有限要素法による粘弾性流動解析における定式化

岩 田 修 一

Finite Element Formulations of Viscoelastic Flow Analysis

Shuichi IWATA(Materials Science and Engineering, (NAGARE College), Nagoya Institute of Technology, Gokiso-cho, Showa-ku, Nagoya, Aichi, 466-855 Japan)

Flow of viscoelastic fluid such as polymer melt or aqueous solution of polymer is more complex in complex flow geometry even at lower Reynolds number. Rheological behavior of the polymer fluid may change non-linearly as the flow condition. Therefore, flow analysis of such polymer fluid is more important for establishing a reliable design of the processing units. Even though there are useful viscoelastic models available, numerical prediction of viscoelastic fluid is not an easy task, because of hyperbolic nature of the constitutive equation. In the last decades, great progresses have been made on the numerical methods for solving viscoelastic flow problems. In this paper, some of the finite element formulations are described and discussed.

Key Words : Viscoelastic Fluid, Finite Element Method, Formulation, Numerical Analysis

1. は じ め に

トラブル原因の解明のために、押出成形機内部の樹脂流動や、射出成形機の金型内部での充てん流れを可視化したというニーズは大きい。しかしながら、熔融樹脂の流動の可視化は、高温・高压という過酷な条件のために、非常に困難な問題である。一方、流路形状の最適化問題や混練状況の定量的な評価など、数値解析による設計支援についても、同様に大きなニーズがある。経験的な設計手法に対し、数値解析による結果は設計方針に対して、裏付けを与えるものとなり得る。最近、数値解析結果をわかりやすく表現するツールが発達し、様々なメディアで紹介されるため、「シミュレーションをやればすぐに様々な情報が得られるだろう」という気にさせられる。そのような背景から、粘弾性流動解析は、樹脂流動の様々な情報を与えるツールとして、大きな期待が寄せられている。そのような期待に反して、メモリーの使用量は多く、実装置と同じ運転条件で解析を行うことは容易ではない。そのために、様々な解析手法の開発が行われてきた。流体モデルの説明は多くの成書に述べられているが、解析手法に関する説明は余り見受けられない。そこで、今回、有限要素法を中心にその発展の歴史について簡潔に紹介し、粘弾性流動問題に特有な問題である定式化手法に焦点をあてることにしたい。その幾つかを紹介しながら、簡単に解が得られない理由を解説（言

い訳）していきたい。

2. 有限要素法による粘弾性流動問題の各種解法

2.1 有限要素法の発達の歴史

有限要素法は、形状適合性に優れた離散化手法として広く利用されている。その歴史は古く、1943年にCourant^{1,2)} がねじり問題を解くために三角形要素の集合と最小化ポテンシャルエネルギーの原理を使用したのが始まりとされ、工学的な問題には、航空宇宙工学の分野において、Turner, Clough, Martin, Topp^{1,3)} らの三角形要素を用いた平面応力問題が最初とされる。Finite Element Method (有限要素法) という言葉は、1960年のClough^{1,4)} らの平面弾性問題の取り扱いを進化させた論文が最初である。この後さらに多くの研究がなされ、変分原理を基にしたRitz有限要素法^{1,5)} が確立した。この有限要素法は、変分の原理が適用できる弾性連続体問題が中心であり、非線形な問題には適用出来ない。それとほぼ同じ時期に、重み付き残差法 (Galerkin 法)^{1,6)} が発展する。要素節点から内挿した

岩田修一；名古屋工業大学大学院工学研究科物質工学専攻（〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町）助教，博士（工学）。平成3年，名古屋工業大学大学院工学研究科物質工学専攻博士前期課程修了。専門は，非ニュートン流体力学，化学工学。

速度, 圧力, 応力を用いれば, 支配方程式には残差が生じる. その残差を補間関数 (重み関数) によって同様に評価し, 要素における残差の積分値が0を満たす弱解として速度, 圧力, 応力節点値が得られる. この方法であれば, 支配方程式と境界条件が与えられれば方程式を組み立てることを意味し, 非線形な項を含む流動解析にも適用出来る.

ニュートン流体の流動解析の場合, 運動方程式と連続式が支配方程式となる. たとえば, 2次元軸対称問題の場合, 支配方程式を Galerkin 法で定式化・離散化すると, 各要素節点における速度節点値 (u^i, w^i) と圧力節点値 p^m という3種類の節点値に関する代数方程式系が得られ, ガウス消去法など適当な連立一次方程式用ソルバー等で解かれる.

しかしながら, 粘弾性流体の流動解析の場合は, 支配方程式に, 物質のレオロジー特性 (弾性応力と変形速度の関係) を示す構成方程式が新たに加わる. すなわち, ある要素の1節点に着目すると, 速度・圧力に関する3種類の節点値だけでなく, 応力に関する4種類の節点値が追加されるため, 自由度は著しく増加し, 離散化マトリックスのサイズも非常に大きくなる.

構成方程式に微分型モデルを用いる場合, 以下の2つの取扱法が可能である. 1つめは, 運動方程式, 連続式, 構成方程式すべてを同時に解く混合法 (Mixed method) であり, 2つめは, 連続式・運動方程式と構成方程式との2グループに分割し, それぞれのグループを別々に交互に解く分割法 (Decoupled method) である.

混合法は, すべての支配方程式を同時に解くため大規模メモリーを要するという短所があるものの収束性 (計算安定性) に優れている. この短所は, 近年, 64ビット演算 CPU が容易に入手できることや Open MP をはじめとする並列計算基盤技術の普及により, この制約は緩やかになった. しかしながら, 3次元解析では, 依然としてメモリー使用量がネックとなることは避けられない. 混合法に関する多くの研究報告がなされており, その概要を後述する.

一方, 分割法は, 支配方程式を2グループに分割して解くためマトリックスサイズが縮小し, 低メモリーで計算が行えるという長所を有する. しかしながら, 速度場・圧力場を解く場合には, 本来は未知である応力を既知として扱い, 応力場を解く場合には, 本来は未知である速度場を既知として扱い, 反復計算により収束解を求めるため, 混合法に比べて収束性は極めて悪いことが知られている (Mitsoulis⁷⁾, Luo and Tanner⁸⁾, Iwata *et al.*⁹⁾).

2.2 混合法

速度場, 圧力場, 応力場をすべて未知として同時に解く混合法を用いた有限要素法解析は, Kawahara and Takeuchi¹⁰⁾ によって初めて報告された. その後, 定式化の検討や各変数に対する近似関数 (多項式) の次数の検討

が行われた. その中で, 応力の代入方法と近似関数の次数の組合せに関する検討については, Crochet and Keunings¹¹⁾ や Van Schaftingen and Crochet¹²⁾ の報告がある. 後者では, UCM モデル (Upper Convected Maxwell model) を用いて以下に示す MIX1 ~ MIX4 という4種類の定式化が提案された. 以下に, 各定式化について概説する.

◇ MIX 法

支配方程式は, 次の運動方程式, 連続式, 構成方程式 (UCM モデル*) である.

$$\rho \mathbf{a} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta \mathbf{S} \quad (3)$$

ここに, ρ は密度, η は粘度, $\mathbf{v}$ は速度ベクトル, $\mathbf{a}$ は加速度ベクトル, $\boldsymbol{\tau}$ は偏差応力テンソル, $\mathbf{g}$ は重力加速度ベクトル, λ は緩和時間であり, $\mathbf{S} \equiv (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)/2$ は変形速度テンソルである. 全応力テンソル $\mathbf{T}$, 等方性の圧力, 偏差応力テンソル $\boldsymbol{\tau}$ は, $\mathbf{T} = -p\boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau}$ と関係づけられる. また, (1) ~ (3) 式を成分式で表すと複雑になるため, 太字で示すベクトルやテンソルを用いて表記した. 構成方程式 (3) 中の上付記号 ' ∇ ' は, 反変型対流時間微分であり, 流体とともに移動・変形・回転する座標系に対して, 物質客観性の原理を満足する特殊な時間微分である.

Crochet らは, 運動方程式 (1), 連続式 (2), 構成方程式 (3) にそれぞれ重み関数 (ϕ^i, ψ^j, ϕ^k) を掛け, Galerkin 法により定式化し, 次式の MIX1 を与えた. ただし, 内積記号 (**脚注参照) を用いて表記されていることに注意されたい.

《MIX1》

$$\left\langle \left(\nabla \phi^i \right)^T; -p\boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau} \right\rangle + \left\langle \phi^i; \rho \mathbf{a} \right\rangle = F^i \quad (4)$$

$$\left\langle \psi^j; \nabla \cdot \mathbf{v} \right\rangle = 0 \quad (5)$$

$$\left\langle \phi^k; \boldsymbol{\tau} + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} - 2\eta \mathbf{S} \right\rangle = 0 \quad (6)$$

【近似関数】 $\Rightarrow$ (速度 $P^2 - C^0$, 圧力 $P^1 - C^0$, 応力 $P^2 - C^0$)

ここに, $\boldsymbol{\delta}$ は単位テンソルである. 近似関数 (多項式) の特性を示す表記法 ' $P^m - C^n$ ' は, 近似関数が m 次多項式からなり, 要素間で n 階微分までが連続性を有することを

* UCM (Upper Convected Maxwell model) 流体は, ダッシュポット要素とスプリング要素が直列に結合されたモデルで表現される粘弾性流体である. ダッシュポットの滑りは粘性流動を, スプリングの伸びは弾性変形を表す. 物理的に UCM 流体は, セン断粘度が一定値を示しつつ (Shear thinning 性を示さず) 法線応力差が発生する流体である. 現実流体として Boger 流体が UCM 流体の挙動を示す. セン断速度 $\rightarrow$ 無限大にすると, 法線応力差 $\rightarrow$ 無限大となる性質がある. 詳細は, 成書 (Nakamura¹³⁾) および参考文献 (Tam and Tiu¹⁴⁾) を参照されたい.

** $\langle f; g \rangle = \int_D f g dD$; D は, 着目する要素の領域を意味する.

意味する。(4) 式中の右辺 F^i は体積力と面積力の寄与を示す。

このMIX1による定式化では、運動方程式(4)中に2次微分項 $\nabla^2 \mathbf{v}$ が存在しない。したがって、 $\lambda = 0$ の極限の場合に対応するニュートン流体の定式化とは一致しないという欠点を有する。また、運動方程式は楕円型でなく、数値安定性に問題があることがわかる。

そこで、構成方程式(3)を $\boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{S} - \lambda \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ と変形し、運動方程式に代入後、変形すると、次式のMIX2を得る。ただし、この場合、応力に $(P^2 - C^0)$ 級の近似関数を用いる。

《MIX2》

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle (\nabla \phi^i)^T; -p\delta + \eta(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) - \lambda \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \rangle + \langle \phi^i; \rho \mathbf{a} \rangle = F^i \end{array} \right. \quad (7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \psi^j; \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \phi^k; \boldsymbol{\tau} + \lambda \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{S} \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (6)$$

【近似関数】 $\Rightarrow$ (速度 $P^2 - C^0$, 圧力 $P^1 - C^0$, 応力 $P^2 - C^0$)

また、MIX2の定式化をそのまま用い、応力の近似関数のみを $(P^1 - C^0)$ 級に変更すると、MIX3の方法が得られる。

《MIX3》

MIX2と同じ定式化

【近似関数】 $\Rightarrow$ (速度 $P^2 - C^0$, 圧力 $P^1 - C^0$, 応力 $P^1 - C^0$)

また、MIX4では、さらに、構成方程式中の偏差応力 $\boldsymbol{\tau}$ を、粘性寄与項 $2\eta \mathbf{S}$ と弾性寄与項 $\mathbf{E}$ に分解する。

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{S} + \mathbf{E} \end{array} \right. \quad (8)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{E} + \lambda \nabla \nabla \cdot \mathbf{E} + 2\lambda \eta \nabla \nabla \cdot \mathbf{S} = 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

したがって、MIX4の方法は、以下の如く与えられる。

《MIX4》

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle (\nabla \phi^i)^T; -p\delta + \eta(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) - \lambda \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \rangle + \langle \phi^i; \rho \mathbf{a} \rangle = F^i \end{array} \right. \quad (7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \psi^j; \nabla \cdot \mathbf{v} \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \phi^k; \boldsymbol{\tau} - 2\eta \mathbf{S} + \mathbf{E} \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (10)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \phi^k; \mathbf{E} + \lambda \nabla \nabla \cdot \mathbf{E} + 2\lambda \eta \nabla \nabla \cdot \mathbf{S} \rangle = 0 \end{array} \right. \quad (11)$$

【近似関数】 $\Rightarrow$ (速度 $P^2 - C^0$, 圧力 $P^1 - C^0$, 応力 $P^1 - C^0$)

ただし、(11) 式の対流時間微分 $\dot{\mathbf{S}}$ 中に速度の2階微分を含むので、部分積分とガウスの発散定理とを用いて微分の階数を減らす必要がある。

これらMIX3, MIX4を用いた解析では、速度の2階微分項 $\nabla^2 \mathbf{v}$ が生じるため、MIX1の欠点が克服されている。

MIX2を用いた解析では、MIX3の場合と異なり、応力場に $(P^2 - C^0)$ 級の近似関数を用いるが、収束解に数値

振動が顕著に現れ、収束性も劣悪であることが報告されている。

その後、Marchal and Crochet¹⁵⁾ は、応力場の離散化に対し、サブエレメント法、すなわち、要素をさらに 2×2 , 3×3 , 4×4 に分割する方法を導入した。その結果、MIX4をベースに、流線上流法(SU法)と 4×4 サブエレメント法を用いてOldroyd-B流体の流動解析を行い、収束性の大幅な改善が得られたと報告している。

このように、同一の支配方程式から出発して定式化を行ったにもかかわらず、その定式化の仕方によって収束性や収束結果が異なることが示された。商用ソフトには、要素(近似関数)の選択が可能なものがあるが、その選択によって、収束性や計算結果が異なることを示唆しており、解析結果の妥当性を見極めることが重要である。

◇付加粘性

Luo and Tanner¹⁶⁾ は、非等温非圧縮性の粘性流体を対象とする有限要素プログラムNACHOSESに流線要素法(Streamline element scheme)を導入し、粘弾性流体版に拡張した。彼らは、定式化の過程で、次式に示す参照粘性(Reference viscous stress)項 $2\eta_r \mathbf{S}$ を導入した。

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\delta + 2\eta_r \mathbf{S} + \boldsymbol{\tau}^* \quad (12)$$

$$\boldsymbol{\tau}^* = \boldsymbol{\tau} + 2(\eta_s - \eta_r) \mathbf{S} \quad (13)$$

ここに、 $\boldsymbol{\sigma}$ は全応力テンソル(Cauchy stress tensor)、 η_s はニュートン粘性である。Luo and Tannerは、 η_r を参照粘性(reference viscosity)と名付けた。上式中の $\boldsymbol{\tau}^*$ は、応力を運動方程式に代入したとき、擬似体積力として扱われる。参照粘性 η_r にある数値(正值)を設定すると、全応力 $\boldsymbol{\sigma}$ 中の粘性応力寄与が増大し、定式化・離散化の結果得られるマトリックス方程式の優対角化が実現され、数値安定性が改善される。

Tanoue *et al.*¹⁷⁾ は、付加粘性の概念を用いたTME(Transformation of Momentum equation to the Elliptic equation)を提案し、Giesekusモデル流体を対象した2重管ダイスウェル流動問題を混合法で解析を行った。

慣性項・重力項を無視したStokes流れの運動方程式(14)に、(8)式を代入すると、(15)式の如く変形できる。

$$-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \quad (14)$$

$$-\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{E} + 2\eta \nabla \cdot \mathbf{S} = 0 \quad (15)$$

運動方程式(15)の両辺に付加粘性項 $2\eta f \nabla \cdot \mathbf{S}$ を加えると、次式が得られる。

$$-\nabla p^{(n+1)} + \nabla \cdot \mathbf{E}^{(n+1)} + 2\eta(1+f)\nabla \cdot \mathbf{S}^{(n+1)} = 2\eta f \nabla \cdot \mathbf{S}^{(n)} \quad (16)$$

ここに、上付指標 $(n+1)$ は、反復 $(n+1)$ 段目の計算における未知変数を意味し、上付指標 (n) は、反復前段 (n) 段で得られた近似解を用い、既知関数として扱うことを意味する。収束時には、左辺の $2\eta f \nabla \cdot \mathbf{S}^{(n+1)}$ と右辺の $2\eta f \nabla \cdot \mathbf{S}^{(n)}$ が一致し、付加粘性項の影響は消滅する。

運動方程式 (16) 中の ηf は付加粘性の意味を持ち、パラメータ f を適当に規定すると、付加粘性項の寄与により運動方程式は楕円型に保持される。Tanoue *et al.* は、この付加粘性の概念を用いることにより、ワイゼンベルグ数 (We) が 450 という高ワイゼンベルグ数領域にて収束解を得ることに成功した。ここに、ワイゼンベルグ数とは、緩和時間 λ 、代表速度 U 、代表長さ L を用いて、 $We \equiv \lambda U/L$ により定義される無次元数であり、弾性力と粘性力との比を表す指標として用いられる¹⁸⁾。

Tanoue *et al.* は、計算領域すべてに一定の付加粘性を適用したが、Baaijens *et al.*¹⁹⁾ や Otsuki *et al.*²⁰⁾ は、付加粘性を状態量の関数として設定する手法を提案した。

◇EVSS法

一般に有限要素法では、要素上の値を、着目要素の節点値から Lagrange 補間公式により内挿するという Lagrange 要素が多用されているが、この場合、要素境界上にて速度微分値に連続性が保たれないという欠点がある。すなわち、同一節点を共有する要素間で、どの要素に着目するかによって、速度微分値が異なった値を示す。速度微分値は、構成方程式中の複数項に現れ、これを精度良く評価することが収束性に顕著に影響する。

この速度微分値の評価法改善に関連する手法として、Rajagopalan *et al.*²¹⁾ は、偏差応力を粘性応力と弾性応力とに分離し、速度・圧力・応力に加えて変形速度テンソルを新たな未知数と見なして定式化する EVSS 法 (Elastic-Viscous Split Stress) を提案した。使用する計算メモリー量は若干増えるが、収束性が著しく改善されることが報告されている。以下に EVSS 法を概説する。

EVSS 法では、(20) 式に示す偏差応力 τ を粘性応力 τ_v と弾性応力 τ_e に分離する。

$$\tau = \tau_v + \tau_e \quad (17)$$

$$\tau_v = \eta_a^* (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (18)$$

ここに、 η_a^* は零せん断粘度に対するポリマー寄与の粘度である。

(17), (18) 式を Stokes 流れに関する運動方程式 (14) と構成方程式 (3) に代入すると、それぞれ (19), (20) 式が得られる。この両式と連続式および変形速度テンソル S に関する方程式 (21) を加え、支配方程式系を形成する。この EVSS 法の特徴は、変形速度テンソル S を未知数として扱う所にある。

$$\nabla \cdot [\eta_a^* (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] - \nabla p + \nabla \cdot \tau_e = 0 \quad (19)$$

$$\tau_e + 2(\eta_a^* - \eta) S + \lambda \tau_e + 2\lambda \eta_a^* \dot{S} = 0 \quad (20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2)$$

$$S - (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)/2 = 0 \quad (21)$$

この場合、変形速度テンソル S は独立に節点未知数として求められ、要素間における連続性が確保されるため、収束性が大幅に向上する。中程度の Deborah 数 (De) では、数値安定性と精度は大幅に改善されるが、ある De 以上では、メッシュの細粗にかかわらず計算不能となる。ここに、 De は、流体の見かけの緩和時間と流れの変化を示す代表時間との比で表される無次元数であり、 De が大きい場合、流体の弾性的応答が強いことを示している¹⁸⁾。

EVSS 法の概念は多くの研究者により拡張された。Brown *et al.*²²⁾ や Szady *et al.*²³⁾ は速度勾配テンソル $\nabla \mathbf{v}$ に注目し、その連続性を保持するように定式化する EVSS-G 法を提案した。すなわち、次式

$$\mathbf{G} \equiv \nabla \mathbf{v} \quad (22)$$

の如くテンソル $\mathbf{G}$ を導入し、このテンソル $\mathbf{G}$ を節点未知数として求め、構成方程式の求解を数値的に安定化させる方法である。

Liu *et al.*²⁴⁾ は、前述の EVSS-G 法に次の概念を導入した。すなわち、運動方程式に粘性項を加算・減算し、その一方を未知、他方を既知として取扱うことにより、数値安定性を改善する手法を併用した。この解法は Discrete splitting method (DEVSS-G 法) と呼ばれ、EVSS-G 法と同じ精度・安定性を有する。

Giesekus 流体の流動解析に DEVSS-G 法を適用した Sun *et al.*²⁵⁾ の研究を以下に述べる。この場合、Giesekus 流体の構成方程式は、偏差応力 τ を solvent 寄与 τ_s と polymer 寄与 τ_p とに分離して次式の如く与えられる。

$$\tau = \tau_s + E = \eta_0 s (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + E \quad (23)$$

$$E + \lambda \dot{E} + \frac{\alpha}{G} E \cdot E = \eta_0 (1-s) (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (24)$$

$$\dot{E} \equiv \frac{\partial E}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla E - \nabla \mathbf{v}^T \cdot E - E \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (25)$$

Stokes 流れを対象とした場合、運動方程式 (14) と (22), (23) 式より次式が得られる。

$$\eta_0 s \nabla \cdot (\mathbf{G} + \mathbf{G}^T) - \nabla p + \nabla \cdot E = 0 \quad (26)$$

この式の左辺に $\nabla \cdot [\eta_a^* (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] - \nabla \cdot [\eta_a^* (\mathbf{G} + \mathbf{G}^T)]$ を加算し、整理すると (27) 式が得られ、DEVSS-G 法における運動方程式が完成する。

$$\nabla \cdot [\eta_a^* (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)] - \nabla p + \nabla \cdot E - \nabla \cdot [\eta_a^* (\mathbf{G} + \mathbf{G}^T)] = 0 \quad (27)$$

ここで、定式化の途中の運動方程式 (26) 式に注目しよう。運動方程式は、本来、未知の速度場 $\mathbf{v}$ に関する微分方

程式である。ところが、後段で説明する分割法を用いる場合、 $\mathbf{G}$ は(22)式より得られる既知のテンソルであり、(26)式では、速度の2階微分項(最高次の微分項)がこの既知関数 $\mathbf{G}$ の微分に置き換えられている。すなわち、(27)式はもはや未知の速度場 $\mathbf{v}$ を規定する運動方程式ではなくっており、この式を経由する定式化には疑問が残る。

EVSS法による最近の報告では、Sunwoo *et al.*²⁶⁾が、UCMとPTTモデル流体(Phan-Tien-Tannerモデル流体;高分子のネットワーク理論に基づいたものであり、非線形応力を与える²⁷⁾)を用いて、3次元流動解析を行った例がある。また、市販の流動解析ソフトウェアでは、オプションとしてEVSS法とDEVSS法の定式化を利用することが出来る(例えばPolyflow Users Guide²⁸⁾)。

以上、EVSS法の概略を述べてきたが、EVSS法は収束性が良い反面、解くべき支配方程式が増えるため、大規模メモリーを要するという欠点がある。

今回略述した混合法に基づく種々の解法は、何れの場合も大規模メモリーを要するという重大な欠点があり、複雑系・3次元系への適用には問題が残る。

2.3 分割法

運動方程式・連続式と構成方程式とを別々に交互に解く分割法は、低メモリー型の長所を有するが、収束可能最大 We が高々1のオーダーと極めて低い値であり、計算収束性が劣るため研究報告例は少ない^{7,8)}。

Tseng and Lin²⁹⁾は、多モードLeonovモデルの平板テーパー縮小流れ問題を分割法を用いて解いた。彼らは、artificial viscosity³⁰⁾と称される特殊な粘性項を導入し、次の如く運動方程式を修正することにより、 $De = 27.5$ までの収束解を得た。

すなわち、Stokes流れの運動方程式(14)について、その両辺に2次微分項 $\eta_a^+ \nabla^2 \mathbf{v}$ を加えて、次式

$$(\eta + \eta_a^+) \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla p + \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}} = \eta_a^+ \nabla^2 \hat{\mathbf{v}} \quad (28)$$

の如く変形し、左辺の付加項 $\eta_a^+ \nabla^2 \mathbf{v}$ を未知、右辺の付加項 $\eta_a^+ \nabla^2 \hat{\mathbf{v}}$ を既知として取扱う方法を用いた。ここに、上付記号‘ $\hat{}$ ’は、反復前段の近似解を用いて既知として取扱うことを意味する。 $\hat{\mathbf{v}}$ は反復前段の速度場(近似解)であり、 $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ は反復前段の構成方程式から得られた応力場(近似解)である。これらの既知項は擬似体力積力として扱われる。なお、収束時には、 $\mathbf{v}$ と $\hat{\mathbf{v}}$ 、 $\boldsymbol{\tau}$ と $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ はそれぞれ一致する。

Schmidt *et al.*³¹⁾は、ペナルティ法により支配方程式系から連続式を除去し、ブロー成形の非定常流動解析を行い、低 De 領域にて推定値と実測値とが良好に一致することを報告した。

◇AVSS法

分割型有限要素法の低メモリー型解法という長所に注目

して、その収束性改善のための検討がなされている。Sun *et al.*³²⁾は、AVSS(Adaptive Viscoelastic Stress Splitting)法を提案し、その収束性の改善効果を確認した。

AVSS法では、任意の着目要素について、要素代表寸法 h_e と各変数の最大値($|\mathbf{v}|_{\max}$, $|p|_{\max}$, $|\boldsymbol{\tau}|_{\max}$)を用い各変数を次式の如く正規化する。

$$\bar{x} \equiv \frac{x}{h_e} \quad (29), \quad \bar{\mathbf{v}} \equiv \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|_{\max}} \quad (30)$$

$$\bar{p} \equiv \frac{p}{|p|_{\max}} \quad (31), \quad \bar{\boldsymbol{\tau}} \equiv \frac{\boldsymbol{\tau}}{|\boldsymbol{\tau}|_{\max}} \quad (32)$$

これらの定義をEVSS法で定式化した運動方程式(19)に代入し、 η_a^* を η_{adp} と書き換えると次式を得る。

$$\left[\frac{|\mathbf{v}|_{\max}}{|\boldsymbol{\tau}_e|_{\max} h_e} \eta_{adp} \right] \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{v}} - \frac{|p|_{\max}}{|\boldsymbol{\tau}_e|_{\max}} \bar{\nabla} \bar{p} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}}_e = 0 \quad (33)$$

応力が極めて大きい場合でも、(33)式左辺第1項の係数は常に1オーダーの値となるように、 η_{adp} を次の如く与える。

$$\eta_{adp} = \alpha \frac{|\boldsymbol{\tau}_e|_{\max} h_e}{|\mathbf{v}|_{\max}} \quad (34)$$

この工夫により運動方程式は常に楕円型となる。 η_{adp} は適合粘性(adaptive viscosity)と呼ばれ、上式中の α は1オーダーの定数である。

このように、要素毎に異なる適合粘性(η_{adp})を運動方程式(19)式に適用する解法をAVSS法という。

Sun *et al.*³²⁾は、このAVSS法を用いてUCM流体の円管Poiseuille流れ(乱れのない円管流れ)を解析し、収束可能最大 We には上限がなく、 $We = 10^4$ にて計算を停止したと述べている。また、円管内に設置した球まわりの流れ解析について、AVSS法と流線積分法(SI)を併用するAVSS/SI法により、 $We = 3.2$ まで収束解を得た。流線上流法(SUPG)を併用するAVSS/SUPG法によると、 $We = 1.55$ であった。一方、AVSS法を適用せず、分割法のみで計算すると、 $We = 0.3$ という極めて低い値までしか収束解が得られなかったと報告している。

AVSS法は、ある着目点における適合粘性がその点での速度・応力の関数形で与えられるため、実際に解く離散化式はもとの基礎式と完全には一致しないという問題点がある。

◇応力代入法と特性テンソル

分割型有限要素法の低メモリー型解法という長所に注目して、その収束性改善のための検討がなされている。Iwata *et al.*⁹⁾は、運動方程式を解く際に、運動方程式への応力代入法により、その収束性が異なることを示した。粘弾性流体の構成方程式には、次式の単一モード

Giesekus モデルが用いられた.

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_0 s \mathbf{S} + \mathbf{E} \quad (35)$$

$$\mathbf{E} + \lambda \hat{\mathbf{E}} + \frac{\alpha}{G} \mathbf{E}^2 = 2\eta_0 (1-s) \mathbf{S} \quad (36)$$

ここに, $\mathbf{S} \equiv [\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T]/2$ は変形速度テンソル, η_0 は零せん断粘度, λ は緩和時間, α および s はモデルパラメータ ($0 \leq \alpha \leq 1$, $0 \leq s \leq 1$), $G \equiv \eta_0 (1-s)/\lambda$ は緩和弾性率である. $\hat{\mathbf{E}}$ は反変型対流時間微分であり, 定常状態では次式で定義される.

$$\hat{\mathbf{E}} \equiv \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{E} - (\nabla \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \nabla \mathbf{v}) \quad (37)$$

定常流れの運動方程式は次式の通りである.

$$\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (38)$$

運動方程式 (38) 式に応力を代入する際, 次の2つの方法が可能である. すなわち, (35) 式を直接代入する「直接代入法」と, (36), (37) 式を用いて (35) 式を変形後に (38) 式へ代入する「変形代入法」である. 運動方程式に代入される応力はそれぞれ次式ようになる.

[直接代入法]

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\chi}_D + \boldsymbol{\chi}_D \cdot \nabla \mathbf{v} + \hat{\mathbf{E}} \quad (39)$$

$$\boldsymbol{\chi}_D \equiv \eta_0 s \boldsymbol{\delta} \quad (40)$$

[変形代入法]

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\chi}_R + \boldsymbol{\chi}_R \cdot \nabla \mathbf{v} - \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\mathbf{E}} - \frac{\alpha}{G} \hat{\mathbf{E}}^2 \quad (41)$$

$$\boldsymbol{\chi}_R \equiv \eta_0 \boldsymbol{\delta} + \lambda \hat{\mathbf{E}} \quad (42)$$

ここで, 上付記号 “^” は, 反復計算の前段で得られた近似解を用いて, 既知関数と見なすことを意味する. $\boldsymbol{\chi}_D$ と $\boldsymbol{\chi}_R$ は ‘特性テンソル’ であり, η_0 を大きくすると粘性力が増加し, 計算安定性が増す性質を持つ. $\boldsymbol{\chi}_D$ と $\boldsymbol{\chi}_R$ とを比較すると, $\boldsymbol{\chi}_D$ には1より小さなモデルパラメータ s を含むが, $\boldsymbol{\chi}_R$ には s はなく, より大きな値になる. また新たな寄与項 $\lambda \hat{\mathbf{E}}$ が付加されている. Iwata *et al.*⁹⁾ は, 通常要素を用いたダイスウェル流動問題で検討し, 特性テンソルの違いにより, 変形代入法の方が直接代入法よりも良い収束性が得られたと報告した. また, 分割法に特有に生じる補間法や積分問題に注目し, 収束性を大幅に改善することに成功している Iwata *et al.*^{9,33,34)}.

さらに, Iwata *et al.*³⁵⁾ は, Tanoue *et al.*¹⁷⁾ の付加粘性の概念を参考に, (41) 式右辺に $2\eta_a \mathbf{S} - 2\eta_a \hat{\mathbf{S}}$ を加える方法を提案した.

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\chi}_R + \boldsymbol{\chi}_R \cdot \nabla \mathbf{v} - \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\mathbf{E}} - \frac{\alpha}{G} \hat{\mathbf{E}}^2 + (2\eta_a \mathbf{S} - 2\eta_a \hat{\mathbf{S}}) \quad (43)$$

$2\eta_a \hat{\mathbf{S}}$ は反復前段の解で評価した変形速度テンソルの既知関数である. なお, この項は, 式中の他の既知関数項とともに運動方程式中で重力と同じように領域全体に作用する擬似体積力 (pseudo-body force) として取り扱われる. 反復計算の収束時には $2\eta_a \mathbf{S}$ と $2\eta_a \hat{\mathbf{S}}$ の両者は一致し, 運動方程式に代入する式は元の (41) 式に帰着する. ここで, 特性テンソル $\boldsymbol{\chi}_{Ra}$ を用いて (43) 式を整理すると,

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\chi}_{Ra} + \boldsymbol{\chi}_{Ra} \cdot \nabla \mathbf{v} - \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\mathbf{E}} - \frac{\alpha}{G} \hat{\mathbf{E}}^2 - \eta_a (\nabla \hat{\mathbf{v}} + \nabla \hat{\mathbf{v}}^T) \quad (44)$$

$$\boldsymbol{\chi}_{Ra} \equiv (\eta_0 + \eta_a) \boldsymbol{\delta} + \lambda \hat{\mathbf{E}} \quad (45)$$

となる. (42) 式と (45) 式を比較すると, 特性テンソル $\boldsymbol{\chi}_{Ra}$ は付加粘性量 $\eta_a \boldsymbol{\delta}$ だけ対角項の増加がみられる.

(44) 式中の擬似体積力に相当する項をテンソル量 $\mathbf{c}$ としてまとめて整理すると, 次式が得られる.

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\chi}_{Ra} + \boldsymbol{\chi}_{Ra} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{c} \quad (46)$$

$$\mathbf{c} \equiv \lambda \mathbf{v} \cdot \nabla \hat{\mathbf{E}} + \frac{\alpha}{G} \hat{\mathbf{E}}^2 + \eta_a (\nabla \hat{\mathbf{v}} + \nabla \hat{\mathbf{v}}^T) \quad (47)$$

(46) 式を運動方程式 (38) に代入・変形すると, 次式が得られる.

$$\boldsymbol{\chi}_{Ra} \cdot \nabla^2 \mathbf{v} + [\nabla \cdot \boldsymbol{\chi}_{Ra}] \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v} : \nabla \boldsymbol{\chi}_{Ra} - \rho \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \mathbf{v} - \nabla p - \nabla \cdot \mathbf{c} + \rho \mathbf{g} = 0 \quad (48)$$

この式より, 特性テンソル $\boldsymbol{\chi}_{Ra}$ は, 速度の2次微分項の係数であり, このテンソルの成分で運動方程式の型特性が判別できる. 楕円型特性を保持するためには, 次式の判別式が負の値を満足する必要がある.

$$D \equiv (\boldsymbol{\chi}^{13})^2 - \boldsymbol{\chi}^{11} \boldsymbol{\chi}^{33} < 0 \quad (49)$$

$\boldsymbol{\chi}^{ij}$ は特性テンソル $\boldsymbol{\chi}_{Ra}$ の成分であり, 次式で示される.

$$\boldsymbol{\chi}^{11} \equiv \lambda \hat{\mathbf{E}}^{11} + (\eta_0 + \eta_a) \quad (50)$$

$$\boldsymbol{\chi}^{13} \equiv \lambda \hat{\mathbf{E}}^{13} \quad (51)$$

$$\boldsymbol{\chi}^{33} \equiv \lambda \hat{\mathbf{E}}^{33} + (\eta_0 + \eta_a) \quad (52)$$

各節点値を用いると判別式 (49) を評価することができ, 付加粘性 η_a を増すと, D に対して負の値が加わり, 楕円型特性が強まることがわかる.

仮に $D > 0$ となる領域が存在すると, 運動方程式は双曲型特性を示すようになり, 楕円型として設定した境界条件と整合が取れず, 運動方程式が解けなくなることが考えられる. そこで, Iwata *et al.*³⁵⁾ は, 判別式に注意しながら適切な付加粘性を導入することにより, 収束性が改善されることを示した.

3. お わ り に

粘弾性流動解析では, 様々な定式化手法があることを紹介した. 有限要素法の市販ソフトの中には, オプションの選択だけで, これらの手法の幾つかを利用することが可能

である。しかしながら、定式化手法には、長所と短所がそれぞれ存在する。その手法の特徴を十分に理解することが大切である。読者がより難しい計算にチャレンジするとき、ここから得られた知見がその助けとなることができれば幸いである。

References

- 1) Huepner, K. H.: "The Finite Element Method for Engineers," John Wiley and Sons, New York, Chapter 1 (1975)
- 2) Courant, R.: *Bull. Am. Math. Soc.*, **49** (1943)
- 3) Turner, M. J.; Clough, R. W.; Martin, H. C.; Topp, L. J.: *J. Aeronaut. Sci.*, **23**(9) (1956)
- 4) Clough, R. W.: "The Finite Element Method in Plane Stress Analysis," Proceedings of 2nd ASCE Conference on Electronic Computation, Pittsburgh Pa., Sept. 8 and 9, (1960)
- 5) Chen, Z.: "Finite Element Methods and Their Applications," Springer, p.4, Germany (2005)
- 6) Zienkiewicz, O.C.; Taylor, R.L.: "The Finite Element Method," Vol.3 Fluid Dynamics, 5th Ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, Chapter 2 (2000)
- 7) Mitsoulis, E.: Encyclopedia of Fluid Mechanics, Vol.9 (edited by N.P.Chermisinoff), "Polymer Flow Engineering", Gulf Publishing Co., Houston, pp.649-704 (1990)
- 8) Luo, X.-L.; Tanner, R. I.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **31**, 143-162 (1989)
- 9) Iwata, S.; Aragaki, T.; Mori, H.; Shin, Y.; Ishikawa, S.; Iwabuchi, K.: *Seikei-Kakou*, **10**(10), 824-831 (1998)
- 10) Kawahara, M.; Takeuchi, N.: *Comput. Fluids*, **5**, 33-45 (1977)
- 11) Crochet, M. J.; Keunings, R.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **10**, 85-94 (1982)
- 12) Van Schaftingen, J. J.; Crochet, M. J.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **4**, 1065-1081 (1984)
- 13) Nakamura, K.: "Hi-Newton Ryutai Rikigaku," Koronasha, Tokyo, Chapter 6 (1990)
- 14) Tam, K. C.; Tiu, C.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **31**, 163-177 (1989)
- 15) Marchal, J. M.; Crochet, M. J.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **26**, 77-114 (1987)
- 16) Luo, X.-L.; Tanner, R. I.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **21**, 179-199 (1986)
- 17) Tanoue, S.; Koga, J.; Kajiwar, T.; Iemoto, Y.; Funatsu, K.: *Seikei Kakou*, **9**, 817-824 (1997)
- 18) Tomita, Y.: "Reoroji," Koronasha, Tokyo, Chapter 8 (1975)
- 19) Baaijens, F. P. T.; Selen, S. H. A.; Baaijens, H. P. W.; Peters, G. W. M.; Meijer, H. E. H.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **68**, 173-203 (1997)

- 20) Otsuki, Y.; Kajiwar, T.; Funatsu, K.: *Polym. Eng. Sci.*, **39**, 1969-1981 (1999)
- 21) Rajagopalan, D.; Armstrong, R. C.; Brown, R. A.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36**, 159-192 (1990)
- 22) Brown, R. A.; Szady, M. J.; Northey, P. J.; Armstrong, R. C.: *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, **5**, 77-106 (1993)
- 23) Szady, M. J.; Salamon, T. R.; Liu, A. W.; Bornside, D. E.; Armstrong, R. C.; Brown, R. A.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **59**, 215-243 (1995)
- 24) Liu, A.W.; Bornside, D. E.; Armstrong, R. C.; Brown, R. A.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **77**, 153-190 (1998)
- 25) Sun, J.; Smith, M. D.; Armstrong, R. C.; Brown, R. A.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **86**, 281-307 (1999)
- 26) Sunwoo, K. B.; Park, S. J.; Lee, S. J.; Ahn, K. H.; Lee, S. J.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **99**, 125-144 (2001)
- 27) Osswald, T.; Menges, H.; under the editorship of Takeda, K.: "Materials Science of Polymers for Engineers," Sigma-shuppan, Tokyo, Chapter 4 (1997)
- 28) Polyflow Users Guide, v12.1, Ansys Inc., Chapter 11 (2010)
- 29) Tseng, H. C.; Lin, G. G.: *Int. J. Numer. Methods. Fluids*, **10**, 637-649 (1990)
- 30) Upadhyay, R. K.; Isayev, A. I.: *Rheol. Acta*, **25**, 80-94 (1986)
- 31) Schmidt, F. M.; Agassant, J. F.; Bellet, M.; Desoutter, L.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **64**, 19-42 (1996)
- 32) Sun, J.; Phan-Thien, N.; Tanner, R. I.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **65**, 75-91 (1996)
- 33) Iwata, S.; Aragaki, T.; Mori, H.; Ishikawa, S.; Shin, Y.: *Seikei-Kakou*, **12**(2), 115-121 (2000)
- 34) Iwata, S.; Aragaki, T.; Mori, H.; Ishikawa, S.; Waki, H.: *Seikei-Kakou*, **12**(8), 523-529 (2000)
- 35) Iwata, S.; Aragaki, T.; Mori, H.; Hattori, M.; Waki, H.: *J. Chem. Eng. Japan*, **35**(7), pp.660-669 (2002)

日本語表記参考文献

- 9) 岩田修一, 新垣勉, 森秀樹, 秦裕作, 石川敏志, 岩渕欽也: 成形加工, **10**(10), 824-831 (1998)
- 13) 中村喜代治: 非ニュートン流体力学, コロナ社, 東京, 6章 (1990)
- 17) 田上秀一, 古閑二郎, 梶原稔尚, 家元良幸, 船津和守: 成形加工, **9**, 817-824 (1997)
- 18) 富田幸雄: レオロジー, コロナ社, 東京, 8章 (1975)
- 27) Osswald, T.; Menges, H.: 旭化成工業(株)樹脂開発・技術センター 若手技術研究会誌, 武田邦彦監修: エンジニアのためのプラスチック材料工学, シグマ出版, 東京, 4章 (1997)
- 33) 岩田修一, 新垣勉, 森秀樹, 石川敏志, 秦裕作: 成形加工, **12**(2), 115-121 (2000)
- 34) 岩田修一, 新垣勉, 森秀樹, 石川敏志, 和気光: 成形加工, **12**(8), 523-529 (2000)

*

*

*

*

*