有限要素法による粘弾性流体のダイスウェル解析*

藤 枝 忠 臣*¹, 棚 橋 隆 彦*²

Die Swell Simulation of Visco-Elastic Fluid Using Finite Element Method

Tadaomi FUJIEDA Takahiko TANAHASHI*³^{*3} Keio University, Faculty of Science and Technology,
3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, 223-8522 Japan

In this paper, numerical analysis of the entrance flow and the die swell of visco-elastic fluid in the dies are carried out. This method employs the GSMAC-method for the analysis of the momentum equation and the MUSCL-TVD method for the analysis of the constitutive equation. And we use larson model equation and the constitutive equation of visco-elastic fluids. In order to investigate the validity of this present analysis, the present solutions are compared with the experiment data of the HDPE-melts in the former literature. This present solutions of principal stress difference and swell ratio are in good agreement with the experiment data. And we investigate effects of flow rate and the slit length on die swell.

Key Words: Visco-Elastic fluids, Multi-Mode Larson Model, MUSCL-TVD Scheme, GSMAC-FEM, Computational Fluid Dynamics, Finite Volume Method, Die Swell

1. 結 言

高分子材料の押し出し成形などでは、ダイ流出後の自由表面の形状が製品の最終精度に大きく影響する。そのため、精度の高い製品を成形するためにはダイ内およびダイ流出後の熔融樹脂流動の挙動を把握する必要がある。熔融樹脂は粘弾性流体としての性質を示すため、粘弾性流体のダイ入口における縮小流れ、およびダイ出口におけるダイスウェルを正確に予想することが重要である。筆者らは前報において、運動方程式の解法に GSMAC 有限要素法⁽¹⁾を、構成方程式の解法に MUSCL 型 TVD 法⁽²⁾をそれぞれ用いた、粘弾性流体の解析に適した数値解析スキームを提案した。そして、高せん断速度下における急縮小平板間の LDPE 融液の数値解析を行い、その有効性を確認した^{(3),(4)}。本報では、前報で提案した解析スキームを用いて粘弾性流体のダイスウェル解析を行い、他者の実験結果と比較することによりその有効性を確認するとともに、流量およびスリット長がダイスウェルに与える影響を調べた。

ダイスウェル解析を行う場合、ダイ出口における応力の特異性が問題となる。しかし、本手法では構成方程式の解法に双曲性の強い方程式の解析に有効な MUSCL 型 TVD 法を用いることにより、応力の特異性が強い問題に対しても安定に解析することを可能にした。また、応力変数を要素中心で定義することにより最も強い特異性を示すダイ出口のコーナーの格子点において応力を定義していないため、

安定な解析が期待できる。

粘弾性流体の数値解析を行う場合、構成方程式の選択が問題となる。粘弾性流体の構成方程式は本報では、8 モードの緩和時間分布を考慮した非可逆型の Larson モデル^{(5),(6)}を用いた。このモデルは、土井・Edwards の管理論⁽⁷⁾に基づくモデルである。高分子鎖の枝別れが、伸長した高分子鎖の contraction を阻害することを考慮することにより非線型粘弾性を表現するモデルであり、熔融樹脂の挙動を良好に表現することが可能である。

主な記号

- e_{ij} : 変形速度テンソル
- G_n : 第 n モードにおける弾性係数
- G : 緩和弾性係数
- h : ダンピング関数
- p : 圧力
- u_i : 流速ベクトル
- x_i : 実空間座標
- α : 非可逆パラメータ
- γ : ひずみ
- μ_n : 第 n モードにおける粘性係数
- λ_n : 第 n モードにおける緩和時間($=\eta_n/G_n$)
- ρ : 密度
- τ_{nij} : 第 n モードにおける余剰応力テンソル
- τ_{ij} : 余剰応力テンソル
- ξ : 非線形粘弾性パラメータ

* 原稿受付 1998 年 10 月 16 日。

^{*1} 学生員, 慶應義塾大学大学院 (〒223-8522, 横浜市港北区日吉 3-14-1)。^{*2} 正員, 慶應義塾大学理工学部。

E-mail: taka@mech.keio.ac.jp

2. 基礎方程式

等温、非圧縮の仮定のもと、連続の式、運動方程式は以下のようになる。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} - u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

粘弾性流体の解析を行う場合、そのレオロジック特徴を記述する構成方程式を導入する必要がある。適切な構成方程式については現在も様々な議論があり^{(8),(9)}、今後とも発展が期待される分野であるが、すべての溶融樹脂を広範囲のせん断速度にわたって統一的に記述できる構成方程式は存在しない。そのため、解析対象により適切な構成方程式を選択する必要がある。本解析では、一般に溶融樹脂の挙動をよく再現するとされる多モードの Larson モデルの構成方程式を用いる。Larson モデルは土井・Edwards の管理論をもとにしたモデルであり、高分子鎖の枝別れが伸長した高分子鎖の contraction を阻害することを考慮することにより、非線型粘弾性を表現したモデルである。以下に多モードの Larson モデルの構成方程式を示す。なお、本解析では 8 モードの緩和モードを考慮した。

$$\frac{O\tau_{nij}}{Ot} = -\frac{1}{\lambda_n} \tau_{nij} - \frac{2}{3} \frac{\xi}{G_n} \text{tr}(e_{ik} \tau_{nkj})(\tau_{nij} + G_n I_{ij}) + 2 \frac{\mu_n}{\lambda_n} e_{ij} \quad (3)$$

$$\tau_{ij} = \sum_n \tau_{nij} \quad (4)$$

ここで、式(3)中の ξ は高分子鎖の contraction を阻害する強さを表す非線形粘弾性パラメータであり、0 から 1 の間の値をとる。 $\xi = 0$ の場合、高分子鎖の contraction は完全に阻害されアフィン変形するため、線形粘弾性流体モデルである Maxwell モデルと一致する。 $\xi = 1$ の場合は、高分子鎖の contraction は阻害されず、伸長変形した高分子鎖は平衡長まで緩和するため、土井・Edwards 理論による構成方程式と一致する。また、 O/Ot は座標系の変形と回転を考慮した時間微分である Oldroyd 微分を、 e_{ij} は変形速度テンソルをそれぞれ意味する。以下に、Oldroyd 微分および変形速度テンソルの定義をそれぞれ示す。

$$\frac{O\tau_{ij}}{Ot} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (5)$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

Larson モデルには、先に示した可逆型のものと不可逆型のものがある⁽⁶⁾。可逆型の Larson モデルを用いてダイスウェル解析を行った場合、スウェルを過大評価することが知ら

れている⁽¹⁰⁾。そこで、本解析では、不可逆型の Larson モデルを用いて解析を行った。不可逆型の Larson モデルでは、式(3)の右辺第二項は以下のようになる。

$$-\frac{2}{3} \alpha \frac{\xi}{G_n} \text{tr}(e_{ik} \tau_{nkj})(\tau_{nij} + G_n I_{ij})$$

$$\alpha = 1 \quad \text{if} \quad \text{tr}(e_{ik} \tau_{nkj}) > 0$$

$$\alpha = 0 \quad \text{if} \quad \text{tr}(e_{ik} \tau_{nkj}) < 0 \quad (7)$$

3. 計算手法

本解析では運動方程式および連続の式の解法として GSMAC-FEM に二段階有理ルンゲクッタ法⁽¹¹⁾を組み合わせたスキームを用いる。GSMAC-FEM はニュートン流体の解析スキームとして実績があり、粘弾性流体の解析に対しても有効であることが期待できる。また、圧力解法に流速・圧力同時緩和法⁽¹²⁾を用いており、効率のよい解析が期待できる。有理ルンゲクッタ法は高粘性流動の解析に対し安定であり、溶融樹脂の解析に有効である^{(13),(14)}。また、構成方程式の解法には MUSCL 型 TVD 法を用いている。粘弾性流体の構成方程式は移流項が卓越するため、数値的に不安定になる。特に大きな速度勾配付近では、粘弾性流体の応力は強い不連続性を示すため数値的安定性を確保することが困難になる。MUSCL 型 TVD 法は不連続な物理量の移流現象の解析に対して安定であるため、粘弾性流体の構成方程式の解法として有望である。本解析で用いた MUSCL 法では大局的に三次精度を維持するために応力の数値流束を決定する際、二次関数により補間を行う。また、TVD 条件を満足するために流束制限関数として minmod limiter を用いる。詳細は参考文献(3)、(13)を参照のこと。

自由表面の位置 $h(x)$ の決定は入力した流量 Q および流路幅 W を用いて次式によって決定する。

$$h^{m+1}(x) = \frac{Q}{\rho U_{mean} W} \quad (8)$$

$$U_{mean} = \frac{1}{h^m} \int u^{m+1}(y) dy \quad (9)$$

非定常計算を行う場合は運動方程式の時間ステップ 1 ステップごとに式(8)、(9)と運動方程式の反復計算が必要となる。しかし、ここでは、定常解のみを考え、時間ステップ n の表面高さをを用いて式(9)より U_{mean} を計算し、式(8)より求める $h(x)$ を時間ステップ $n+1$ の表面高さとし、速度場および表面位置が収束するまで時間進行を行った。

4. 解析条件および解析モデル

4.1 レオロジック物性 本解析では、解析対象として High-density polyethylene (HDPE) 融液の物性値を取り上げる。緩和モードの分布は 8 モードの緩和モード分布を用いる。Table 1 に本解析で用いた緩和時間分布を示す。

Table 1 Distribution of time relaxation

Relaxation mode n	Relaxation times λ_n (s)	Modulus coefficients G_n (Pa)
1	0.002	211910
2	0.00938	76242
3	0.044	64017
4	0.2065	34310
5	0.9686	18545
6	4.544	9842.1
7	21.32	3845.2
8	100.0	2042.6

なお、密度 ρ は 951 kg/m^3 、非線形粘弾性パラメータ ξ は 0.7 とした。図 1 に一軸伸長における緩和弾性係数の時間依存性の Larson モデルによる予測値を HDPE 融液の Ahmed らによる実験値⁽¹⁵⁾ と共に示した。Larson モデルでは、一軸伸長における緩和弾性係数 $G(t, \gamma)$ は次式で現される。

$$G(t, \gamma) = \frac{\sum_n G_n \exp(-t/\lambda_n)}{1 + \frac{1}{3} \xi \gamma^2} \quad (10)$$

ここで、 γ は伸長ひずみであり、ここでは $\gamma=1$ の場合を示した。この図から Larson モデルが HDPE 融液の応力緩和の様子を良好に表現することができることがわかる。

Fig.1 Model prediction of modulus

図 2 にダンピング関数の Larson モデルによる予測値を HDPE 融液の実験値と共に示す。なお、一軸引っぱりにおけるダンピング関数 $h(\gamma)$ の Larson モデルによる予測値は以下の式となる。

$$h(\gamma) = \frac{1}{1 + \frac{1}{3} \xi \gamma^2} \quad (11)$$

この図より、Larson モデルの構成方程式が HDPE 融液のひずみ依存性を良好に表現していることが分かる。

図 3 に Larson モデルによるせん断流動特性の予測値を示す。横軸にせん断速度を、縦軸にせん断速度粘度および

第一法線応力差をとった図を示す。この図を見ると、Larson モデルは熔融樹脂に見られるせん断粘度の shear thinning 性や非線形法線応力差を示すことが分かる。図 4 に Larson モデルによる伸長粘度の伸長速度依存性の予測値を示す。Larson モデルでは、低伸長速度域において弱い伸長粘度の strain thickening 性を示し、高伸長速度域では強い伸長粘度の strain thinning 性を示している。

Fig.2 Model prediction of damping function

Fig.3 Shear viscosity and normal stress difference as a function of shear rate

Fig. 4 Elongational viscosity as a function of elongational rate

4.2 解析モデル 本解析では、解析モデルとして急縮小平板内流れを取り上げる。このモデルは形状が単純であるにもかかわらず、コーナー部の二次渦、流路の急縮小に伴う過剰な圧力損失、ダイスウェルなど粘弾性流体特有の現象を多く含む。また、古くから粘弾性流体の検証モデルとして多く用いられてきたため、実験結果や他者の数値解析結果など検証用のデータが豊富である。以上の理由により、急縮小平板間流れは粘弾性流体のダイスウェル解析の検証問題として最適であるといえる。図5に本解析で用いた解析モデル図および解析条件を、表2に解析モデルの各サイズをそれぞれ示す。なお、これらの流路形状および流路サイズは Ahmed らの実験⁽¹⁵⁾と同様のものを用いており、 z 方向の幅は $2h_{in}$ とした。解析境界条件は、入口が十分発達したニュートン流体の厳密解を、壁面条件にノンスリップ条件を、出口、自由表面条件にトラクションフリーの条件を与えた。ここで、スリット長がスウェルに与える影響を調べるため、スリット長さ L を 4.0 mm, 8.0 mm, ∞ と変化させ解析を行った。ここで、 $L=\infty$ は縮小のない流れを意味する。

Fig.5 Flow through the contraction

Table 2 Size of analytical model (mm)

h_{out}	h_{in}	L_{out}	L_{in}
1.15	7.35	12	12

5. 解析格子

ここでは、本解析で用いた解析格子を示す。本解析では、四接点アイソパラメトリック要素の非構造格子を用いた。コーナー部およびスリット出口において詳細な格子を用いた不等分割格子を用いた。本解析では、スリット長が流れに与える影響を検証するため三種類の解析格子を用いて解析を行った。mesh 1 は $L=4.0$ mm で総要素数 778 要素, mesh 2 は $L=8.0$ mm で総要素数 820 要素, mesh 3 は $L=\infty$ で総要素数 280 要素である。図6に mesh 1 から mesh 3 の解析格子図を、図7に mesh 2 の解析格子スリット近傍の拡大図を

それぞれ示す。なお、最小格子幅はすべてのケースにおいて 0.0535 mm である。

(a) mesh 1 ($L=4.0$ mm, 778 elements) (b) mesh 2 ($L=8.0$ mm, 820 elements) (c) mesh 3 ($L=\infty$, 280 elements)

Fig.6 Figures of the finite element meshes

Fig. 7 Figure of mesh 2 near the slit

6. 解析結果および検討

6.1 流量がダイスウェルに与える影響 流量がスウェルに与える影響を調べるため、流量 Q を 0.22 g/s, 0.32 g/s と変化させ解析を行った。ここで式(12)で表される代表緩和時間 $\bar{\lambda}$ を用いて代表流速としてスリット内の平均流速, 代表長さとしてスリット幅の半分の長さ h_{out} を取ると、ワイゼン

ベルグ数は次式により定義される。

$$\bar{\lambda} = \frac{\sum_{i=1}^8 \lambda_i G_i}{\sum_{i=1}^8 G_i} \quad (12)$$

$$We = \bar{\lambda} \frac{U_{mean}}{h_{out}} = \bar{\lambda} \frac{Q}{4\rho h_{out}^2 h_{in}} \quad (13)$$

式(12), (13)の定義に従えば, $Q=0.22$ g/s, $Q=0.32$ g/s の場合のワイゼンベルグ数はそれぞれ 11, 16 である。図 8 に $Q=0.22$ g/s 場合におけるダイ出口付近の初期メッシュ形状および最終メッシュ形状を示す。ここでは, L は 8.0 mm で一定とした。表 3 にダイ出口から 2.0 mm におけるスウェル比を Ahmed らの実験結果⁽¹⁵⁾と共を示す。ここで, スウェル比は自由表面の高さとスリット幅の半分の長さとの比として定義している。本解析は Ahmed らの実験結果と良好に一致しており, 本解析結果の有効性が確認された。また, 本表からスリット出口近傍では, 流量がスウェル比に与える影響は小さいことが分かる。図 9 に横軸にスリット出口からの距離を, 縦軸にスウェル比をとった図を示す。この図から, ダイ出口近傍では流量がスウェル比に与える影響は小さいが, 出口から十分に離れると流量が増加するに伴い, スウェル比も増加することが分かる。

(a) The initial shape

(b) The final shape

Fig.8 The final shapes of mesh ($L=8.0$ mm, $Q=0.22$ g/s)

Table 3 The swell ratio at $x=2.0$ mm

Flow rate Q (g/s)	Present	Ahmed et al. ⁽¹⁵⁾
0.22	1.46	1.46
0.32	1.49	1.46

Fig.9 Swell ratio as a function of distance from the die exit ($L=8.0$ mm)

6.2 スリット長がスウェルに与える影響 横軸にダイ出口からの距離を, 縦軸にスウェル比をとったグラフを図 10 に示す。スリット長がスウェルに与える影響を調べるため, 流量 Q を 0.22 g/s で一定とし, スリット長 L を 4.0 mm, 8.0 mm, ∞ と変化させた解析結果を示す。この図より, スリット長が短くなるに伴い, スウェルの効果が強く現れていることが分かる。縮小部を通過する粘弾性流体は伸長変形を受け, 強い応力の成長が起こるが, スリットに沿ってこの応力は緩和していく。しかし, スリット長が短いと, 十分に応力が緩和する前にダイ出口に到達してしまう。そのために強いスウェルが生じたと考えられる。

6.3 中心軸上における主応力差 図 11 に $L=8.0$ mm の場合の中心軸上における主応力差の分布を Ahmed らの実験結果⁽¹⁵⁾と共を示す。ここで, 主応力差 $\tau_1 - \tau_{II}$ は, 二次元直交座標系では, 応力の各成分を用いて次のように計算される。

$$\tau_1 - \tau_{II} = \sqrt{(\tau_{xx} - \tau_{yy})^2 + (2\tau_{xy})^2} \quad (14)$$

図 11 をみると, 本解析結果は実験結果と良好に一致しており, 本スキームが有効であることが確認される。また, この図より, 急縮小部に流入した粘弾性流体は流路の急縮小により伸長変形を受け, 法線応力差が増加している様子がわかる。縮小部を通過した粘弾性流体は, スリットに沿って応力の緩和現象により, 法線応力が急速に減少している。この応力の成長と緩和の現象は, 流量が増加するほど顕著に表れている。

Fig. 10 Swell ratio as a function of distance from die exit ($Q=0.22$ g/s)

Fig. 11 Principal stress difference along the center line

6.4 ダイ出口における第一法線応力分布 図 12 にスリット長を $L=8.0$ mm で一定とした場合のスリット部付近における第一法線応力差分布を示す。ダイスウェル現象は流路内において受ける変形により生じる張力がダイから流出する際に回復することにより生じると考えられる。そのため、変形による張力の強さの指標である第一法線応力差を調べることはダイスウェルの挙動を把握する上で重要である。ここで、応力差の等高線の間隔は 0.05 MPa である。図 12 をみると、コーナー近傍およびダイ出口において等主応力線が集中し、強い特異性を示していることが分かる。この応力の特異性は見かけのせん断速度が増加するほど顕著に表れている。この特異性は粘弾性流体の数値解析における数値的不安定性の原因となっている。ダイ出口における法線応力差の最大値は流量が $Q=0.22, 0.32$ g/s の順に $0.39, 0.45$ MPa である。また、平板中心近傍では、流線が等応力線と直交するため、流線に沿って強い張力の回復が生じている。そのため、中心軸上の応力分布はダイスウェル現象に深く関わっていると考えられる。図 12 を見ると、出口付近の平板中心近傍において流量の大きい $Q=0.32$ g/s の場合のほうが、流量の小さい $Q=0.22$ g/s の場合と比較して法線応力差の値および勾配が大きく、これが、流量が増加するほどダ

イスウェルが強くなる原因であると考えられる。

より詳細に中心軸上における出口近傍の第一応力差分布を検討するため、図 13 に横軸に x 軸上の位置を、縦軸に第一法線応力差を取った図を示す。この図を見ると、中心軸上において張力が急速に回復している様子が良く分かる。また、この傾向は流量が大きい $Q=0.32$ g/s の場合のほうがより顕著に表れていることも読み取れる。

(a) $Q=0.22$ g/s

(b) $Q=0.32$ g/s

Fig. 12 Contours of normal stress difference ($L=8.0$ mm)

Fig. 13 Normal stress difference along the center line near the die exit ($L=8.0$ mm)

図14に流量 Q を0.22 g/sで一定とし、スリット長 L を4.0, 8.0, ∞ mmと変化した第一法線応力差分布を示す。壁面近傍における第一法線応力差の最大値は三つのケースについて大きな相違が見られないが、等応力線と流線が直交し張力の回復に対する寄与の大きい中心軸近傍では、応力値、応力勾配ともに流路長が短くなるに伴い強くなっていることが分かる。

(a) $L=4.0$ mm (b) $L=8.0$ mm (c) $L=\infty$ Fig.14 Contours of principal stress difference ($Q=0.22$ g/s)

さらに詳細に中心軸上におけるダイス出口近傍の法線応力差分布を調べるため、図15に流量を一定とし、スリット長を変化させた場合のダイス出口近傍の法線応力差を示す。横軸は中心軸上の位置を、縦軸は第一法線応力差をそれぞれ示す。図15を見ると、スリット長が短くなるに伴い、出口近傍における応力および応力勾配が強くなっていることが分かる。これは、スリット長が短い場合は流路の急縮小に伴い発達した張力が十分に緩和すること無く出口に達し、張力の回復が生じるためと考えられる。スリット長が短い場合の強いスウェルはこの中心軸付近における張力の回復が原因であると考えられる。

Fig.15 Normal stress difference along the center line near the die exit ($Q=0.22$ g/s)

7. 結 言

本報では、前報で提案した構成方程式の解法に MUSCL 型 TVD を、運動方程式の解法に GSMAC-FEM をそれぞれ用いたスキームにより、多モード型 Larson モデルによる粘弾性流体のダイスウェル解析を行った。その結果、以下の知見を得た。

1. 筆者らが前報で提案したスキームは粘弾性流体のダイスウェル問題を安定に解析することができた。
2. 本解析によるスウェル比の値は他者の実験結果と良好に一致し本スキームが精度よくダイスウェルを捕らえられることが分かった。
3. 本解析結果による中心軸上の応力分布を他者の実験結果と比較することにより、本解析結果の有効性が確認された。
4. 流量およびスリット長がダイスウェルに与える影響を調べることができた。
5. ダイス出口の平板中心付近における強い張力の回復がスウェルに大きな影響を与えることが確認された。

参考文献

1. 棚橋・斎藤, 京都大学数理解析研究所講究録, **548**, (1985), 122.
 2. Van Leer, B., *J. Comput. Phys.*, **23**, (1977), 276.
 3. 藤枝・加藤・棚橋・大川, 機論, **63**-610, B, (1997), 1987.
 4. 藤枝・棚橋, 機論, **64**-620, B, (1998), 1041.
 5. Larson, R. G., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **13**, (1983) 279.
 6. Larson, R. G. and Valesano, V. A., *J. Rheology*, **30**, (1986) 1093.
 7. Doi, M. and Edwards, S., F., *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, **II**, **74**, (1978), 1789, 1802, 1818.
 8. 高橋・多久・升田, 日本レオロジー学会誌, **18**, (1990), 18.
 9. 高橋, 日本レオロジー学会誌, **16**, (1988), 53.
 10. 大槻・梶原・船津, 計算工学講演会論文集, **3**-2, (1998), 213.
 11. Wambecq, A., *Computing*, **20**, (1978), 333.
 12. 加藤・棚橋, 機論, B, **57**-540, (1991), 2640.
 13. 加藤・藤枝・棚橋, 機論, **61**-592, B (1995), 4305.
 14. 久野・里深・徳永, 機論, **58**-552, B (1992), 2632.
 15. Ahmed, A. et al., *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **59**, (1995) 129.
-