

境界要素法による粘弾性流体の近似解析

井出 康之* 登坂 宣好**

Approximate Analysis of Viscoelastic Fluid by Boundary Element Method

Yasuyuki IDE and Nobuyoshi TOSAKA

In this paper, the applicability of boundary element method to the analysis of non-Newtonian fluid prescribed as nonlinear viscoelastic model is discussed. The differential equations of the viscoelastic fluid are derived from Maxwell model and Phan-Thien-Tanner model (PTT model). The boundary element formulation in order to solve the above equations is described. The fundamental solution tensor of viscoelastic fluid is constructed from the derived fundamental solution. Numerical simulation is carried out about the contraction flow problem of both viscous and viscoelastic fluids, The applicability and effectiveness of the proposed method is discussed with the obtained numerical results.

Key Words: Viscoelastic Fluid, Boundary Element Method, Maxwell Model, PTT Model, Contraction Flow, Subregion Partition

1. はじめに

工業の各分野において成形材料として高分子材料が多く使われている。最近の製品の高機能化、高品質化の傾向から高分子材料から成る成形材料に関し、高分子溶融体の流動解析が求められるようになった。

高分子溶融体のような材料は粘弾性流体と呼ばれ、物性的に粘性と弾性の両方の性質を有している。粘弾性流体の場合、応力と歪の関係は一般にMaxwellモデルにより与えられ、その構成方程式は内在する時間依存性から多時間相関となり閉じられた関係式にならない。また時間微分に伴う非線形性により構成方程式は非線形項を有する。また一方で、一次元Maxwellモデルから同モデルが特異性を有することが示されており、実際の粘弾性流体の特性と大きく異なることがわかる。そのため近年においては粘弾性流体の特性に対し高い応答性を示すPTTモデル等が発表されている。しかし、広い剪断速度範囲において定量的な評価ができる粘弾性モデルは確立されていない。

上述に示されるような粘弾性流体の支配方程式は非線形となり、その解析は数値的に行わざるを得ない。また、等温、定常問題でも定量的な解析は困難とされているが、最近では多くの解析例が発表されている^{[1]~[4]}。

本論では単一緩和モードによるMaxwellモデルとPTTモデルから粘弾性流体の支配方程式を導出し、そ

れに対して境界要素法を適用した近似解析について述べる。また、計算例として急縮小流れ問題をとりあげ、得られた計算結果を示す。さらに、粘性流体と粘弾性流体の流動の比較を行い、非線形パラメータに依存した粘弾性流体の特性について推測する。そして、これらの計算結果により示される妥当性から本手法の適用性について検討する。

2. 基礎方程式

2.1. 保存方程式

解析対象が2次元、等温、非圧縮性であると仮定する。このときの質量保存則、運動量保存則は次のように与えられる。

・連続の式

$$u_{i,i} = 0 \quad (1)$$

・Cauchyの運動方程式

$$\frac{Du_i}{Dt} = \sigma_{ij,j} + b_i \quad (2)$$

ここで、 u_i は流速、 $\frac{D}{Dt}$ は実質微分、 σ_{ij} は応力テンソル、 b_i は物体力を表す。なお、添字は総和規約に従い $i, j, k = 1, 2$ とする。

2.2. 構成方程式

粘弾性流体の構成方程式は粘性応力と偏差応力の和

*非会員, 日本大学生産工学研究所 275 習志野市泉町1-2-1 TEL 0474-74-2241

**学識会員, 日本大学生産工学部数理工学科 教授 275 習志野市泉町1-2-1 TEL 0474-74-2241

から次のように与える。

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \frac{1}{R_e}(u_{i,j} + u_{j,i}) + \tau_{ij} \quad (3)$$

ただし、 δ_{ij} はKroneckerのdelta、 p は等方圧力、 τ_{ij} は偏差応力とする。また、 R_e はReynolds数を表す。さらに、 τ_{ij} には必要となる運動学的な関係式を得るため次のような関係式を与える。

$$\lambda \dot{\tau}_{ij} + R_{ij} = 0 \quad (4)$$

ここで、 λ は緩和時間を表す。なお、 $\dot{\tau}_{ij}$ は偏差応力 τ_{ij} のGordon-Schowalter時間微分^[5]を表し次のように与えられるものとする。

$$\dot{\tau}_{ij} = \frac{\xi}{2}\dot{\tau}_{ij} + (1 - \frac{\xi}{2})\bar{\tau}_{ij} \quad (5)$$

ただし、 $\dot{\tau}_{ij}$ はlower-convect時間微分、 $\bar{\tau}_{ij}$ はupper-convect時間微分であり、それぞれ次のように与えられる。

$$\lambda \dot{\tau}_{ij} = \lambda \dot{\tau}_{ij} + W_i(u_j \tau_{ik,i} + L_{ik} \tau_{kj} + \tau_{ik} L_{jk}) \quad (6)$$

$$\lambda \bar{\tau}_{ij} = \lambda \dot{\tau}_{ij} + W_i(u_j \tau_{ik,i} - L_{ik} \tau_{kj} - \tau_{ik} L_{jk}) \quad (7)$$

ここで、 $\dot{\tau}_{ij}$ は τ_{ij} の時間微分とし、 L_{ij} は速度勾配テンソルを表す。また、 W_i はWeissenberg数とする。

このGordon-Schowalter時間微分は物性的に分子鎖どうしのすべりが存在する系において、物体の変化を表すためのモデルが与える方程式上の仮定と実際の流動との間に生じる差異に対して補正を与えるものとされており、対象となる物性に応じてパラメータ ξ の値を実験的解析から決定する。ここで、本論ではupper-convect時間微分を採用するものとし、 $\xi = 0.0$ とする。

また、 R_{ij} には粘弾性流体のレオロジー特性に追従させるため、種々に表現されるモデルが与えられる。本論では一般的によく知られたMaxwellモデルと高分子溶液体の流動特性に対し高い応答性をもつPhan-Thien-Tannerモデル(PTTモデル)^[6]の場合について示す。

まずMaxwellモデルの場合、 R_{ij} には次のような表現が採用される。

$$R_{ij} = \tau_{ij} \quad (8)$$

また、PTTモデルの場合には、次のようになる。

$$R_{ij} = \{1 + \varepsilon R_e^* W_i \text{tr}(\tau_{ij})\} \tau_{ij} + W_i \zeta (D_{ik} \tau_{kj} + \tau_{ik} D_{kj}) - \frac{1}{R_e^*} D_{ij} \quad (9)$$

ここで、 D_{ij} は変形速度テンソル、 ε 、 ζ は伸長速度、剪断速度に特性を与える無次元パラメータを表す。なお、本論では R_e^* は $R_e^*/R_e = 8$ と定義する。

2.3. 支配方程式

式(2)に式(3)を代入し、応力が与える流動の影響に比べて物体力と慣性力の影響が微小なものと仮定し、次式のような方程式を与える。

$$u_j u_{i,j} = -p_i + \frac{1}{R_e}(u_{i,jj} + u_{j,ij}) + \tau_{ij,j} \quad (10)$$

ここで、式(10)の偏差応力テンソル τ_{ij} は時間微分を伴うことから本論では τ_{ij} に対し陽的に時間差分をとり次のような近似式を用いて表現する。

$$\tau_{ij}^f = \tau_{ij}^{f-1} + \frac{W_i}{D_e} \{L_{ik} \tau_{kj} + \tau_{ik} L_{jk} - u_j \tau_{ij,k} - \frac{1}{W_i} R_{ij}\}^{f-1} \quad (11)$$

ここで、添字 f は f 時間ステップでの各項の成分を表し、 D_e は $D_e = \lambda/\Delta t$ と定義している。

連続の式(1)と上述の式(10)、式(11)が本論で扱う粘弾性流体の基礎微分方程式となる。

3. 積分方程式による定式化

上述のように粘弾性流体の基礎微分方程式は連立微分方程式になっていることから、以下に示す定式化によって、必要とする境界積分方程式を導く。この手法に関しては既に成果が確認されている粘性流体の定式化^[7]と本質的に同一となる。まず基礎微分方程式を次のような行列表現に書き改める。

$$L_{\alpha\beta} u_\beta = B_\alpha \quad (12)$$

ここで、添字 α, β, γ は $\alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3$ とし、各行列は具体的に次のように表される。

$$[L_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} 2D_1^2 + D_2^2 & D_1 D_2 & -R_e D_1 \\ D_1 D_2 & D_1^2 + 2D_2^2 & -R_e D_2 \\ D_1 & D_2 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\{u_\beta\} = \{u_1 \quad u_2 \quad p\}^T \quad (14)$$

$$\{B_\alpha\} = \left\{ \begin{array}{l} R_e(u_j u_{1,j} - \tau_{1j,j}) \\ R_e(u_j u_{2,j} - \tau_{2j,j}) \\ 0 \end{array} \right\} \quad (15)$$

次に、式(12)に重み関数 $v_{\alpha\gamma}^*$ を乗じて、積分恒等式を導き、これに2回発散定理を適用し逆定式化を行うことで、次の積分方程式を得る。

$$\int_\Omega u_\beta(\xi) L_{\beta\alpha}^* v_{\alpha\gamma}^* d\Omega = \int_\Gamma u_i(\mathbf{x}) \sigma_{i\gamma}^*(\mathbf{x}, \xi) d\Gamma - \int_\Gamma \sigma_i(\mathbf{x}) v_{i\gamma}^* d\Gamma + \int_\Omega B_i v_{i\gamma}^* d\Omega \quad (16)$$

ここで、 \mathbf{x} は観測点を表し、 $L_{\alpha\beta}^*$ は $L_{\alpha\beta}$ の随伴作用素とする。さらに、 σ_i, σ_{ik}^* はそれぞれ、表面力、擬トラクションテンソルであるとし、 n_i が法線ベクトルの成分とする。と次のような表現ができる。

$$\sigma_i = \sigma_{ij} n_j \quad (17)$$

$$\sigma_{ik}^* = (v_{ik,j}^* + v_{kj,i}^*) n_j - v_{3k}^* n_i \quad (18)$$

さらに、式(16)において、重み関数 $v_{\alpha\beta}^*$ が次式を満足する関数とする。

$$\mathcal{L}_{\beta\alpha}^* v_{\alpha\gamma}^* = -\delta_{\beta\gamma} \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) \quad (19)$$

ただし、 $\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})$ は Dirac の delta 関数である。

ここで、式(16)から上式(19)の delta 関数の性質により流速 $u_k(\boldsymbol{\xi})$ 、圧力 $p(\boldsymbol{\xi})$ を未知関数とする次の積分方程式を得る。

$$C_{kl} u_l(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\Gamma} \sigma_i(\mathbf{x}) v_{ik}^* d\Gamma - \int_{\Gamma} u_i(\mathbf{x}) \sigma_{ik}^*(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) d\Gamma - \int_{\Omega} B_i v_{ik}^* d\Omega \quad (20)$$

$$p(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\Gamma} \sigma_i(\mathbf{x}) v_{i3}^* d\Gamma - \int_{\Gamma} u_i(\mathbf{x}) \sigma_{i3}^*(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) d\Gamma - \int_{\Omega} B_i v_{i3}^* d\Omega \quad (21)$$

なお、 C_{kl} は形状係数とする。

また、非線形項内の移流項と偏差応力項に、発散定理を用いた次の関係式を与える。

$$\int_{\Omega} u_i u_j v_{ik}^* d\Omega = \int_{\Gamma} u_i u_j n_j v_{ik}^* d\Gamma - \int_{\Omega} u_i u_j v_{ik,j}^* d\Omega \quad (22)$$

$$\int_{\Omega} \tau_{ij} v_{ik}^* d\Omega = \int_{\Gamma} \tau_{ij} n_j v_{ik}^* d\Gamma - \int_{\Omega} \tau_{ij} v_{ik,j}^* d\Omega \quad (23)$$

ただし、式(22)に対しては非圧縮性の条件を与えている。

ここで、式(20)、式(21)の具体化された表現を得るということはすなわち、重み関数 $v_{\alpha\gamma}^*$ を具体的に求めることに帰着する。ここで、本論ではヘルマンダーの方法^[6]を用いて $v_{\alpha\gamma}^*$ を基本解テンソルとして構成する。

ここで、 \mathcal{L} を $\mathcal{L}_{\alpha\beta}^*$ の行列式とする。このとき、スカラー関数 ϕ^* を重調和演算子の基本解から次のように与える。

$$\phi^* = -\mathcal{L}^{-1} \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) = \frac{-1}{8\pi R_e} r^2 \ln r \quad (24)$$

また、 $\mathcal{L}_{\beta\alpha}^*$ の転置余因子行列を $M_{\alpha\gamma}^*$ とすると式(19)と式(24)から次の関係式が求められる。

$$v_{\alpha\gamma}^* = M_{\alpha\gamma}^* \phi^* \quad (25)$$

そして、式(24)と式(25)から次に示す基本解テンソルの具体的な表現を得ることができる。

$$\begin{aligned} v_{11}^* &= \frac{1}{8\pi} \{-2(r_{12})^2 - 2\ln r - 1\} & v_{12}^* &= \frac{1}{4\pi} r_1 r_2 \\ v_{22}^* &= \frac{1}{8\pi} \{-2(r_{11})^2 - 2\ln r - 1\} & v_{21}^* &= v_{12}^* \\ v_{13}^* &= -\frac{1}{2\pi R_e} r_{11} & v_{23}^* &= -\frac{1}{2\pi R_e} r_{12} \\ v_{31}^* &= \frac{1}{2\pi} r_{11} & v_{32}^* &= \frac{1}{2\pi} r_{12} \end{aligned} \quad (26)$$

4. 近似解法

4.1. 積分方程式の離散化表現

境界積分方程式(20)に対する離散化表現を考える。本論においては境界上の流速 u_i と表面力 σ_i を一定要素で離散化を行う。また、式(22)および式(23)で与えられる非線形項においても境界、領域共に一定要素で離散化を行い、また、領域内部は4角形セルを用いて分割を行う。このような離散化手法を導入することにより、次のような離散化方程式の行列表現ができる。

$$\mathbf{H}\mathbf{u} = \mathbf{G}\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{n} \quad (27)$$

ここで、 \mathbf{H}, \mathbf{G} を影響係数行列とし、 $\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}$ を境界上の流速、表面力を表す未知関数ベクトルとする。また、 \mathbf{n} は非線形項から与えられるベクトルとする。

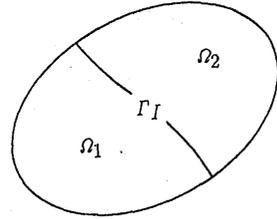


Fig.1 Subregion Partition

本論では、解析モデルの任意な形状についても計算精度が確保される部分領域を用いた方法に従い、離散化方程式を構成する。ここで、Fig.1のように解析対象となる2つの部分領域を Ω_1, Ω_2 とし、両者が接する境界を Γ_I とする。ここで、領域 Ω_1, Ω_2 について式(20)をそれぞれ上述のように離散化を行い、そして、次のように表現される離散化方程式を構成する。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^1 & \mathbf{H}_I^1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^1 \\ \mathbf{u}_I^1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^1 & \mathbf{G}_I^1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \boldsymbol{\sigma}^1 \\ \boldsymbol{\sigma}_I^1 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \mathbf{n}^1 \\ \mathbf{n}_I^1 \end{Bmatrix} \quad (28)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^2 & \mathbf{H}_I^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^2 \\ \mathbf{u}_I^2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^2 & \mathbf{G}_I^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \boldsymbol{\sigma}^2 \\ \boldsymbol{\sigma}_I^2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \mathbf{n}^2 \\ \mathbf{n}_I^2 \end{Bmatrix} \quad (29)$$

さらに、次に示す Γ_I 上の適合条件、平衡条件

$$\mathbf{u}_I = \mathbf{u}_I^1 = \mathbf{u}_I^2 \quad (30)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_I = \boldsymbol{\sigma}_I^1 = -\boldsymbol{\sigma}_I^2 \quad (31)$$

を考慮することにより式(28)、式(29)は解析領域全体の離散化方程式として次のように構成できる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H}^1 & \mathbf{H}_I^1 & -\mathbf{G}_I^1 & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{H}_I^2 & \mathbf{G}_I^2 & \mathbf{H}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^1 \\ \mathbf{u}_I \\ \boldsymbol{\sigma}_I \\ \mathbf{u}^2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{G}^1 & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{G}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \boldsymbol{\sigma}^1 \\ \boldsymbol{\sigma}^2 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \mathbf{n}^1 \\ \mathbf{n}_I^1 \\ \mathbf{n}_I^2 \\ \mathbf{n}^2 \end{Bmatrix} \quad (32)$$

上記の式(32)と境界条件をもとに、境界上の流速 u_i と表面力 σ_i を求めていくことになる。

4.2. 数値計算手法

基礎微分方程式を線形ストークス方程式と偏差応力の項の2つに分割し、まず、離散化式(32)の線形ストークス

クス方程式に相当する部分から流速、表面力の各成分を求める。これをもとに、区分された領域毎の初期における流速と偏差応力の成分を求める。このとき偏差応力の値に関しては式(11)を用いる。各区分域の領域積分については数値的に行い、この積分値の総和をとり、非線形ベクトルの成分とする。これを式(32)の非同次項に加え、反復解法により流速と表面力の修正値を順次求めて、各値を収束させて決定する。さらに、微小時間毎に計算を行い、安定した流動を得るまで計算を行う。得られた解をもとに Reynolds 数、Weissenberg 数の更新を行い、非線形性を高めて計算を進めていく。さらに、所定の Reynolds 数、Weissenberg 数に達し、時刻歴についての計算を行う場合、上記による計算結果をもとに、上述と同様の計算を随時行っていく。なお、PTT モデルの偏差応力を求める際必要となる空間に関する流速、偏差応力の勾配量は差分近似を用いて定めてゆく。

5. 数値計算例

数値計算例として、粘性流体と粘弾性流体 (Maxwell モデル、PTT モデル) の急縮小部への流れの流速分布と領域内の軸 a_0 における圧力について計算を行う。

急縮小流れ問題は、粘性流体と粘弾性流体の流れにおいて大きな差異がみられることから、粘弾性流体の解析でよく用いられている。

ここで、計算モデルは Fig.3 に示し、与えられる境界条件もこれに従う。なお、 Δt は 10^{-3} とし、PTT モデル

の無次元パラメータ ϵ 、 ζ は共に 0.1 とする。領域内の分割は Fig.4 に示すものを使用する。また、Fig.2 の ϵ_n と ϵ_t は、それぞれ非線形パラメータ、時間ステップを更新した際の収束値を表す。

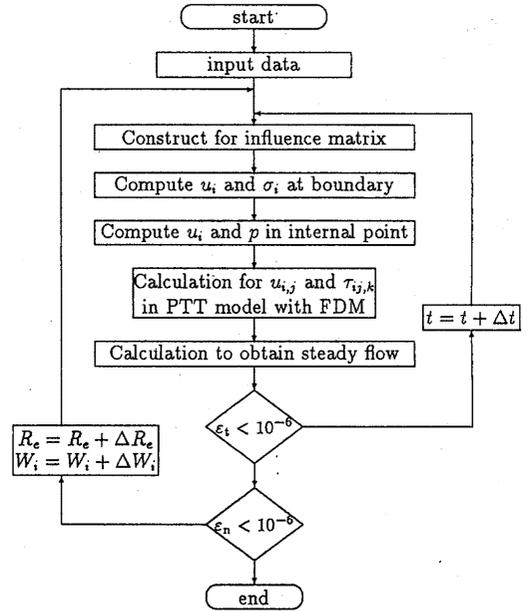


Fig.2 Flow chart

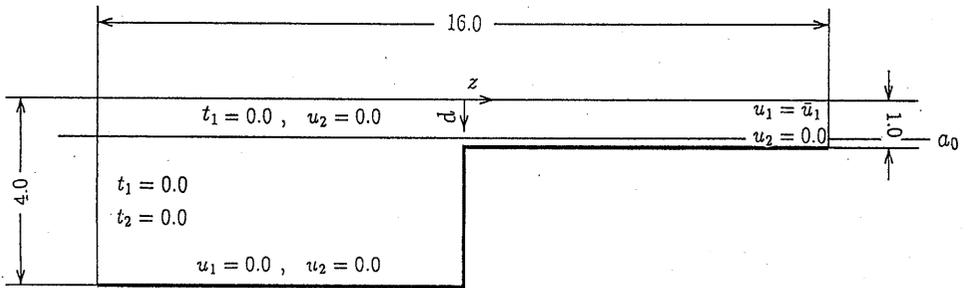


Fig.3 Boundary conditions for the 4/1 contraction flow

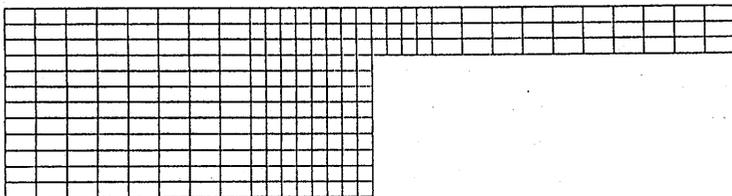


Fig.4 Element mesh for the 4/1 contraction flow

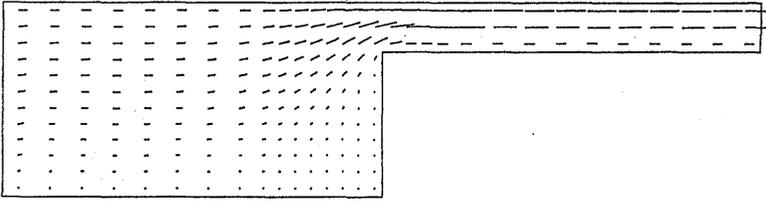


Fig.4 Contraction for the flow of a viscoelastic fluid on Maxwell model

$$R_e = 0.3, W_i = 0.2, \lambda = 10.0, t = 0.1$$

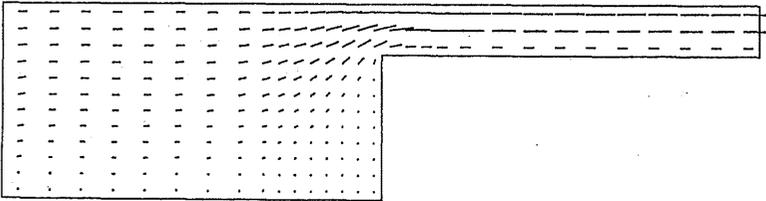


Fig.5 The contraction for the flow of a viscoelastic fluid on PTT model

$$R_e = 0.3, W_i = 0.2, \lambda = 10.0, t = 0.1$$

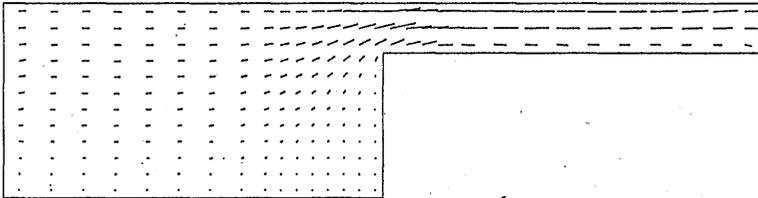


Fig.6 Contraction for the flow of a viscoelastic fluid on PTT model

$$R_e = 1.0, W_i = 0.5, \lambda = 0.2, t = 0.1$$

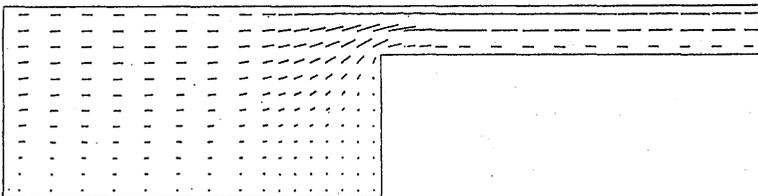


Fig.7 Contraction flow of a viscous fluid

$$R_e = 1.0$$

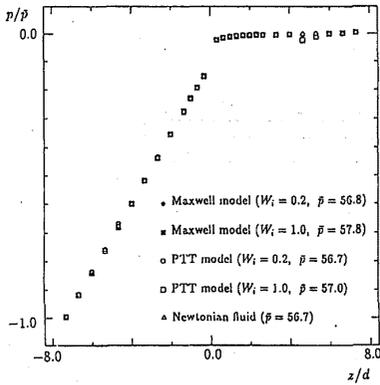


Fig.9 Pressure distribution along the axis of a_0 for several fluids ($Re_e = 0.3$, $\lambda = 10.0$, $t = 0.1$)

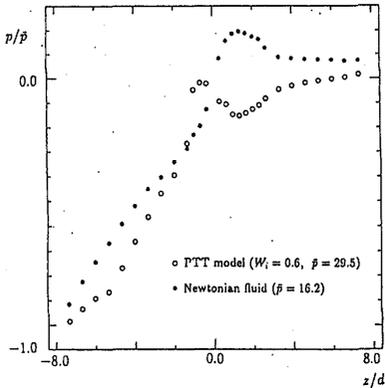


Fig.10 Pressure distribution along the axis of a_0 for several fluids ($Re_e = 1.0$, $\lambda = 0.2$, $t = 0.1$)

本手法によって得られた流速分布についての計算例を Fig.4~Fig.7 に示した。全般的に粘弾性流体の流速分布は粘性流体と同様に Reynolds 数に大きく依存する。その一方で Fig.9 の下流部分では粘弾性流体特有の履歴の性質の影響と思われる流動を示した分布が生成されており、粘性流と異なる性質が確認できる。この非 Newton 的な流れについては、得られた結果から Weissenberg 数と緩和時間の双方に依存していることがわかる。また、圧力分布は Reynolds 数が小さいとき粘性流体も粘弾性流体もほぼ同一の値となる。このとき Weissenberg 数と緩和時間は圧力の値に対しほとんど影響を与えていないことが Fig.9 からわかる。その一方で Fig.10 から Reynolds 数がある程度大きくなると圧力分布は不安定になり、粘性流体と粘弾性流体とでは明かに異なる性質を示していることがわかる。特に粘弾性流体では縮小流部に負圧が発生し、下流部においては圧力欠損を伴う粘弾性流体特有の圧力分布が確認できた。ただし、圧

力についての特異性も Weissenberg 数と緩和時間の値に依存していることが確認される。

また、計算で対象とした非線形パラメータの範囲では、Maxwell モデルと PTT モデルにおける流速、圧力共にその差は若干に留まった。

6. おわりに

本論で得られた結果は粘弾性流体の定性的な特徴をかなり示しているものと思われる。また、本手法の適用性についても、示された結果により明かになったものと考えられる。今後の課題はさらに、非線形性の強い場合の解析を行い、粘弾性流体の特性について検討していくことである。

参考文献

- [1] M.B.Bush and R.I.Tanner, "Boundary element analysis of slow non-Newtonian flow", Boundary element methods in nonlinear fluid dynamics, Vol.6, (1990), pp.285-317
- [2] N.Tosaka and K.Kakuda, "Newtonian and non-Newtonian unsteady flow problems", Boundary element methods in nonlinear fluid dynamics, Vol.6, (1990), pp.151-182
- [3] M.B.Bush, R.I.Tanner and N.Phan-Thien, "A boundary element investigation of extrudate swell", Journal of Non Newtonian Fluid Mechanics, Vol.18, (1985), pp.143-162
- [4] M.B.Bush J.F.Milthorpe and R.I.Tanner, "Finite element and boundary element methods for extrusion computations", Journal of Non Newtonian Fluid Mechanics, Vol.16, (1984), pp.37-51
- [5] 船津和守, 梶原稔尚, 成形加工, 3号, (1989), pp.312-317
- [6] Nhan Phan Thien and Roger.I.Tanner, "A new constitutive equation derived from network", Journal of Non Newtonian Fluid Mechanics, Vol.2, (1977), pp.353-365
- [7] 登坂宣好, ナビエ・ストークス方程式の境界要素解析, 数理科学, 263号, (1985), pp.52-61
- [8] 登坂宣好, 中山 司, 境界要素法の基礎, 日科技連, (1987)
- [9] M.J.Crochet, A.R.Davies, K.Walters, "Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow", Elsevier Science Publishers B.V. (1984)