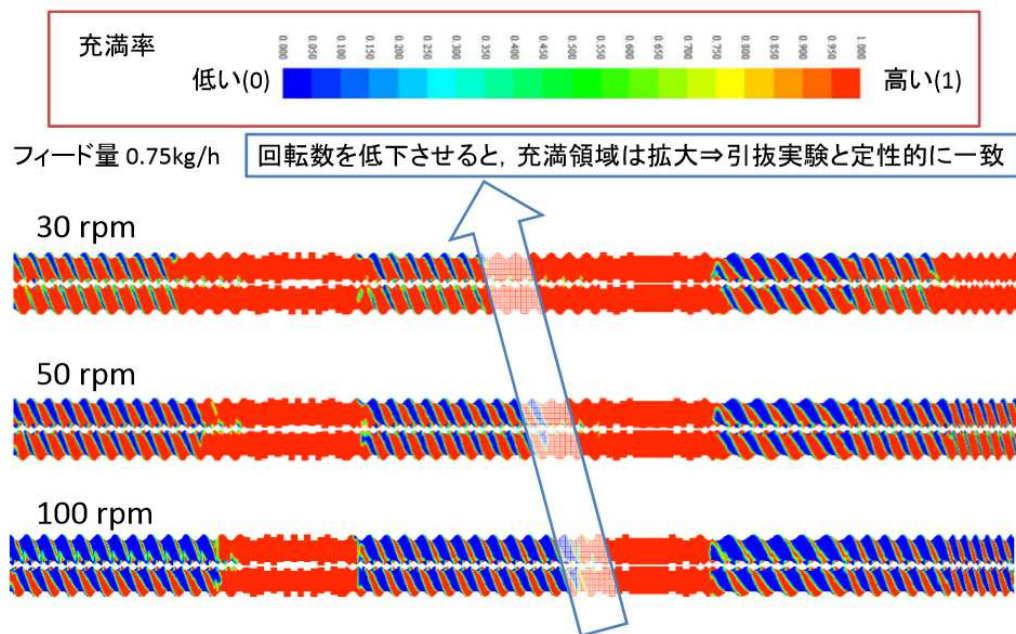
Flow direction



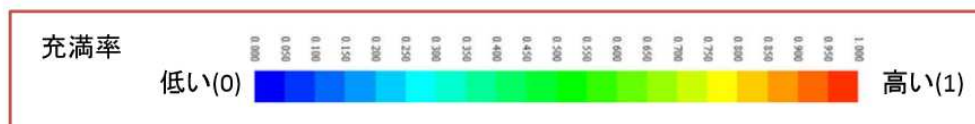
スクリー引き抜き実験結果(白い領域は樹脂が存在している)

フライトスクリーの押し側の充満状態が良好に表現されている。

○ 充填率の精度検証結果／回転数の影響



○ 充填率の精度検証結果／フィード量の影響



回転数 30 rpm

フィード量の増加と共に、充填領域が拡大⇒実験と一致

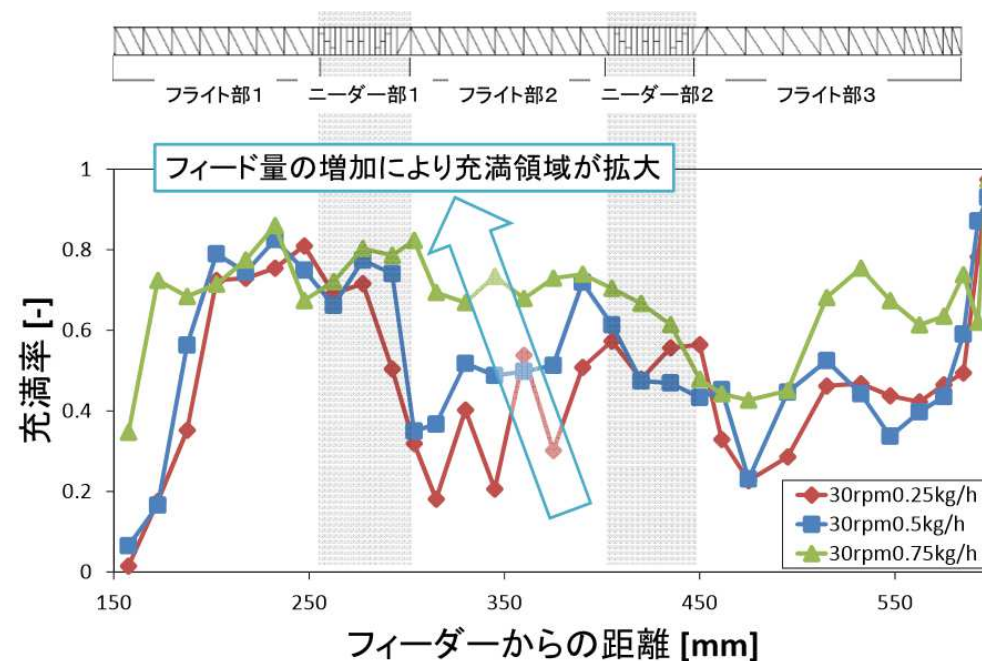
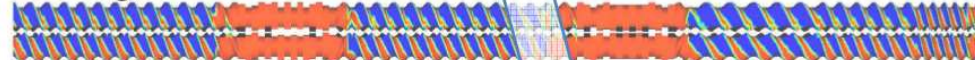
0.75 kg/h



0.50 kg/h



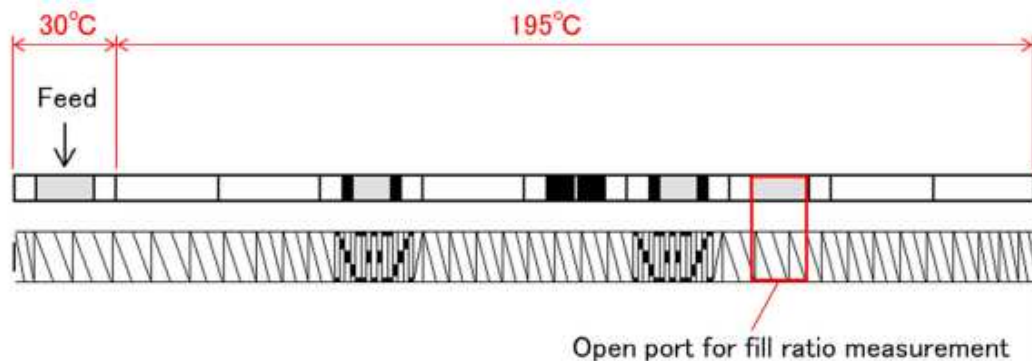
0.25 kg/h



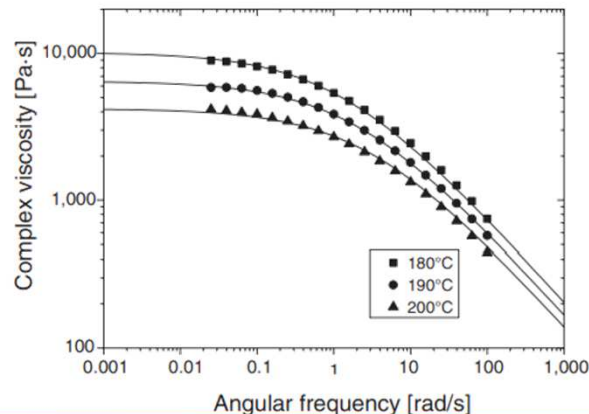
【検証事例3】 未充満検証解析

参考文献: “Resin distribution along axial and circumferential directions of self-wiping co-rotating parallel twin-screw extruder”,
M. Ohara, S. Tanifuji, Y. Sasai, T. Sugiyama, S. Umemoto, J. Murata, I. Tsujimura, S. Kihara, K. Taki, AIChE J. 66, 11, e17018 (2020)

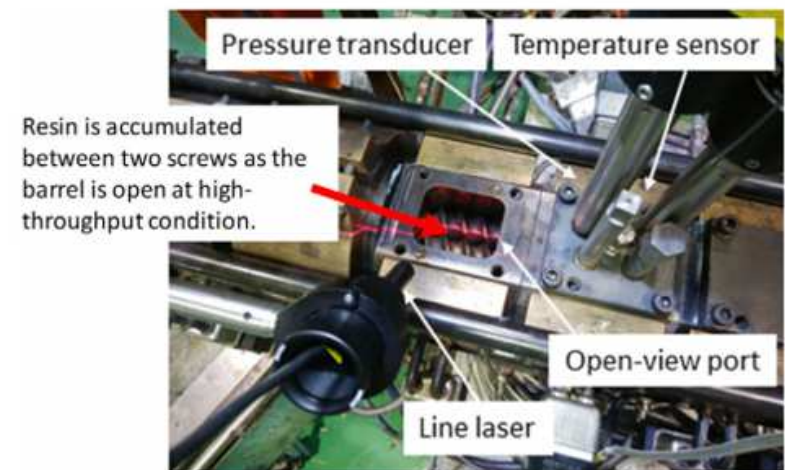
○スクリュレイアウト($\Phi 26$, $L/D=40.4$)



○成形樹脂：ホモポリプロピレン
(F-704NP, プライムポリマー製)

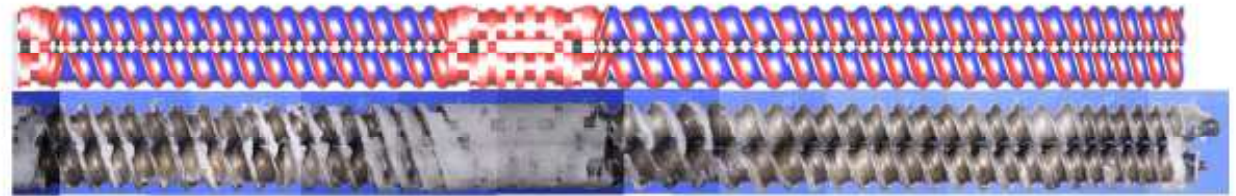


○ラインレーザを利用した
充満率測定装置

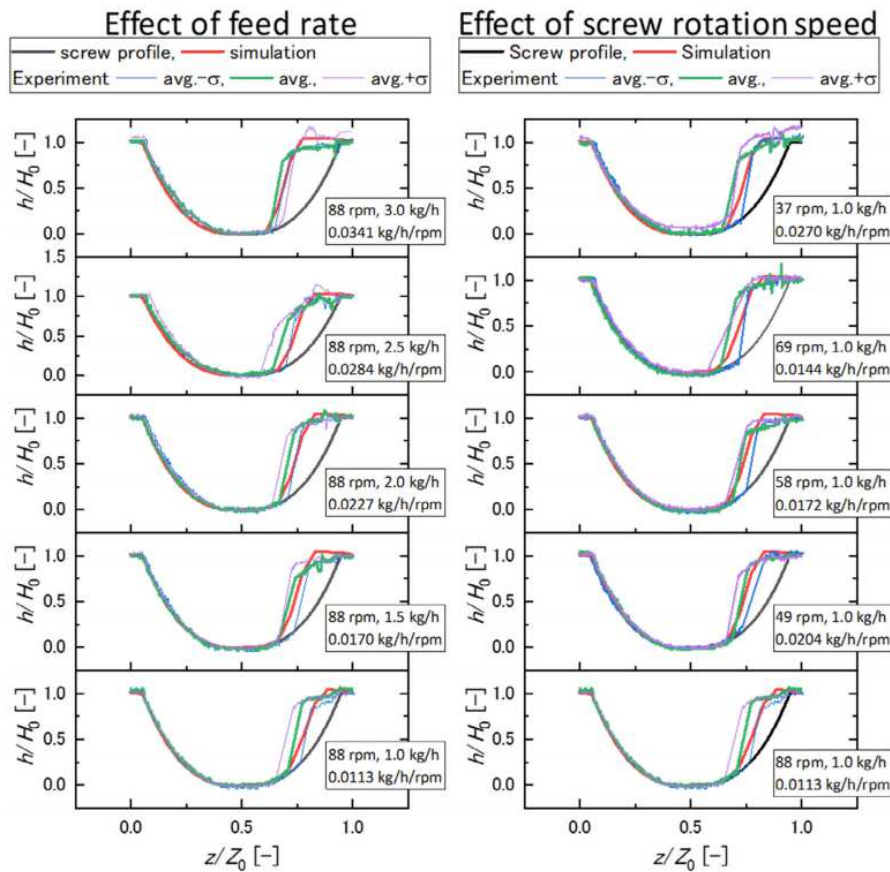


○ 充満率の精度検証結果

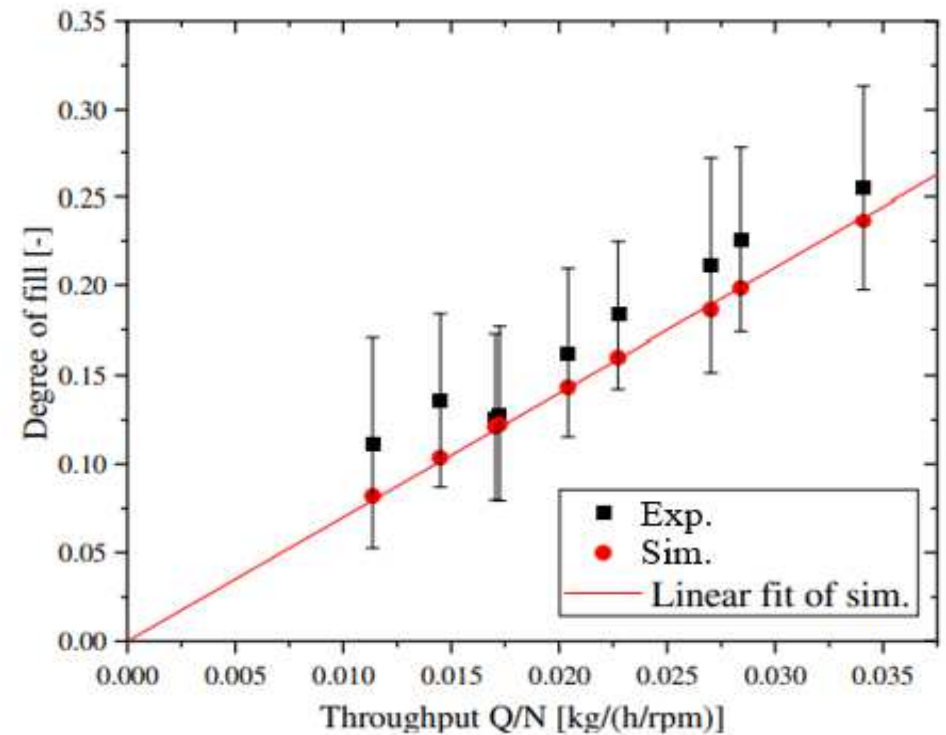
・ 充満率の比較 (1kg/h, 88rpm)



・ ラインレーザ評価方法の有効性検証



・ Q/N の影響確認



3.2 混練性評価シミュレーション

“ひずみ”は、スクリュの混練性能を評価する上で重要な定量化情報であり、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ の履歴積算値としてひずみ γ が定量化されます。

$$\gamma = \int \dot{\gamma} dt$$

粒子運動軌跡に沿った履歴積分

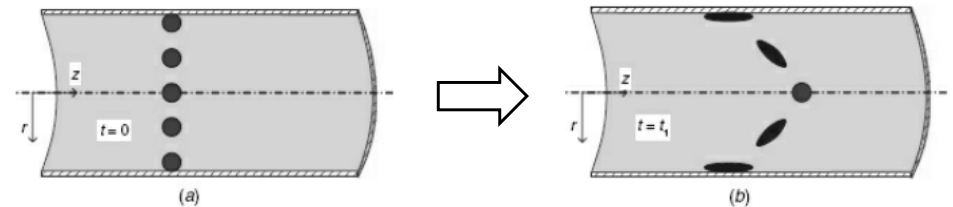
2.5D FEM 当定式化では、計算要素毎に算出される $\dot{\gamma}$ を用いて、上記評価式と等価な次式に示す輸送方程式を解析することでひずみを定量化します。

$$\frac{D\gamma}{Dt} = \frac{\partial \gamma}{\partial t} + u \frac{\partial \gamma}{\partial x} + v \frac{\partial \gamma}{\partial y} + w \frac{\partial \gamma}{\partial z} = \dot{\gamma}, \quad u, v, w: x, y, z \text{方向の流速成分}$$

Laminar mixing by shear flow

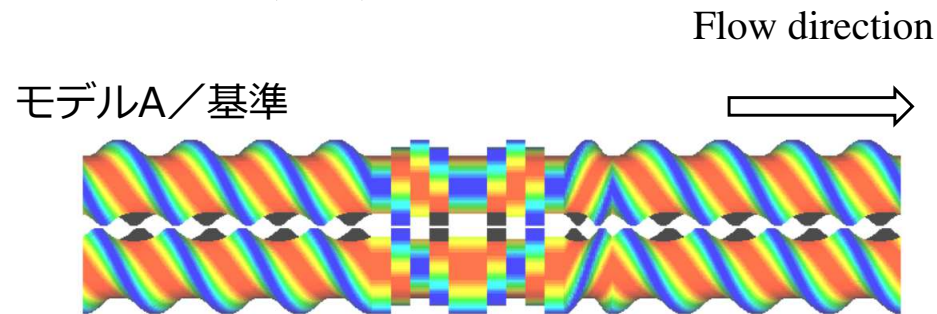
Dark areas are occupied by a tracer consisting of the bulk liquid and a small amount of a dye.

参考文献: “Principles of Polymer Processing” second edition,
Zehev Tadmor, Costas G. Gogos, Wiley-Interscience (2013), Fig.7.3.

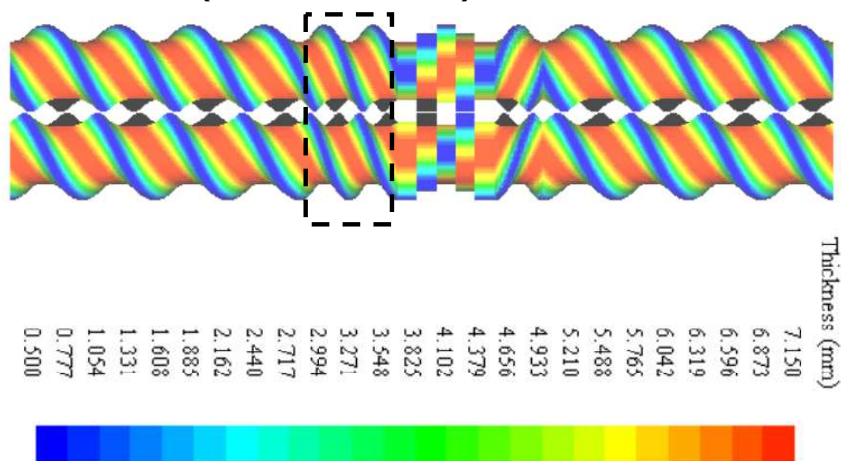


ひずみ(混練性)の解析例

○解析モデル(Φ20)／肉厚分布



モデルB／KD(ニーディング)の一部をSWに置換え



○解析条件／未充満解析

- ・ 押出量 20kg/h (共通)
- ・ 出口圧力 0.1MPa (共通)
- ・ 樹脂 HDPE (共通)
- ・ スクリュ回転数 100 or 150 rpm

○解析水準：以下の3ケース

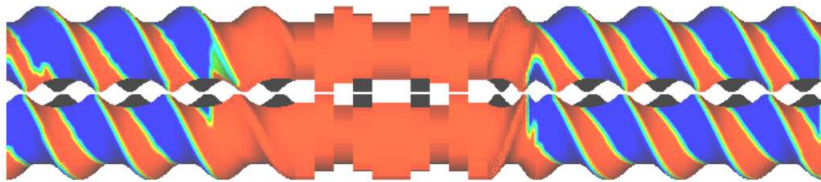
CASE1: モデルA／回転数100rpm

CASE2: モデルB／回転数100rpm

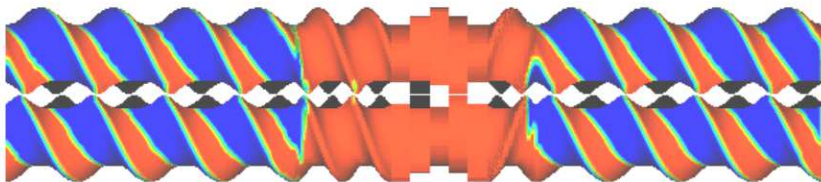
CASE3: モデルB／回転数150rpm

○解析結果／充満率分布

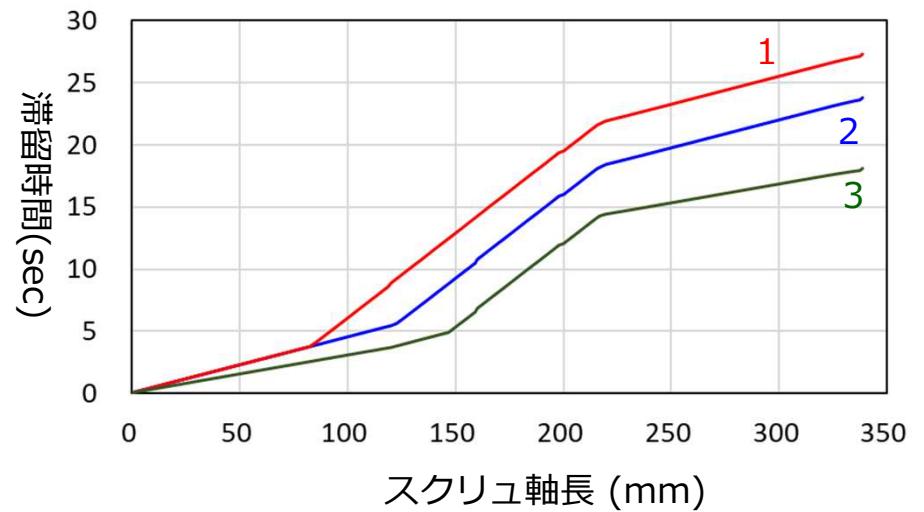
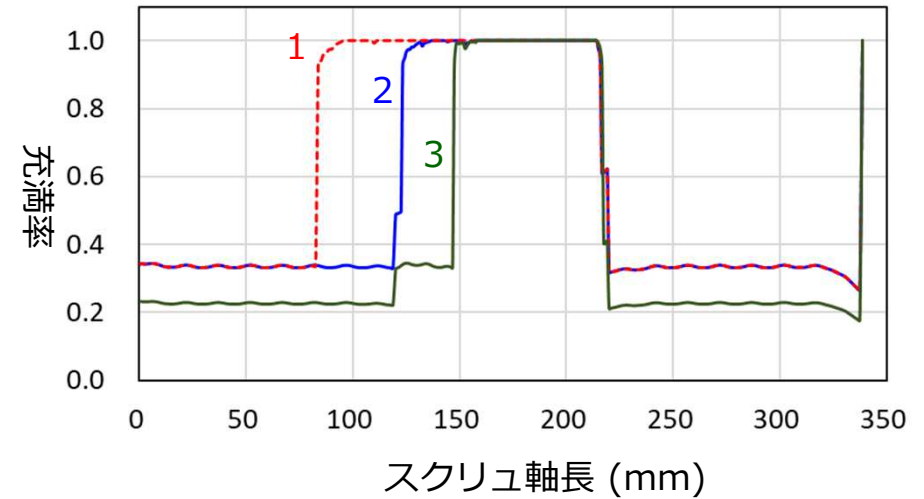
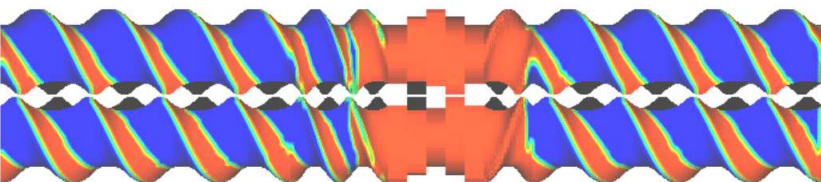
CASE1: モデルA／回転数100rpm



CASE2: モデルB／回転数100rpm

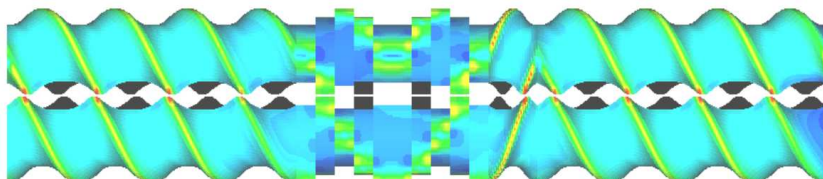


CASE3: モデルB／回転数150rpm

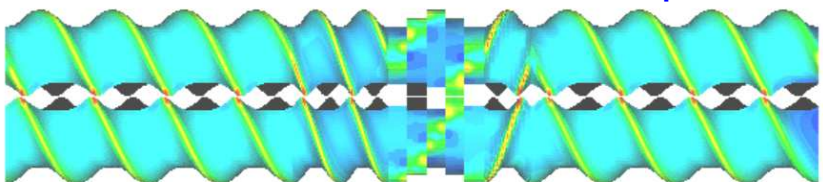


○解析結果／ひずみ速度分布 (1/sec)

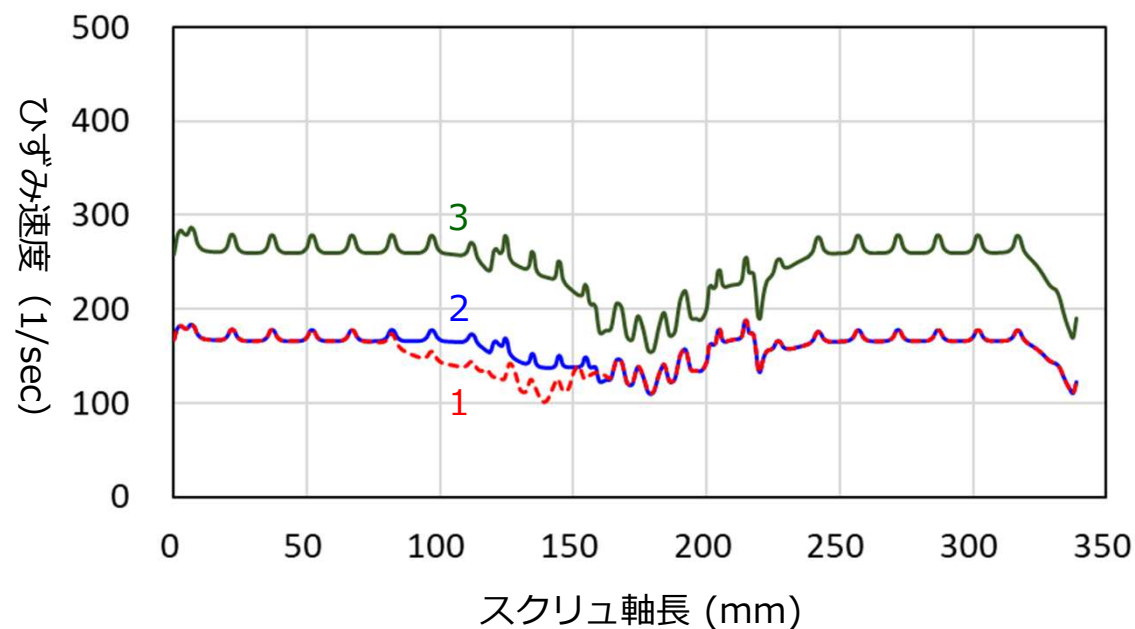
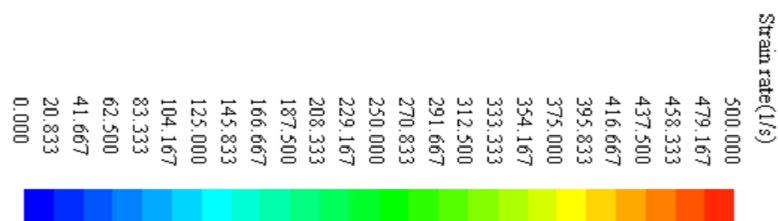
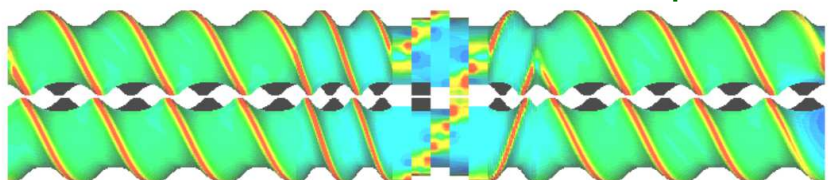
CASE1: モデルA／回転数100rpm



CASE2: モデルB／回転数100rpm

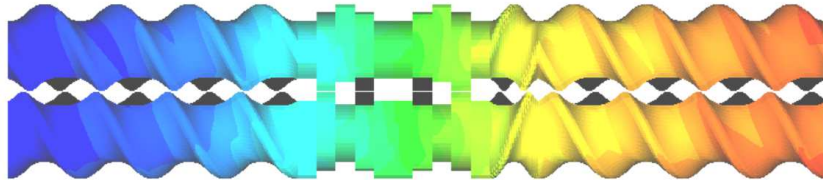


CASE3: モデルB／回転数150rpm

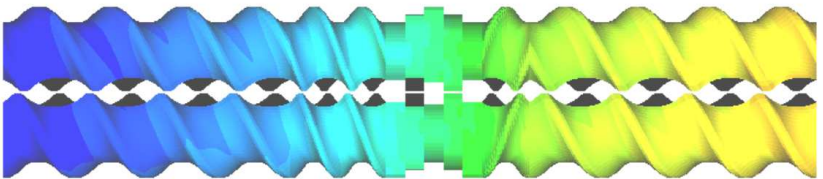


○解析結果／ひずみ分布（混錬性）

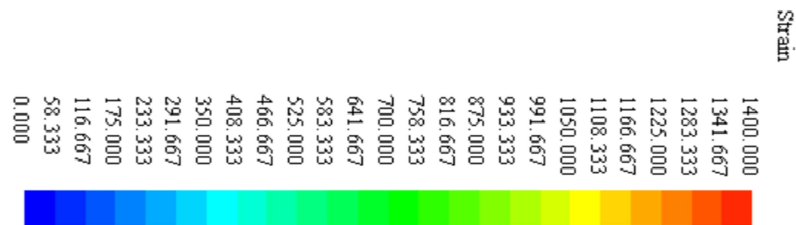
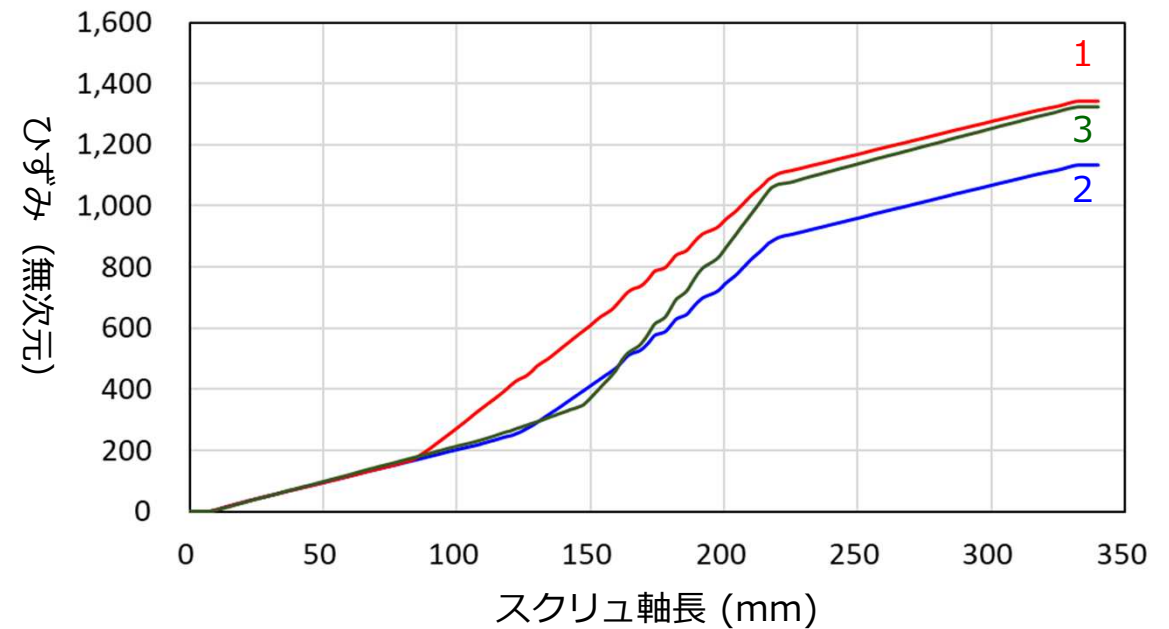
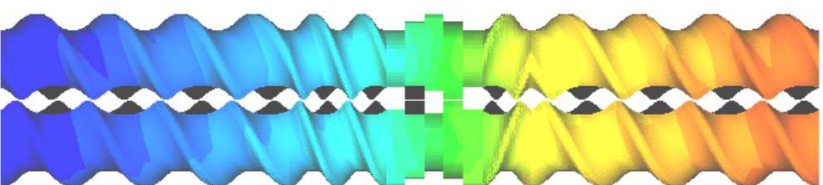
CASE1: モデルA／回転数100rpm



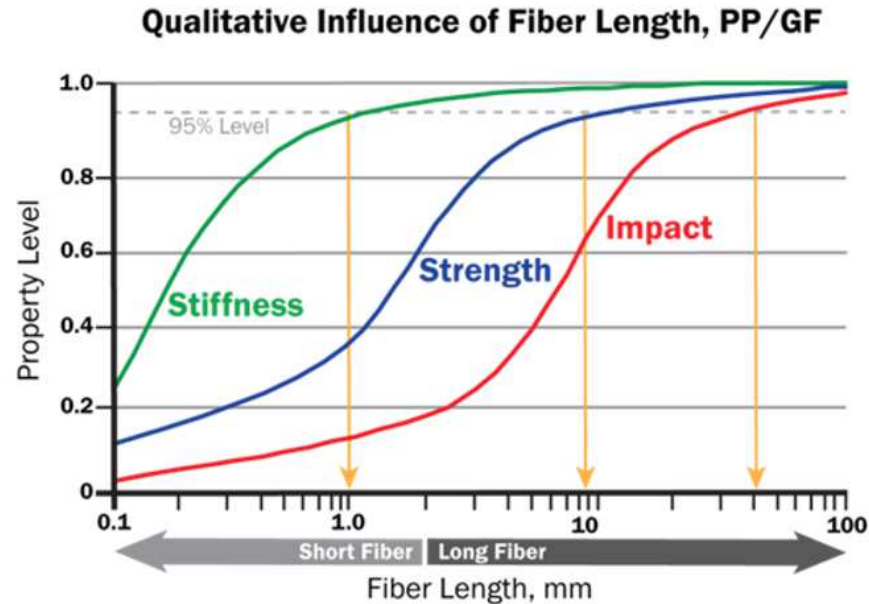
CASE2: モデルB／回転数100rpm



CASE3: モデルB／回転数150rpm



3.3 複合材料の繊維破断シミュレーション



繊維複合材の強度は、繊維長に依存して大きく変化する。一般的に繊維長の増加に伴って、剛性、強度、耐衝撃性能は何れも向上する。

Composite properties are shown to increase with fiber-length

出典: J.L. Thomason & M.A. Vluc, Composites, A27 (1996)

Fiber attrition model^{*)}

繊維長を離散化モデルで表現： $l_i = i\Delta l (i = 1 \sim i \max, \Delta l : \text{繊維長刻み幅})$

単位体積あたりに含まれる繊維長 l_i の繊維数： $N_i (i = 1 \sim i \max)$

$$\frac{dN_i}{dt} = -P_i N_i + \sum_{k=i+1}^{i \max} R_{ik} N_k$$

繊維長 l_i の
繊維数の変化率

繊維長 l_i の
破断に伴う減少率

繊維

別の繊維長 ($k > i$) の破断に
伴う繊維長 l_i の繊維の増加率

^{*)} 参考文献: J.H. Phelps (2009). "Processing-Microstructural Models for Short- and Long-Fiber Thermoplastic Composites," PhD Thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL 61801.

繊維破断確率の評価式

$$P_i = C_b \dot{\gamma} \left[1 - \exp(1 - \hat{\gamma}) \right] \text{ for } \hat{\gamma} \geq 1,$$

$$P_i = 0 \text{ for } \hat{\gamma} < 1,$$

$$\hat{\gamma} = \frac{4\zeta\eta_m \dot{\gamma}_i^4}{\pi^3 E_f d_f^4}$$

C_b : 無次元破断頻度係数

ζ : 無次元抗力係数

η_m : 流体粘度

E_f : 繊維ヤング率

d_f : 繊維断面直径

$$R_{ij} = C \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right),$$

$$x = l_i, \mu = \frac{l_j}{2}, \sigma = S l_j$$

S : 繊維長分布の調整パラメータ

C : 規格化パラメータ

繊維破断解析例／設定および解析結果

繊維情報

初期繊維長 μm
 繊維断面直径 μm
 繊維ヤング率 GPa
 初期繊維本数

環境情報

流体粘度 Pa·s
 ひずみ速度 S-1

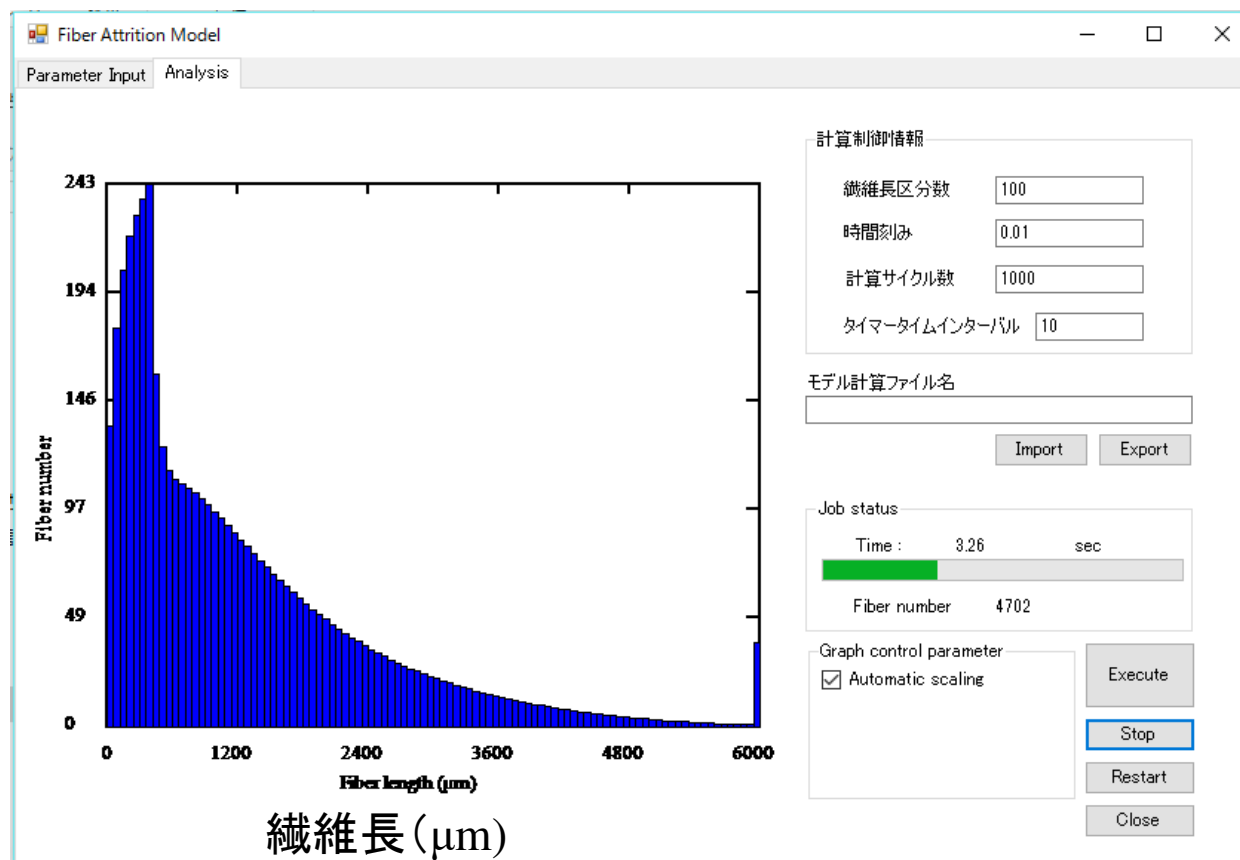
Dimension less parameters

Cb
 S
 ξ

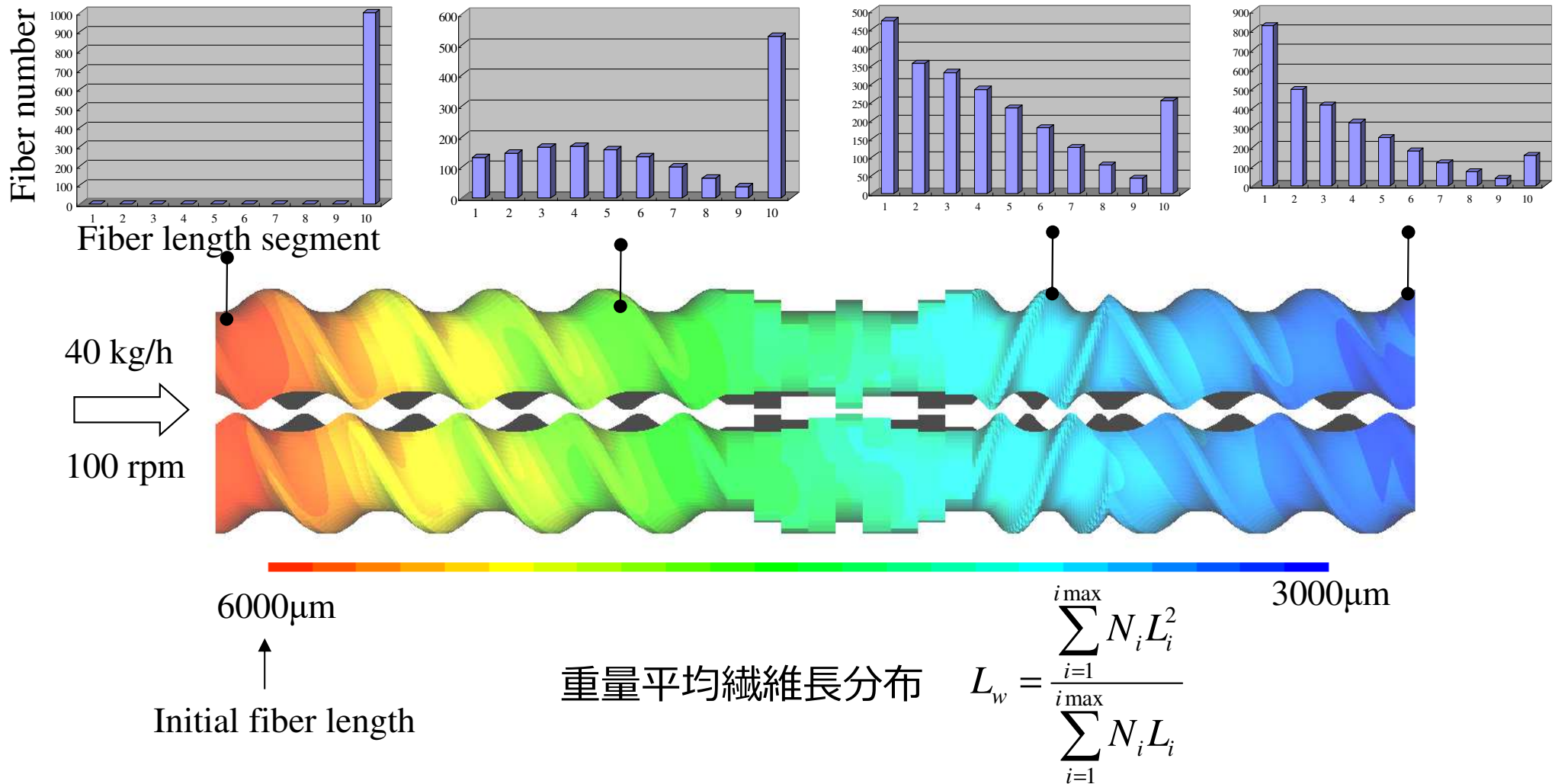
計算制御情報

繊維長区分数
 時間刻み
 計算サイクル数
 タイマータイムインターバル

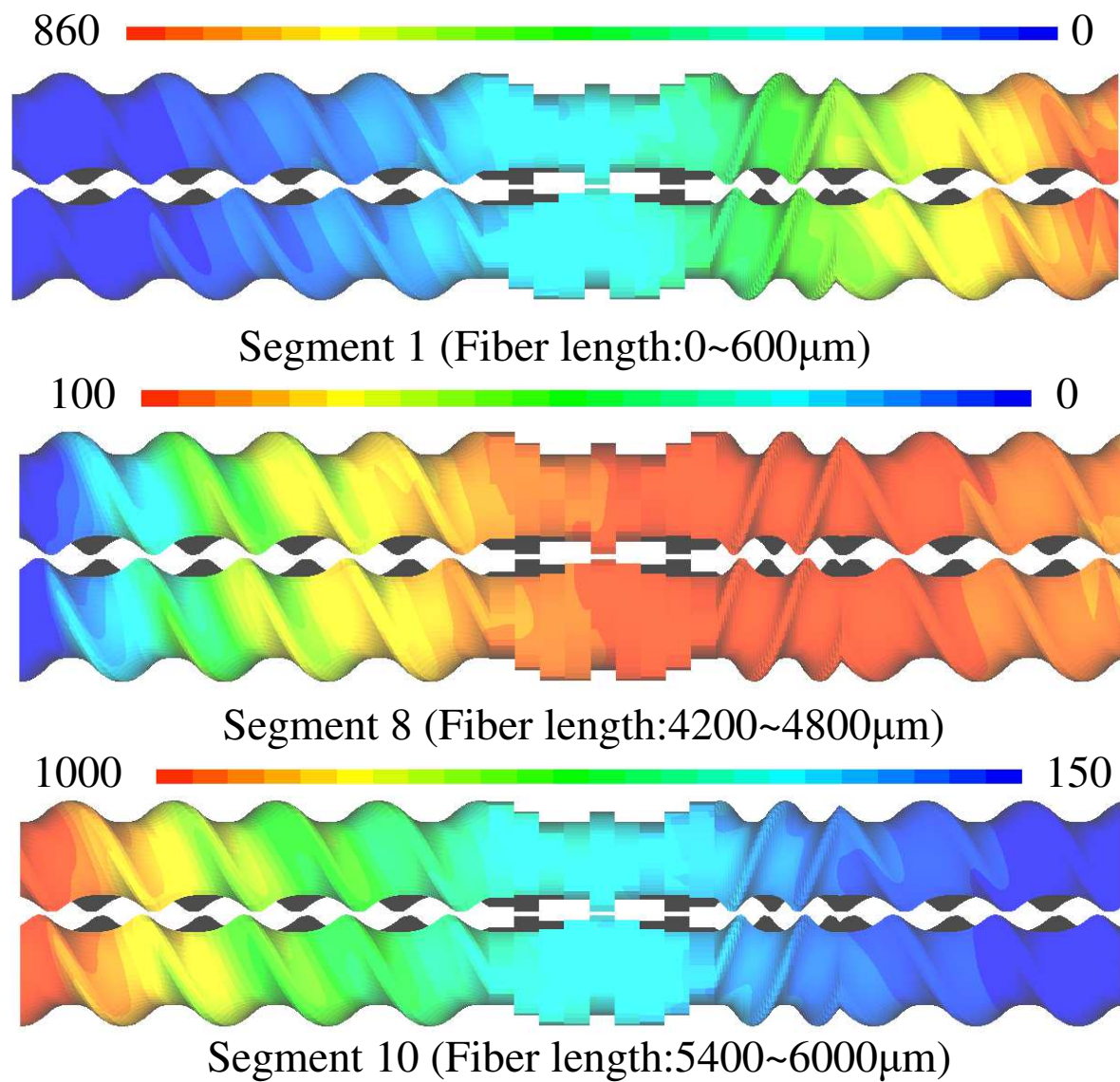
繊維数



繊維破断解析例／繊維破断の進行状況評価



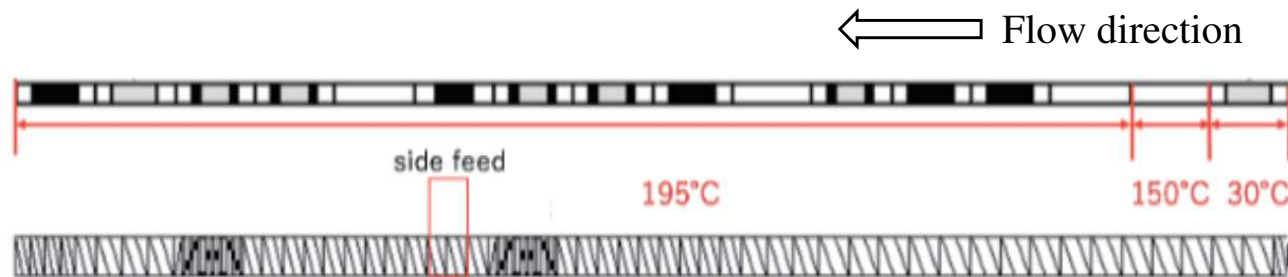
繊維破断解析例／区分毎の繊維長分布



【検証事例4】 繊維破断検証解析

参考文献：二軸押出機内における繊維破断挙動の実験的評価とHele-Shawシミュレーションに基づく予測
小幡祐也, 尾原正俊, 梅本翔, 谷藤眞一郎, 瀧健太郎, 成形加工シンポジウム'18 (C209,2018)

○スクリュレイアウト($\Phi 26$, $L/D=64$)



○成形樹脂：ホモポリプロピレン(F-704NP, プライムポリマー製)

○ガラス繊維：チョップドストランド, 繊維長 3 mm, 繊維径 13 μm , 日本電気硝子製)

○繊維長測定：マイクロスコブ (VHX-6000, キーエンス製)
各条件につき200本のガラス繊維の長さを測定し、数平均繊維長を算出

○解析の繊維破断パラメータ： $(C_b, \xi, S) = (0.002, 0.1, 0.05)$, 繊維濃度 3.0 wt. %

○解析結果

- 実験結果と解析結果の比較
(押出量 10kg/h, スクリュ回転数 200rpm)

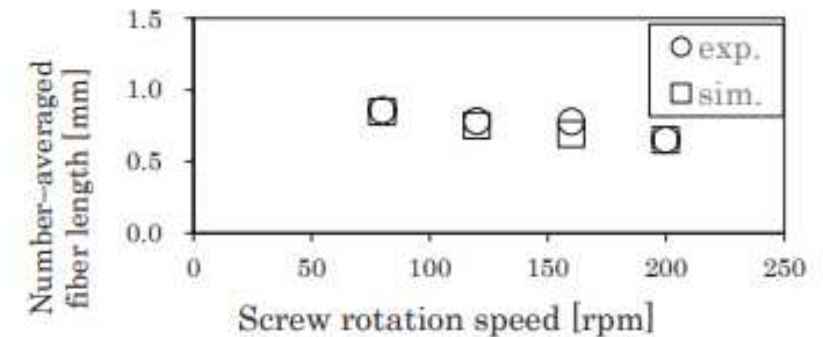
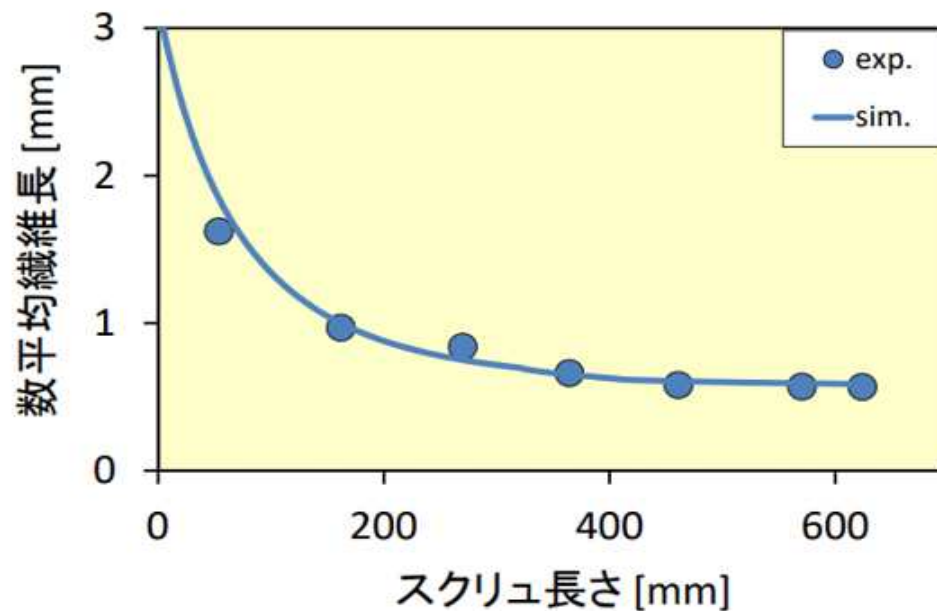


Fig. 2 Effect of screw rotation speed on number-averaged fiber length at feed rate of 10 kg/h.

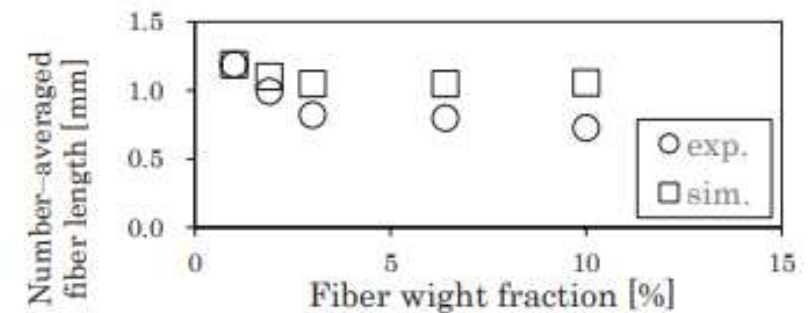
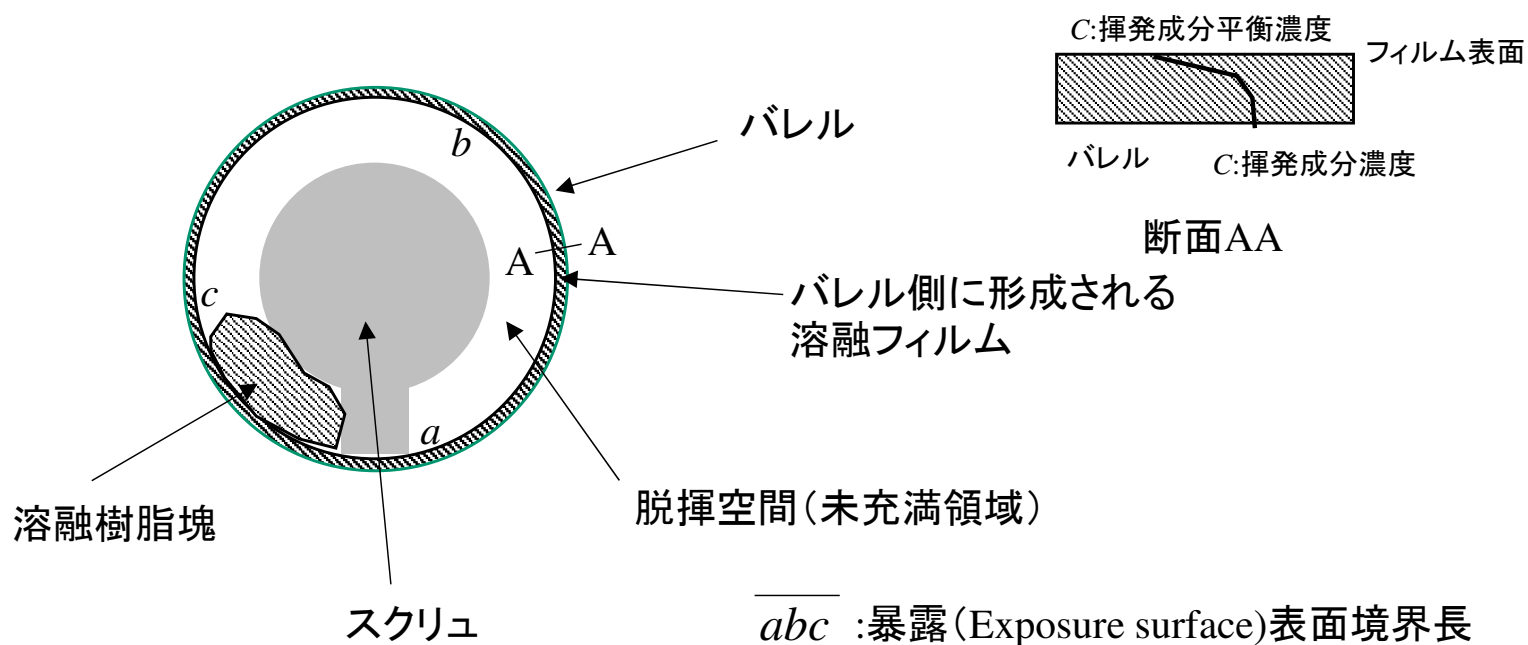


Fig.3 Effect of fiber weight fraction on number-averaged fiber length in screw rotation speed of 40 rpm.

3.4 脱揮シミュレーション

表面更新型脱揮解析モデル(Surface renewal model)

溶融樹脂の自由表面を介した拡散支配の脱揮プロセスを定量化するモデル



図： 未充满領域のスクリュ軸垂直断面内の状態

*) 参考文献: George A. Latinen, "Devolatilization of viscous polymer systems",
Advances in Chemistry, American Chemical society, 19,235-246(1962)

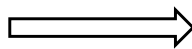
脱揮モデル拡散係数関数化

$$D = a_T D_r \exp\left(\beta \frac{\phi}{\phi_m}\right),$$

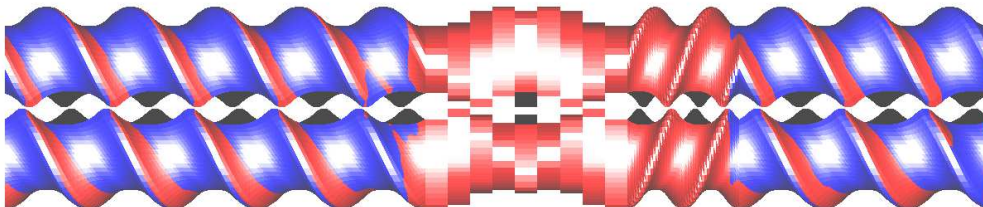
$$a_T = \exp(\alpha(T - T_r))$$

α : モデルパラメータ
 β : モデルパラメータ
 T_r : 基準温度
 D_r : 基準温度における拡散係数
 ϕ : 揮発成分濃度
 ϕ_m : 揮発成分濃度最大(初期)値

解析結果例


 Flow direction

充満率分布



揮発成分濃度分布/ Volatile concentration (ppm)

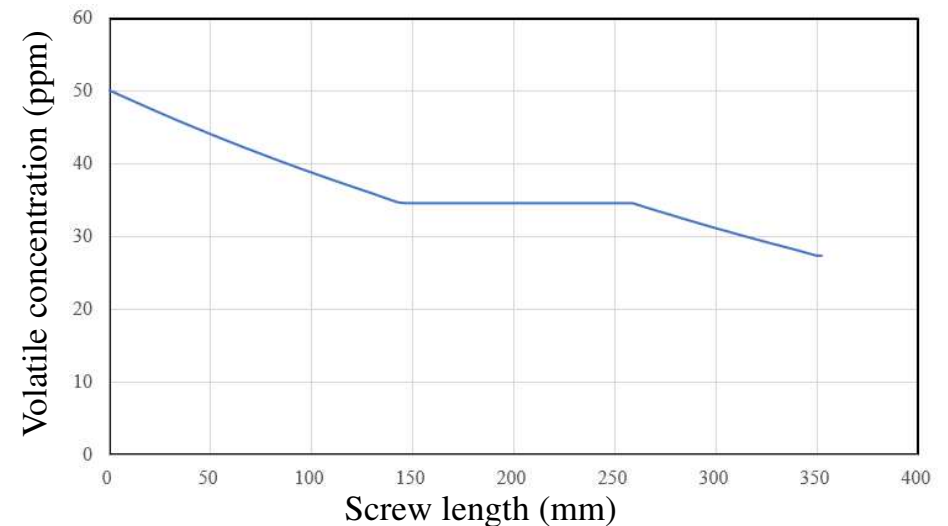
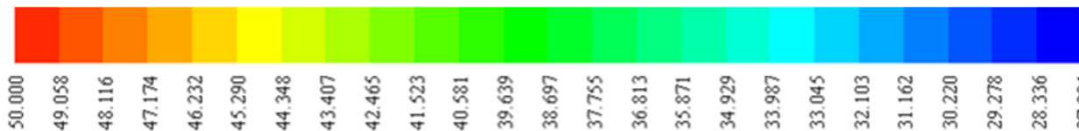
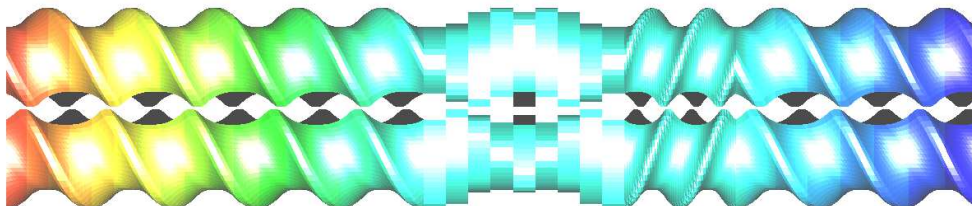
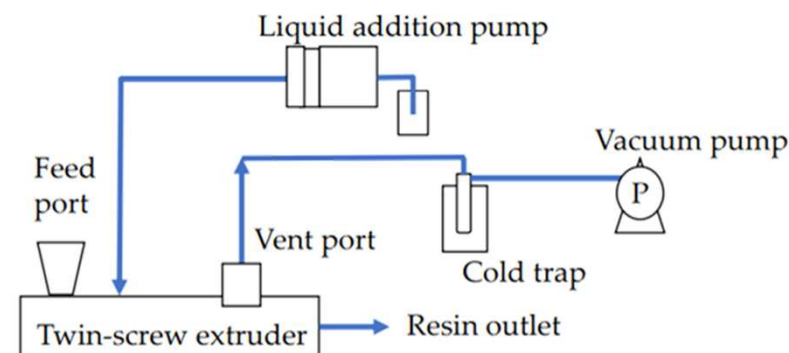
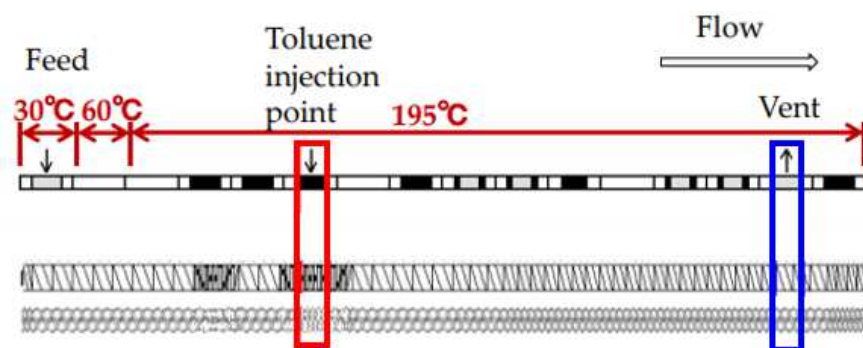


図: 揮発成分濃度のスクリュ長依存性

【検証事例5】 脱揮検証解析

参考文献: “Experimental and Numerical Simulation Study of Devolatilization in a Self-Wiping Corotating Parallel Twin-Screw Extruder”,
M. Ohara, Y. Sasai, S. Umemoto, Y. Obata, T. Sugiyama, S. Tanifuji, S. Kihara, K. Taki, *Polymers*. **12**, 11, 2728 (2020)

○スクリュレイアウト (Φ26二軸スクリュ, L/D=64.6)



○成形樹脂：ホモポリプロピレン (F-704NP, プライムポリマー製)

○揮発成分：トルエン (special-grade reagent, purity 99.5%, FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation)

Table 1. Diffusion coefficient of polypropylene-toluene.

Temperature (°C)	Diffusion Coefficient (m ² /s)
25	4.58×10^{-13}
50	3.44×10^{-12}
80	1.16×10^{-11}

Table 2. Parameters used to calculate the diffusion coefficient.

Initial Volatile Concentration of Experiment (ppm)	Equilibrium Volatile Concentration, C* (ppm)	α	β	D_r (m ² /s)	T_r (°C)
30,000	4000	0.04	1	4.58×10^{-13}	25

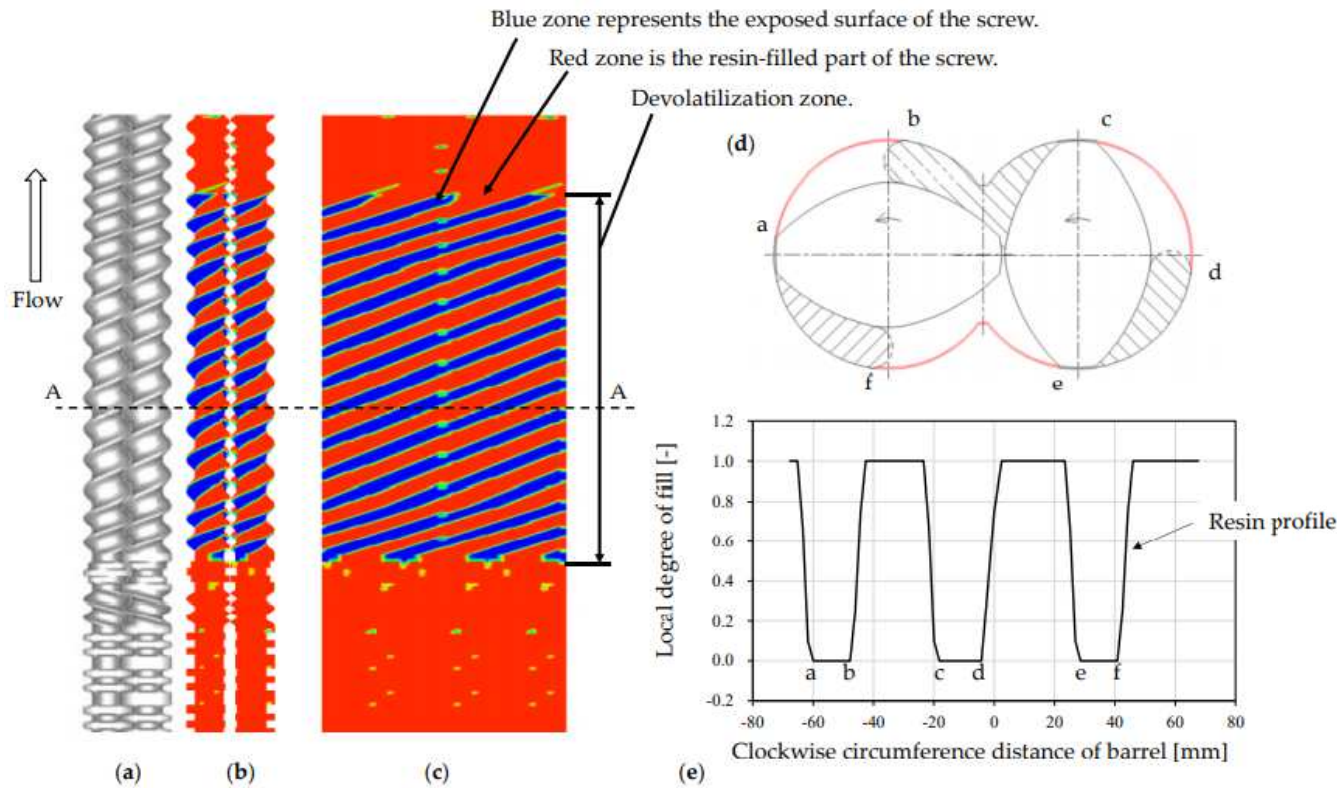


Figure 2. Devolatilization calculation section ($z_e - z_s$) and the exposed surface boundary length in a twin-screw extruder. (a) Screw configuration. (b) Resin distribution: red and blue indicate the local degree of fill 1 and zero, respectively. (c) Resin distribution on unwrapped screw geometry. (d) Cross-sectional view of screw, barrel, and resin in the starved zone. (e) Local degree of fill distribution as a function of clockwise circumference distance of the barrel.

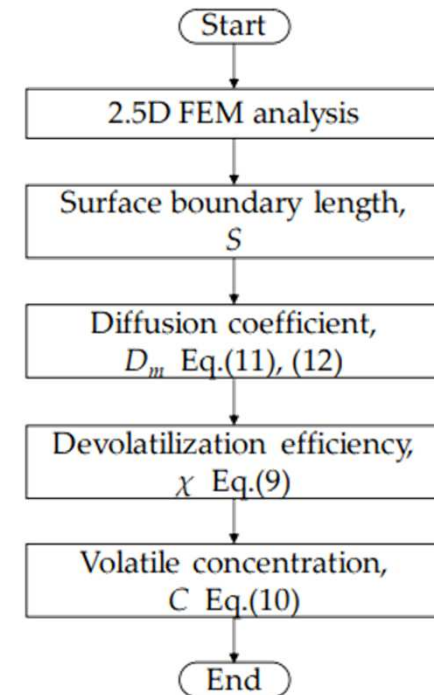


Figure 3. Flow chart for calculating the volatile concentration.

○解析結果

Figure 7. Simulation results of toluene concentration along the machine direction of twin-screw extruder.

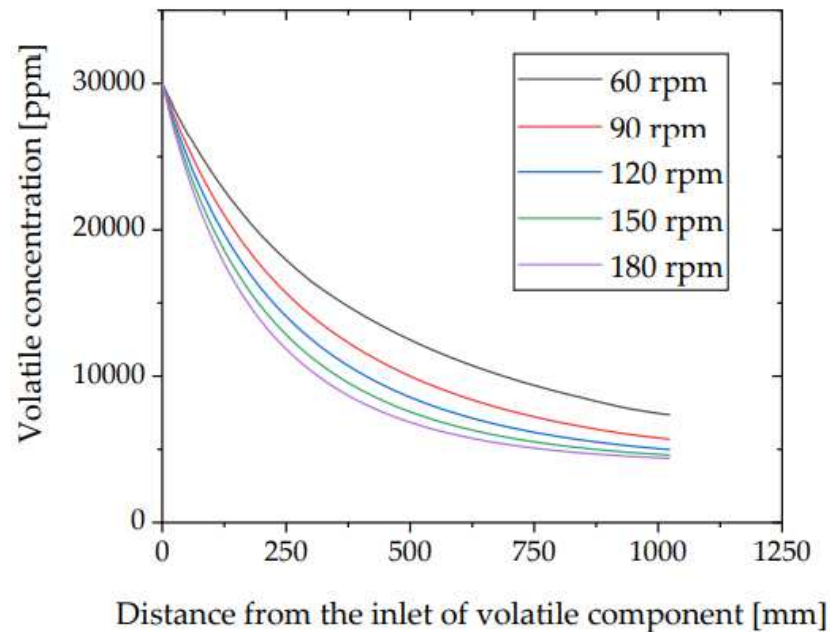
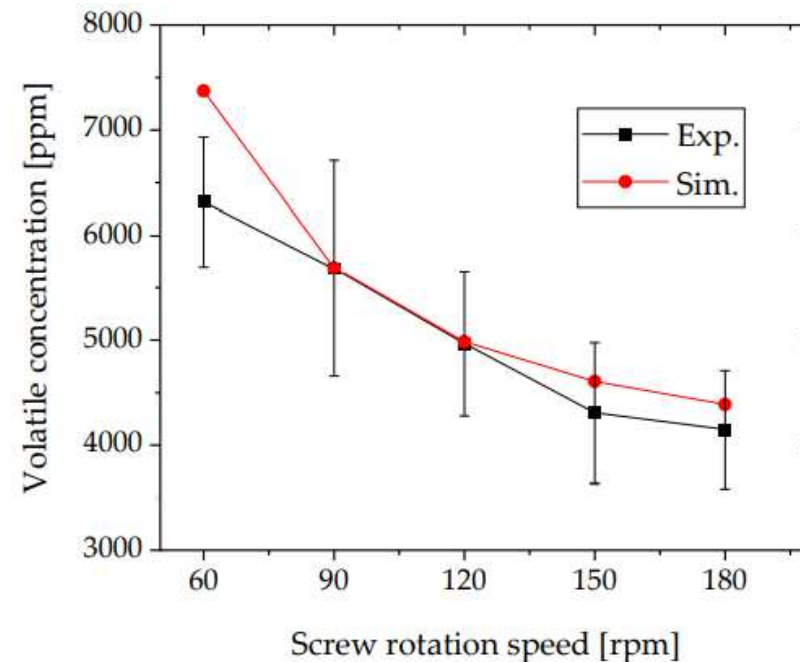
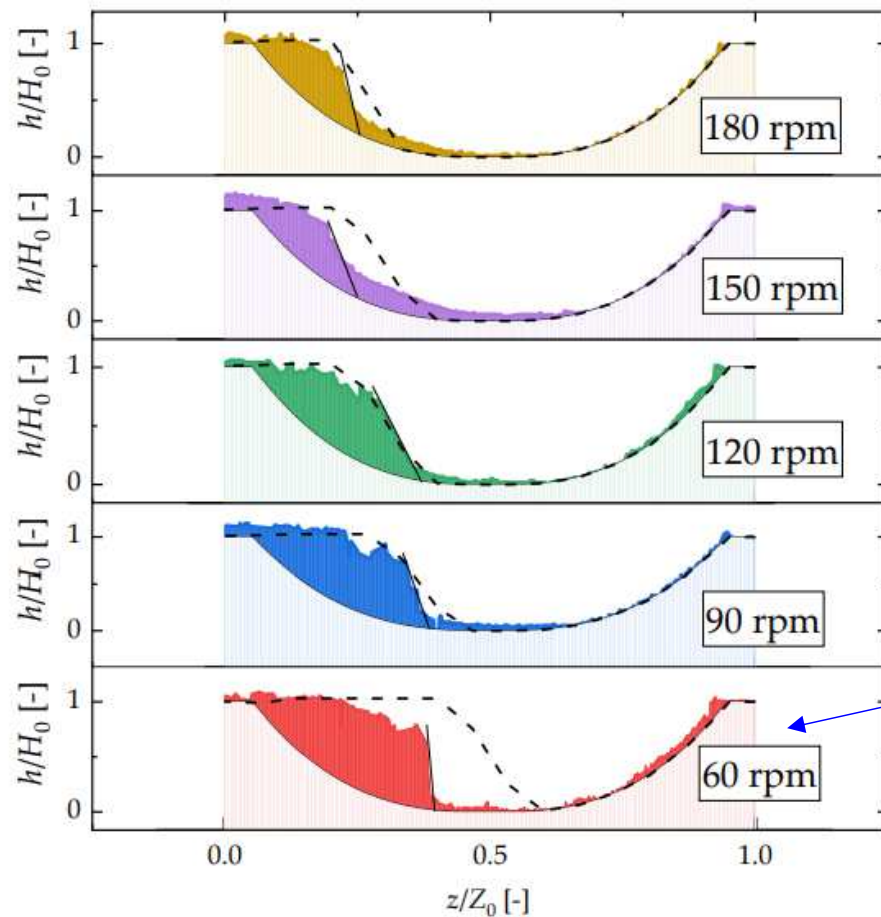


Figure8. Comparison of simulation results and experimental results of screw rotation speed and toluene concentration (starved zone length = 1024 mm). The volatile concentration at each screw rotation speed was measured three times.



○解析結果

Figure 9. Effect of screw rotation speed on the resin distribution of the experimental and simulation results. The dotted lines show the simulation results and the experimental results are filled with colors.



This result is obtained because the exposed surface length of the simulation is two-third of that obtained experimentally. The deviation was treated as an artifact of the experiment because **the resin tends to remain in the valley of the two screws when the barrel is open at slow screw speeds.** Hence, the short-exposed surface length of the simulation overestimated the volatile concentration.

おわりに

成果

2.5D FEM解析技術は、既往FAN法の強みである未充満状態の評価が可能であることに加えて、計算負荷が3D FEM/FVMと比較して小さいため押出機全域の解析が可能である。また解析運用も容易で短時間で解析結果を得ることができる。

Hele-Shaw薄肉流れに立脚したFEM定式化により、要素肉厚方向に対する流速成分は無視されるが、同方向に生じる速度勾配や温度勾配を考慮するために各要素は肉厚方向にも離散化される。そのため、解析で得られる流速や温度分布は、軸方向、周方向、および肉厚方向の3D情報として定量化される。

当技術と輸送方程式で表現される数理モデルを併用することで、混練性能、複合材の繊維破断、脱揮性能、反応押出など、熔融樹脂の未充満状態や自由表面の解析精度が重要、かつ実用性の高い評価項目の解析に対応可能である。

今後の方針

大学や企業（可視化装置）との連携を計り、解析結果の妥当性検討や新規定量化モデルの構築などを目的とした共同研究（実験検証解析）を推進する。