

(論文)

粒子法に基づく樹脂混練機内の部分充満解析技術の開発

Partially Filled Flow Simulation Based on Particle Method of High-Viscosity Fluid in Mixer



関山和英*1
Kazuhide SEKIYAMA



山田紗矢香*1 (博士(工学))
Dr. Sayaka YAMADA



中川知和*2 (博士(工学))
Dr. Tomokazu NAKAGAWA

In the development of mixers and extruders, it is important to grasp the fluid flow inside the machines, and three-dimensional flow analysis is being increasingly applied. There, however, are not many studies on the partially filled flow of high-viscosity fluid. Hence, this study focuses on the particle method, a common method for analyzing free surfaces, to improve its accuracy. The Element-free Galerkin method (EFGM), which is known to have high accuracy in the calculation of rotating motions, has been used with our newly devised technique (rearrangement) to prevent particle spacing to become uneven. The comparison between the analysis results and experimental results has revealed the possibility of quantitative analysis based on this technique. This method is expected to be applied to the elucidation of mixing mechanism.

まえがき = 近年、連続混練機、二軸押出機およびバッチミキサなどの高粘性流体を混練する装置（以下、混練機という）を対象に、数値解析（以下、解析という）によって装置内部の流動挙動を把握することにより、運転条件やロータ形状が異なる混練機の混練性能を評価する研究が盛んに行われている。これまでの研究における解析は完全充満状態で行われていたが^{1), 2)}、実際の混練機内の多くが部分充満状態であることから、完全充満状態の解析での評価には限界がある。そこで、より高精度な評価を狙いとした部分充満解析が注目されているが^{3), 4)}、混練機に対し部分充満流動解析を適用した例は極めて少ない。

混練機内の流体は、スクリュの高速回転により流動するため、自由表面の変動が大きいことが特徴である。そこで当社では、この大きな自由表面変動を伴う部分充満流動に対して、格子法よりも有利とされる粒子法に着目し、混練機内流動に適用可能な解析手法の開発を試みた。開発した手法を用いて混練機内を模擬した二次元的なモデルの流動を解析し、理論解および可視化実験結果と比較することによって解析手法の精度を確認した。

1. 解析手法

1.1 支配方程式

材料を等温で微圧縮性の粘性体としたときに、運動方程式は式(1)から式(3)のように、構成方程式は式(4)のように表される。

$$\rho \dot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} \quad \text{in } \Omega \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \bar{\mathbf{s}} \quad \text{on } \Gamma_s \quad \dots \dots \dots (2)$$

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

$$\sigma_{ij} = 2\mu \dot{\epsilon}'_{ij} + \lambda \dot{\epsilon}_v \delta_{ij} \quad \dots \dots \dots (4)$$

ここで、 Ω : 対象領域、 Γ_s : 表面力規定境界、 Γ_u : 速度規定境界、 ρ : 密度、 $\dot{\mathbf{u}}$: 速度の時間微分、 $\boldsymbol{\sigma}$: 応力テンソル、 \mathbf{b} : 体積力ベクトル、 ∇ : ベクトル微分演算子、 \mathbf{u} : 速度ベクトル、 \mathbf{n} : 境界の法線方向ベクトル、 $\bar{\mathbf{u}}$: 境界速度ベクトル、 $\bar{\mathbf{s}}$: 表面力ベクトル、 σ_{ij} , $\dot{\epsilon}'_{ij}$, $\dot{\epsilon}_v$: 時刻 $t + \Delta t$ における応力成分、偏差ひずみ速度成分および体積ひずみ速度、 μ : 流体粘度である。 λ は体積変化に対する抵抗係数であり、ここでは十分大きい値として μ の100倍とした。

1.2 離散化法

部分充満解析を行う際に、計算点がメッシュ上に固定される格子法（メッシュ法）の場合（図1左）、自由表面を表現する複雑なモデル化が必要である。いっぽう、計算点が流れに沿って移動する粒子法（メッシュフリー法）の場合（図1右）は特別なモデル化を必要としない。このため、一般に自由表面の解析に向いているとされる。そこで本開発では、粒子法に着目した。

高粘性流体の流動においては、流動へのせん断場（伸

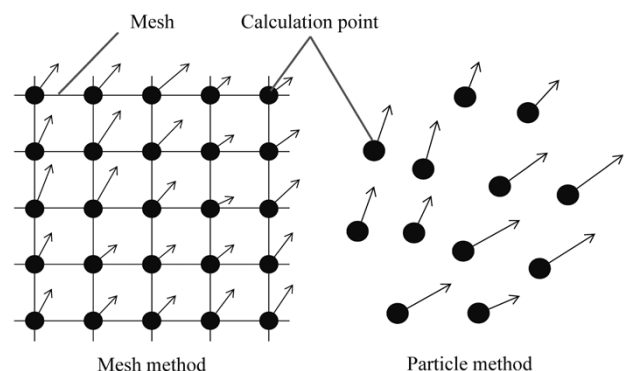


図1 格子法（メッシュ法）と粒子法（メッシュフリー法）
Fig.1 Mesh method and particle method (mesh-free method)

*1 技術開発本部 機械研究所 *2 技術開発本部 機械研究所 (現 ㈱高砂コンピュータサービス)

長と回転が組み合わせられた流れ) や回転場の寄与度が高いため、それらが高精度で予測できる必要がある。また、混練性能評価指標としてはせん断速度やせん断応力が重要であると一般にいわれている⁵⁾。そのため本開発では、離散化法にEFGM (Element-Free Galerkin Method⁶⁾) を採用した。EFGMは、本問題のような移流項を含まない微分方程式の解法として確立している有限要素法の定式化によっており、上記のようにせん断場や回転場の寄与度が高い流動においても、高精度な解析が可能である。また、複雑な自由表面に対しても境界条件の設定が容易であるという特長も有する。

一般的にEFGMでは、数値積分のためのバックグラウンドセル (background cell) が必要であるが、計算負荷軽減のためこれを用いず、粒子点で積分 (nodal integration) を行った。

時間積分には完全陰解法を採用した。この理由は、陽解法で高粘性体を解析する場合は時間増分を極めて小さくする必要があり、計算時間が掛かるためである。

1.3 速度の近似関数

速度の近似関数には移動最小二乗法 (Moving Least Square Method : MLSM) を用いた。本開発では、必要最低限の1次とし、重み関数 W として以下の指数関数を用いた。

$$W(r) = \frac{e^{-\alpha(r/r_0)^2} - e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} \dots\dots\dots (5)$$

ここに、 r は粒子間距離、 r_0 はカーネル半径、 α は係数である。上式は、 $r \leq r_0$ の場合にのみ用い、 $r > r_0$ の場合は $W(r) = 0$ とする。本開発の解析においては、全て $\alpha = 7$ 、 r_0 は初期粒子間隔の2.6倍とした。

なお、標準的なSPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法⁷⁾ やMPS (Moving Particle Semi-implicit) 法⁸⁾ のように、ゼロ次の近似関数を用いると角運動量が保存できず、高粘性流体の場合は極めて大きな誤差を生ずる⁹⁾。

2. 精度向上のための新手法 (粒子再配置)

粒子法においては一般に、粒子間隔が不ぞろいになることによって離散化誤差が増大し、精度が劣化することが知られている。しかし、混練機内の部分充満流動は、ロータの回転による粒子の流動が定常状態になるまでに長時間の計算が必要になり、時間の進行とともに粒子間隔が不ぞろいになることは避けられない。そこで、精度改善のため、図2のように仮想的なばねの反発力を利用して粒子間隔を一定に保つ手法 (粒子再配置) を考案した。

この処理によって粒子間隔が一定に保たれるものの、

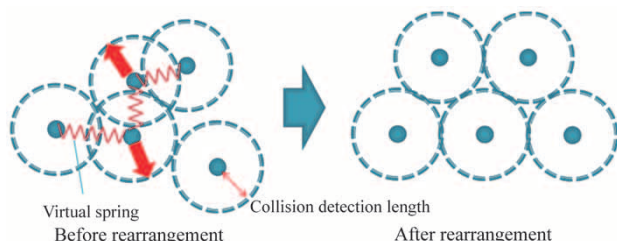


図2 粒子再配置
Fig.2 Particle rearrangement

再配置処理によって自由表面形状がひずむなどの誤差が導入される。これらの誤差を最小化するためにここでは、最も簡便な手段として、 Δt を十分小さく取り、さらに再配置を毎ステップ実施することによって1ステップあたりの座標変動量を小さくした。

3. 開発した手法の精度検証

本章では、前章で述べた新たな手法の精度を定量的に検証した結果を概説する。

3.1 二重円筒間内の完全充満流動における理論解との比較

開発した手法の精度を確認するため、同軸二重円筒クーエット (Couette) 流れの完全充満解析を実施し、同条件の定常状態の理論解と比較した。解析条件は、内筒半径を10 mm、外筒半径を25 mmとし、内筒の回転数を200 rpm (=角速度20.944 rad/s) とした。また、流体の粘度 μ は相当ひずみ速度の関数とし、べき乗則 $\mu = \mu_0 \dot{\gamma}^{(n-1)}$ に従うものとした。ここで、 $\dot{\gamma}$ は相当ひずみ速度、 μ_0 および n は定数で、内筒に作用するトルクが1,000 Pa·sのニュートン流体と同じになるよう、 $\mu_0 = 11324.76$ Pa·s、 $n = 0.3$ を使用した。比較のために、再配置を導入しない手法の解析も実施した。

図3に、再配置ありの場合と再配置なしの場合の全粒子の中心からの距離 r に対する周方向速度 u をそれぞれ示す。再配置ありの結果は理論解によく一致した。いっぽう、再配置なしの結果は配置の粗密の影響を受けて大きな離散化誤差を生じ、各所の u が理論解と大きく乖離 (かいり) した。

なお、内筒壁面上に作用する境界力 (図4) の接線方向の合力を内筒が受けるトルクとして算出したところ、理論解との誤差は再配置なしの場合の-28.9%に対し、再配置ありの場合は-0.3%と良好な結果が得られた。

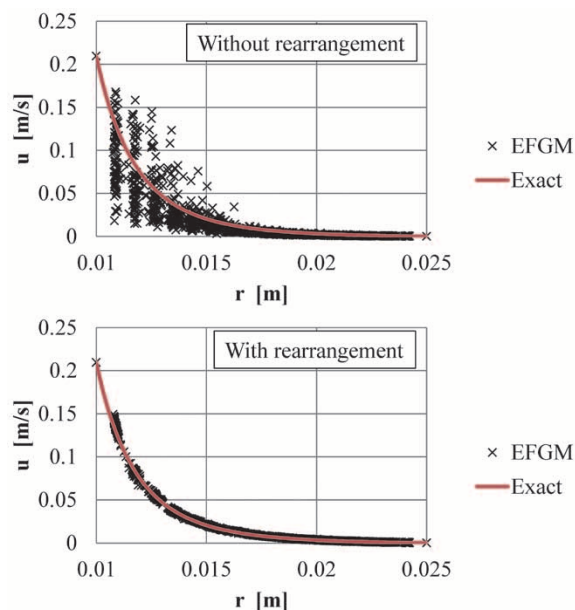


図3 中心からの距離と周方向速度の関係における理論解と解析結果との比較
Fig.3 Comparison between theoretical solution and simulation results in relationship between distance from the center and circumferential velocity

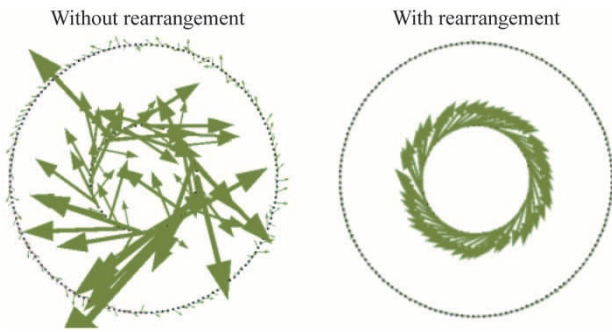


図4 内筒一回転後の境界力の比較

Fig. 4 Comparison of boundary force after one rotation of inner cylinder

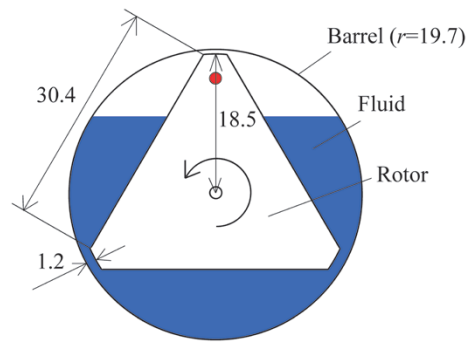


図6 単純形状ミキサの断面形状

Fig. 6 Cross sectional shape of simple mixer

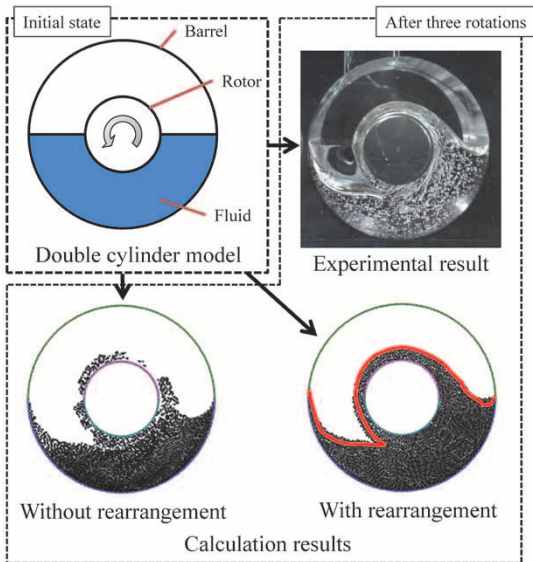
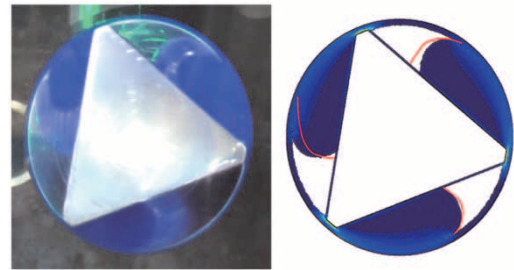


図5 部分充満流動における3回転後の自由表面形状の実験結果と解析結果の比較

Fig. 5 Comparison of free surface shape between experimental and simulation result after three rotations in partially filled state



Experiment

Calculation

図7 6 rpmで回転させた時の定常流動

Fig. 7 Steady state flow at 6 rpm

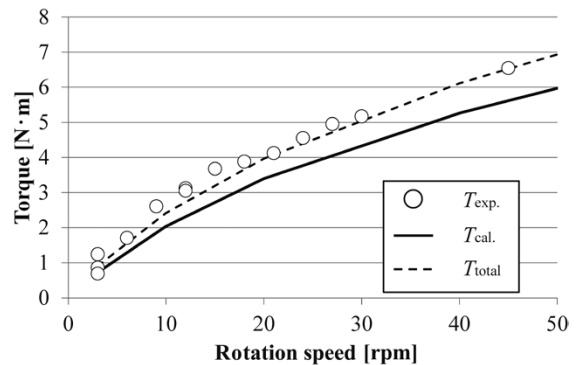


図8 回転速度とロータに作用するトルクの関係

Fig. 8 Relationship between rotation speed and torque acting on rotor

3.2 二重円筒間内の部分充満流動における実験との比較

二重円筒間に流体を50%充填し、内側の円筒を6 rpmで回転させた。このときの開発した手法による自由表面形状の予測精度を実験と解析によって確認した。3回転後の流体の様子を図5に示す。再配置を導入しない解析では、粒子間隔の不均一が発生して実験結果のような表面が再現できなかった(図5左下)。いっぽう、再配置を導入した解析では、粒子間隔の不均一が発生せず、実験結果と非常に良い一致が見られた(図5右下)。また、粒子間隔の不均一が解消されたことにより、流動状態が定常になるまでの長時間の解析が可能となった。

3.3 模擬混練実験との比較

混練機を模擬した単純な形状(図6)の解析を実験結果と比較した。バレルは半径19.7mm、奥行46mmの円形で、ロータは半径18.5mmの三翼ロータである。解析には、混練機の軸方向に垂直な断面の二次元モデルを用いた。

実験においても、軸方向にねじれがないロータを採用し、軸方向の流れを極力除した(二次元モデル実験)。ただし、ロータの軸方向の長さは89mm、バレルの軸方向長さは90mmであり、ロータ端面に前後合わせて1mmの隙間が存在する。

解析、実験ともに、ロータ回転数6 rpm、充満率75%とし、解析で用いた流体の物性値は、密度を 1.000 kg/m^3 とし、粘度特性は前記のべき乗則に従い、粘度測定結果から最小二乗法により決定した粘度モデル係数、 $\mu_0 = 1926.7 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、 $n = 0.635$ を使用した。

開始から十分な回転を経て、表面形状が大きく変化しなくなった状態(以下、定常状態という)における解析および実験での流動挙動を図7に示す。右図中の赤線は、実験結果から読み取った自由表面の輪郭であり、軸方向の中央部における自由表面形状を表している。同図からわかるように、解析と実験とで流体の自由表面形状がよく一致することが確認できた。

つぎに、解析および実験により、定常状態における回転速度とロータに作用するトルクとの関係を調べた(図8)。同図から、解析結果 $T_{\text{cal.}}$ は実測結果 $T_{\text{exp.}}$ に比べてトルクが15%程度小さくなっているものの、 $T_{\text{exp.}}$ の傾向をよく再現していることがわかる。解析結果が小さくなった原因としては、解析が二次元であることに対して実験

では端面でもトルクが発生すること、また、二次元モデル実験では、軸方向への流れが完全にはゼロにならないため、トルクが変化することが考えられる。このうち、試算が可能である端面とロータの間で発生するトルクを解析結果に足し合わせた合計トルク (T_{total}) を図8に合わせて記載した。なお、試算においては簡単のため、三角形を等価な面積の円形状に換算し、流体が隙間全体に充滿しているとした。

図8より、 T_{total} は、 T_{exp} とよく一致することがわかる。すなわち、上記の端面の影響を考慮することによって良い精度でトルクが予測できることが示唆された。

4. 三次元解析による混練の定性的評価と今後の展開

当社の大型混練造粒装置 (LCM) において、熔融樹脂が流動する箇所 (熔融混練部) に対して今回開発した手法を適用して解析を行った。解析モデルはスクリュ部とロータ部をもち、ロータの構成は、(A) 送りロータのみ、および (B) 送りロータと戻しロータの組み合わせとした。それぞれの構成においてスクリュは同形状であり、ロータの断面形状も同一である。解析結果を図9

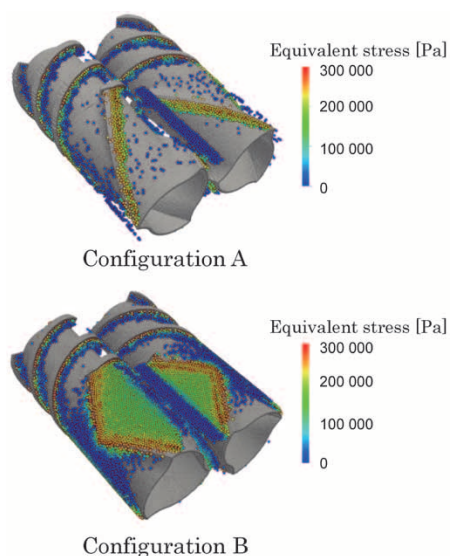


図9 異方向連続混練機における熔融混練部の三次元流動解析結果
Fig. 9 Results of 3-D flow simulation of melt mixing zones in counter-rotating mixer

に示す。一般に、ロータ構成に戻しロータが使われると充滿率が上昇する傾向があることが知られており、図9の結果はその傾向と一致する。

今後は、三次元解析による定量的検証を行うとともに、従来完全充滿で多く実施されてきた混練機の性能評価手法の確立へと発展させ、混練機の適切な運転条件の解明やロータ形状の改良検討に活用可能な技術とする予定である。

むすび = EFGMを基礎とし、新しく粒子再配置手法を取り入れた粒子法にて高粘性流体のシミュレーションを行った。二次元モデルでは自由表面形状がよく一致すること、およびトルクが定量的に十分予測可能なことを示した。また、実機の熔融混練部の三次元解析を実施し、充滿状態が定量的に表現できることがわかった。

実機での混練現象の解明への活用を目指して、今後も引き続き解析手法の開発を進めていきたいと考えている。

参考文献

- 1) 山田紗矢香ほか. 成形加工. 2012, Vol.24, No.5, p.279-285.
- 2) M. Malik et al. Intern. Polym. Process. 2014, Vol.29, No.1, p.51-62.
- 3) S. Riviere et al. Polym. Eng. And Sci. 2013, Vol.53, No.12, p.2509-2518.
- 4) 福澤洋平ほか. 日本計算工学会論文集. 2014, p.20140007.
- 5) Q. Li et al. Rub. Chem. And Tech. 1995, Vol.68, No.5, p.836-841.
- 6) T. Belytschko et al. Int. J. Numer. Methods Eng. 1994, Vol.37, No.2, p.229-256.
- 7) Monaghan et al. Annual. Rev. of astro. And astrophysics. 1992, Vol.30, No.1, p.543-574.
- 8) S. Koshizuka et al. Nucl. Sci. and Eng. 1996, Vol.123, No.3, p.421-434.
- 9) 中川知和ほか. 成形加工. 2015, Vol.27, No.9, p.380-387.