流速・圧力同時緩和法による非ニュートン流れの 三次元有限要素解析* (べき乗則流体の急縮小円管内流れ)

加藤 保真^{*1}, 藤枝 忠臣^{*2}, 棚橋 隆彦^{*3}

Three-Dimensional Non-Newtonian Fluid Flow Analysis by Finite-Element Method Using Simultaneous Relaxation Method of Velocity and Pressure (Flow of Power-Law Fluids through an Axisymmetric Abrupt Contraction)

Yasumasa KATO, Tadaomi FUJIEDA and Takahiko TANAHASHI

A simple and low-storage finite-element method for three-dimensional incompressible non-Newtonian flow is presented. The present method employs the rational Runge-Kutta scheme for time integration and simultaneous relaxation method of velocity and pressure for the incompressible condition. In order to reduce computational storage, coefficient matrices are calculated by simple integration formulas which are applicable to large systems. Flow of power-law fluids through an axisymmetric abrupt contraction is calculated to confirm the present method. The present method is stable in numerical simulation of power-law fluids, and the numerical results agree with other numerical results.

Key Words: Non-Newtonian Fluid, Finite-Element Method, Incompressible Viscous Flow, Simultaneous Relaxation, Computational Fluid Dynamics, Rational Runge-Kutta Scheme

1. 緒言

プラスチック射出成形の分野では、樹脂充填シミュレーションが金型最適化設計に広く活用されている⁽¹⁾。しかし、現在市販されている樹脂流動解析ソフトの大部分は Hele-Shaw 流れ、円管内流れ等の近似に基づいている。よって、ランナー・ゲート最適化等のマクロ設計には有効であるが、局所的な樹脂流動現象による製品不良原因の解明や精密設計には適用困難である。

複雑形状金型内の樹脂流れを詳細解析するためには、以下の二点の問題に注意する必要がある。第一に、実際の金型形状のモデリングには多数の計算格子点からなる非構造格子が必要であり、計算効率の良い非構造格子対応スキームが不可欠である。第二に、熔融樹脂の流れはせん断速度の変化にともない見かけの粘度が変化する非ニュートン性を持つ。このため、局所的に見かけの粘度が増加した場合に生じる拡散数の制約に対する計算の安定化が必要である。

非ニュートン流れの数値解析では有限要素法がよく利用されてきたが^{(2),(3)}、これらの手法は多くの行列計算を必要とし、計算効率の面で実用的な三次元問題への拡張は困難であった。非圧縮性べき乗則流体については、寒河江⁽⁴⁾は有限要素法で、また久野^{(5),(6)}は有限差分法で、安定な陽的時間進行法である有理 Runge-Kutta 法⁽⁷⁾を用いてそれぞれ有効な数値解析結果を得ている。非定常解析を考慮すると計算容量の面で優れる陽的時間進行法の重要性は高く、安定性の良い有理 Runge-Kutta 法は高粘性の非ニュートン流体の数値解法として適していると考えられる。しかしながら三次元任意形状問題を計算効率良く解析できるスキームの開発はまだ十分ではない。

本報では上記の問題に対して、圧力の解法に element-by-element の流速・圧力同時緩和法⁽⁸⁾、時間進行法に二段階有理 Runge-Kutta 法を用いた三次元非ニュートン流体解析用の有限要素法スキームを提案する。流速・圧力同時緩和法はニュートン流体の大規模非定常解析でスキームの有効性が確認されており^{(8),(9)}、三次元非ニュートン流れの有限要素法解析においても計算効率の高さが期待できる手法である。また要素係数行列に対しては近似解析公式^{(10),(11)}を利用して計算容量を低減する。本スキームの検証問題としては非圧縮べき乗則流

* 原稿受付 1995 年 4 月 6 日。

*¹ 正員、旭硝子(株)中央研究所 (〒221 横浜市神奈川区羽沢町 1150)。

*² 学生員、慶應義塾大学大学院 (〒223 横浜市港北区日吉3-14-1)。

*³ 正員、慶應義塾大学理工学部。

体の三次元急縮小円管内流れを取り上げ、得られた数値解について厳密解および他者の数値解と比較検討してスキームの妥当性を検討する。

主な記号

$b1, b2, c2$: 有理 Runge-Kutta 法の定数

$\mathbf{d}$: 無次元変形速度テンソル

L_{eq} : 過剰圧力損失距離

n : べき乗則粘度指数

p : 無次元圧力

Re : Reynolds 数

t : 無次元時間

$\mathbf{u}$: 無次元流速ベクトル

$\tilde{\mathbf{u}}$: 中間流速ベクトル

$\tilde{\mathbf{u}}$: 仮想流速ベクトル

α : 収束加速係数

Δt : 時間刻み幅

η : 見かけの粘度

λ : 緩和係数

ϕ : 修正速度ポテンシャル

τ_w : 壁面せん断応力

2. 支配方程式

温度場および外力の影響が無視できる場合、べき乗則流体の支配方程式は以下に示す連続の式および Navier-Stokes 方程式となる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + Re \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot (2\eta \mathbf{d}) \quad (2)$$

$$\mathbf{d} = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) \quad (3)$$

式中の変数 $\mathbf{u}$ および p は、無次元の流速ベクトルおよび圧力であり、 η は見かけの粘度である。べき乗則流体の場合は η が定数にならず、次式のようにせん断速度の関数として表現される。

$$\eta = (2\mathbf{d} : \mathbf{d})^{(n-1)/2} \quad (4)$$

一般的な溶融樹脂ではべき乗則粘度指数 n は 1 以下の値となり、流体はせん断速度の増加とともに見かけの粘度が減少する擬塑性を示す。なお式 (1)~(4) は式 (5) に従って無次元化されている。

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{u}^*/U^* \\ \nabla &= \nabla^*/(1/L^*) \\ p &= p^*/(\rho^*U^{*2}/Re) \\ t &= t^*/(ReL^*/U^*) \\ \eta &= \eta^*/(K^*(U^*/L^*)^{n-1}) \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

上添字 * は有次元量を意味し、Reynolds 数 Re は代表流速 U^* と代表長さ L^* を用いて $Re = \rho^*U^{*2}L^*/K^*$ で定義される。ここで ρ^* は流体の密度で、 K^* はべき乗則粘度の係数である。

3. 数値解法

3.1 SMAC 法 式 (1)~(4) を流速について陽的に、圧力と連続の式について陰的に離散化すると SMAC 法⁽¹²⁾に準拠した時間前進のアルゴリズムが得られる。

$$\eta^N = (2\mathbf{d}^N : \mathbf{d}^N)^{(n-1)/2}, \quad \mathbf{d}^N = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}^N + \mathbf{u}^N \nabla) \quad (6)$$

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{u}^N}{\Delta t} + Re \mathbf{u}^N \cdot \nabla \mathbf{u}^N = -\nabla p^N + \nabla \cdot (2\eta^N \mathbf{d}^N) \quad (7)$$

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \quad (8)$$

$$\mathbf{u}^{N+1} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \phi \quad (9)$$

$$p^{N+1} = p^N + \phi/\Delta t \quad (10)$$

ここで ϕ は修正速度ポテンシャルで、上添字 N は N 時刻ステップを意味する。この時間進行法は高粘度流れの解析において安定性が悪い。

3.2 有理 Runge-Kutta 法 時間進行を安定にするために、二段階有理 Runge-Kutta 法⁽⁷⁾を応用して SMAC 法のアルゴリズムを改める。二段階有理 Runge-Kutta 法は、安定条件の制約が緩やかな陽的手法として最近の流れ解析で注目されている⁽¹³⁾。

・流速予測値計算 (第一段階)

$$\eta^N = (2\mathbf{d}^N : \mathbf{d}^N)^{(n-1)/2}, \quad \mathbf{d}^N = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}^N + \mathbf{u}^N \nabla) \quad (11)$$

$$\mathbf{g}_1 = \Delta t [-Re \mathbf{u}^N \cdot \nabla \mathbf{u}^N - \nabla p^N + \nabla \cdot (2\eta^N \mathbf{d}^N)] \quad (12)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^N + c_2 \mathbf{g}_1 \quad (13)$$

・同時緩和反復計算 (第一段階)

$$\nabla^2 \phi^{(k)} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(k)} \quad (14)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(k+1)} = \tilde{\mathbf{u}}^{(k)} - \nabla \phi^{(k)} \quad (15)$$

$$\bar{p}^{(k+1)} = \bar{p}^{(k)} + \phi^{(k)}/\Delta t \quad (16)$$

・流速予測値計算 (第二段階)

$$\bar{\eta} = (2\bar{\mathbf{d}} : \bar{\mathbf{d}})^{(n-1)/2}, \quad \bar{\mathbf{d}} = \frac{1}{2} (\nabla \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}} \nabla) \quad (17)$$

$$\mathbf{g}_2 = \Delta t [-Re \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \bar{p} + \nabla \cdot (2\bar{\eta} \bar{\mathbf{d}})] \quad (18)$$

$$\mathbf{g}_3 = b_1 \mathbf{g}_1 + b_2 \mathbf{g}_2 \quad (19)$$

$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^N + \frac{2\mathbf{g}_1(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_3) - \mathbf{g}_3(\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_1)}{(\mathbf{g}_3, \mathbf{g}_3)} \quad (20)$$

・同時緩和反復計算（第二段階）

$$\nabla^2 \phi^{(l)} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{(l)} \quad (21)$$

$$\tilde{\mathbf{u}}^{(l+1)} = \tilde{\mathbf{u}}^{(l)} - \nabla \phi^{(l)} \quad (22)$$

$$p^{(l+1)} = p^{(l)} + \phi^{(l)} / \Delta t \quad (23)$$

ここで上添字 (k) , (l) は同時緩和反復ステップで, $(,)$ は全計算空間における内積を表している。時間前進のアルゴリズムは以下のように整理される。

step 1) 式 (11)~(13) から仮の中間流速 $\tilde{\mathbf{u}}$ を求める。

step 2) $\tilde{\mathbf{u}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{u}}$, $\tilde{p}^{(0)} = p^N$ を初期値として連続の式を満足するまで式 (14)~(16) を反復し, 流速と圧力の同時緩和から中間流速 $\tilde{\mathbf{u}}$ と中間圧力 $\tilde{p}$ を求める。

step 3) 式 (17)~(20) から $N+1$ step の仮想流速 $\tilde{\mathbf{u}}$ を求める。

step 4) $\tilde{\mathbf{u}}^{(0)} = \tilde{\mathbf{u}}$, $p^{(0)} = \tilde{p}$ を初期値として連続の式を満足するまで式 (21)~(23) を反復し, 流速と圧力の同時緩和から $N+1$ step の流速 $\mathbf{u}^{N+1}$ と圧力 p^{N+1} を求める。

空間の離散化は通常の Galerkin 法で, 八節点六面体要素を用いて流速変数を要素内双一次補間, 他の変数を要素内一定補間する。なお Poisson 方程式 (14), (21) は優対角近似の概念から代数計算式 (24) に変形し, 同時緩和計算時のある要素 e の修正速度ポテンシャル ϕ_e を element-by-element で高速に解ける形式にする⁽⁸⁾。

$$\phi_e = -\alpha \lambda \int_{\Omega^e} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} d\Omega \quad (24)$$

ここで λ は要素形状で決まる緩和係数, α は収束加速係数, Ω^e は要素領域を意味する。また要素係数行列に対しては近似解析公式^{(10),(11)}を利用して三次元計算における計算容量を低減する。以上の計算は完全に陽的であり, パイプライン型および並列型計算機で計算効率の良いプログラミングが容易である。

4. 検証モデルおよび解析条件

4.1 検証モデル 急縮小円管内流れの解析モデルを Fig.1 に示す。上流側の大口径管および下流側の細管の長さはそれぞれ細管直径の 8 倍と 3 倍で, 大口径管と細管の直径比は 2:1 である。解析モデルは久野らの二次元軸対称差分解析⁽⁵⁾と同一である。大口径管端部から十分に発達した軸方向流速分布で流入したべき乗則流体が, 急縮小部を通過した後に細管内で速度分布が発達する様子を時間進行法で定常解を求める。そして, 管壁面はすべり無しの境界条件を与える。ここで代表長さは下流側の細管直径で, 代表流速は十分に発達した細

管部の軸方向平均流速である。解析の際は要素アスペクト比が 1 に近くなるように, 計算領域を要素数 47,360 で計算領域を分割した。解析に使用した有限要素メッシュの側面図と正面図を Fig.2 に示す。

4.2 解析条件 解析条件は $Re = 0.01, 1.0, 10$, $n = 0.5, 0.75, 1.0, 1.25$ で, 時間刻みは全て $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$, 反復計算の収束加速係数 $\alpha = 1.2$ とした。また有理 Runge-Kutta 法の定数は $b_1 = 2$, $b_2 = -1$, $c_2 = 0.5$ として二次精度の時間進行とした。Collins-Schowalter⁽¹⁴⁾が整理したべき乗則流体のべき乗則粘度指数 n および Reynolds 数 Re と助走区間距離の相関より, 本解析条件の範囲では解析上の流路出口で流れは十分に発達する。

解析に使用した計算機は IBM 社のワークステーション RS/6000-37T で, 全ての計算条件について単精度変数で数値解を求めた。

Fig.1 Flow in axisymmetric abrupt contraction

(a) Side view

(b) Front view

Fig.2 Finite-element mesh

5. 解析結果および検討

5.1 時間進行法の比較 $Re = 1$, $n = 0.5$ の条件について前進 Euler 法を用いた SMAC 法の時間進行法による結果と二段階有理 Runge-Kutta 法による結果を Fig.3 に示す。Figure 3 は $y = 0$ 断面における見かけの粘度分布を示している。見かけの粘度分布を見ると、前進 Euler 法の場合は拡散数の制約から生じた数値的不安定性により、せん断速度の小さい領域で見かけの粘度が増加する擬塑性流体の特徴が大口径管中央部で再現されていない。べき乗則流体はせん断速度に依存して見かけの粘度が大きく変化するため、前進 Euler 法では全計算領域で安定条件を満足させる事が困難な場合が多い。一方、二段階有理 Runge-Kutta 法は 1 時刻ステップあたりの計算時間は倍になるが、安定条件の制約がゆるやかなため高粘度の領域でも擬塑性流体の特徴を安定に再現できる事がわかる。

5.2 見かけの粘度分布 べき乗則粘度指数 n を変化した際の、 $y = 0$ 断面における見かけの粘度分布の変化を Fig.4 に示す。管壁面近傍のせん断速度の大きい領域を見ると、 $n < 1$ の場合はせん断速度の増加にともない見かけの粘度が減少す

る擬塑性流体の特徴を、 $n > 1$ の場合はせん断速度の増加にともない見かけの粘度が増加するダイラタント流体の特徴をそれぞれ再現している。

5.3 十分に発達した細管部の流れ 十分に発達した細管部における軸方向流速 v_z および見かけの粘度 η の半径方向分布を Fig.5 に示す。横軸は無次元化された半径方向距離で、 $r = 0$ が細管中心、 $r = 0.5$ が細管壁面を表す。本解析で得られた数値解はべき乗則流体の十分に発達した円管内流れの厳密解と良好に一致している。

(a) $n = 0.5$

(a) Forward Euler method

(b) $n = 0.75$

(b) Two step rational Runge-Kutta method

(c) $n = 1.25$

Fig.3 Comparison of time marching scheme (viscosity; $Re = 1.0$, $n = 0.5$)

Fig.4 The viscosity profiles ($y = 0.0$)

(a) The axial velocity profiles ($Re = 1.0$)

(b) The viscosity profiles ($Re = 1.0$)

Fig.5 Fully developed flow in the small pipe

(a) The effect of Reynolds number ($n = 1.0$)

(b) The effect of power-law index ($Re = 1.0$)

Fig.6 The axial velocity profiles at the plane of contraction

(a) The effect of Reynolds number ($n = 0.5$)

(b) The effect of power-law index ($Re = 1.0$)

Fig.7 The axial velocity profiles on centerline

Fig.8 The pressure profiles on centerline ($n = 0.75$)

Fig.9 Pressure drop distance

Fig.10 Mesh dependency of numerical results

(axial velocity profiles at the plane of contraction)
 $n = 0.5, Re = 1.0$

なおべき乗則流体の十分に発達した円管内流れの軸方向流速の厳密解は有次元で次式のように記述される。

$$\frac{v_z^*(r^*)}{V^*} = \left(\frac{3n+1}{n+1} \right) \left[1 - \left(\frac{r^*}{R^*} \right)^{(n+1)/n} \right] \quad (25)$$

ここで V^* , R^* はそれぞれ軸方向平均流速および円管半径である。

5.4 急縮小部の流れ 急縮小部における軸方向流速分布の Reynolds 数依存性とべき乗則粘度指数依存性を、詳細な計算格子を用いた久野らの二次元軸対称差分解析結果⁽⁵⁾と合わせて Fig.6 に示す。べき乗則粘度指数依存性については軸方向流速を十分に発達した流れの最大流速 $\max(v_z)$ で正規化している。久野らの解析結果と同様に、Reynolds 数あるいは n の値が増加すると管中心部の流速が小さくなる傾向が本解析でも再現された。ただし $Re < 1$ の範囲では、軸方向流速分布の Reynolds 数依存性は小さい。なお全ての計算条件で、本解析による縮小部軸上流速は久野らの解析結果より数%増加した。

5.5 中心軸上の流速分布 急縮小管中心軸上の軸方向流速分布について、Reynolds 数依存性およびべき乗則粘度指数依存性を Fig.7 に示す。 $Re = 1$ の場合、軸方向流速の発達のべき乗則粘度指数に対する依存性は小さい。また Reynolds 数が小さいほど急縮小の影響が上流側までおよぶが、 $Re < 1$ の範囲では軸方向速度の発達の Reynolds 数依存性は小さい。

5.6 急縮小による圧力損失 $Re = 1$ の場合について急縮小管中心軸上の軸方向圧力分布を Fig.8 に示す。急縮小部で付加的な圧力損失が存在し、また Reynolds 数 Re が増加するにつれて全圧力損失が増加している様子がわかる。

Fig.9 に本解析により得られた流路急縮小に起因する過剰圧力損失距離 L_{eq} を示す。過剰圧力損失距離 L_{eq} は次式で定義される。

$$L_{eq} = \frac{\Delta p - (\Delta p_{up} + \Delta p_{down})}{4\tau_w} \quad (26)$$

ここで Δp は本解析による流入部から流出部までの全圧力損失計算結果、 Δp_{up} , Δp_{down} はそれぞれ大口徑管と細管の完全発達流れの理論的圧力損失であり、 τ_w は細管部完全発達流れの理論的壁面せん断応力である。べき乗則流体の場合もニュートン流体の場合も Reynolds 数が 1 を越えると過剰圧力損失距離 L_{eq} が大きく増加する結果が得られ、久野らの結果と定性的に一致した。

5.7 数値解のメッシュ依存性 本解析で使用した要素数 47,360 の有限要素メッシュの他に要素数 21,888 の粗い有限要素メッシュを用い、 $n = 0.5$, $Re = 1.0$ の場合の急縮小部の軸方向流速分布を比較した結果を Fig.10 に示す。要素数が少ない場合は中心軸上の流速がやや小さくなるが、二つの数値解は相対誤差約 1.3% の範囲で一致した。したがって本解析の範囲では数値解のメッシュ依存性の影響は小さいと考えられる。

6. 結言

本報では粘性項支配の熔融樹脂の三次元流れ解析を目的に、連続の式の解法に element-by-element の流速・圧力同時緩和法、時間進行法に二段階有理 Runge-Kutta 法を用いた新しい有限要素法スキームを提案した。本スキームの検証問題としてべき乗則流体の三次元急縮小円管内流れを解析し、以下の結言を得た。

- (1) 本スキームは粘性項支配のべき乗則流れを安定に解析する事が可能であり、三次元複雑形状を有する金型内の樹脂流動解析に有効である。
- (2) 十分に発達した細管部の流れについて、本解析結果は厳密解と良好に一致した。
- (3) 本スキームにおいても久野らの二次元軸対称差分解析結果と同様に、Reynolds 数あるいはべき乗則粘度指数が増加すると急縮小管中心の流速が減少する傾向が再現された。

本研究の遂行にあたり、旭硝子株式会社中央研究所、根岸紀夫氏の協力を得たことを付記し、謝意を表する。

参考文献

- (1) 天野, 射出成形用 CAE をどう利用するか, プラスチックス, **38-8** (1987), 25-36.
- (2) Kim-E, M.E., Brown, R.A., and Armstrong, R.C., The roles of inertia and shear-thinning in flow of an inelastic liquid through axisymmetric sudden contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **13** (1983), 341-363.
- (3) Boger, D.V., Viscoelastic Flows through Contraction, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **19** (1987), 157-182.
- (4) 寒河江・小泉・山川, 高粘性非ニュートン流体の数値解法 (指数則流体の三次元非定常解析), 機論, **55-517**, B (1989), 2618-2625.
- (5) 久野・里深・徳永, 非圧縮性べき乗則流体の急縮小円管内流れの数値計算, 機論, **58-552**, B (1992), 2632-2638.
- (6) 久野・里深・徳永, 境界適合座標系を用いた非圧縮性べき乗則流体の数値計算, 機論, **58-552**, B (1992), 2442-2448.
- (7) Wambecq, A., Rational Runge-Kutta Methods for Solving Systems of Ordinary Differential Equations, *Computing*, **20** (1978), 333-342.
- (8) 加藤・棚橋, 流速と Bernoulli 関数の同時緩和法を用いた三次元非圧縮粘性流れの有限要素解析 (第1報, $Re=5000$ の立方体キャビティ内流れ) 機論, **57-540**, B (1991), 2640-2647.
- (9) 加藤・棚橋, 流速と Bernoulli 関数の同時緩和法を用いた三次元非圧縮粘性流れの有限要素解析 (第2報, 水平同軸二重円筒内自然対流) 機論, **58-551**, B (1992), 2100-2107.
- (10) Mizukami, A., Some Integration Formulas for a Four-Node Isoparametric Element, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **59** (1986), 111-121.
- (11) 斉藤, GSMAC3D の開発 (III) 有限要素法解析で発生する数値不安定現象とその抑制手法, 旭硝子研究報告, **39** (1989), 167-194.
- (12) Amsden, A.A. and Hirt, C.W., The SMAC Method - A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flows, *Los Alamos Scientific Lab. Rep.*, LA-4370 (1970).
- (13) Morinishi, K. and Satofuka, N., Numerical Solution of Viscous Flows over Cascades with Sidewalls, *AIAA paper*, 88-0708 (1988).
- (14) Collins, M. and Schowalter, W.R., Behaviour of non-Newtonian fluids in the inlet region of pipe., *AIChE J.*, **9-6** (1963), 804-809.