急縮小流路における粘弾性流体のスタートアップ流れの数値計算*

山本 剛 宏^{*1}, 中村 喜代次^{*1}Numerical Analysis of Viscoelastic Start-up Flow
in Abrupt Contraction Channel

Takehiro YAMAMOTO and Kiyoji NAKAMURA

Start-up flows of viscoelastic fluids in a two-dimensional 4 to 1 abrupt contraction channel is numerically studied and the transient behavior of viscoelastic fluids is discussed. The multi mode Leonov model is applied to describe the rheological properties of the viscoelastic fluid. The numerical simulation has been carried out for two Weissenberg numbers. The following results are obtained from the present analysis: The corner vortices develop with time and restrict the velocity gradient to relax the growth of the stress field. The circular secondary flow works as a stress relief mechanism. The overshoot of the stress growth is observed at the high Weissenberg number and is not done at the low Weissenberg number. This phenomenon is caused by the unsteady elongational property of the fluid.

Key Words: Viscoelastic Fluid, Unsteady Flow, Computational Fluid Dynamics, FEM, Start-up Flow, Abrupt Contraction Flow, Leonov Model

1. 緒 言

工業的に使用される高分子液体の多くは、非ニュートン粘性と弾性的性質をあわせもつ粘弾性流体であり、ニュートン流体にはみられない複雑な流動現象を示すことが知られている^{(1),(2)}。特に変形履歴の記憶効果や応力緩和などの、粘弾性流体のもつ時間依存特性のために、非定常流れにおいて、ニュートン流体との流動挙動の違いが顕著にみられる。粘弾性流体の非定常流れは工業的には射出成型などの高分子成形加工においてみられる。成型過程における流体の挙動は製品の性能や品質に影響するために、粘弾性流体の非定常流れは工業的な見地からも興味深い流れである。

しかし粘弾性流体の非定常流動現象に関する研究は、定常流れに関するものに比べて少なく、粘弾性流体の非定常流動特性については未だ解明されていない点も多い。特に高分子成型過程では縮小流れや拡大流れを含む

複雑な流れが現れるために、このような流れ場において粘弾性流体がどのような非定常流動挙動を示すかを知らることが重要になる。

本研究では非定常流れとして、静止している流体を急激に流動させるスタートアップ流れを取りあげ、複雑な流れ場における粘弾性流体の流動の数値計算を試みる。粘弾性流体のスタートアップ流れについては、これまでに実験では急縮小部を通過する流れ^{(3),(4)}などの複雑な流れに関するものも行われているが、数値解析は単純せん断流れや単軸伸長流れのような簡単な流れに関するものが多く、複雑な流路における数値解析はほとんど行われていない。著者らはこれまでに、初期状態として静止状態を考え、時刻 $t \geq 0$ に流路入り口境界に十分に発達した流れを与えることによって、スタートアップ流れをモデル化し、急縮小流路におけるスタートアップ流れの数値解析^{(5),(6)}を行った。本研究ではより現実に近いモデル化を行い、急縮小流路における粘弾性流体のスタートアップ流れの数値計算を行った。そしてその計算結果をもとに急縮小流れにおける粘弾性流体の非定常流動挙動について考察した。

* 原稿受付 1997年3月18日。

^{*1} 正員, 大阪大学工学部 (☎ 565-0871 吹田市山田丘 2-1)。

2. 基礎方程式

本解析では2次元非定常非圧縮流れを考える。そして粘弾性流体のレオロジー特性を記述する構成方程式にはマルチモードのレオノフモデル^{(7),(8)}を使用した。レオノフモデルは高分子融液を想定し、ゴム弾性理論と熱力学的不可逆過程を基礎として導かれた非線形の微分型構成方程式である。

以下に解析の基礎式を示す。基礎式は連続の式(1)、コーシーの運動方程式(2)、構成方程式(3)～(5)からなる。

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

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} - \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) = 0 \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_0 s \mathbf{D} + \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \mathbf{C}^k \quad (3)$$

$$\frac{\nabla}{\theta_k} + \frac{1}{2\theta_k} (\mathbf{C}^k \cdot \mathbf{C}^k - \mathbf{I}) = 0 \quad (4)$$

$$\det \mathbf{C}^k = 1 \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{v}$ は速度ベクトル、 ρ は流体の密度、 $\boldsymbol{\tau}$ は応力テンソル、 $\mathbf{I}$ は単位テンソル、 p は圧力である。また、 ∇ はナブラ演算子を表す。 η_k 、 θ_k 、 s はレオノフモデルのパラメータで、それぞれ第 k モードの粘度、緩和時間、0 と 1 の間の値をとる定数である。 η_0 はゼロせん断粘度で $\eta_0 \equiv \sum_{k=1}^N \eta_k / (1-s)$ で定義される。 $\mathbf{C}^k$ は第 k モードのフィンガーひずみテンソル、 $\mathbf{D}$ はひずみ速度テンソルを表す。また $[\cdot]$ は上対流微分である。

また非常に小さな緩和時間をもつモードに対しては quick adaptation 近似⁽⁹⁾が適用できる。このとき $\mathbf{C}^k$ は

$$\mathbf{C}^k = \mathbf{I} + 2\theta_k \mathbf{D} \quad (6)$$

と表される。

式(1)～(5)をデカルト座標系で成分表示すると以下のようなになる。

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (7)$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} - \eta_0 s \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \left(\frac{\partial C_{xx}^k}{\partial x} + \frac{\partial C_{xy}^k}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} - \eta_0 s \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \sum_{k=1}^N \frac{\eta_k}{\theta_k} \left(\frac{\partial C_{xy}^k}{\partial x} + \frac{\partial C_{yy}^k}{\partial y} \right) + \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_{xx}^k}{\partial t} + u \frac{\partial C_{xx}^k}{\partial x} + v \frac{\partial C_{xx}^k}{\partial y} - 2 \left(C_{xx}^k \frac{\partial u}{\partial x} + C_{xy}^k \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{1}{2\theta_k} (C_{xx}^{k2} + C_{xy}^{k2} - 1) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_{xy}^k}{\partial t} + u \frac{\partial C_{xy}^k}{\partial x} + v \frac{\partial C_{xy}^k}{\partial y} - C_{xx}^k \frac{\partial v}{\partial x} - C_{yy}^k \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{1}{2\theta_k} (C_{xx}^k C_{xy}^k + C_{xy}^k C_{yy}^k) = 0 \quad (11)$$

$$C_{yy}^k = \frac{1 + C_{xy}^{k2}}{C_{xx}^k} \quad (12)$$

ここで u, v はそれぞれ x, y 方向の速度成分を、 C_{ij}^k は第 k モードのフィンガーひずみテンソルの ij 成分を表す。 D/Dt は物質微分である。

3. 数値計算スキーム

3.1 離散化 先に示した基礎式を離散化する。まず式(7)～(11)をガラーキン有限要素法を用いて離散化する。速度とひずみに対して2次の多項式近似を、圧力に対して1次の多項式近似を用いて、それぞれ6節点および3節点の三角形要素を用いる。各要素について作成した有限要素式を全体系に重ね合わせるにより、式(7)～(9)から式(13)を、式(10)および(11)から式(14)を得る。

$$[\mathbf{M}]\{\dot{\mathbf{V}}\} + [\mathbf{K}]\{\mathbf{V}\} = \{\mathbf{F}\} \quad (13)$$

$$[\mathbf{C}]\{\dot{\mathbf{C}}^k\} + [\mathbf{E}]\{\mathbf{C}^k\} = \{\mathbf{R}^k\} \quad (14)$$

ここで $\{\mathbf{V}\}$ は各節点上の u, v, p を成分とするベクトル、 $\{\mathbf{C}^k\}$ は各節点上の C_{ij}^k を成分とするベクトルである。 $[\mathbf{M}]$ 、 $[\mathbf{K}]$ 、 $[\mathbf{C}]$ 、 $[\mathbf{E}]$ は要素マトリックスである。上付きのドットは時間に関する偏微分を表す。

これらの式を時間に関して離散化する。ここでは連続の式と運動方程式に対してクラーク・ニコルソン法を、構成方程式に対してはオイラー前進差分法を用いる。その結果として、それぞれ式(15)、(16)の形の式を得る。

$$\left([\mathbf{M}] + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{K}] \right) \{\mathbf{V}\}_{n+1} = \left([\mathbf{M}] - \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{K}] \right) \{\mathbf{V}\}_n + \frac{\Delta t}{2} (\{\mathbf{F}\}_{n+1} + \{\mathbf{F}\}_n) \quad (15)$$

$$[\mathbf{C}]\{\mathbf{C}^k\}_{n+1} = [\mathbf{C}]\{\mathbf{C}^k\}_n + \Delta t (\{\mathbf{R}^k\}_n - [\mathbf{E}]\{\mathbf{C}^k\}_n) \quad (16)$$

ここで Δt は時間増分を、添字 n は第 n 時間ステップの量であることを表す。

3.2 スタートアップ流れのモデル 以下に示す条件のもとで式(15)、(16)を各時間ステップについて解

くことによってスタートアップ流れの数値計算を行う。

- (1) 初期状態で流体は静止しているとする。したがって、初期条件として $u=v=0$, $C_{xx}^k = C_{yy}^k = 1$, $C_{xy}^k = 0$ を与える。
- (2) $t \geq 0$ で流路入り口境界には、平行平板間のスタートアップ流れ⁽¹⁰⁾の各時間ステップにおける流速とひずみの値, $u(y, t)$, $v=0$, $C_{ij}^k(y, t)$ を境界条件として与える。したがって、入り口の境界条件は各時間ステップごとに更新される。
- (3) その他の境界条件として、壁面境界ではすべりなしの条件を与え、流路出口では流れは流れ方向 (x 方向) に十分に発達していると考え、また、流路出口で圧力の境界条件として $p=0$ を与える。

なお、境界上における C_{ij}^k の値は、速度に関する境界条件を考慮した構成方程式を解くことによって求められる。

4. 試料流体のレオロジー特性

解析に使用した試料流体のレオロジー特性を示す。ここではポリスチレン融液に対して Isayev ら⁽¹²⁾ が決定した2モードのレオノフモデルのパラメータ ($s=0.09$, $\eta_1 = 5.44 \times 10^3$ Pa·s, $\eta_2 = 1.50 \times 10^3$ Pa·s, $\theta_1 = 0.80$ s, $\theta_2 = 0.027$ s) を用いて計算を行った。流体の密度 ρ は 960 kg/m^3 とした。このパラメータを用いたときの流体の定常せん断粘度 η_s と第一法線応力差 N_1 を図1に、非定常一軸伸長粘度 η_E^+ を図2に示す。図中の破線は Wales⁽¹³⁾ による測定値である。試料流体の η_s は、せん断速度の増加とともに低下する shear-thinning 性を示し、 η_E^+ は伸長速度 $\dot{\epsilon}$ の増大とともに粘度が増大する stretch-thickening 性を示している。また η_E^+ は $\dot{\epsilon}$ が大きいほど早く定常値に達することが分かる。

5. 計算結果および考察

5・1 解析条件 解析は縮小比が4対1の急縮小流路について行った。図3に解析流路の形状を、図4にメッシュ分割を示す。図3には境界条件もあわせて示した。

本解析では2種類の入り口平均流速 $\bar{u}_{\text{ent}} = 10, 20 \text{ mm/s}$ について計算を行った。このときワイゼンベルグ数 $We = \lambda U/L$ はそれぞれ6.58, 13.2になる。ここで $\lambda = \sum_{k=1}^N \eta_k \theta_k / \eta_0$ は特性緩和時間である。 U と L はそれぞれ代表速度と代表長さで、 U に縮小部の平均流速を、 L に縮小部の半流路幅を用いた。

また、本解析では第2モードに対して quick adaptation 近似を適用した。そして、対称条件 ($y=0$ で $v=0$, $C_{xy}^k=0$,

Fig.1 Steady shear viscosity η_s and the first normal stress difference N_1 versus shear rate. Solid line : Leonov model, Broken line : experimental data of STYRON 678 at 190 °C.

Fig.2 Unsteady uniaxial elongational viscosity η_E^+ versus time t for various elongational strain rates $\dot{\epsilon}$

Fig.3 Schematic diagram of a two-dimensional 4 to 1 abrupt contraction channel and boundary conditions.

Fig.4 Finite element mesh for a 4 to 1 abrupt contraction channel.

Fig.5 Change of velocity vectors with time: (a)–(d) Viscoelastic ($We=13.2$), (e) Newtonian ($\bar{u}_{ent}=20$ mm/s, steady state). (a) $t=0.1$ s, (b) $t=0.5$ s, (c) $t=1$ s, (d) $t=5$ s.

$\partial/\partial y=0$) を用いて, $y \geq 0$ の領域について解析を行った.

5・2 速度場 速度場の計算結果を示す. 図5に $We=13.2$ の場合の速度場の時間変化を示す. ここでニュートン流体の計算は粘度を η_0 として行った.

いずれの流体の場合にも, 流路角部に循環二次流れが発生している. ニュートン流体の場合にも, このような循環二次流れが現れることは, 実験⁽¹⁴⁾でも確認されている. 粘弾性流体の場合には, 渦が時間とともに成長しているが, ニュートン流体ではこのような渦の成長はみられない.

また渦の大きさは粘弾性流体のものの方が大きくなっている. これらの現象は $We=6.58$ の場合にも同様にみられた. 循環二次流れの成長は後述する速度勾配を通じて, 応力場の成長と関連があることが分かった.

図6に流れ方向流速 u の中心線上分布の時間変化を示す. 粘弾性流体の場合には縮小部入り口の少し下流側で u のオーバーシュート領域がみられる. このような領域はニュートン流体ではみられない⁽⁵⁾. これは粘弾性流体では流体が縮小流れで加速され, 下流側の領域で発達した流れの速度分布になるまでに必要な助走区間が, 流体の弾性的性質のために長くなるためであると考えられる.

(a)

(b)

Fig.6 Distribution of velocity u along the center line: (a) $We=6.58$, (b) $We=13.2$.

図6の結果を中心線上の流れ方向の速度勾配 $\partial u/\partial x$ でみると, 図7のようになる. 中心線上では $\partial u/\partial x$ は伸長速度に相当し, 伸長応力の増大の原因のひとつである. $\partial u/\partial x$ は流体が急激に加速される, 縮小部入り口付近で大きな値をとっている. そして循環二次流れの成長とともに, その最大値が小さくなっていく.

(a)

(a)

(b)

(b)

Fig.7 Distribution of velocity gradient $\partial u/\partial x$ along the center line: (a) $We=6.58$, (b) $We=13.2$.

Fig.9 Growth of normal stress difference $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ on the center line near the entrance of the contraction: (a) $We=6.58$, (b) $We=13.2$.

Fig.8 Distribution of normal stress difference $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ for $We=13.2$.

5・3 応力場 図8に $We=13.2$ の場合の法線応力差 $\tau_{xx}-\tau_{yy}$ の分布を示す。伸長流れが支配的となる縮小部入り口付近で大きな値になっていることが分かる。またこの領域で応力が成長していく様子が分かる。また縮小部の下流側では、せん断流れが支配的となり、速度勾配の大きい壁面近くで応力が大きくなる。 $We=6.58$ の場合も応力の値は小さいが、同じような応力分布となる。

図9に中心線上の縮小部入り口付近の各点における $\tau_{xx}-\tau_{yy}$ の時間変化を示す。中心線上では $\tau_{xx}-\tau_{yy}$ は伸長応力に相当する。いずれの場合も流動開始直後に応力が急速に成長し、やがてその成長速度が遅くなり、ほぼ定常値へと達している。しかし $We=6.58$ のときにはみられなかった応力成長のオーバーシュートが、 $We=13.2$ のときには現れている。

このような応力成長のメカニズムは次のように説明できる。流動開始直後は縮小部入り口付近の $\partial u/\partial x$ が大きく、応力が急激に成長する。しかし先に述べたように、時間とともに循環二次流れが大きく成長することによって、縮小部入り口付近の流れ方向の速度勾配を小さく抑えられ、その結果、応力の成長速度は緩和される。つまり循環二次流れが応力緩和機構⁽¹⁵⁾として働いている。

このとき、 We が大きいときにはオーバーシュートが現れるが We が小さいときには現れないことは次のように説明できる。図2から分かるように、伸長速度が大きいほど試料流体の伸長粘度は早く定常値に達する。つまり We が大きい、したがって縮小部入り口付近の速度勾配が大きい場合には、伸長粘度の増大が早く、応力の成長も早い。そして応力が十分発達した後で、速度勾配の抑制による応力成長の緩和が生じて、応力が小さくなる。そのために応力のオーバーシュート現象が生じる。しかし We が小さい場合には伸長粘度の成長は遅く、応力が十分に成長するまでに応力成長の緩和が始まるために、成長速度は緩やかになるがオーバーシュートは生じない。

6. 結 言

本研究では粘弾性流体の非定常流動挙動を調べることを目的として、構成方程式にレオノフモデルを用いて、2次元急縮小流路における粘弾性流体のスタートアップ流れの数値計算を行った。そして次の結果を得た。

- (1) 中心線上の流速にオーバーシュート領域が存在する。
- (2) 循環二次流れの成長によって流れ方向の速度勾配が抑えられ、それが応力の成長を緩和する働きをする。
- (3) We が大きくなると応力成長のオーバーシュートがみられる。これは流体の非定常伸長特性と関係がある。

文 献

- (1) Bird, R.B., Armstrong, R.C. and Hassager, O., *Dynamics of Polymeric Liquid* 2nd ed. (1985), Wiley.
- (2) Tanner, R.I., *Engineering Rheology* (1985), Clarendon.
- (3) 森・武原・小西・中村, 日本レオロジー学会誌, **18** (1990), 69-75.
- (4) 森・海下・中村, 日本レオロジー学会誌, **21** (1993), 33-40.
- (5) 中村・山本, 日本繊維機械学会論文集 **47** (1994), T127-134.
- (6) 中村・山本, 日本繊維機械学会論文集 **47** (1994), T211-218.
- (7) Leonov, A.I., *Rheol. Acta*, **15** (1976), 85-98.
- (8) Leonov, A.I., Lipkina, E.H., Pashkin, E.D. and Prokunin, A.N., *Rheol. Acta*, **15** (1976), 411-426.
- (9) Leonov, A.I. and Prokunin, A.N., *Rheol. Acta*, **19** (1980), 393-403.
- (10) Isayev, A.I., *J. Rheol.*, **28** (1984), 411-437.
- (11) Upadhyay, R.K. and Isayev, A.I., *Rheol. Acta*, **25** (1986), 80-94.
- (12) Isayev, A.I. and Hieber, C.A., *Rheol. Acta*, **19** (1980), 168-182.
- (13) Wales, J. L. S., *The Application of Flow Birefringence to Rheological Studies of Polymer Melts* (1976), Delft University Press.
- (14) 千葉・村上・山本・中村, 日本繊維機械学会論文集, **44** (1991), T247-259.
- (15) White, J.L. and Kondo, A., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **3** (1978), 41-64.