二軸スクリュ押出機の溶融可塑化シミュレーション技術

福澤 洋平*

1. はじめに

CAE (Computer Aided Engineering) 技術は今や産業界において、製品設計や製造プロセスの最適化を図る上でなくてはならないツールとなっており、プラスチック成形加工分野においてもこの CAE 技術を駆使した現象のメカニズム解明や新製品の開発が推進されている。特に押出機を用いた溶融混練プロセスでは、押出機の運転条件、樹脂の材料物性など様々な要因が複雑に作用するため、完全にブラックボックス化された押出機内部の樹脂挙動を把握するためにも CAE は有用な技術である。

樹脂の溶融可塑化メカニズムの理論的モデル化への試みは、単軸押出機にて Tadmor¹⁾が初めて行った。Tadmor モデルは可塑化過程での樹脂をソリッドベッド、メルトフィルム、メルトプールの 3 ゾーンで分類し、樹脂の溶融可塑化が進行するにつれてソリッドベッドが減少すると共にメルトプールが拡大していくものである。Tadmor が提案した可塑化モデルを基にして、その後様々な可視化実験が実施され、現在では新たな可塑化モデルへと改良され発展してきた^{2)~5)}。

一方で、二軸押出機に関しては Potente^{6),7)}や White^{8),9)}, Gogos¹⁰⁾らの理論が代表的ながら、それらのモデルは十分とは言えない。これは、単軸押出機では回転するスクリュの溝で樹脂が圧縮された後にバレル表面から伝熱とせん断エネルギーが付与されて徐々に可塑化が進行し系統立てた理論化が可能であるのに対して、二軸押出機ではスクリュによる高いせん断応力によって生じる固体原料の摩擦や塑性変形による発熱など、あらゆる要因が複雑に作用し可塑化メカニズムを明確に定義しづらいためである。

我々は、FAN (Flow Analysis Network) 法と粒子法を用いた二軸押出機での溶融可塑化モデルの開発を行っており、本解説ではこれらのシミュレーション手法と事例について紹介する。

2. FAN 法による溶融可塑化シミュレーション

2.1 FAN 法の演算アルゴリズム

FAN 法は固体輸送から溶融可塑化までの押出機内の全域を予測できる実用的な解析手法である。近年では噛み合い型同方向回転二軸スクリュ押出機の FAN 法シミュレーションソフトウェアが市販されるようになり、Ludovic (Sciences Computers Consultants: フランス), TEX-FAN (日本製鋼所: 日本)^{11),12)}などがある。これらのソフトウェアは樹脂物性、スクリュ構成、押出条件の解析条件を設定し解析を実行すると、スクリュ軸方向の樹脂温度、圧力、充満率、滞留時間、可塑化挙動等をスクリュ軸方向断面の平均値として予測でき、混練プロセスにおけるスクリュ構成や押出条件の最適化など、混練理論の支援として混練の現場で活用されている。

FAN 法¹¹⁾とは押出機内の流路を図 1 に示すように 2 次元の平板流れへと展開し、この平板間の流路を要素分割することで要素間での流入と流出の流量・圧力バランスをスクリュの押出特性式に基づいて解く手法である。

$$\bar{Q} = \alpha' - \beta' \frac{\Delta \bar{P}}{L} \quad (1)$$

$$\bar{Q} = \frac{Q}{ND^3}, \quad \Delta \bar{P} = \frac{\Delta P}{\eta N}, \quad \bar{L} = \frac{L}{D} \quad (2)$$

$\bar{Q}$ は無次元体積流量、 $\Delta \bar{P}$ は無次元圧力差、 $\bar{L}$ はスクリュエレメント長 L とスクリュ外径 D で無次元化したもの、 α' と β' は牽引流と圧力流の大小を示すパラメータ、 Q は体積流量、 N はスクリュ回転数、 η は溶融粘度である。 α' と β' はスクリュのリードや外径などの形状因子によって定まり、例えばリードが増加するほど α' は大きく β' が小さくなり、圧力流よりも牽引流の寄与が大きくなり下流へと流れやすくなる。

図1 押出機内流路の FAN 法によるモデル化

Analysis of Polymer Plastication in a Twin Screw Extruder

* Fukuzawa, Yohei

(株)日本製鋼所広島製作所 技術開発部

広島市安芸区船越南 1-6-1 (〒736-8602)

yohei_fukuzawa@jsw.co.jp

2018.12.13 受理

図2 要素内のエネルギーバランス

樹脂温度は図2に示すように、シリンダからの伝熱と粘性発熱量のエネルギーバランスを各要素内で計算する。

$$Q\rho C_p(T_{out}-T_{in})=E_B+E_V \quad (3)$$

$$E_B=h(T_{in}-T_b)A \quad (4)$$

ρ は樹脂の密度、 C_p は樹脂の比熱、 T_{in} と T_{out} は要素における入と出の樹脂温度、 E_B はシリンダからの伝熱量、 E_V は粘性発熱量、 h は熱伝達係数、 T_b はシリンダ温度、 A は接触面積である。粘性発熱量 E_V は押出特性と同様にスクリュの形状因子によって定まるパラメータである。

樹脂の熔融可塑性は、フィーダーより投入された固体樹脂が搬送スクリュによって搬送され、混練部で充填し圧縮・緻密化した後、スクリュのせん断作用とシリンダからの伝熱によって熔融が進行することが判明している¹³⁾。FAN 法シミュレーションでは、固体樹脂が熔融樹脂中に浮遊・分散した状態から計算を行い、固体樹脂が徐々に小さくなることで可塑性が進行するものとした仮定を用いている。固体樹脂が熔融する量は、完全に熔融するのに必要なエネルギー（融点までの固体比熱と融解熱によって求まる）と樹脂が受けたシリンダ伝熱量 E_B と粘性発熱量 E_V の総和の比によって求める。固体樹脂の熔融開始位置は、シリンダの伝熱とスクリュ回転によるせん断作用が最も効果的に働く位置、つまり流路内が完全充満となり固体相を形成したときである。シミュレーションでもこれと同様に、固体樹脂が完全充満した位置を熔融開始位置とし、それ以降の下流側では上記に従った熔融量の計算を逐次行う。

2.2 FAN 法による熔融混練プロセスの予測

高密度ポリエチレン（HDPE）を用いた熔融混練プロセスのFAN 法シミュレーション結果について紹介する。二軸スクリュ押出機はTEX 65 α Ⅲ（日本製鋼所製）を用い、スクリュ構成は全長 $L/D=17.5$ （ L ：スクリュ長さ、 D ：シリンダ径）、下流部に $L/D=1$ の順送りニーディングディスク F-KD を2つ、その後 $L/D=1$ と0.5の逆送りニーディングディスク B-KDとした混練スクリュを有し、それ以外は全てフルフライトスクリュ FF で構成している（図3にスクリュ構成、表1に使用した各スクリュの形状

図3 スクリュ構成

と概略図を示す)。押出量は200 kg/hとし、スクリュ回転数は100, 200, 400 rpmの3条件である。表2にシミュレーションに用いたHDPEの物性値、図4にせん断粘度の測定データとCarreauモデルのせん断粘度曲線を示す。

図5は下流の混練部付近における充満率、温度、圧力、固相占有率（熔融状態）の予測結果である。スクリュ回転数が高くなるにつれて充満率が全体的に低下し、混練部での充満長は短く、圧力の立ち上がり位置も下流側へ遷移している。圧力のピーク位置はどのスクリュ回転数においてもF-KDとB-KDの境界で示しており、KDの昇圧特性から妥当な結果である。最大圧力値は低回転数ほど高い値を示しているが、これは熔融速度に起因しており、固相の割合が多く熔融粘度が高いほど圧力値は上昇する。温度については、スクリュ回転数によるせん断発熱量を正確に計算でき、妥当な傾向が予測できている。

図6は各スクリュ回転数での固相占有率の予測結果と実測結果である（点：実測値、線：予測値）。高回転数ほど熔融速度は速く、実測値と比べてもその傾向を捉えている

表1 スクリュ形状の模式図

Screw type	Screw shape	Schematic illustration
Forward full-flight screw FF		
Forward kneading disk F-KD		
Backward kneading disk B-KD		

表2 HDPEの物性値

Physical properties	Solid state	Molten state
Density[kg/m ³]	920	750
Thermal conductivity[W/(m·K)]	0.38	0.335
Specific heat[J/(kg·K)]	2700	2800
Melting point[°C]	130

図4 せん断粘度の測定データとCarreauモデルによるせん断粘度曲線

図5 HDPE 溶融混練プロセスのFAN法シミュレーション結果

図6 各スクロ回転数での固相占有率の予測結果と実測結果の比較

が、溶融開始位置は実測値に比べて上流側にある。実際には固体原料が溶融混練ゾーンに入ると圧力が徐々に加わり、空気層が排除され固体原料は圧縮・緻密化された後、スクロのせん断応力によって溶融が進行する。つまり、見た目が完全充満でもかさ密度が低い（空気層を多く含む）状態ではせん断応力が効果的に作用せず、かさ密度が固体原料の真密度に近づくことで溶融が開始される。シミュレーションでは完全充満状態で溶融が開始するといった仮定を用いているため、実測との溶融開始位置に乖離が生じたと考えられる。このかさ密度の概念を厳密にモデル化すれば、より実測値を捉えた溶融可塑性シミュレーションが可能である¹⁴⁾。

3. 粒子法による溶融可塑性シミュレーション

3.1 DEMとMPS法の演算アルゴリズム

粒子法は比較的新しい解析手法であり、DEM (Discrete

Element Method)¹⁵⁾やMPS (Moving Particle Simulation) 法¹⁶⁾、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法^{17), 18)}が代表的な手法として挙げられる。DEMは粉体やピンポン玉のような不連続体である固体の挙動を対象とした解法である。一方で、MPS法とSPH法は連続体である流体を個々の粒子によって表し、各粒子の運動を計算することで連続体の挙動を予測する手法であり、大変形や自由表面を有する問題に対して容易に予測できることが最大の特徴である。これらの特徴を活かし、不連続体である固体ペレットをDEM、連続体の溶融体部分をMPS法によってそれぞれの挙動を同時に計算することで、二軸押出機の溶融可塑性プロセスを予測することができる。

DEMで用いる運動方程式は、並進と回転運動によって表される。

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_g, \quad \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \frac{\mathbf{T}}{\mathbf{I}} \quad (5)$$

m は粒子質量、 $\mathbf{u}$ は速度ベクトル、 t は時間、 $\mathbf{F}_c$ は粒子に作用する接触力、 $\mathbf{F}_g$ 外力、 $\boldsymbol{\omega}$ は角速度、 $\mathbf{T}$ はトルク、 $\mathbf{I}$ は慣性モーメントである。 $\mathbf{F}_c$ は法線方向と接線方向成分に分けられ、粒子間の相互作用は弾性バネとダッシュポットおよび摩擦スライダから構成されたモデルに基づいて計算する。

MPS法はラグランジュ的記述による非圧縮性流体の連続の式(6)とナビエーストークス方程式(7)を用いる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \quad (7)$$

ρ は流体密度、 p は圧力、 η はせん断粘度、 $\mathbf{g}$ は重力加速度である。ここではDEMとMPS法の充分な解析手法についての説明は割愛しているが、詳細については参考文献を参照されたい^{19)~21)}。

温度計算では、固体粒子は熱伝導と摩擦・衝突発熱を考慮し、溶融体粒子は熱伝導とせん断発熱から成るエネルギー方程式を用いて温度を算出する。

$$\text{DEM (固体粒子)}: \rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \frac{1}{V} (Q_f + Q_c) \quad (8)$$

$$\text{MPS (溶融体粒子)}: \rho C_p \frac{DT}{Dt} = k \nabla^2 T + \eta \dot{\gamma} \quad (9)$$

C_p は定圧比熱、 T は温度、 k は熱伝導率、 V は粒子体積、 Q_f は摩擦発熱量、 Q_c は衝突発熱量、 $\dot{\gamma}$ はせん断速度である。

以上のように、運動方程式とエネルギー方程式を用いて融点以下の粒子はDEM、融点を超えた粒子はMPS法によって双方の挙動を同時に予測することが可能である。

3.2 DEM-MPS連成による溶融混練プロセスの予測

DEM-MPS連成による二軸押出機内の溶融混練挙動の予測結果を図7に示す。解析モデルと用いた樹脂は2.2節と同一である。粒子径は3 mm、押出量200 kg/h、スクロ回転数200 rpmの条件である。ホッパーより投入された固体粒子はFFにより搬送され、混練部に到達すると次第

図7 DEM-MPS 連成によるHDPE 溶融混練プロセスの予測

図8 固相占有率の予測結果と実測結果の比較

に充満状態を形成し、徐々に温度が上昇することで溶融可塑化が進行する。混練部を通過し、押出機出口では完全に溶融しており、実現象に沿った挙動を定性的に捉えている。図8に固相占有率の予測結果（スクリュ断面の固体粒子と溶融体粒子の割合）と実測結果との比較を示す。予測結果は混練部のやや上流側から徐々に溶融が開始し、混練部で急激に可塑化が進行している。実測値に比べて溶融開始位置は上流側にあるものの、固相占有率の変化（傾き）を示す溶融速度については傾向を捉えており、従来は困難とされていた3次元解析における樹脂の溶融可塑化挙動の予測が達成できつつある。

4. おわりに

二軸押出機を用いた実プロセスでは、主にフィラーやアロイなど多成分系でのコンパウンドとして利用することがほとんどである。この際、混練物の分散状態は主原料の可塑化過程に大きく左右されるため、可塑化過程とモルフォロジーの形成過程を同時に制御するコンパウンディング技術が必要となる。さらに材料やコンパウンドプロセスが複雑化する中、その支援としてCAE技術の重要性は、より一層増すことは確かである。多様化・複雑化する要求に対応するためにも、実験による可塑化メカニズムを正確に把

握すると共に、シミュレーションによる可塑化モデルのさらなる発展が今後必要である。

参考文献

- 1) Tadmor, Z. : *Polym. Eng. Sci.*, **6**, 185 (1966)
- 2) Edmondson, I. R. and Fenner, R. T. : *Polymer*, **16**, 49 (1975)
- 3) Shapiro, J., Halmos, A. L. and Pearson, J. R. A. : *Polymer*, **17**, 905 (1975)
- 4) Lindt, J. T. : *Polym. Eng. Sci.*, **16**, 284 (1976)
- 5) Lindt, J. T. and Elbirli, B. : *Polym. Eng. Sci.*, **25**, 412 (1985)
- 6) Potente, H., Ansahi, J. and Klarholz, B. : *Int. Polym. Proc.*, **9**, 11 (1994)
- 7) Potente, H. and Melisch, U. : *Int. Polym. Proc.*, **11**, 101 (1996)
- 8) Bawiskar, S. and White, J. L. : *Int. Polym. Proc.*, **10**, 105 (1995)
- 9) Bawiskar, S. and White, J. L. : *Polym. Eng. Sci.*, **38**, 727 (1998)
- 10) Gogos, C. G., Tadmor, Z. and Kim, M. H. : *Adv. Polym. Tech.*, **17**, 285 (1998)
- 11) 富山秀樹, 石橋正道, 井上茂樹 : 日本製鋼所技報, **55**, 32 (2004)
- 12) 日本製鋼所, スクリュ式押出機のシミュレーション装置およびスクリュ式押出機のシミュレーションプログラム, 特許第5086383号, 登録2012-09-14
- 13) Sakai, T. : *Int. Polym. Proc.*, **4**, 429 (1990)
- 14) 福澤洋平 : 成形加工, **26**, 468 (2014)
- 15) Cundal, P. A. and Strack, O. D. L. : *Geotechnique*, **29**, 47 (1979)
- 16) Koshizuka, S. and Oka, Y. : *Nucl. Sci. Eng.*, **123**, 421 (1996)
- 17) Lucy, L. B. : *Astron J.*, **82**, 1013 (1977)
- 18) Gingold, R. A. and Monaghan, J. J. : *Mon. Not. R. astr. Soc.*, **181**, 375, (1977)
- 19) 越塚誠一 : 粒子法, 丸善 (2005)
- 20) Koshizuka, S., Shibata, K., Kondo, M. and Matsunaga, T. : *Moving Particle Semi-implicit Method*, ELSEVIER (2018)
- 21) 酒井幹夫 : 粉体の数値シミュレーション, 丸善 (2012)