



Title	粘弾性流体の流れの数値計算に関する研究
Author(s)	藤田, 克志
Citation	大阪大学, 1998, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3144202
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

27448

粘弾性流体の流れの 数値計算に関する研究

平成 9 年 11 月

藤 田 克 志

粘弾性流体の流れの 数値計算に関する研究

平成 9 年 11 月

藤 田 克 志

目次

第1章 序 論	1
1.1 まえがき	1
1.2 従来の研究の概要	5
1.2.1 構成方程式に関する研究	5
1.2.2 粘弾性流体の特異流れに関する研究	14
1.3 本研究の目的と概要	27
1.3.1 本研究の目的	27
1.3.2 概 要	28
第2章 構成方程式による粘弾性流体の流れの数値計算法	30
2.1 緒 言	30
2.2 基礎式	33
2.3 離散化	35
2.4 構成方程式の実質微分項の取り扱い	38
2.4.1 CIP 法の原理	38
2.4.2 CIP 法の構成方程式への適用	40
2.5 境界条件	43
2.6 結 言	45
第3章 2次元急縮小流れの構成方程式を用いた数値解析	47
3.1 緒 言	47
3.2 可視化実験および粘性係数の測定	49
3.2.1 可視化実験装置	49
3.2.2 高分子溶液および粘性係数	49
3.3 計算領域、計算条件	50
3.4 特異流れの発生	51
3.4.1 可視化実験結果	51
3.4.2 Maxwell モデルによる計算結果	51
3.4.3 計算結果と実験結果の比較	52
3.4.4 流動曲線と対称軸上の伸長速度	53
3.5 Giesekus モデルによる検討	54
3.6 PTT モデルによる検討	56
3.6.1 モデル定数 ε の影響	56
3.6.2 モデル定数 ξ の影響	56
3.6.3 伸長粘度の影響	57

3.6.4 第2ニュートン粘度の影響	57
3.7 lip 渦の発生	58
3.8 結 言	59
第4章 後向きステップ流れの構成方程式を用いた数値解析	80
4.1 緒 言	80
4.2 流路形状および計算条件	81
4.3 ニュートン流体による実験結果との比較	81
4.4 Maxwell モデルによる結果	82
4.5 Denn モデルによる結果	84
4.6 結 言	86
第5章 球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の流れの数値計算法	96
5.1 緒 言	96
5.2 球・バネマクロモデル	99
5.3 球・バネマクロモデルの運動方程式	100
5.4 流体の運動方程式	102
5.5 無次元化	103
5.6 結 言	105
第6章 球・バネマクロモデルによる平行平板間のポアズイユ流れ	107
6.1 緒 言	107
6.2 2次元1方向流れの取り扱い	108
6.3 定常流れ	110
6.4 非ニュートン粘性	112
6.5 結 言	114
第7章 結 論	127
謝 辞	129
参 考 文 献	130

第1章

序 論

1.1 まえがき

高分子溶液や融液、繊維懸濁液に代表されるような粘弾性流体の流れに関する研究は、“変形と流動に関する科学”である「レオロジー」の学問分野に含まれる。この分野の歴史は古く、中川^[52]によれば1929年にアメリカのBinghamによって創設され、学問としての体系化が始まった。レオロジーの骨格は、変形する物体の力学の総称である弾性力学と粘性流体力学である。これらの力学は、二つの簡潔な線形法則、即ち弾性に関するフックの法則と粘性に関するニュートンの粘性法則に支配されている。また、この二つの法則は現象論的性格を帯びており、物質種の違いや分子構造は議論の表には現れてこない。しかし、レオロジーではフックの法則やニュートンの粘性法則に支配されない領域を取り扱う。そのため、レオロジーの立場は、化学や物理の分野を含み、どちらかというとも分子論的であり微視的であるといえる。

さらにレオロジーは、物理学の立場をとると物質の力学的性質に関する物性論であり、化学の立場からみると物質の力学的性質に関する理論化学、物理化学であり、材料力学、流体力学の立場をとると非フック弾性、塑性、非ニュートン粘性などの力学的性質に関する力学である。つまり、レオロジーという学問分野は、物理学、理論化学、物理化学、材料力学、流体力学、応用力学などの学問をはじめとして他の多くの学問の境界領域をなすものといえる。

従ってレオロジー関係の著書も多数ある。流体力学の立場から主なものを以下に示す。

富田幸雄『レオロジー』^[32]は、工業的思考方法である連続体力学の立場に立って非線形流体の力学に関する基礎と応用について述べている。レオロジーの発達と

その取り扱い、テンソル解析の解説、物体の変形と応力の関係、基礎方程式やレオロジー方程式の総説、物性値測定の例や実際の流れの例など、対象は幅広い。中川鶴太郎『レオロジー』^[52]は、レオロジー全般の体系を概観しているので、教科書、解説書として適している。弾性、粘性、粘弾性に加えて、結晶塑性、強度、接着などにも言及し、さらに、生物レオロジーと乱流の話も含んでいる。小川明『レオロジー概論』^[116]は、わかりやすい記述が多い、レオロジー全般の総合科学としての入門書である。最後の章に”感性のレオロジー”があるのがおもしろい。岡小天『バイオレオロジー』^[73]は、血液、血管に関するバイオレオロジーに焦点を絞って述べている。血液の粘度、変形態、電気的性質、血管のレオロジー、拍動流など詳しい記述が多い。種谷真一『やさしいレオロジー工学』^[112]は、数式をほとんど交えないやさしい入門書である。レオロジーの基本的な考え方、高分子、生体、粉体、食品のレオロジー、熱的方法によって粘性を求める方法について解説している。岡小天編『レオロジー入門』^[20]は、数式が全くなく、気楽に読める入門書である。ただし、内容はレオロジーの歴史に始まり、食品、生物のレオロジー、物性や工学の応用にも言及しており、意外に幅広い入門書となっている。

以上のように、レオロジーの分野は多岐に渡り、幅広い産業界の要請によって様々なことが調べられている。従って、粘弾性流体といえる液体も多種多様である。本研究でターゲットにしている高分子溶液、融液、繊維懸濁液をはじめとして、ペイント工業に関連するペイント、印刷インキ、粘土、食品工学関係では、パン、チョコレート、バター、チーズ、さらには医療工学に関連する血液や体液、近年その調査が盛んになってきた界面活性剤水溶液などが挙げられる。つまり、本研究の数値計算の方法は高分子工学や機械工学のみならず、他の分野へ展開する可能性を十分に含んでいるということがいえる。

このような粘弾性流体が流動するとき、ニュートン流体とは異なる粘弾性流体の流れ特有の挙動をすることが多い。そのような流れを特異流れというが、主なものを以下に挙げる^{[20],[32],[84]}。

1. **ワイセンベルグ効果** 円筒容器内の軸心に回転している棒を入れる。円筒容器内の液体は、ニュートン流体なら液面の中央近くがくぼみ、周辺が上昇するが、粘弾性流体の中には、中央付近が盛り上がり、液体が棒に巻き付いたような状態になるものがある。この現象をワイセンベルグ効果（法線応力効果）という。この現象は、円周方向に張力が働き、液体の各部分が順にその内側をしめつけ、軸に近いほど液体の圧力が高くなり表面が盛り上がる、と考えられている。

2. **バラス効果** 高分子溶液を細管から流出させると、流出直後に液体の直径が管径より太くなる現象をバラス効果という。この現象は今の所二つの説が有力である。ひとつは弾性流入効果である。これは、狭い管の中で半径方向に圧縮された高分子が、管から出るとこの半径方向の圧縮を支えていた管壁がなくなることによって開放され、バラス効果を生じるというものである。もうひとつは法線応力効果である。これは高分子液体が半径方向に速度勾配をもち管の軸方向に流れている。従って、張力は軸の方向に働く。これは逆に考えると軸の方向に対して半径方向に圧力が働くことになり、管を出た所で圧力が開放されバラス効果を生じる、というものである。
3. **サイフォン現象** ある種の粘弾性流体では、サイフォンで液を流出させてからサイフォンの管の入口を液面より少し持ち上げても依然として液が流出する現象がある。
4. **Toms 効果** ニュートン流体に微量な高分子溶液を混入することにより、乱流摩擦抵抗が著しく減少することが知られている。発見者にちなんで Toms 効果と呼ばれる。
5. **細管への押し出し流れによる2次流れ** 容器の中から細管を通して流体が流出するときニュートン流体は緩やかな曲線に沿ってスムーズに流出するが、粘弾性流体は細管に流入する前の壁近傍で再循環領域が形成される。この再循環領域は流量が増えるに従って不安定になる。

これらの特異流れについて、それがなぜ発生するのかというメカニズムが解明されているものは少ない。

高分子融液や溶液は、高分子科学の発達に伴いその工業的な多様性、重要性が高まってきている。とりわけ、工業的に直結することから、高粘度の融液を取り扱うことが多い。例えば、プラスチック樹脂の射出成形工程や紡糸加工工程において、広い容器（レザーバ）から細管に押し出されるとき、ある流量になると細管入口端で不安定な流動を起こす。この流れは、押し出し物表面の形状が不規則になり成型品にしわがよることの原因であるといわれている。これは融液損傷 (melt fracture) といわれ、製品の機械的性質、形状などが悪くなる。従ってある流量以下で生産を行う必要を迫られ、かなり生産制限を受ける。また、この不安定現象は高分子溶液でも見られる。

現代は新素材の時代、合成物質の時代といわれるように、産業界のさまざまなニーズに応じて数多くの高分子物質が考案されている。このような物質である融液、溶液、懸濁液が流動するときには、流れ場中において、流体の加速度による慣性力、

粘性による粘性力に加え、流体の弾性に起因する弾性力が作用し、その取り扱いが極めて困難なものとなる。また、このような流体の応力と変形速度の関係を表す構成方程式は、主として非定常粘弾性現象に関する実験結果との定量的一致を得ることが難しいため、一般的な形を得ていない。

本研究は、このような粘弾性流体の流れに対して二つの数値計算の方法を試みる。一つはマクロ的に流体を取り扱う従来の構成方程式に対して双曲形方程式の数値解法を適用する方法、もう一つは、どちらかという分子論的な立場を取る球・バネマクロモデルによって直接流れ場を調べる方法である。前者では CIP 法を構成方程式の時間進行に適用することによって急縮小流れを計算し、特異流れの発生について調べた。さらに Lax 法を構成方程式の時間進行に適用した方法によって後向きステップ流れを計算し、再循環領域の挙動について調べた。また、後者では平行平板間ポアズイユ流れについて計算し、非ニュートン粘性 (shear thinning 性) のメカニズムについて考察を加えた。

1.2 従来の研究の概要

粘弾性流体に関する研究は、

1. 粘弾性流体の変形速度と応力の関係を記述する構成方程式の開発と、実験と解析を通しての検証。
2. 粘弾性流体による流れの特異現象に関する実験および数値計算。

に大きく分けることが出来る。本節では、構成方程式に関する研究と粘弾性流体の各種流れの研究について以下に概要をまとめる。

1.2.1 構成方程式に関する研究

流体の変形速度と応力の関係を記述した構成方程式は、(1) 法線応力効果、(2) 非ニュートン粘性、(3) 粘弾性効果（緩和現象、記憶現象、応力成長などの非定常粘弾性現象）などを説明する必要がある^[32]。そのため、研究の範囲也多岐にわたり、解説も多い。

高橋は構成方程式について一連の解説を行っている^{[30],[31],[98],[135]}。構成方程式の分類、非線形現象、あるいは各構成方程式の成り立ちを解説している。特に、BKZ モデル^[10]、Leonov モデル^[37]、Giesekus モデル^[64]、Larson モデル^{[68],[75]} についてその特徴や問題点、具体的な適用性などについて調べている。以下にまとめる。積分形構成方程式では BKZ モデルに優位性があるが、途中で変形の向きが変わるような変形様式には不適である。シミュレーションに適用しやすいのは Leonov モデルである。このモデルは定常せん断流動における粘弾性関数はよく表すが、階段状変形に対する応力緩和と定常流停止後の応力緩和を正確に記述できない。また、Giesekus モデルも応力緩和を記述できない。Larson モデルは応力緩和をよく記述するが、粘性係数と第一応力差係数に対し強すぎるせん断速度依存性を与える。また、一軸伸長流動は上のどのモデルもまずまず記述するが、Giesekus モデルがやや良い。二軸伸長流動の適用性はどのモデルもあまり良くない。また升田は、分子特性または分子構造とレオロジー的性質との関係を実験的に明らかにしようとする立場からのまとめを行っている^[76]。線形粘弾性と非ニュートン流動に限って、分子量、濃度、分子量分布、枝分かれなどのレオロジー的性質に及ぼす影響を調べている。また、尾崎は非線形粘弾性の研究について総説を行っている^[74]。定常ずり流動、一時的網目理論、非定常レオロジー、Doi-Edwards 理論について解説している。

ここでは、現在有効であると思われるモデルを挙げ、そのモデルを検討した研究について述べる。

構成方程式の導出過程での分類を行うと[98],[135]、

1. 連続体力学などの現象論的な立場のモデル

- (a) 3次元 Maxwell 要素を拡張したモデル
- (b) Jeffreys モデルを拡張したモデル
- (c) 粘性流体を拡張したモデル
- (d) 弾性論を拡張したモデル

2. 高分子鎖の動力学（統計力学）などの分子論的な立場のモデル

- (a) Rouse-Zimm の孤立鎖の理論に関連するモデル
- (b) Lodge、山本らの網目理論に関連するモデル
- (c) 管模型理論（DE 理論）に関連するモデル

となる。以下にそれぞれのモデルについて概要を述べる。

(a) 3次元 Maxwell 要素を拡張したモデル

Maxwell モデル Maxwell モデルは微分型の基礎モデルとして重要である。まず、弾性率 G を持つバネと粘度 η を持つダッシュ・ポットを直列に組み合わせた Maxwell 要素^[32] を考える。この要素の応力 σ とひずみ速度 $\dot{\gamma}$ の関係は次のように書ける。

$$\sigma + \lambda \frac{d\sigma}{dt} = \eta \dot{\gamma} \quad (1.1)$$

$\lambda (= \eta/G)$ は緩和時間である。次に、一次元の式 (1.1) を三次元に拡張するため、 $d/dt \rightarrow \nabla$, $\sigma \rightarrow \sigma$, $\dot{\gamma} \rightarrow e$ と変換する。

$$\nabla \sigma + \lambda \sigma = 2\eta e \quad (1.2)$$

ここで、 ∇ は upper-convected 時間微分¹である。この Maxwell モデルは非ニュートン粘性 (shear thinning 性) は示さないが、法線応力効果 (stretch thickening 性) を示す。

¹時間微分について^[98] 物体と共に並進し、剛体的に回転し、変形する reference frame には、(a) 並進だけを行う、(b) 並進・回転を行う、(c) 並進・回転・変形を行う、三つがある。空間に固定した座標系に変換する前にこのような reference frame の違いによって、変換後には次の三種の時間微分量が生じる。

(a) 物質微分

$$\frac{D\sigma}{Dt} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + (v \cdot \nabla) \sigma \quad (1.3)$$

(b) Jaumann 微分

$$\overset{\circ}{\sigma} = \frac{D\sigma}{Dt} - \omega \cdot \sigma + \sigma \cdot \omega \quad (1.4)$$

(c) 対流微分^[2]

$$\overline{\nabla} \sigma = \overset{\circ}{\sigma} - e \cdot \sigma - \sigma \cdot e \quad (1.5)$$

White-Metzner モデル^[11] White-Metzner モデルは Maxwell モデルを拡張したモデルで、せん断応力 τ と粘度 η がひずみ速度テンソル e の不変量の関数としたものである。この White-Metzner モデルは法線応力効果 (stretch thickening 性) と非ニュートン粘性 (shear thinning 性) を示すので、工業的にも重要で複雑な流れを解析するのに向いている。ただし、第2法線応力差が零である。1963年に提案した White and Metzner の論文^[11]では、円管内流れ、噴流、ヘリカルな流れなどを解析的に解いている。また、このモデルは、本質的には後述する Coleman-Noll 2次流体モデル^[9]と同様である。

Denn モデル^[15] Denn モデルは White-Metzner モデルを変形したもので、White-Metzner モデルよりさらに扱いやすく工業的に複雑である流れ場を使用するのに適していると思われる。また、このモデルは非ニュートン粘性、法線応力効果を表す。Denn は 1967 年にはこのモデルで、境界層方程式を導出している。

(b) Jeffreys モデルを拡張したモデル

Jeffreys モデル Maxwell モデルは二要素モデルの基本の一つであるが、次に2つのバネと一つのダッシュ・ポットを組み合わせた三要素モデルを考える。三要素モデルの Jeffreys モデルの構成方程式の一般形は、

$$\sigma + \lambda_1 \frac{d\sigma}{dt} = \eta \left(\dot{\gamma} + \lambda_2 \frac{d\dot{\gamma}}{dt} \right) \quad (1.6)$$

で与えられる。ここで、 λ_1 は緩和時間、 λ_2 は遅延時間、 η は粘性係数である。

Oldroyd 3 定数モデル^[2] Oldroyd モデルは法線応力効果や非ニュートン粘性などを定性的に表すことが出来るモデルである^[84]。1950年に Oldroyd は Oldroyd 3 定数モデル (A モデル、B モデル) を提案した^[2]。このモデルは前述した対流微分 (Oldroyd 微分) を導入しているところに特徴がある。Oldroyd は回転する二つの円柱の間に流れについて検討している。また、円管内の流れと円すい円盤間の流れについても基礎式を導入している^[7]。

ここで、 e はひずみ速度テンソル、 ω は回転速度テンソルを表す。上式 (1.3) ~ (1.5) は、次のように考えられる^[98]。今観測者は物体中の同一の実質部分に着目して σ の時間変化を見んとする。この時、観測者は空間の位置 x における σ の時間的変化 $\partial\sigma/\partial t$ だけでなく、(a) 着目した質点が空間中を速度 v で運動しているための見かけの σ の変化 ($v \cdot \nabla \sigma$) も、(b) 物体の回転による見かけの σ の変化 ($-\omega \cdot \sigma + \sigma \cdot \omega$) も、(c) 物体の純粋な変形による σ の変化 ($-e \cdot \sigma - \sigma \cdot e$) も、観測することになる。この三種の中で重要な導関数は対流微分 $\delta\sigma/\delta t$ である。この対流微分は、物体座標系における表現から空間座標系における表現へと変換を行ったときの導関数である。従って式 (1.2) 中の $\delta/\delta t$ は対流微分 (convected derivate) を表す。Maxwell モデルは通常、時間微分にはこの対流微分が使われている。しかし、式 (1.2) 中の $\delta/\delta t$ を式 (1.4) の Jaumann 微分で置き換えることもある。

(c) 粘性流体を拡張したモデル

Coleman-Noll 2次流体 Coleman-Noll 2次流体モデルは^[9]、純粘性流体から拡張したモデルである。このモデルは比較的簡単で工業的解析に適しており、定常ずり流動において法線応力効果を求めることができるが、非ニュートン粘性は示さない。

(d) 弾性論を拡張したモデル

BKZ モデル 弾性論を拡張したモデルに BKZ モデル^[10]がある。1963年に提案された積分型方程式の代表的なモデルで、古さを感じさせない。この BKZ モデルはひずみエネルギー関数とひずみテンソルからなる非圧縮性の等方弾性体の応力の式を、現時刻 t と過去の時刻 t' を固定したとき、 t' について積分して応力テンソルを得るモデルである。最も簡単で適用範囲の広いモデルであると高橋は高い評価をしている^[135]。また高橋らは、ポリスチレンによる実験と BKZ 方程式のダンピング関数を比較した^[156]。実験はせん断流と二軸伸長流の応力緩和について行った。ダンピング関数を、二軸の応力成長実験に使用する Wagner-Demarmels 法で求めたダンピング関数と比較するとよく一致することを示した。

Leonov モデル^[37] 弾性論を拡張したモデルを 1976 年に Leonov が提案している^[37]。このモデルは、外部ひずみテンソルを回復性ひずみテンソルで置き換える拡張方法を取っている。応力テンソルとひずみ速度テンソルを、可逆的(平衡)部分と非可逆的(散逸的、非平衡)部分とに分ける。さらにひずみテンソルについても、フィンガーとコーシーの可逆的(回復性ひずみ)部分を考え、フィンガーのひずみテンソルを弾性体の取り扱いと同様に求める。コーシーの部分についても同様にひずみエネルギー関数を使って求める。この Leonov の方法は、エネルギー蓄積機構と散逸機構を考えたモデルであるということができる。また、特徴のひとつとして、粘度のせん断速度依存性を調節するような非線形パラメータがないことが挙げられる。高橋はこの Leonov モデルがシミュレーションに適用するのによいとしている^[98]。また、この Leonov モデルは射出成形、ブロー成形などに採用されたことを指摘している^[111]。さらに、高橋らは、ポリスチレン濃厚溶液と溶融物、低密度ポリエチレン溶融物について、定常せん断流と流動停止後の応力緩和について実験を行い、Leonov モデルからの計算値と比較を行った^[111]。Leonov モデルの一般式から単純せん断流に対する微分方程式を導出し、角振動数の広い範囲で、貯蔵剛性率、損失剛性率の実験値と計算値が一致することを示した。さらに、緩和時間分布が決

定されると定常せん断流に対して適用でき、応力の予測が可能であることを示した。また、定常流停止後の応力緩和に対しては、応力を過小に予測すること、大変形応力緩和に対しては適用性がよくない、という Leonov モデルの限界も示している。

(e) Rouse-Zimm の孤立鎖の理論に関連するモデル

次に、高分子鎖の動力学などの分子論的な立場のモデルについて述べる。まず、孤立鎖の理論から出現した球・バネモデルについて概説する。球・バネモデルについては、Bird らの著書^[87]と Öttinger の著書^[155]がある。

球・バネモデルの研究は大きく三つの仕事に分けられる。1. 濃度平均流体力学的相互作用と排除体積を考慮した、主として 1960 年代に行われた Fixman の仕事。2. 非線形バネの FENE ダンベルモデルへと展開していく 1970 年代から 1980 年代にかけての Bird を中心とした仕事。3. 濃度平均流体力学的相互作用と非線形バネを考慮した、1980 年代に行われた Öttinger を中心とした仕事。

これらの仕事の基礎となっているのが、1953 年に提案された Rouse モデル^[3]と 1956 年に提案された Zimm モデル^[5]である。またこれらのモデル化は大部分が、高分子鎖一本を一つのモデルに置き換えるという考え方のものである。

Rouse モデル Rouse は、線形粘弾性の性質の理論の基礎を与えた^[3]。submolecule の概念を使い、高分子鎖長は、端末間距離が Gaussian 確率分布で近似されとした。バネにはフックの法則を使い、モデルの絡み合いはなく、球の周りは Stokes 則を適用する。さらに、球とバネを多数組み合わせた chain モデルとした。しかし、この Rouse モデルでは希薄溶液中の高分子の運動を正しく記述できない。

Zimm モデル そこで Zimm は Rouse の理論を基に流体力学的相互作用を取り入れた Zimm モデルを提案した^[5]。流体力学的相互作用とは、ひとつの球が動くとその回りに溶媒の動きが発生し、その流れによって他の球が動くという溶媒の流れを介した相互作用である。Zimm モデルは、三次元の Chain 問題として取り扱うためにブラウン運動を考慮し、流体力学的相互作用は Oseen 近似を使用している preaveraging 近似 (Kirkwood and Riseman 近似^[1]) で導かれる。緩和時間のスペクトルは従来の Rouse モデルと同じになり、その最大値は低振動数領域であった。また、せん断流れにおいて、粘性係数が分子量に依存することを再現した。小さい振動数では実験結果と一致することを示した。しかし、粘性係数がせん断速度に依存しないこと、第 2 法線応力差係数が求められないことが欠点である。

Fixman のモデル 1965 年に高分子鎖の力学的理論である Fixman 理論が発表された^[12]。Oseen テンソル近似を使った流体力学的相互作用と排除体積を考慮し、

バネポテンシャルと排除体積ポテンシャルから内部ポテンシャルを求め、モデルの配向分布関数から拡散方程式を定義した。高分子を剛体球と見なすと、球の中心とするある半径以内にその他の球が入ることが出来ないとき、そのときの領域の体積を排除体積という。Pyun and Fixman はこの Fixman 理論を基に本質的粘度を計算した^[13]。Zimm の理論などとは 1% 以内の誤差である。この論文では、流体力学的相互作用の小さな変動を仮定している。これで、この理論による高分子鎖力学を完全に確立したとしている。

FENE モデル Warner は 1972 年に FENE(Finitely Extensible Nonlinear Elastic) ダンベルモデルを提案し、拡散方程式を定式化している^[27]。非線形バネとして逆 Langevin バネモデル、流体力学的相互作用は、Oseen テンソル近似を使用する。せん断流に対して、粘度と法線応力差係数を求め、振動せん断流に対しても定式化している。Christiansen and Bird は FENE ダンベルモデルによる計算結果と実験結果との比較を、粘度と複素粘度について行った^[38]。

FENE-P モデル さらに Bird ら は濃厚系への展開を考え、非線形粘弾性現象を記述するために、FENE-P モデルを 1980 年に提案した^[59]。この論文では、流体力学的相互作用は Oseen テンソル近似を使い、非線形バネとして、逆 Langevin 関数を使用しているが、これは Warner^[27] の方法 (FENE モデル) と同様である。FENE-P モデルは、非線形バネを使用してバネ力を求める際に、球の位置の差と平衡長さの比を平均した値を使用するところが特徴である。粘性係数は shear-thinning 性を示し、伸長粘度は stretch-thickening 性を示す。また、複素粘度も実験値とよく一致することを示した。

FENE-PM モデル 1991 年に Wedgewood らは FENE-PM モデルを提案している^[101]。Bird らの FENE-P モデル^[59] は、緩和時間の幅広い分布を表すことが出来ない、応力テンソルを計算するときの方程式の組み合わせが多い、という欠点がある。そこで、この FENE-PM モデルは、モデルの球の座標差の算術平均を取る方法であり、FENE-P モデルよりも方程式の組み合わせが少なくなる。さらにより長い鎖に対しても効率よく計算が出来る。せん断流と伸長流に対しては、FENE-P モデルと定性的に同様の結果を得ている。

Öttinger のモデル 1987 年に Öttinger は Zimm モデルの一般化を行っている。まず、Rouse-Zimm モデルに対して、流体力学的相互作用に平均 Oseen テンソルを適用し(濃度平均化法)、配向分布関数の拡散方程式を定義した^[90]。応力テンソルに対するレオロジー方程式から、せん断流れに対する、粘性係数、第一法線応力差係数、第二法線応力差係数をそれぞれ定義した。また、せん断流れにおける長

鎖の取り扱いについて説明している。また、50 個の球で計算結果がほぼ一定になることを示した。さらに Öttinger は Zimm モデルに対する拡散性を見直しを行った^[91]。球に対する摩擦係数をブラウン力から求め、流体力学的相互作用に対して Oseen-Burgers テンソル(等方性つりあい平均)を使用した。配向分布関数に対する拡散方程式を定義した。また Öttinger は上のモデルに非線形バネを組み合わせた^[92]。即ち、球・バネの鎖の非線形バネ力と濃度平均流体力学的相互作用を適用し、配向分布関数に対する拡散方程式を定義した。さらに、この方法を一般化し、長鎖への適用も可能にした。また、せん断振動流から物性値を求めている。Wedgewood and Öttinger は定常せん断流、スタートアップ流れ、せん断流を止める流れ、ステップせん断流を与えて応力緩和を調べた^[99]。定常せん断流では、球を 15 個連結した場合に、shear-thinning 性が現れる場合があり、それはバネの強さで大きく変化する。また、流体力学的相互作用の強さにも依存する。従来のモデルと比較してほぼ満足行く結果を得ている。

(f) Lodge、山本らの網目理論に関連するモデル

1956 年に Yamamoto は網目理論を提案し、一般化を行っている^[4]。この理論は、ゴムのようなネットワークの応力-変形-時間の関係と消散のエネルギーで構造を調べるものである。このモデルの粘性係数は shear-thinning 性を示し、伸長粘度は伸長速度の増加に従って増加し、最大値に達した後緩やかに減少する^[6]。さらにワイゼンベルグ効果についても調べた例がある^[8]。

1968 年に Lodge が濃厚系に対して網目理論から構成方程式を提案している^[19]。このモデルは次のような考え方によって導かれている。高分子濃厚系中では、高分子鎖が複雑に絡み合っており、この絡み合いによって一時的網目構造ができるものとする。鎖の各部分は網目に加わったり、網目から離脱したりすると考える。さらに、網目に加わった鎖は、その時点では変形を受けておらず応力に寄与しないが、変形を受けた後は網目構造を離脱するまで応力の変形に寄与する。絡み合い点は、物体の巨視的な変形に際して、アフィン変形で移動すると考える。従って、ひずみは応力が生成された時刻によって異なってくる。また、応力のずり速度依存性はないと考える。

Johnson-Segalman モデル 1977 年に Johnson and Segalman は非アフィン変形を許す粘弾性体の理論を使って網目理論の一種である JS モデルを提案した^[41]。ひとつのパラメータで大きな変形を表す分子論により構成方程式を一般化した。非線形粘弾性現象を説明するために、 $\delta/\delta t$ を複雑な時間微分で置き換えた。この理論

論を単純せん断流れに適用し、第二法線応力差係数を負で与え、融液に対してよい一致を示すことを明らかにした。

ALMT モデル 1976 年に Acierno らは Lodge の網目理論からなる ALMT モデルを提案した^{[33],[34]}。このモデルは粘性係数と緩和時間が、ひずみ速度テンソルあるいは extra stress テンソル(異方性応力テンソル)の不変量に依存すると仮定したモデルである。ポリスチレンの実験値と比較をしているが、緩和時間スペクトルは緩和時間が 10^2 で一致したが、応力と伸長応力はあまり一致していない。

PTT モデル 1977 年に Phan-Thien and Tanner は網目理論による PTT モデルの提案を行った^[46]。このモデルは時間微分を upper-convected 時間微分と lower convected 時間微分を組み合わせたものにし、粘性係数や応力がひずみ速度テンソルや応力テンソルの不変量に依存すると仮定したモデルである。高分子溶液に対して、ネットワーク理論の Lodge・山本タイプから構成方程式を導出している。ネットワークの継ぎ目は、連続体の点が厳密に動くことを仮定しないが、「効果的なスリップ」を許す。接続の生成と破壊の速度は、ネットワークの瞬時の弾性エネルギーと同等に、簡単な法則の中でのネットワーク要素の平均伸びに依存することを仮定している。PTT モデルの構成方程式は、

$$\sigma + \lambda \overset{\square}{\sigma} + \frac{\varepsilon}{G} \text{tr}(\sigma) = 2\eta e \quad (1.7)$$

$$\overset{\square}{\sigma} = \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \overset{\circ}{\sigma} + \frac{\xi}{2} \overset{\Delta}{\sigma} \quad (1.8)$$

で与えられる。ここで、反変成分と共変成分の対流微分 (Oldroyd 微分) と Jaumann 微分との関係は、

$$\overset{\nabla}{\sigma} = \overset{\circ}{\sigma} - e \cdot \sigma - \sigma \cdot e \quad (1.9)$$

$$\overset{\Delta}{\sigma} = \overset{\circ}{\sigma} + e \cdot \sigma + \sigma \cdot e \quad (1.10)$$

となる。ここで、 ξ, ε は無次元パラメータである。また、低密度のポリスチレン(融液、 150°C)の実験値と比較している^[53]。スタートアップフロー、伸長流についてはモデルの予測は良い一致を示す。

(g) 管模型理論 (DE 理論) に関連するモデル

1978 年に Doi and Edwards によって、管模型理論の Doi-Edwards 理論が提案された^{[49],[50],[51]}。この理論は、高分子濃厚系の粘弾性の発現機構のアイデアをもつ網目理論と分子運動のメカニズムを管模型のアイデアで取り扱う de Gennes の理論を組み合わせたものである^[71]。

この DE 理論の考え方の基になった de Gennes 理論は、1971 年に提案されている^[21]。この理論は、高分子の絡み合いを管による束縛で置き換えるアイデアである。即ち、高分子は網目を横切っては動けない。その運動はある管状の領域に束縛されると考えるものである。また、de Gennes は、de Gennes 理論を使って高分子溶液について次のように考えた^[28]。高分子溶液のコイルは速度勾配が臨界値になったとき、突然巻き戻し、流体力学的相互作用は、コイルのひっぱりによって元に戻る。速度場は、連続的なあるいは不連続的なものとなり、このコイルの伸び縮み、ひっぱりの変化に依存する。ヒステリシスを観察すると、緩和時間を求めることが出来る。単純せん断流れに対してはシャープな変化を与えない、ことなどを明らかにした。

Doi-Edwards (DE) 理論について述べる。基本となる高分子鎖は、ステップ長さと拡散定数で性格づけられると考える。この質量の中心の拡散係数と緩和時間は、de Gennes 理論によって分子量と濃度に強く依存することが予想できる。また、Brownian 運動は Langevin 方程式であらわされる。基本の鎖の点の二乗平均と接線ベクトルの時間相関関数は、Rouse 鎖におけるものと同じとなる。力学的組織のファクターは、Rouse 鎖のものとは質が異なる。Doi and Edwards は、まず以上のような考えを示した^[49]。

さらに、管模型モデルをすべり環ネットワークモデルに置き換えることを示した^[50]。すべり環ネットワークモデルとは、絡まった高分子はその中をダイナミックに動くことはなく管状をなして高分子が動くことを考える。その管を固定された slip link (止め環) を通るような一本の紐として表す。このモデル化が DE 理論のポイントである。このモデルは、単純せん断流下での応力緩和に対して、ポリスチレン溶液の実験結果と比較すると良い一致を得る。さらに、DE 理論を基礎にして BKZ 型の構成方程式を導いた^[51]。この構成方程式は、分子量と濃度のレオロジーパラメータの依存が記憶関数に対して陽的に与えられ、非線形粘弾性を表す。

また、尾崎は分子量が狭い濃厚ポリスチレン溶液について、DE 理論の検討を行っている^[63]。尾崎は、階段ずり変形後の応力緩和は、特性時定数よりも大きい時間では DE 理論は定量的に正しい。また、逆向き二段階変形後の応力緩和をよく表していることを示した。しかし、高ひずみ速度下でのオーバーシュートを表すことが出来ないことも示した。この重要な DE 理論については尾崎^[74]、土井^[71]、高橋^[98]などいくつか詳細な解説がある。

Larson モデル DE 理論が基礎になっている Larson モデルは 1983 年に提案された^{[68],[75]}。Larson は高分子鎖の contraction の問題に着目した。DE 理論では、contraction によって高分子鎖が平衡長まで戻ると仮定したが、Larson は contraction

が阻害されるとし、contraction の寄与するパラメータを導入した。これは、着目した鎖の上で、相隣る絡み合い点に相当する 2 点を結ぶベクトルを r とする。 r の時間変化率 $\dot{r}$ は、アフィン変形の時の値よりも contraction によって小さくなることを示す。Larson は preaveraging の近似を使って、拡散分布関数の方程式から微分型の構成方程式を得た。ただし、第 2 法線応力差係数は零となる。Larson の構成方程式は、

$$\sigma + \lambda \overset{\nabla}{\sigma} + \frac{2\xi\lambda}{3G} \text{tr}(e \cdot \sigma)(\sigma + GI) = 2\eta e \quad (1.11)$$

で与えられる。ここで、 ξ は無次元パラメータ、 I は単位行列であり、 ∇ は upper-convected 時間微分である。

Giesekus モデル Giesekus は高分子鎖の運動の著しい異方性について注目し、高分子鎖と媒体の間に働く摩擦の異方性について調べた^[64]。変形の履歴に依存する配向と相対的な運動は、配向テンソルの関数である。最も単純な場合を考えると、ひとつの配向テンソルが、応力と流動テンソルに依存するというモデルで与えられる。配向テンソルの応力と流動テンソルの相対移動速度が内部ひずみと線形に依存するという仮定によってモデルは確立された。さらに、定常と瞬時の伸長流とせん断流を陽的に与え、粘性係数の shear-thinning 性を示し、第 1、第 2 法線応力差を与え、有限になる伸長粘度を与える。また、応力緩和とスタートアップカーブを予測でき、せん断流ではストレスオーバーシュートを予測することを示した。Giesekus はさらに、単一モードから多モードへの展開も行っている^[65]。Giesekus の構成方程式は、

$$\sigma + \lambda \overset{\nabla}{\sigma} + \frac{\alpha}{G} \sigma^2 = 2G\eta e \quad (1.12)$$

で与えられる。ここで、非線形性を表すパラメータ α が 0 のとき式 (1.2) に一致する。また、 ∇ は upper-convected 時間微分である。

1.2.2 粘弾性流体の特異流れに関する研究

粘弾性流体の種々の流れが研究されている。高分子融液や濃厚系高分子溶液を扱う場合には、クリープ流れあるいはレイノルズ数の小さな範囲に限られるが、希薄高分子溶液における乱流の抵抗減少を調べる場合にはレイノルズ数は数万のオーダーになる。急縮小流れをはじめとする流路内流れ、球や円柱などの物体周りの流れ、血管をターゲットにした曲がり管や分岐管の流れ、乱流に微量の高分子を混入させた場合の流れ、など取り扱う流れは多岐に渡る。

粘弾性流体の各種の特異流れの研究概要についてまとめる。

1. 急縮小流れは実験・計算の両面から各種の方法によって多数の報告がなされている流れ場である^{[88],[94]}。急縮小部上流側に再循環領域が発生する流れについて詳しく調べられている。再循環領域の大きさは流量の増加に伴って成長し、非対称な流れになり、非定常な流れになる^[57]。また、ある条件では角部に lip 渦が発生することが報告されている^[88]。慣性力の影響の大きい範囲では、主流の流れが外側に開く流れ (divergence flow) が発生することが実験によって調べられている^{[47],[48],[54]}。計算でこのような流れを捉えた結果はまだないと思われる。
2. 拡大流れの研究はあまり多くない。再循環領域の大きさが慣性力、弾性力に依存することが示されている^[42]。
3. 曲がり管内流れは、管摩擦係数に対する実験式の提案、二次流れの流れパターンに関する研究が中心に行われている。二次流れは遠心力の影響によって発生し、ニュートン流体よりも強い二次流れとなる。
4. L ベンドの流れは、上流管と下流管の幅の比を大きくすると角部手前に逆流域が発生することが報告されている^[105]。
5. Toms 効果と呼ばれる乱流摩擦抵抗減少は主として実験によって調べられている。微量な高分子を混入させるだけで、壁面の平均応力および平均速度勾配は 20~30 % 程度低くなり、最大 65 % に減少する^[24]。また、粘性底層の厚さはニュートン流体よりわずかに厚くなる^[26]。さらに、希薄高分子溶液は低速ストリークの組織を抑制することによって乱流エネルギーの生成を減少させることを示した^[23]。
6. 流体中を運動する球の抵抗問題は、流体力学の基本問題のひとつである。ニュートン流体に比べて、粘弾性流体中を落下する球の速度は増加し、抵抗が減少する。このような抵抗減少が発生するのはレイノルズ数の高い範囲であり、実験および計算が行われている。抵抗係数は PEO 濃度 0.075% で最大 45% になり^[14]、球の後流幅は小さくなり離点を遅らせる^[16]。また、抵抗係数はレイノルズ数とワイセンベルグ数に依存する^[25]。
7. 円柱まわりの流れは主として円柱を落下させる実験によって調べられている。高分子溶液の濃度が高くなると水平に落下する円柱の向きが垂直に徐々に変化し、抵抗減少する^{[81],[122]}。また、円柱の落下姿勢は円柱の密度や形状に依存する^[133]。

8. 樹脂の射出成形について簡単に述べる^[149]。射出成形 CAE は、樹脂射出成形分野において製品および金型の設計段階でコンピュータ・シミュレーションを行うことにより、不具合を予測し、対策を講じ、形状や成形条件の最適化を図ろうとする技術で有用性を認められている。1970 年代のはじめは、解析は一次元流れが主として行われてきたが、二次元の複雑キャビティ形状でメルトフロントの進展を含む樹脂流動の解析に FAN(Flow Analysis Network) 法^[29]、有限要素法^[149]、コントロール・ボリューム (有限体積法)^[85]の適用で実用的な解析が可能になったといえる。また、この射出成形の計算は、狭い隙間の間の流れといわゆるメルトフロントといわれる自由表面を持つ流れとの組み合わせとなる^[110]。

ここでは、数値計算についての主な研究、急縮小流れ、複雑流路などの流れにおける粘弾性流体の流れの主な研究について述べる。

(a) 計算方法について

数値的研究方法は、

1. 有限要素法 (計算例が一番多い)
2. 差分法
3. 有限体積法
4. 摂動法による解析

がある。この他、数値的研究の中で、有限要素法と有限体積法を組み合わせた方法や、有限要素法と差分法を組み合わせた方法も行われている。この他、スペクトル法による計算も行われている。

これらの数値計算の研究は、弾性力の影響の強い範囲でも計算可能な高精度の方法を開発することが主として行われている。ここでは、流れ場を直接解く数値計算方法について簡単にまとめる。

有限要素法による計算例が最も多い。まず、1977 年に Kawahara and Takeuchi が、混合型有限要素法を提案した^[43]。これが有限要素法による粘弾性流体の数値計算の最初であると思われる。混合型有限要素法は、運動方程式と連続の式、構成方程式を組み合わせ、Galerkin 型の重みつき残差法を使って離散化する方法である。離散化は、定常流に対してはニュートン・ラプソン法で、非定常流に対しては摂動法で解く。さらに、Crochet and Bezy は、混合型有限要素法^[43] を、二つの緩和時間で流体の性

質をあらわし、応力に対する二つの構成方程式と連続の式および運動方程式を連立させて解くように拡張した^[55]。1982年に Mendelson らは、Galerkin 有限要素法において、異方性応力テンソルを粘性部分と弾性部分とに分離して解く EVSS(elastic viscous split stress)-FEM を提案した^[66]。流れ場は二次元急縮小 4:1 のクリープ流れで、モデルは Maxwell モデルと二次流体モデルで、デボラ数² が 2.3 までを計算している。1987年に Marchal and Crochet は流線上流化法 (streamline-upwind : SU 法) と subelements を使った補間法を組み合わせる方法と SU 法に Petrov-Galerkin 法を組み合わせる方法を提案した^[89]。SU 法 + subelements では、急縮小流れに対してデボラ数 = 20 までを計算し、再循環領域はデボラ数の増加に従って大きくなることを示した。これが流線上流化法と補間法を組み合わせる最初の試みであり、それまでよりもより強い弾性の範囲における計算を可能にした。桑野らは、流線上流型有限要素法 (SU 法) を使って、Oldroyd-B モデルおよび Giesekus モデルについて 4:1 の縮小流れに対して計算を行った^[128]。Oldroyd-B モデルではワイセンベルグ数 = 10.6、Giesekus モデルではワイセンベルグ数 = 100(限界がない) まで計算が可能であることを示した。

1988年に King らは、運動方程式の性質が楕円型であることを利用して従来の方程式を書き替えた EEME(Explicitly Elliptic Momentum Equation : 陽的楕円型運動量方程式) 法で計算する方法を提案し^[97]、計算できるデボラ数の範囲を高くした。構成方程式は流線上流化 Petrov-Galerkin (SUPG) 法と人工粘性項 (AD 法) を使って離散化し、補間法の QLL 法と QQL 法について調べた。従来法では、円柱問題において結果に振動が見られるが、QQL/SUPG では振動を抑えることができ、精度も良いことを示した。1990年に Rajagoplan らは、運動方程式と連続の式は楕円型、構成方程式は双曲型になるので、運動方程式と連続の式は Galerkin 有限要素法で構成方程式は流線上流化 Petrov-Galerkin 法で解く方法を提案した^[109]。ただし、支配方程式は次の 3 つのタイプを試した。運動方程式の粘性項に粘性楕円オペレータ β を導入した粘性法、応力のポアソン方程式を解く EEME 法、異方性応力テンソルを粘性部分と弾性部分に分離して解く EVSS 法。Fortin and Fortin は、重み付き上流化有限要素法によって Lesaint-Raviart 法 (メッシュにおける各物理量の置き方を変えている) を適用する方法を提案した^[106]。1991年に Rao and Finlayson は King らの EEME 法^[97]を混合型 Galerkin 有限要素法に適用し、緩和法に GMRES 法を使った^[117]。EEME の式は、フィンガーひずみテンソルに対する楕円型方程式となり、ここから応力テンソルを導く。また従来の CME (Cauchy 型の運動量方程式) 法およ

²デボラ数 = $(\lambda/t_0)(U/L) = (\text{流体の見かけの緩和時間})/(\text{流れの変化を示す代表時間})$ ^[32]

び補間法として QQL 法と QLL 法の比較を行った。QQL/EEME は QQL/CME より改良されるが、QLL/EEME は QLL/CME より改良されないことを示した。Rao and Finlayson は EEME 法^[117] と SU 法を組み合わせ、三角形要素と四角形要素の有限要素法による急縮小流れの結果を与えた^[130]。格子と計算方法の組み合わせで、計算限界のデボラ数が増加する。三角形要素では、SU+EEME が一番良くデボラ数 = 7.04 まで、四角形要素では、SU+CME が一番良く、デボラ数 = 17.9 まで計算できることを示した。

1992 年に Fortin and Zine は、流線上流化有限要素法を使って効率的に計算する方法を提案した^[125]。また、Fortin and Zine は有限要素法に GMRES 法を使って Oldroyd-B モデルに対する 4:1 の急縮小流れを解いた^[124]。この方法は、従来法と比べて、デボラ数が高い範囲でも繰り返し回数が少なく計算時間も短いことを示した。1994 年に Debae らは有限要素法の 3 つの方法と 4 つの物理量の定義の仕方で、4:1 の急縮小流れに対して Maxwell モデルの計算を行った^[140]。Galerkin 法、SUPG(Streamline Upwind/Petrov-Galerkin) 法、SU(nonconsistent streamline upwind) 法の 3 種類の方法である。物理量の定義は、応力の定義を圧力と同様にする低次の EVSS 法が、精度、安定性、計算速度から一番良いと判断している。1995 年に Tsai and Liu は有限要素法で 3 つの計算方法(直接法、緩和法(BiCGStab 法(複接合勾配法))、GMRES 法))で比較を行った^[151]。stick slip 流れと急縮小流れを計算しているが、デボラ数 = 34.2 まで計算可能であることを示した。さらに、BiCGStab 法が GMRES 法の約 1.5 倍程度計算速度が速くなることを示した。また、Guénte and Fortin は、運動方程式と連続の式と構成方程式および変形速度テンソルの式の 4 つを連立させて解く新しい混合型有限要素法を提案した^[147]。モデルは、PTT モデルと Grmela モデルを使用し、緩和法としては GMRES 法を使用する。stick slip 流れと急縮小 4:1 の流れを計算し、高いワイセンベルグ数まで (PTT モデル:14、Grmela モデル:56) 計算可能であることを示した。

田上らは、慣性項を考慮した有限要素法に CEF モデルを適用して急縮小流れの計算を行った^[134]。CEF モデルは、伸長粘度が伸長速度の増加に伴って減少する。レイノルズ数が 300、ワイセンベルグ数が 8 程度まで計算が可能である。慣性の影響が大きいと再循環領域の強さは弱くなることを示した。

有限体積法及び差分法などについても計算効率や精度を良くする方法が研究されている。1988 年に Choi らは楕円-双曲型の渦方程式を導入し、構成方程式の離散化には人工粘性項を含んだ二次精度の修正風上スキームを適用した有限体積法で、4:1 の慣性項を考慮した急縮小流れを解いている^[95]。1991 年に Yoo and Na は、非

一様スタガード格子の有限体積法に SIMPLER 法を適用し、構成方程式の移流項は修正風上スキームを使用した場合の、慣性項を考慮した急縮小流れを解いている[120]。1995 年には Xue らは、矩形断面を持つ直管の 3 次元流れの計算を有限体積法で行った[153]。時間進行は SIMPLEST アルゴリズムで、構成方程式には計算を安定させるために人工粘性項を追加し、この方法は、計算時間を短縮し、容量も小さくてよいことを示した。1995 年、Sasmal はスタガード格子の有限体積法に Upper-Convected Maxwell モデルを適用して軸対称 4:1 の急縮小流れを渦度-流れ関数法で解いた[150]。応力項には一次精度の風上スキームを適用した。格子の比較を各デボラ数(= 6.25 まで)で行っているが、格子によって流れの状態や再循環領域の大きさが異なってくることを示した。

1990 年に、川端らは、構成方程式が双曲型方程式であることに注目し、構成方程式の時間進行に Lax 法を陰的に処理する方法を提案した[108]。差分法を適用し、圧力方程式は MAC 法、時間進行はオイラー陰解法で高レイノルズ数、高ワイゼンベルグ数の流れを解いた。1994 年、Sato and Richardson は時間に依存した粘弾性流体の流れを解くために、有限要素法と有限体積法を組み合わせる方法を提案した[144]。安定化を図るため、CFL 条件は移流の速度と渦の速度から求める。圧力に関するポアソン方程式を MAC 法で解き、運動方程式を有限要素法で陽的に解き、構成方程式を有限体積法で陰的に解く。ただし、構成方程式の移流項には 1 次精度の風上スキームを適用した。1980 年に Hieber and Shen は、射出成形樹脂流れを有限要素法と差分法を組み合わせで解いた[60]。平板座標は有限要素法であらわし、狭い隙間と時間進行は差分近似した。また、メルトフロントは隣のフロント節点と直線近似した。1991 年に、鈴木・持丸は、慣性項を考慮した運動方程式を渦度-流れ関数に書き換えて、スペクトル法による偏心二重円管内流れの計算例を示した[118]。1993 年に Dlugogorski らは、FENE ダンベルモデルと一般化 Lennard-Jones モデルを使って分子動力学シミュレーションを行った[131]。

(b) 急縮小流れ

急縮小流れの実験および数値計算に関する研究についてまとめる。粘弾性流体の急縮小流れはニュートン流体では発生しないような様々な特有の流れが発生する。このような流れは、流体の濃度や種類、縮小比、流路形状などに依存する。

1987 年に Boger のレビューが発表されている[88]。Boger 流体に対する可視化写真、流量増加に対して再循環領域(二次流れ)は大きくなることを示している。また、shear-thinning 性を示す流体で lip 渦が発生することを紹介し、クリープ流れに対

して縮小比と二次流れの発生の種類を解説している。また同じ年に White らは実験と計算についてレビューしている^[94]。高分子溶液および融液の実験について、圧力の修正、粘弾性の効果、形状の影響、流れパターンについてまとめている。さらに、流体の種類や可視化法、計測法に関することを表にまとめている。計算については、縮小比や二次流れの有無についてまとめている。

まず、**可視化実験**について述べる。例えば、Nguyen and Boger は PAA 水溶液のクリープ流れについて可視化実験を行っている^[57]。流れパターンが、1. 再循環領域に成長する流れ、2. 非対称流れ、3. 回転する流れ、4. ヘリカルな流れ、の 4 つがあることを示した。この 4 つの流れは次のような挙動を示す。1. 再循環領域の長さはワイセンベルグ数の増加と共に長くなる。2. せん断速度を増加させると流れが非対称性になる。3. さらにせん断速度を増加すると、再循環領域が左右交互に大きくなったり小さくなったりし、主流はそれに応じて交互に曲がる。4. さらにせん断速度を大きくすると、主流がねじ曲がるように回転し、再循環領域が無くなったり現れたりする。粘弾性流体の急縮小流れの不安定現象は次のようにまとめることが出来る。表面にしわがよるような融液損傷 (melt fracture) を生ずる臨界のせん断速度以下では、細管入り口付近の再循環領域 (二次流れ) を生じ、主流は再循環領域を避けて収縮して流入する軸対称で安定なワインカップ状の流れを示す。臨界せん断速度以上になると、軸対称でなくなり、再循環領域の一部が間欠的に細管に流入する。

Boger らは 1986 年にクリープ流れの PAA シロップ溶液などについて縮小比 4:1, 16:1 の場合で再循環領域の挙動に対して濃度の影響について調べた^[80]。0.04% 濃度では流量を増加させると、再循環領域の大きさは徐々に大きくなって行くが、0.1% 濃度の場合、流量の増加に従って再循環領域は消滅し、急縮小部入口角部に lip 渦が発生する。さらに流量を増加させると、この lip 渦が徐々に拡大し、再循環領域へと発達する。縮小比が大きい場合には lip 渦は発生しない。

また、White and Baird は二種類の高分子融液 (低密度ポリエチレン :LDPE、ポリスチレン) で、同一のせん断速度下で再循環領域の発生する場合としない場合があることを示した^[86]。LDPE は再循環領域が発生し、PS は発生しない。これは、LDPE は時間とともに伸長応力が指数関数的に増加するが、PS は伸長応力がある時点で増加しなくなるので、伸長応力が影響を与えていると考えられている。

粘弾性流体の特異流れは、慣性の影響を考慮する必要のある範囲においても調べられている。1972 年に Boger and Rama Murthy は、円管急縮小 2:1 の流れで七種類の PAA 水溶液に対して速度分布測定と流れの可視化を行った^[22]。レイノルズ数は 1.38~272、ワイセンベルグ数は 0.033~0.409 の範囲で実験を行っている。再循環

領域の発生する軸上速度分布では、不弾性非ニュートン流の予想よりも大きな値となる。流れパターンは、弾性が小さい範囲でも再循環領域が発生し、弾性の影響が大きくなるに従って再循環領域は小さくなり、主流は divergence flow となる。さらに弾性が大きくなると再循環領域が消滅し、流線が側壁側に膨らむパターンがあることを示した。1978 年に Cable and Boger は、PAA 水溶液に対する縮小比 2:1,4:1 の円管急縮小流れの詳細な実験を行った^{[47],[48],[54]}。急縮小部前に発生する再循環領域(二次流れ)に対して、1. 再循環領域の成長する流れと 2. 主流の流れが外側に開く流れ (divergent flow) を可視化している。再循環領域の長さは、ワイセンベルグ数の増加と共に長くなるが、最大値を示した後短くなることを示した。主流の流れが外側に開く流れは、慣性力が重要であることを指摘している。また、上の二つの流れパターンの速度分布は大きく異なることを示している。また、非定常流れについては、3. 流量を増加させると急縮小部前の再循環領域が、周期的に変化する流れがあることを示した。

不安定流動が流路形状でどのように変わるかを調べた Giesekus は、高分子溶液であるポリアクリルアミド(PAA)水溶液2%を使ってダイ入口流れを急縮小(フラットな形状)、テーパの付いた形状など4種類について調べた^[18]。縮小比 15:1 において流量を増加させると急縮小角部に lip 渦が発生し、流量の増加に従って lip 渦が徐々に大きくなっていく。この lip 渦は対称性を持つが、流量をさらに増加させると非対称性を示す。濃度が高い場合は、lip 渦が再循環領域にまで成長する。テーパのついている流路においても、流量が増加すると lip 渦は対称性を持ちながら大きくなる。しかし、PAA の濃度が高くなるとその対称性は崩れることを示した。

Mckinley らは Boger 流体に対して速度分布測定と流れの可視化実験を行い、縮小比 β の影響を調べた^[115]。 $\beta = 4$ では流れパターンは、デボラ数およびレイノルズ数の増加に伴ってニュートン流体と同様の流れ → lip 渦が発生し、主流が divergence flow になる流れ → 再循環領域が発達し、主流が divergence flow になる流れ、となる。再循環領域の長さ(再付着距離)は、デボラ数に依存するが、縮小比には依存しない。divergence flow の場合の速度分布は縮小比に大きく依存する。非定常流れに対して流れパターンは、再循環領域が発生する → 再循環領域が消滅する → lip 渦が発生する → 再循環領域が発生する、となる。

Chiba らは縮小比 10:3,10:1 の幅 4 に対して高さ 10 の急縮小流路における流れの 3 次元性を調べている^[104]。不安定流動では変則的な流れ現象となり、束のようになって下流側に流れ込む 3 次元性を示す。両側の壁の影響を受け、流れは壁に沿って上下することを示した。

また、このような流れの流速を調べた研究もある。例えば、1976 年に Busby and MacSporran は円管入り口流れをレーザードップラー流速計で PAA 0.75% の場合のレイノルズ数が 470 までの速度分布を測定した^[35]。速度分布は壁面近傍が発達し、中央が平坦になる。入り口から下流になるに従って速度が発達していくが、半径の 30 倍下流において完全発達流となった。再循環領域が発生するので、速度は壁に近い方が下流軸に沿って振動する。

主として高分子融液に対して流動複屈折法を使って応力分布を求めた研究がある。例えば、Fields and Bogue はポリスチレンの Aroclor 溶液に対して 111:41 の急縮小流れの応力分布を求めた^[17]。急縮小前の再循環領域では、せん断応力の値は小さく、法線応力の値はマイナスになる。また、急縮小角部から、それぞれの応力が広がり、その影響が下流にまで及ぶ、ことを示した。

次に数値計算による研究についてまとめる。

まず、有限要素法についてまとめるが、この場合は工業的な要求からクリープ流れがほとんどである。

1980 年に Viriyayuthakorn and Caswell は円管急縮小 4:1 のクリープ流れをガラキン有限要素法で、デボラ数 3 まで、Maxwell モデルおよび BKZ モデルで計算した^[61]。軸上の速度は、急縮小部前後でニュートン流体よりもオーバーシュートすることを示した。また、Kim-E らは、非ニュートン不弾性の Carreau モデルを使って、有限要素法により慣性項を考慮した流れを解いた^[67]。レイノルズ数が 100 までを計算し、レイノルズ数が大きくなると再循環領域の長さが長くなることを示した。また、Carreau 数が大きくなると再循環領域がなくなること示した。

Debbaut and Crochet は、縮小比 4:1 のクリープ流れに PTT モデルを適用した混合型有限要素法によって、ワイセンベルグ数 = 8 程度までの流れを解いた^[82]。圧力の不連続により、同一のワイセンベルグ数であっても速度が二つの値を持つ領域があることを指摘した。

1986 年に Marchal and Crochet は、混合型有限要素法と四角形要素を組み合わせ、各物理量を補間するのに形関数を導入する方法を提案した^[83]。流れはクリープ流れで、Oldroyd-B モデルを使用した。流路形状が円管の場合はデボラ数が 5.28 では再循環領域が発生し、平板の場合は、デボラ数が 6.57 で lip 渦が発生した。さらに、Marchal and Crochet は流線上流化法と subelements を使った補間法を組み合わせ、Maxwell モデル、Oldroyd-B モデルを円管急縮小 4:1 を使って解いた^[89]。デボラ数が 20 までを解いているが、デボラ数の増加とともに再循環領域は大きくなることを示した。また、Debbaut らは、縮小比 4:1 の場合において、Oldroyd-B

モデル、PTT モデル、Giesekus モデルについて比較を行った^[96]。Oldroyd-B モデルにおいては、回復せん断応力が増加するのに応じて、再循環領域が増強されるが、実験とは定量的に一致しない。PTT モデルは、ワイゼンベルグ数の増加とともに再循環領域は一旦大きくなるが、最大値を示した後小さくなる。Giesekus モデルはワイゼンベルグ数の増加に従って再循環領域は大きくなる、ことを示した。El Hadi and Tanguy は、対称条件を使った場合と対称条件を使わずに流れを解いた場合とを比較し、対称条件を使わない場合に圧力や速度の振動が起こりにくいことを示した^[107]。梶原らは、ガラーキン有限要素法の四角形要素に QQL 法を組み合わせ、PTT モデルおよび Giesekus モデルによる流れを解いた^[114]。伸長粘度が伸長速度の増加に従って増加する流体は、再循環領域が大きくなる特性を持つことを示した。Hulsien and van der Zauden は、8 モード Giesekus モデルを使用して、150℃における LDPE 融液の物性値を適用して、縮小比 4:1, 5.75:1 の計算を行った^[113]。再循環領域の開き角度、強さは(第一法線応力差/せん断応力)に依存し、従来の実験結果と比較的良好一致を示すことを報告した。

1992 年に Boger らは、Nguyen-Boger の実験^[57] と Marchal-Crochet の計算^[89]を比較した^[121]。ワイゼンベルグ数を定義するときに、流量によって定義し、White-Metzner モデルについて、ワイゼンベルグ数と再付着長さの関係がほぼ一致することを示した。

Guénnéte らは、SU 法 + GMRES 法で、Gmela モデル^[103] で計算を行った^[126]。ワイゼンベルグ数が大きくなると急縮小部前後での軸上の速度はオーバーシュートし、その大きさは大きくなっていく。また、圧力分布もワイゼンベルグ数に依存する、ことを示した。1992 年 Coates らは、縮小比 4:1, 8:1 の軸対称流れに対して、EEME 式と流線上流化 Petrov Galerkin 法を組み合わせた方法を適用した^[123]。モデルは、UCM(Upper Convected Maxwell)、MUCM(Modified Upper Convected Maxwell)、MCR(Modified Chilcott and Rallison)を使用した。(MCR は FENE ダンベルモデルの一種で、構成方程式にデボラ数を導入しているモデル) 縮小比 4:1 の結果より、UCM モデルでは急縮小部の半径方向の法線応力の変化の傾きは -1 になるが、MUCM モデルと MCR モデルでは -0.455 となる。再循環領域の大きさはデボラ数が大きくなるに従って大きくなり、再循環領域の長さは、Boger 流体と比較して定量的に一致することを示した。しかし、縮小比 8:1 の結果では、計算結果と実験結果は、再循環領域の大きさは全く異なる傾向を示すことを報告している。

Park and Mitsoulis は、4:1, 22:1 の円管急縮小流れにおいて緩和時間のスペクトルを持つ K-BKZ 積分型モデルと有限要素法を組み合わせた方法で計算を行った

[129] クリープ流れのときに再循環領域の長さが実験値と良く一致した。Bernstein らは、4:1 の急縮小のクリープ流れに対して、K-BKZ モデルを適用して再循環領域とワイセンベルグ数の関係について調べた^[139]。再循環領域の大きさを示す開き角度は、ワイセンベルグ数の増加に伴って大きくなる。また、再循環領域の強さはワイセンベルグ数の増加に伴って強くなる、ことを示した。

Azaiez らは、Guénné-Fortin の混合型有限要素法^[147] で 3 つのモデル (Giesekus モデル、FENE-P モデル、PTT モデル) を適用した急縮小 4:1 の計算を解いた^[154]。また、Quinzani らの実験 ($Re = 0.56, De = 2.9$)^[143] の場合と Giesekus モデルによる結果とを比較した。上流側の y 断面 (縦方向) の速度分布は定性的に一致している。 x 断面 (横方向) の速度分布は定量的に一致する。また、せん断応力の分布および第一法線応力差の分布は定性的に一致する。下流側の分布についてはいずれのモデルについても検討が必要で、定性的な一致もみることができない。軸方向の第一法線応力差の変化を 3 つのモデルについて調べている。FENE-P モデルと PTT モデルは角部近傍で最大値が Giesekus モデルよりも大きくなる。ただし、3 つとも実験地よりも値が大きくなることを示した。

次に差分法と有限体積法について述べるが、この場合は慣性項を考慮したケースが比較的多い。

1976 年に Crochet and Pilate は渦度-流れ関数法で二次流体モデルを使って計算を行っている^[36]。レイノルズ数が小さい範囲でワイセンベルグ数が増加するとニュートン流体よりも再循環領域が大きくなるが、レイノルズ数が大きい場合は再循環領域が消滅することを示した。後藤・加藤は、渦度-流れ関数法により、Denn モデルを用いてレイノルズ数 = 8 程度までを計算した^[102]。ずり流動化 ($n < 1$) は再循環領域の大きさを減少させ、ずり粘ちょう化 ($n > 1$) は逆に増加させることを示した。

1988 年に Choi らは楕円-双曲型の渦方程式を導入した差分法を使って縮小比 4:1 の場合を有限レイノルズ数、高ワイセンベルグ数において数値計算を行っている^[95]。モデルは Giesekus モデルである。shear-thinning 性の影響、第一法線応力差の影響などを調べ、実験結果と定性的な一致を得ている。しかし、十分な実験データがないので、定量的な検討は困難であることを指摘している。

1990 年に、川端らは、構成方程式の時間進行に Lax 法を適用する方法で慣性項を考慮した場合の 2:1 の急縮小流れを解いた^[108]。モデルは Maxwell モデル。ワイセンベルグ数の増加に従って、再循環領域の大きさは大きくなる。しかし、流量を徐々に増加させる場合と減少させる場合では、同一のワイセンベルグ数において 2

つのタイプの流れが存在することを示した。ここでは定常状態が、縮小部手前で流線が外側に緩やかに膨らむタイプ、流線が滑らかに流入するタイプ、流れが上下非対称になり蛇行して流入するタイプ、の3つがあることを示した。Yoo and Na は、有限体積法に SIMPLER 法を、構成方程式の移流項には修正風上スキームを適用して慣性項を考慮した Oldroyd モデルによる急縮小流れを解いた^[120]。ワイセンベルグ数とレイノルズ数の比が低い値は再循環領域の成長をおさえることを示した。

Keiller は、Oldroyd モデルと FENE ダンベルモデルを使った入口流れのクリープ流れの範囲を、渦度一流れ関数法で解いた^[132] Oldroyd-B モデルでは再循環領域が発生しないが、FENE ダンベルモデルでは、再循環領域が発生することを示した。

(b) 拡大流れ及び複雑流路の流れ

この節では、流路内における拡大流れおよび複雑流路の流れについて概説する。

拡大流れ 加藤は流動複屈折法を使って、CMC 0.5% 水溶液の流れを可視化した^[42]。レイノルズ数 90 までの再循環領域の再付着距離を求め、レイノルズ数と再付着距離は線形的な関係にあることを示した。加藤・芝沼はテーパのついた拡大管の圧力分布と速度分布を測定した^[56]。また、芝沼・加藤は乱流の拡大管流れの速度分布の実験式を与え、境界層近似に基づいて応力分布を求めた^[58]。

久野らは、急拡大管と緩やかな拡大管流れを境界適合座標系を用いた方法で指数則モデルの計算をした^[127]。1994 年に Debae らは 3 つの有限要素法の方法で拡大流れの計算を行った^[140]。膨張比はワイセンベルグ数の増加によって増加することを示した。

保田らは、1:4 の急拡大の繊維懸濁液の流れを Jeffery モデルを適用した渦度一流れ関数法でレイノルズ数 = 10 まで計算を行った^[137]。松岡・山本は、有限要素法を PSM (粒子シミュレーション法) の組み合わせで、拡大流れをクリープ流れとして計算した^[148]。粒子法シミュレーション法は、繊維を球の連なったモデルとして球に対する運動方程式を解く方法である。

複雑流路の流れ Crochet and Pilate は渦度一流れ関数法で二次流体モデルを使って、ステップのある流れの計算を行っている^[36]。ステップ前方に再循環領域が発生し、ステップ後方の再循環領域は小さくなることを示した。Cochrane らはステップのある流れなどの複雑流路に対して実験と計算を比較した^[62]。実験は可視化実験、計算は渦度一流れ関数法を用いている。1990 年に、川端らは、構成方程式の時間進行に Lax 法を適用する方法でステップのある流れを解いた^[108]。

Perera and Walters は、渦度－流れ関数法に Oldroyd モデルを適用して T 字流路の流れについて計算を行った^[44]。速度分布は合流してから、速度の発達がニュートン流体より遅れる。慣性の影響がニュートン流体よりも大きく、速度が外側で大きくなることを示した。西村らは T 形流路での 2 種類の合流流れ (1. 対称な合流流れ、2. 非対称な合流流れ) を PAA 濃度 0.8% の可視化実験と差分法による計算とで循環流れについて調べた^[69]。また、西村らは T 字流路の流路比が 5:1 で、PAA 0.5%, 0.8%、HEC 1.0%, 1.5% の流れの速度をレーザードップラー流速計を用いて測定した^[72]。凸状角部上流側の循環 2 次流れの存在および合流付近には流速の周期的な変動が測定された。中村らは合流部における流れの可視化とレーザードップラー流速計での測定を行い不安定現象について調べ、合流部付近の周期的な流速変動は合流点上流に生じる循環 2 次流れ領域の変動に起因していることを示した^[77]。また、中村らは Y 形流路における分岐合流流れについて可視化実験と数値計算を行った^[78]。

後藤らは、分岐流の動特性を、流れの様相とエネルギー損失について調べた^[141]。2 次元分岐流れで、T 形と Y 形の 2 種類、PAA 0.1% の流れの可視化 (インキ注入法) と圧力測定を行った。

Perera and Walters は、渦度－流れ関数法に Oldroyd モデルを適用して急縮小と急拡大を組み合わせた流れについて計算を行った^[45]。拡大する部分ではバラス効果の影響で、ニュートン流体の場合では発生していた再循環領域は消滅したり、小さくなったりする。弾性が強くなると急縮小前の再循環領域は大きくなることを示した。山口・野田は、ベンチュリ型の縮小と拡大を組み合わせた流路について圧力測定を行った^[145]。高分子溶液は PAA, PEO を使用した。PEO では、濃度が高くなると縮小部での圧力損失が増加するが、拡大部では圧力回復が小さくなる。これは摩擦損失が主な原因であると考えられる。PAA では、濃度が高くなると圧力損失が減少するという普通とは逆の結果が得られた。

さらに、Crochet and Bezy は、拡張した混合型有限要素法でホールプレッシャーのクリープ流れを計算した^[55]。ニュートン流体より粘弾性流体の方が渦が増強されている様子を示した。

1.3 本研究の目的と概要

1.3.1 本研究の目的

粘弾性流体の流れの数値計算は粘弾性の性質を示す数式モデルである構成方程式とコーシーの運動方程式を連立させて解くことが一般的である。しかし、構成方程式と運動方程式の強い非線形性のために、その求解をするには意外に困難を極める。また、構成方程式は双曲型、運動方程式は楕円型の方程式になり、性質の異なる方程式を連立させなければならないことも解を求めにくくすることの一因になっていると思われる。

しかし、微分型の構成方程式の解析は、特定の流れ場を再現する方法として実用上有用である。従って、この方法に対して精度の高い数値計算方法を開発することも、この粘弾性流体の流れの数値計算の分野では重要なことである。構成方程式を解く場合に数値計算の精度上問題となるのは、時間微分のために現れる移流項の取り扱いである。この項に風上スキームを用いるのが一般的である。しかし、数値粘性が流れ場に影響を及ぼすので、風上スキームの取り扱いには注意が必要である。例えば、急縮小におけるクリープ流れを解く場合、流線上流型有限要素法を用いることが一般的であり、風上スキームを適用すれば再循環領域が発生する範囲でも計算は可能であることを示されている。しかし、急縮小流れにおける divergence flow のような粘弾性流体の特異流れを計算した例は著者の知見ではまだない。数値粘性のために流れ場が鈍ってしまうので、急激な流れの変化が捕らえられないと考えられる。即ち、実験結果を再現し得るような計算方法はまだ開発されていない、ということがいえる。

以上の数値計算上の問題点をまとめると次のようになる。

1. 現状では流れ場によって数値スキームを変える必要がある。
2. 高レイノルズ数・高ワイセンベルグ数の範囲で、信頼性の高い数値計算方法がない。

前節で述べたが、様々な構成方程式が提案され、実験および計算で検証されている。つまりこれは、構成方程式にも今のところ決定的なモデルの出現がない、ということを示している。

また、粘弾性流体の流れの特異現象に対してもその現象発生メカニズムまで検討した例は少ない。また、従来のマクロな構成方程式を計算した結果からその流れのメカニズムを解明することは困難である。

そこで、現在の構成方程式に対して次の問題点を指摘することが出来る。

1. 流れ場によって数式モデル（構成方程式）を取り替える必要がある。
2. 流れ場に応じて時間微分の方法がいくつか存在する。
3. 粘弾性流体の流れの特異現象のメカニズムがわかりにくい。

従って、粘弾性流体の数値計算には、溶質の挙動、変形などの局所的な影響を取り入れられる微視的なモデルに基づく方が物理的現象の再現には適切であり、その適用性にも優れていると考えられる。このような微視的モデルによる数値計算にはかなりの計算量が必要である。しかし、近年のコンピュータ技術の飛躍的な発達がこのような計算を可能とした。

そこで、本研究の目的は、以下の二つにまとめられる。

1. 構成方程式を解くために、双曲型方程式の解法である CIP 法^[93] および Lax 法を適用し高レイノルズ数、高ワイゼンベルグ数における計算方法の提案。
2. 流れのメカニズム解明を行うために、ニュートン流体中に球・バネマクロモデルを混入させた粘弾性流体の流れの数値計算方法の提案。

1.3.2 概 要

次に本研究の概要を示す。本研究は7章からなる。

第1章は序論である。粘弾性流体の構成方程式および粘弾性流体の特異流れに関する従来の研究をまとめ、本研究の目的と概要について述べる。

第2章、第3章は、構成方程式による粘弾性流体の流れの高精度の数値計算方法の提案と急縮小流れへの適用である。第4章は、構成方程式による後向きステップ流れの数値計算である。第5章、第6章は、球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の流れの新しい数値計算方法の提案と平行平板間のポアズイユ流れへの適用である。

第2章は、連続の式とコーシーの運動方程式と構成方程式を連立させて、粘弾性流体の流れ場を差分法で解く場合の数値計算方法について述べている。構成方程式を解くときに双曲型方程式の解法である Lax 法および CIP 法^[93] を適用する計算方法の解法を示す。特に CIP については、新しい計算方法の提案であるので詳しく述べる。第3章は、第2章で提案した計算方法のひとつである CIP 法を 2:1 の急縮小流れに適用する例を示す。モデルは Maxwell モデルと Giesekus モデル、PTT モデルを使用している。また、側壁側の流線が外に開く流れ、lip 渦など急縮小流れに発生するいくつかの粘弾性流体特有の流れについて、可視化実験結果と数値計算結果とを使って考察する。

第4章は、第2章で説明した Lax 法を再循環領域の発生しやすい後向きステップ流れに適用する例をまず示す。Maxwell モデルおよび Denn モデルの各パラメータ

の流れ場に与える影響、即ち、慣性力、粘性力および非ニュートン粘性などの影響を調べた。

第5章は、粘弾性流体に流れに発生する特異流れのメカニズムの解明を最終目的とした球・バネマクロモデルの提案と、提案したモデルでの粘弾性流体の流れの数値計算の定式化および解法について示す。第6章は、第5章で提案した球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の流れの数値計算方法を平行平板ポアズイユ流れに適用する例を示す。この流れから非ニュートン粘性の流れのメカニズムを明らかにする。

第7章は、本研究で得られた結論である。

第2章

構成方程式による粘弾性流体の流れの数値計算法

2.1 緒言

粘弾性流体の流れの数値計算は、コーシーの運動方程式と粘弾性の性質をあらわす構成方程式を連立させて解くことが一般的である。この粘弾性の性質を示す構成方程式を解く場合に、構成方程式に現れる移流項の取り扱いが数値計算上問題となる。有限要素法、差分法、有限体積法いずれの計算方法の場合もこの移流項に対して風上スキームを適用する、あるいは基礎式に人工粘性項を負荷する、という方法が一般的である。しかし、風上スキームを適用すると数値粘性が流れ場に大きな影響を与えると考えられる。また、運動方程式と構成方程式は、前者が楕円型に、後者が双曲型の方程式となる。従って、構成方程式を解く際に双曲型方程式の解法を適用することが、この種の計算をするひとつのアイデアであると考えられる。

粘弾性流体の構成方程式は、双曲型方程式の形をしている。川端らはこのことに注目して、構成方程式の時間進行に Lax 法を適用する方法を提案し^[108]、高レイノルズ数、高ワイセンベルグ数の流れでも計算が可能であることを示した。

まず、本章では、粘弾性流体の流れに対するコーシーの運動方程式と連続の式および構成方程式 (Giesekus モデル、Maxwell モデル、PTT モデル) を定式化した。構成方程式に Lax 法を適用した場合を示した。さらに本章では、構成方程式を解くために、双曲型方程式の高精度解法の一つである CIP 法^[93] を粘弾性流体の流れに適用する計算方法を提案する。この方法では、風上スキームなどによる数値粘性が流れ場に影響を及ぼすことがないと考えられる。偏差応力テンソル $\mathbf{P}$ を粘性による応力 $\boldsymbol{\tau}$ とそれ以外の応力 $\boldsymbol{\sigma}$ に分離し、この $\boldsymbol{\sigma}$ についての基礎式を導出した。

コーシーの運動方程式は、空間的には2次精度の中心差分で、時間積分にはEuler陰スキームを適用する。運動方程式と連続の式から圧力に対するポアソン型方程式を導いた。この式には、2次精度の中心差分を適用して離散化し、MAC法によって等方性圧力 p を求めた。 σ の時間微分を Euler 部分と Lagrange 部分に分離し、移流項のみを扱う Euler 部分に対して CIP 法を適用する。まず CIP 法の原理について述べ、次に、2次元 Maxwell モデルの構成方程式に対して、CIP 法を適用する方法を示した。

また、各物理量に対して境界条件を示した。

第2章、第3章および第4章で用いた主な記号を以下に示す。括弧内はその値で無次元化している事を意味している。

- E : ひずみ速度テンソル $= (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)/2$ (U/L)
- L : 速度勾配テンソル (U/L)
- P : 偏差応力テンソル $= (2/R)\mathbf{E} + \sigma$ (ρU^2)
- P_{xx}, P_{yy}, P_{xy} : 偏差応力テンソルの成分. (ρU^2)
- $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}$: 弾性による応力テンソルの成分. (ρU^2)
- p : 圧力 (ρU^2)
- R : レイノルズ数 $= \rho U L / \eta_0$
- R_2 : 第2レイノルズ数 $= \rho U L / \eta_2$
- t : 時間 (L/U)
- u, v : x, y 方向の流速成分 (U)
- W : ワイゼンベルグ数 $= \lambda U / L$
- x, y : カートesian座標系 (L)
- $\dot{\gamma}$: 無次元ずり速度 (L/U)
- $\dot{\epsilon}$: 無次元伸長速度 (L/U)
- L : 代表長さ (流路流入部の流路幅)
- n : Denn モデルのモデル定数
- s : Denn モデルのモデル定数
- U : 代表速度 (平均流入速度)
- α : Giesekus モデルのモデル定数
- ξ, ε : PTT モデルのモデル定数
- η_0 : ゼロせん断粘度

η_E : 伸長粘度

η_2 : 第2ニュートン粘度

η_1 : $\eta_0 - \eta_2$

λ : 緩和時間

ρ : 密度

また二次元問題におけるテンソルの成分は

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} & 2\frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_{xx} & P_{xy} \\ P_{yx} & P_{yy} \end{pmatrix} \quad (P_{xy} = P_{yx})$$

2.2 基礎式

等温、非圧縮性の粘弾性流体と仮定し、以下の基礎方程式を用いる。
コーシーの運動方程式、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \mathbf{P} \quad (2.1)$$

連続の式、

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.2)$$

Giesekus モデルによる粘弾性流体の構成方程式、

$$\mathbf{P} + W \overset{\nabla}{\mathbf{P}} + \alpha W R \mathbf{P}^2 = \frac{2}{R} \mathbf{E} \quad (2.3)$$

である。ここで、 α は Giesekus モデルのモデル定数で、 $\alpha = 0.0$ の時に Maxwell モデルとなる。

また、Denn モデルによる粘弾性流体の構成方程式は

$$\mathbf{P} + W \Pi^{(s-n-1)/2} \overset{\nabla}{\mathbf{P}} = \frac{2}{R} \Pi^{(n-1)/2} \mathbf{E} \quad (2.4)$$

ここで

$$\Pi = 2 \left(\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right) + \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \quad (2.5)$$

であり、 s と n は Denn モデルのレオロジー一定数である。 $n = 1, s = 2$ のときに、Maxwell モデルとなる。

また、PTT モデルによる粘弾性流体の構成方程式は、

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{P} + W \overset{\square}{\mathbf{P}} + \varepsilon W R \text{tr}(\mathbf{P}) \cdot \mathbf{P} &= \frac{2}{R} \mathbf{E} \\ \overset{\square}{\mathbf{P}} &= (1 - \xi/2) \overset{\nabla}{\mathbf{P}} + (\xi/2) \hat{\mathbf{P}} \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

である。ここで、 ε, ξ は PTT モデルのモデル定数で、 $\varepsilon = \xi = 0.0$ の時それぞれ Maxwell モデルとなる。

また ∇ は upper-convected 時間微分、 Δ は lower-convected 時間微分である。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{P}} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{P} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{P} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{L}^T \quad (2.7)$$

$$\overset{\Delta}{\mathbf{P}} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{P} + \mathbf{L} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{L}^T \quad (2.8)$$

偏差応力テンソル $\mathbf{P}$ は

$$\mathbf{P} = \frac{2}{R} \mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} \quad (2.9)$$

のように、ゼロせん断粘度 η_0 を用いた粘性応力とそれ以外の応力 σ とに分離する。
式 (2.9) を式 (2.3) に代入すると (Giesekus モデルの場合)

$$\sigma + W \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \sigma - \mathbf{L} \cdot \sigma - \sigma \cdot \mathbf{L}^T \right) + \alpha W R P^2 = -\frac{2W}{R} \nabla \mathbf{E} \quad (2.10)$$

となる。

また、第2ニュートン粘度 η_2 を考慮する場合には偏差応力テンソルを

$$\mathbf{P} = \frac{2}{R_2} \mathbf{E} + \overline{\mathbf{P}} \quad (2.11)$$

として、 $\overline{\mathbf{P}}$ について各構成方程式についてを解いていく。ただし、それぞれの式の
右辺第一項にある $1/R$ を $(1/R - 1/R_2)$ となるように置き換える。

時間進行法を用いて式 (2.1) から速度ベクトル $\mathbf{v}$ 、式 (2.10) から応力 σ 、連続の
式 (2.2) の時間微分に式 (2.1) の発散を代入して得られる圧力方程式から等方性圧
力 p の順で求め、非定常解の漸近解として定常解を求めた。

2.3 離散化

運動方程式 (2.1) と構成方程式の離散化および式 (2.1) と連続の式 (2.2) から導かれる圧力のポアソン型方程式について述べる。

運動方程式 (2.1) と連続の式 (2.2) は、二次元流路の流れに対しては、

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial P_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial P_{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial P_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial P_{yy}}{\partial y} \end{aligned} \right\} \quad (2.12)$$

$$D \equiv \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.13)$$

となる。また、式 (2.12) は、式 (2.9) のように偏差応力テンソル $\mathbf{P}$ を粘性による応力 $\boldsymbol{\tau}$ とそれ以外の応力 $\boldsymbol{\sigma}$ とに分離し、さらに粘性による応力を

$$\tau_{xx} = \frac{2}{R} \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \tau_{yy} = \frac{2}{R} \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \tau_{xy} = \frac{1}{R} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (2.14)$$

とすると、式 (2.12) は

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} \end{aligned} \right\} \quad (2.15)$$

となる。上式を時間については Euler 陰スキーム、空間については 2 次精度の中心差分によって離散化する。

$$\left. \begin{aligned} \frac{u^k - u^{k-1}}{\Delta t} + u^{k-1} \frac{\partial u^k}{\partial x} + v^{k-1} \frac{\partial u^k}{\partial y} - \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 u^k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^k}{\partial y^2} \right) \\ = -\frac{\partial p^{k-1}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}^{k-1}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}^{k-1}}{\partial y} \\ \frac{v^k - v^{k-1}}{\Delta t} + u^{k-1} \frac{\partial v^k}{\partial x} + v^{k-1} \frac{\partial v^k}{\partial y} - \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 v^k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v^k}{\partial y^2} \right) \\ = -\frac{\partial p^{k-1}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xy}^{k-1}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}^{k-1}}{\partial y} \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

ここで上添字 k は $t = k\Delta t$ における値を意味する。また、 Δt は時間刻み幅。

構成方程式 (1.12) を二次元における Maxwell モデルに対して書くと

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial y} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \sigma_{xx} - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \sigma_{xy} \right) &= A_{xx} \\ \sigma_{yy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} - 2 \frac{\partial v}{\partial x} \sigma_{xy} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{yy} \\ \sigma_{xy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \sigma_{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{xy} \\ A_{xx} &= \frac{2W}{R} \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) - u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right\} \\ A_{yy} &= \frac{2W}{R} \left\{ \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial v}{\partial x} + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) - u \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right\} \\ A_{xy} &= \frac{W}{R} \left\{ 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right. \\ &\quad \left. - u \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right) - v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right\} \end{aligned} \right\} \quad (2.17)$$

となる。

Lax 法

上式 の左辺の時間微分に Lax 法を次式のように適用する。

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \frac{\sigma_{ij}^k - \bar{\sigma}_{ij}^{k-1}}{\Delta t} \quad (i, j = x, y) \quad (2.18)$$

ここで、 $\bar{\sigma}_{ij}^{k-1}$ は上下左右の隣り合う 4 点の格子点における σ_{ij}^{k-1} の平均を意味する。Lax 法は衝撃波を含むような高速気流に関する計算法で、1 時間ステップ前の値に回りの格子点の平均値を用いることによって 2 次の拡散項を導入して双曲形方程式を安定に解こうとするものである。Lax 法は導入された拡散項の影響が大きく、急激な変化に伴う衝撃波や膨張波を緩やかな変化にしてしまうため実用的でないと考えられているが、粘弾性流体の流れで扱う応力場の場合には不連続面が現れないと考えられるので、Lax 法を適用することは有効である。右辺の τ の時間微分は Euler 法を使い、空間的には二次精度の中心差分によって離散化した。

CIP 法

式 (2.10) の σ の時間微分を

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_E + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_L \quad (2.19)$$

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t} \right)_E = -\mathbf{v} \cdot \nabla \sigma \quad (2.20)$$

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial t}\right)_L = -\frac{\sigma}{W} + L \cdot \sigma + \sigma \cdot L^T - \frac{2}{R} \nabla E - \alpha R P^2 \quad (2.21)$$

と分離して取り扱い、式 (2.20) に CIP 法^[93] を適用し、式 (2.21) は Euler の陽解法によって時間積分を行った。また、CIP 法については次節で詳細に説明する。

次に圧力について述べる。運動方程式から計算される速度場 (u^k, v^k) は連続の式を満たしているとは限らない。そこで、次の時間ステップ $(t = (k+1)\Delta t)$ で連続の式を満たすようにする ($D^{k+1} = 0$)。即ち、

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{D^{k+1} - D^k}{\Delta t} = -\frac{D^k}{\Delta t} \quad (2.22)$$

とおく。すると上式の左辺は、

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial t} \right) \quad (2.23)$$

となるから、これに運動方程式 (2.12) から得られる $\partial u / \partial t, \partial v / \partial t$ を代入して、圧力に対するポアソン型の方程式を導く。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p^k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p^k}{\partial y^2} = - \left\{ \left(\frac{\partial^2 u^k}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \frac{\partial u^k}{\partial y} \frac{\partial v^k}{\partial x} + \left(\frac{\partial^2 v^k}{\partial y^2} \right)^2 \right\} \\ + \frac{\partial^2 P_{xx}^k}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 P_{xy}^k}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 P_{yy}^k}{\partial y^2} + \frac{D^k}{\Delta t} \end{aligned} \quad (2.24)$$

上式を 2 次精度の中心差分によって離散化する。

以上の離散式について、運動方程式と構成方程式はチェッカーボード SOR 法、圧力に対する方程式は前処理付き共役勾配法 (MILUBCG 法) を用いてそれぞれ反復計算を行う。

2.4 構成方程式の実質微分項の取り扱い

2.4.1 CIP 法の原理

双曲型方程式の高精度解法の一つである CIP(Cubic-Interpolated Pseudo Particle) 法は、1985 年、一次元双曲型方程式に対して Takewaki らによって提案された^[79]。Takewaki and Yabe は多次元の双曲型方程式に拡張し^[93]、Yabe and Takei は一般化された双曲型方程式に対して簡易型 CIP 法を提案している^[100]。また、矢部は CIP 法を流体の計算に適用するための解説も行っている^[138]。

CIP 法の原理について簡単に説明する。まず次の最も簡単な双曲型方程式を考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2.25)$$

この方程式の一般解は $f(x - ut)$ である。しかし式 (2.25) の右辺が 0 でなかったり、 u が変数であったりすると、もはや $f(x - ut)$ は解ではなくなる。

そこである時間 $n\Delta t$ のとき f が図 2.1 のような分布をしていると考える。さらに $(n+1)\Delta t$ の分布が前時間の分布と等しく、 $u\Delta t$ だけ移動すると仮定する。ただしこの仮定は Δt が十分小さいときに成り立つ。すると次のように考えることができる、

$$\begin{array}{c} \text{時間 } n\Delta t \text{ の } f^n \text{ の分布を調べる} \\ \Downarrow \\ \text{時間が } \Delta t \text{ 進むと } f^n \text{ の分布が } u\Delta t \text{ ずれると考える} \\ \Downarrow \\ \text{時間 } (n+1)\Delta t \text{ において } x_i \text{ の } f^{n+1} \text{ 値は} \\ \text{時間 } n\Delta t \text{ の } f^n \text{ の分布から } f(x_i - u\Delta t) \text{ となる。} \end{array}$$

以上のように f^n の分布が分かると、 f^{n+1} の値が予測できる。これは Godunov 法の基本である。差分スキームの中には、この考えから出発したものが多くあり、 f^n の分布を精度良く求めると、精度の向上につながる。

次に CIP 法ではどのように f^n の分布を求めているか説明する。三次スプライン関数により $x_{i-1} \sim x_i$ の区間について次の近似多項式 F_i を得る。

$$\left. \begin{array}{l} F_i(x) = a_i \xi^3 + b_i \xi^2 + f'_{i-1} \xi + f_{i-1} \\ \xi = x - x_i \end{array} \right\} \quad (2.26)$$

ここで f_{i-1} , f'_{i-1} は x_{i-1} での f の値及び f の空間的な一階微分値を示す。スプライン法によって近似関数を導く方法として、次の連続の条件から a_i , b_i , f'_i を計算する。

$$F_i(x_i) = F_{i+1}(x_i), F'_i(x_i) = F'_{i+1}(x_i), F''_i(x_i) = F''_{i+1}(x_i) \quad (2.27)$$

それぞれの式は F_i 値の連続性、一階微分値の連続性、二階微分値の連続性を意味する。しかしこの境界条件を全て満足するように解くことは、計算量が増えると共に、必ずしも安定に解けるわけでもない。そこで人工的な連続性や滑らかさ（高次微分値の連続性）を追及するよりも、むしろ式 (2.25) を満足するように解くことが重要である。式 (2.25) の両辺を空間的に微分して、

$$\frac{\partial f'}{\partial t} + u \frac{\partial f'}{\partial x} = 0 \quad (2.28)$$

この式を f' を決める方程式とする。式 (2.25) と式 (2.28) は同じ形となり、最終的に時間を進行する方程式として、

$$\left. \begin{aligned} \xi &= x_i - u_i \Delta t \\ f_i^{n+1} &= a_i \xi^3 + b_i \xi^2 + f'_{i-1} \xi + f_{i-1}^n \\ f'^{n+1}_i &= 3a_i \xi^2 + 2b_i \xi + f'^n_{i-1} \end{aligned} \right\} \quad (2.29)$$

となる。ただし a_i, b_i は値の連続性、一階微分値の連続性から求める。

$$\left. \begin{aligned} a_i &= \frac{f'^n_i + f'^n_{i-1}}{\Delta x^2} - 2 \frac{f^n_i - f^n_{i-1}}{\Delta x^3} \\ b_i &= 3 \frac{f^n_i - f^n_{i-1}}{\Delta x^2} - \frac{f'^n_i + 2f'^n_{i-1}}{\Delta x} \end{aligned} \right\} \quad (2.30)$$

CIP 法を式で示すと、式 (2.29), (2.30) となる。その特徴として、差分スキームの精度を上げるため、空間的な分布を三次スプライン関数で近似するが、二階微分の連続性を犠牲にすることで、自由度を上げて、元の方程式を満足するように安定に解く方法である。またこの方法の利点は $n+1$ のステップの値が完全に陽的に求められるので、並列計算機に適していることがあげられる。

以上が 1 次元に対する CIP 法である。次節で二次元への拡張について説明する。

2.4.2 CIP 法の構成方程式への適用

次に、CIP 法を構成方程式への適用方法について述べる。二次元における Maxwell モデルの構成方程式は

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial y} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \sigma_{xx} - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \sigma_{xy} \right) &= A_{xx} \\ \sigma_{yy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} - 2 \frac{\partial v}{\partial x} \sigma_{xy} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{yy} \\ \sigma_{xy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \sigma_{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{xy} \\ A_{xx} = \frac{2W}{R} \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) - u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - v \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right\} \\ A_{yy} = \frac{2W}{R} \left\{ \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial v}{\partial x} + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right) - u \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} - v \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right\} \\ A_{xy} = \frac{W}{R} \left\{ 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + 2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right. \\ \quad \left. - u \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right) - v \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right\} \end{aligned} \right\} \quad (2.31)$$

この式を一次元で CIP 法を適用した場合と同様に次の二つの式に分離して考える。

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \sigma_{xx} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \sigma_{xy} \right) &= A_{xx} \\ \sigma_{yy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \sigma_{xy} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{yy} \\ \sigma_{xy} + W \left(\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} - \frac{\partial v}{\partial x} \sigma_{xx} - \frac{\partial u}{\partial y} \sigma_{yy} \right) &= A_{xy} \end{aligned} \right\} \quad (2.32)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.33)$$

ただし粘弾性流体の計算は速度、応力（弾性による応力）、圧力の順で行うので、応力を計算する場合には新しい時間ステップ $(n+1)$ の速度の値を用いる。

step 1 式 (2.32) から各応力成分に対して時間的な増分を求める式へ展開する。各応力成分に対する時間的な増分を

$$\Delta \sigma_{xx}^n = \sigma_{xx}^{n+1} - \sigma_{xx}^n, \Delta \sigma_{yy}^n = \sigma_{yy}^{n+1} - \sigma_{yy}^n, \Delta \sigma_{xy}^n = \sigma_{xy}^{n+1} - \sigma_{xy}^n$$

とする。これを式 (2.32) に代入すると

$$\begin{aligned}
& \Delta\sigma_{xx}^n + W \left\{ \frac{\Delta\sigma_{xx}^n}{\Delta t} - 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xx}^n - 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xy}^n \right\} \\
&= A_{xx} - \sigma_{xx}^n + W \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{xx}^n + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{xy}^n \right\} \\
& \Delta\sigma_{yy}^n + W \left\{ \frac{\Delta\sigma_{yy}^n}{\Delta t} - 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xy}^n - 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{yy}^n \right\} \\
&= A_{yy} - \sigma_{yy}^n + W \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{xy}^n + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{yy}^n \right\} \\
& \Delta\sigma_{xy}^n + W \left\{ \frac{\Delta\sigma_{xy}^n}{\Delta t} - \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xx}^n - \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{yy}^n \right\} \\
&= A_{xy} - \sigma_{xy}^n + W \left\{ \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{yy}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{xx}^n \right\}
\end{aligned}$$

となる。整理して

$$\begin{aligned}
& \left(1 + \frac{W}{\Delta t} \right) \Delta\sigma_{xx}^n - 2W \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xx}^n - 2W \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xy}^n \\
&= A_{xx} - \sigma_{xx}^n + W \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{xx}^n + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{xy}^n \right\} \\
& \left(1 + \frac{W}{\Delta t} \right) \Delta\sigma_{yy}^n - 2W \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xy}^n - 2W \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{yy}^n \\
&= A_{yy} - \sigma_{yy}^n + W \left\{ 2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{xy}^n + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{yy}^n \right\} \\
& \left(1 + \frac{W}{\Delta t} \right) \Delta\sigma_{xy}^n - W \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{xx}^n - W \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1} \Delta\sigma_{yy}^n \\
&= A_{xy} - \sigma_{xy}^n + W \left\{ \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^{n+1} \sigma_{yy}^n + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^{n+1} \sigma_{xx}^n \right\}
\end{aligned} \tag{2.34}$$

上式を解いて各応力成分の増分を求める。

step 2 式 (2.33) を CIP 法で解く。弾性による応力は σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} の三つがある。ここでは、 σ_{xx} のみについて示し、その他を省略する。 σ_{yy} , σ_{xy} についてはそれぞれ記号が異なるのみで、式の形としては σ_{xx} の場合と同様である。まず σ_{xx}^n の値から x 方向の速度成分が応力に与える影響を計算し、 $\tilde{\sigma}_{xx}$ を求める。

$$\left. \begin{aligned} (\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j} &= (a_x)_{i,j} \xi^3 + (b_x)_{i,j} \xi^2 + (\Delta_x \sigma_{xx})_{i-1,j}^n \xi + (\sigma_{xx})_{i-1,j}^n \\ (\Delta_x \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} &= 3(a_x)_{i,j} \xi^2 + 2(b_x)_{i,j} \xi + (\Delta_x \sigma_{xx})_{i-1,j}^n \\ \xi &= x_i - u_{i,j}^n \Delta t, \Delta x = x_i - x_{i-1} \end{aligned} \right\} \quad (2.35)$$

ここで次の時間ステップの係数行列 $(a_x)_{i,j}$ 、 $(b_x)_{i,j}$ は

$$\left. \begin{aligned} (a_x)_{i,j} &= \frac{\{(\Delta_x \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} + (\Delta_x \sigma_{xx})_{i-1,j}^{n+1}\}}{\Delta x^2} - 2 \frac{\{(\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j} - (\tilde{\sigma}_{xx})_{i-1,j}\}}{\Delta x^3} \\ (b_x)_{i,j} &= 3 \frac{\{(\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j} - (\tilde{\sigma}_{xx})_{i-1,j}\}}{\Delta x^2} - \frac{\{(\Delta_x \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} + 2(\Delta_x \sigma_{xx})_{i-1,j}^{n+1}\}}{\Delta x} \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

で与えられる。

そして $\tilde{\sigma}_{xx}$ の値から y 方向の速度成分が応力に与える影響を計算し、 σ_{xx}^{n+1} を求める。

$$\left. \begin{aligned} (\sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} &= (a_y)_{i,j} \eta^3 + (b_y)_{i,j} \eta^2 + (\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j-1}^n \eta + (\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j-1} \\ (\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} &= 3(a_y)_{i,j} \eta^2 + 2(b_y)_{i,j} \eta + (\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j-1}^n \\ \eta &= y_j - v_{i,j}^n \Delta t, \Delta y = y_j - y_{j-1} \end{aligned} \right\} \quad (2.37)$$

ここで次の時間ステップの係数行列 $(a_y)_{i,j}$ 、 $(b_y)_{i,j}$ は

$$\left. \begin{aligned} (a_y)_{i,j} &= \frac{\{(\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} + (\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j-1}^{n+1}\}}{\Delta y^2} - 2 \frac{\{(\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j} - (\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j-1}\}}{\Delta y^3} \\ (b_y)_{i,j} &= 3 \frac{\{(\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j} - (\tilde{\sigma}_{xx})_{i,j-1}\}}{\Delta y^2} - \frac{\{(\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j}^{n+1} + 2(\Delta_y \sigma_{xx})_{i,j-1}^{n+1}\}}{\Delta y} \end{aligned} \right\} \quad (2.38)$$

で与えられる。

Δ_x 、 Δ_y はそれぞれ x 、 y 方向の増分を示す。ただし各速度成分が負になる場合は下添え字の -1 を $+1$ に換える。

以上の setp 1 と step 2 の二つの手順で CIP 法を二次元に拡張する。

step 3

step 1 で求めた応力の増分 $\Delta \sigma_{xx}^n$ と step 2 で求めた応力 σ_{xx}^{n+1} を加えて新しい時間ステップの値を求める。

$$\sigma_{xx}^{n+1} = \sigma_{xx}^{n+1} + \Delta \sigma_{xx}^n$$

同様な計算を σ_{yy} 、 σ_{xy} についても行う。以上のような方法で二次元の構成方程式を CIP 法を用いて解く。

2.5 境界条件

ここでは、二次元流路の代表的な流路パターンに対する境界条件について述べる。

流入部の速度は、十分に発達した速度分布を用いる。また、 σ についても十分に発達した場合の σ の分布を与える。

流出部は、主に内部点から外挿して求める。例えば $x = \text{const.}$ の流出境界の場合には次式となる。

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad v = 0, \quad p = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} = 0, \quad (2.39)$$

対称軸上における境界条件は、例えば $y = \text{const.}$ の対称境界に適用する場合は次のようにする。

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = 0, \quad \sigma_{xy} = 0 \quad (2.40)$$

静止壁面境界における条件は、速度は滑り無し条件、圧力は運動方程式 (2.1) から得られる垂直方向の圧力勾配を与える。応力に関しては、例えば $y = \text{const.}$ 境界について考えると、壁面上の弾性による応力成分 σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} は、構成方程式の左辺の $v\partial\sigma_{xx}/\partial y$, $v\partial\sigma_{yy}/\partial y$, $v\partial\sigma_{xy}/\partial y$ によって内部へ影響を及ぼしている。ところが v は境界上で0となり、かつ連続の式から $\partial v/\partial y = 0$ となるため、境界近傍では v はほとんど0になる。したがって、境界近傍では $v\partial\sigma_{xx}/\partial y$, $v\partial\sigma_{yy}/\partial y$, $v\partial\sigma_{xy}/\partial y$ の項の影響が小さくなり、境界上の σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} の影響は内部へ及びにくいと考えられる。そこで本研究では、 σ_{ij} の壁面上の値に対して特別な条件を与えないで、2階微分が0となるように内部点の値から外挿して境界上の σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} を求めた。これらの静止壁面上の境界条件をまとめると次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} u = 0, \quad v = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial y} &= \frac{\partial p_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial p_{yy}}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 \sigma_{xx}}{\partial y^2} &= 0, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{yy}}{\partial y^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial y^2} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.41)$$

次に、図 2.2 に示すような 90° の角度を有する角部の条件について考える。このような角部についてはいくつか条件が示されているが、流れが急激に変化するため厳密な取り扱いは困難である。本研究ではここでも特別な条件は使用せず、外挿条件を用いる。図 2.2 の場合に対する角部の条件を次に示す。ただし、下添字の I, II, III, IV は、それぞれ図 2.2 に示した I, II, III, IV の方向から2階微分が0となるように外挿して求めた角部の値を意味する。

$$\left. \begin{aligned} u = 0, \quad v = 0, \quad p = \frac{p_{\text{II}} + p_{\text{III}}}{2} \\ \sigma_{xx} = \frac{\sigma_{xx,\text{I}} + \sigma_{xx,\text{IV}}}{2}, \quad \sigma_{xy} = \frac{\sigma_{xy,\text{I}} + \sigma_{xy,\text{IV}}}{2}, \quad \sigma_{yy} = \frac{\sigma_{yy,\text{I}} + \sigma_{yy,\text{IV}}}{2} \end{aligned} \right\} \quad (2.42)$$

270°の角度を有する角部については角部近傍の流速がほぼ0となるため、内部に対する影響は無視できるが、90°の角部と同様な条件を用いた。

2.6 結 言

本章では、第3章および4章で用いた流れの基礎式と数値計算方法について流れ場を二次元流路と考えて述べた。まとめると以下ようになる。

1. 慣性力を考慮した粘弾性流体による流れを数値計算するために、構成方程式の解法に CIP 法を適用した新しい方法を示した。また、Lax 法についても簡単に述べた。
2. 偏差応力テンソル $\mathbf{P}$ を粘性による応力 $\boldsymbol{\tau}$ とそれ以外の応力 $\boldsymbol{\sigma}$ に分離し、 $\boldsymbol{\sigma}$ について基礎式を導いた。
3. 速度 $\mathbf{v}$ および圧力 p は、Euler 陰スキームと MAC 法を組み合わせた従来の方法で解く方法について述べた。
4. 境界条件を速度 $\mathbf{v}$ 、圧力 p 、応力 $\boldsymbol{\sigma}$ について示した。

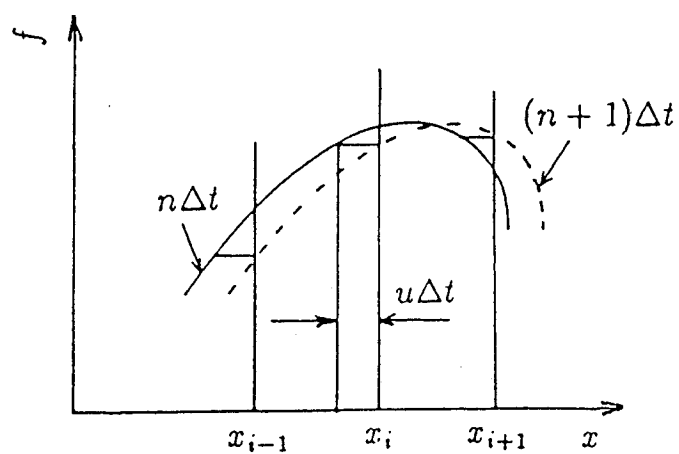


図 2.1 f の時間変化

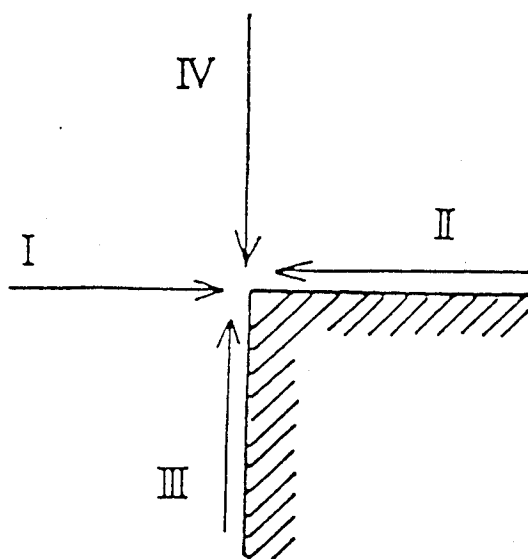


図 2.2 90° 角部

第3章

2次元急縮小流れの構成方程式を用いた数値解析

3.1 緒言

粘弾性流体の流れに関する研究は、工業的な要求から高分子融液のような高粘度の場合を中心に行われてきた^[88]。このような高粘度の流体の場合は通常慣性力を無視して取り扱っている。しかし、高分子溶液の流れのように慣性力が無視できない流れにおいても高粘度の場合と異なる粘弾性流体特有の現象がいくつか存在することが報告されている^{[47],[48]}。これに対し、慣性力を考慮した数値計算はほとんどなく、わずかに Crochet ら^[70]、Yoo ら^[120] によって試みられているが、いずれも慣性力の小さい範囲を扱っているだけである。著者の知る限り、慣性力の影響による粘弾性流体特有の現象を示す実験結果と比較し得るような計算例は見あたらない。

急縮小流れは実験・計算両面から種々の方法で調べられている。急縮小流れは流量や流路形状などによって粘弾性流体特有の流れが発生することが知られている。例えば、急縮小部上流側に再循環領域が発生する^[88]。また、慣性力の影響の大きい範囲では主流の流線が外側に開く流れ (divergence flow) が発生する^{[47],[48]} など流体力学的にも興味深い流れがある。このような流れのほとんどに対して、発生メカニズムが解明されていないのが現状である。数値計算に関していえば divergence flow を計算できた例はまだない。

粘弾性流体の流れでは、慣性力、粘性力、弾性力が流れ場に作用するが、流れ場の代表速度を U とすると、それぞれの力は U^2 、 U 、 U^2 に比例する¹。従って、流

¹代表長さ L 、密度 ρ 、粘度 η 、緩和時間 λ とすると、慣性力 $= \rho U^2 L^2$ 、粘性力 $= \eta U L$ 、弾性力 $= \lambda \eta U^2$ となる。

れが速くなるにつれて粘性力の影響よりも慣性力と弾性力の影響が大きくなる。川端らは構成方程式の解法に Lax 法を適用することによってこのような慣性力と弾性力が重要になる領域でも安定に計算できることを示した^[108]。しかし Lax 法は数値粘性が大きいという欠点がある。

本章では、前章で構成方程式の解法として説明した CIP 法^[93]を、2 次元急縮小流れについて適用した場合による数値計算結果と比較的濃度の薄い高分子溶液による可視化実験結果との比較を行った。その結果、高粘度の場合には現れない粘弾性流体特有の流れパターンがあることを可視化実験により確認し、さらに構成方程式の解法に CIP 法を適用した数値計算によってもこの特有のパターンが得られた。また、構成方程式として Maxwell モデル、Giesekus モデル、PTT モデルを用いてそれぞれについて計算し、各パラメータの流れ場に対する影響を調べた。

3.2 可視化実験および粘性係数の測定

3.2.1 可視化実験装置

図 3.1 に可視化実験装置の概略を示す。アルミ粉末をトレーサとして混入した試料液体はオーバーフロータンク (B) から一定ヘッドで供試流路 (D) に流入する。流量調節はバルブ (E) で行う。可視化写真撮影は光源 (H) の光を幅 2 mm のスリット (I) に通し、トレーサ粒子に反射した光によって行う。

図 3.2 に流路形状を示す。流路は上流側流路幅が 20 mm、下流側流路幅が 10 mm の 2:1 急縮小流路とした。また、流路の奥行きは 200 mm とし、スリット (I) を中央部に置いた。またスリット位置を移動して、本実験の範囲内では流れは 2 次元であることを確認した。

3.2.2 高分子溶液および粘性係数

試料流体としては、ポリアクリルアミド (PAA) の水溶液 (0.01 %, 0.02 %, 0.03 %) を用いた。

十分に発達した円管内の流れの流量と圧力勾配を測定し、見かけの粘性係数を算出した。このとき速度分布はニュートン流体の場合と同様な放物分布を示すと仮定し、流れを代表するせん断速度 $\dot{\gamma}$ は、側壁における速度勾配を用いた。

図 3.3 に粘性係数測定の結果を示す。PAA 濃度 0.01%, 0.02%, 0.03% で液体の温度 $t = 22.0^{\circ}\text{C}$ の場合である。せん断速度 $\dot{\gamma}$ の増加に伴って見かけの粘性係数 η が低下する shear-thinning 性を示すことがわかる。しかし、ゼロせん断粘度および溶媒の粘性係数である第 2 ニュートン粘度の値は顕著にはあらわれていないことがわかる。この図 3.3 より粘度を求めることにする。図から求めたそれぞれの実験結果のせん断速度に対応する粘度を用いてレイノルズ数を算出する。

3.3 計算領域、計算条件

計算領域は図 3.4 に示すように上下対称として半分の領域のみを扱い、流入・流出境界は急縮小部からそれぞれ 3.5 とした。また、計算に用いた格子は、主に 80×30 分割の不等分割格子を用いた。

3.4 特異流れの発生

3.4.1 可視化実験結果

図 3.5 に可視化実験の結果を示す。図 3.5 の (b) ~ (g) のずり速度 (十分に発達した下流側側壁でのずり速度) は $3.2 \sim 46.2$ (1/s) の範囲となる。図 3.3 にその範囲を併記した。(a) はニュートン流体 (水) の場合であり、(b) ~ (g) は PAA 0.02% 水溶液を用い徐々に流量を増加していった場合の結果である。流量が少ない場合 (b) は、ニュートン流体 (a) とほとんど同じ流れになる。しかし、(c) → (d) と流量が増え、流れが急縮小肩部 (図 3.4 の BC 部) に押しつけられる流れになり、(e) → (f) → (g) とさらに流量が増加すると急縮小上流側側壁近傍 (図 3.4 の B 点の上流側) の流れが側壁方向へ一旦曲がってから下流に流入するようになり、その曲がりは流量が増加するに従って急激になることがわかる。

図 3.6 に PAA 0.03%, 0.01% の場合の実験結果の一例を示す。PAA 0.03% の場合は流量では急縮小部前に再循環領域が発生し、流れも外側に曲がってから下流に流入している。また、PAA 0.01% の流量が大きい場合には、流れは流れが急縮小肩部に押しつけられるような流れになる。

流れのタイプは次の 4 つに分類される。

- A. ニュートン流体と同様に下流側にスムーズに流れ込むタイプ。
- B. 流れが急縮小肩部に押しつけられるように流れるタイプ。
- C. 急縮小上流側側壁近傍の流れが側壁方向へ一旦曲がってから下流に流入するタイプ。
- D. 急縮小部前に再循環領域が発生し、流れが外側に曲がってから下流に流入するタイプ。

3.4.2 Maxwell モデルによる計算結果

Maxwell モデルは、バネとダッシュポットを直列に組み合わせた非常に単純なモデルであるが、種々の非線形モデルの基礎モデルとして重要なモデルである。

また、図 3.5 に示した実験と同じように同一の流体に対して流量が増加する場合に対応した数値計算を行いたい。そこで計算は、 $W/R (= \lambda \eta_0 / \rho L^2)$ は代表速度 U に無関係となるよう $W/R =$ 一定の関係を保ちつつ R と W を増加させた。

Maxwell モデルによる計算結果を図 3.7 ~ 図 3.10 に示す。それぞれ上半分に x 方向速度成分 u の分布を、下半分に流線図を示した。図 3.7 は $W/R = 0.01$ 、図 3.8

は $W/R = 0.005$ 、図 3.9 は $W/R = 0.002$ 、図 3.10 は $W/R = 0.001$ の場合である。また、 W/R が大きい場合が高分子の濃度が高い場合になる。

これらの図より、 $W/R = 0.001, 0.002$ のときは流れは A タイプ $\rightarrow$ B タイプへと変化する。 $W/R = 0.005$ のとき、流れは A タイプ $\rightarrow$ B タイプ $\rightarrow$ C タイプへと変化する。 $W/R = 0.01$ のとき、流れは A タイプ $\rightarrow$ B タイプ $\rightarrow$ D タイプへと変化する。このとき、発生する再循環領域は小さく、 W, R の大きい場合の結果は再循環領域があまりはつきりしない。

3.4.3 計算結果と実験結果の比較

図 3.8 は $W/R = 0.005$ の場合である。(a),(b),(c) のように低流量の場合は、図 3.5 (b) と同様にニュートン流体と同じような流れであるが、(d) $\rightarrow$ (e) と流量が増加するにつれて流線が急縮小肩部 (BC 部) に押しつけられ、急縮小部近傍上流側の速度分布についても対称面上の速度が減少し、側壁近くの方が大きくなっている。さらに (f) $\rightarrow$ (g) と流量が増加すると急縮小上流側壁近傍 (B 点の上流側) の流線が側壁側へ一旦曲がってから下流側流路へ流入していく。以上の流れ場の変化 (A タイプ $\rightarrow$ B タイプ $\rightarrow$ C タイプ) は図 3.5 の実験結果と定性的によく一致している。なお、この一旦側壁へ曲がってから流入するパターンは、二次元流路における従来の慣性力が無視できる領域の実験および計算では見られないもので、慣性力と弾性力の相互効果によって現れるものと考えられる。また、この流れパターンは円管急縮小の実験でも報告されており^{[22],[47],[48]}、川端らも Lax 法によってわずかに開く流れを捕らえた^[108]。しかし、本報のように実験結果と定性的に一致する数値計算結果はこれまでに無く、本方法が粘弾性流体の流れにおける慣性力による効果をシミュレートするのに有効であることがわかる。

この特徴を持つ流れとして、先に図 3.6 の (a) に PAA 0.03% 水溶液の可視化実験結果 ($Q = 1.11 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$) を示し、図 3.7(e) は $R = 40, W = 0.4$ ($W/R = 0.01$) の場合の Maxwell モデルによる計算結果を示した。0.03 % 水溶液の場合も低流量の場合はニュートン流体とほとんど変わらないが、流量が大きくなると図 3.6(a) に示すように急縮小角部 (B 点の上流側) に再循環領域が発生し、流線は急縮小部上流側で側壁側に一旦曲がってから下流に流入する流れパターンになった。この場合も実験結果と本方法による数値計算結果はよく一致した。

また、図 3.6 の (b) は PAA 0.01% 水溶液の可視化実験結果 ($Q = 7.74 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$) であり、図 3.7(f) は Maxwell モデルによる $R = 100, W = 0.2$ ($W/R = 0.002$) の

場合の計算結果である。この場合も、低流量の場合はニュートン流体とほとんど同じであるが、流量が大きくなるにつれ流線が急縮小肩部（BC部）に押し付けられる流れとなる。しかし、一旦側壁側へ曲がる流れは見られなかった。

3.4.4 流動曲線と対称軸上の伸長速度

図 3.11 に Maxwell モデルの流動曲線を示す。図中の $\dot{\gamma}$ は無次元せん断速度、 $\dot{\epsilon}$ は無次元伸長速度、 η_E は伸長速度、 θ_1 は第一法線応力差係数である。図より、粘性係数も第一法線応力差係数も一定となり、伸長粘度は伸長速度の増加と共に増加する stretch thickening 性を示すことがわかる。従って、可視化実験で見られた急縮小流れにおける粘弾性流体特有の流れは伸長粘度の stretch thickening 性が大きく影響していると考えられる。

図 3.12 に $W/R = 0.005$ の場合の対称軸上における伸長速度の x 方向の分布を示したものである。伸長速度のピーク値はほぼ急縮小部であり、そのピーク値の値はレイノルズ数が大きい方が大きくなっていることがわかる。

3.5 Giesekus モデルによる検討

前節の計算結果はすべて一定粘度の Maxwell モデルによる結果であるが、実際の高分子溶液で一定粘度を示す流体は稀である。そこで shear-thinning 性と stretch thickening 性を示す Giesekus モデルによる計算を行い、非線形性の影響を検討する。

この Giesekus モデルは、高分子の絡み合い系における高分子鎖の運動の異方性を、高分子鎖と媒体（周囲の分子鎖）の間に働く摩擦の異方性として捕らえ、この異方性の程度を表す無次元パラメーター α を導入したものである。またこのモデルは、Doi-Edwards の管模型理論^{[49],[50],[51]} を基礎とし、式の形も簡単で取り扱いやすく適用範囲も広いと考えられるので、このモデルを使って計算することは価値のあることと考えられる。

以下に shear-thinning 性を示す Giesekus モデルによる計算結果を示す。図 3.13 に $\alpha = 0.001$ 、図 3.14 に $\alpha = 0.005$ 、図 3.15 に $\alpha = 0.01$ 、図 3.16 に $\alpha = 0.015$ 、図 3.17 に $\alpha = 0.02$ の結果である。これらに図より、 α の小さい範囲では、レイノルズ数 R 、ワイゼンベルグ数 W を増加させた場合に Maxwell モデルの場合と同様な傾向を示す。しかし、 α が大きくなると流線が側壁に曲がり始めるレイノルズ数の値が大きくなる傾向にあることが分かる。

$R = 60, W = 0.3 (W/R = 0.005)$ に対して、 $\alpha = 0.001$ (図 3.13 (e))、 $\alpha = 0.005$ (図 3.14 (e))、 $\alpha = 0.01$ (図 3.15 (e))、 $\alpha = 0.015$ (図 3.16 (e))、 $\alpha = 0.02$ (図 3.17 (e)) を比較する。これに対応する Maxwell モデル ($\alpha = 0.0$) による結果は図 3.8 (g) である。これらの図より、急縮小部上流側側壁部における流線の側壁方向への曲がり方は α が大きくなるにつれ弱くなることがわかる。図 3.18 に $\alpha = 0.001, 0.005, 0.01, 0.015, 0.02$ の場合の単純ずり流動（無次元せん断速度 $\dot{\gamma}$ ）における見かけの粘度 η および一軸伸長流動（無次元伸長速度 $\dot{\epsilon}$ ）における伸長粘度 η_E を示す。図より Giesekus モデルの η は $W\dot{\gamma}$ が 1 以下では α による変化はなくゼロ剪断粘度を示すが $W\dot{\gamma}$ が 2 以上になると shear thinning 性が現れることがわかる。また η_E については $W\dot{\epsilon}$ が 0.3 ~ 1 の範囲で急激に増加し、その増加量は α が小さい程大きくなることがわかる。この場合の流れの上流側の十分に発達した流れの側壁における $W\dot{\gamma}$ の値は約 1 となるが、図 3.18 から $W\dot{\gamma} = 1$ 前後で η は一定粘度となるため上流側では非ニュートン粘性の影響は表れないと考えられる。

図 3.19 に $R = 60, W = 0.3$ の場合の対称軸上における x 方向の伸長速度の分布を示す。図より、 $W\dot{\epsilon}$ の値の最大値は 1 を越えないことが分かる。また流れの対称面上の $W\dot{\epsilon}$ の値の最大値は約 1 となり、図 3.18 から $W\dot{\epsilon}$ が 1 より小さい範囲で伸

長粘度の変化が非常に大きくなるため、流れは伸長粘度の変化の影響を大きく受けていると考えられる。従って、流線の側壁への曲がりには伸長速度による伸長粘度 η_E の変化に依存し、 η_E の変化量の減少とともに曲がり弱くなると考えられる。

3.6 PTT モデルによる検討

本節では、PTT モデルによる計算結果を示す。

PTT モデルは、ブロー成形 CAE に関してはベストモデルのひとつであるという評価もある^[119]。また、パラメータの設定の仕方でも shear-thinning 性のみの効果、stretch thickening 性のみの効果を取り出すことが出来、特異流れの原因を調査する際に有効であると考えられる。

3.6.1 モデル定数 ε の影響

PTT モデルのモデル定数 ε が流れ場にどのような影響を与えているかを調べた。

図 3.20 に PTT モデルの $\xi = 0$ に対する $\varepsilon = 0$ (Maxwell モデル)、0.01、0.03、0.05 の場合の単純ずり流動における見かけの粘度 η 、及び二次元の伸長流動における伸長粘度 η_E を示す。この図より η は、 $W\dot{\gamma}$ の増加にともなって shear thinning 性を示している。 η_E は $W\dot{\varepsilon}$ が 0.3 ~ 2 の範囲で急激に増加する stretch thickening 性を示す。また ε が小さいほど stretch thickening 性が強くなり Maxwell モデル ($\varepsilon = 0$) の流動に近くなる事が分かる。

図 3.21 に $R = 60$ 、 $W = 0.3$ 、 $\xi = 0$ に対する $\varepsilon = 0$ 、0.01、0.03 の場合の計算結果を示す。なお、図の上半分は x 方向速度成分 u の分布、下半分には流線を示した。この図より、 ε が大きくなるにつれ粘弾性流体特有の流れである急縮小上流側側壁近傍において、流線が側壁側に一旦曲がってから下流に流入するという流れが見られなくなるのが分かる。これは、前節で述べたように側壁側に一旦曲がる流れは、伸長速度による伸長粘度の変化に依存するという理由によるものと考えられる。

3.6.2 モデル定数 ξ の影響

もう一つのモデル定数 ξ が流れ場にどのような影響を与えているかを調べた。 $\varepsilon = 0.01$ における $\xi = 0.0001$ 、0.001、0.005 の流動曲線を図 3.22 に示す。見かけの粘度 η は、図 3.20 の場合と同様に shear thinning 性があることがわかる。また、伸長粘度 η_E も stretch thickening 性を示すが、この ξ の範囲では η_E の流動曲線にほとんど変わりがない事が分かる。

次に図 3.23 に $R = 60$ 、 $W = 0.3$ 、 $\varepsilon = 0.01$ に対する $\xi = 0.0001$ 、0.005 の場合の計算結果を示す。図より、モデル定数 ξ が変わっても流れの様子にはほとんど変化がなく、側壁側に曲がる流れパターンになっていることが分かる。つまり、伸長粘度 η_E の流動曲線が ξ によって変わらない場合には、モデル定数 ξ の影響はあまりない

と考えられる。

3.6.3 伸長粘度の影響

次に、伸長粘度の影響について検討する。図 3.24 に、見かけの粘度 η の変化がほぼ同じで伸長粘度 η_E が異なる場合の流動曲線を示す。 $\xi = 0.004, \varepsilon = 0.01$ のとき η_E の stretch thickening 性が強く、 $\xi = 0.003, \varepsilon = 0.02 \rightarrow \xi = 0.002, \varepsilon = 0.04$ となるに従って、stretch thickening 性は弱くなることがわかる。

図 3.25 に、 $R = 60, W = 0.3$ の場合の図 3.24 の ξ, ε の値に対応する計算結果を示す。(a) の $\xi = 0.004, \varepsilon = 0.01$ のときは、側壁側に曲がる流れパターンになっていることがわかる。(b) の $\xi = 0.002, \varepsilon = 0.04$ の場合では急縮小部に押しつけられるような流れパターンになることがわかる。 ξ と ε の組み合わせによって伸長粘度の流動曲線 η_E が大きく違うことから、stretch thickening 性の強い流体が側壁側に曲がるパターンになりやすいことが予想できる。

3.6.4 第 2 ニュートン粘度の影響

実際の粘弾性流体は、見かけの粘度 η は、ずり速度 $\dot{\gamma}$ を大きくしていくとある一定値(第 2 ニュートン粘度 η_2) に近づく事が知られている。しかし、その溶媒の影響がどの程度であるかを実験で調べることは困難である。そこで、数値解析において、第 2 ニュートン粘度 η_2 が流れ場にどのように影響しているのか検討した。図 3.26 に $\xi = 0.0001, \varepsilon = 0.01$ 、に対する $\eta_2 = 0.01\eta_0, 0.1\eta_0, 0.2\eta_0$ の場合の流動曲線を示す。図より、見かけの粘度 η については、 $W\dot{\gamma}$ の増加に伴いいずれの場合も shear thinning 性を示すが、ある程度の $W\dot{\gamma}$ になると一定値に近づいていく。また、第 2 ニュートン粘度がゼロせん断粘度 η_0 に近いほど shear thinning 性が緩やかになっているのがわかる。次に、 η_E については、第 2 ニュートン粘度 η_2 とゼロせん断粘度 η_0 の差が大きいほど stretch thickening 性がわずかに強くなっているのがわかる。次に図 3.27 に $R = 60, W = 0.3, \xi = 0.0001, \varepsilon = 0.01$ と固定し R_2 を 6000、600 として計算した結果を示す。これらの結果を見ると (a) $R_2 = 6000$ のときは側壁側に曲がる流れパターンとなり、(b) の $R_2 = 600$ の時は急縮小部に押しつけられる流れパターンになっているのが分かる。 $R = 60$ と一定であるので、 R_2 が大きくなると $\eta_0 - \eta_2$ は大きくなる。従って、 $\eta_0 - \eta_2$ が大きい場合に側壁側に曲がるパターンになることが分かる。

3.7 lip 渦の発生

図 3.28 は、図 3.8 (e) の $R = 40, W = 0.2 (W/R = 0.005)$ の場合に対して、さらに格子分割を細かく (160×60) して数値計算した場合の Maxwell モデルによる結果である。図から図 3.8 (e) との大きな違いはないものの流入角部 (C 点) 近傍に微小な渦が発生していることがわかる。本研究の実験では流入角部に注目した詳細な実験を行うことが出来なかったが、この渦は Boger ら [88],[80] の円管急縮小流路による実験で報告されている lip vortex であると考えられ、本計算方法によって lip vortex が捕らえられることが明らかになった。

3.8 結 言

本章では、第2章で提案した構成方程式の解法に CIP 法を適用する方法を用いて 2次元急縮小流れの数値計算を行い、可視化実験と比較検討した。計算は、Maxwell モデル、Giesekus モデル、PTT モデルについて行った。可視化実験は、PAA 水溶液を使って、アルミ粉法によって可視化した。まとめると以下ようになる。

1. 流量を徐々に増加すると、急縮小部上流側で流線が側壁側に開く流れとなったが、Maxwell モデルを用いた本方法による数値計算でも同様な傾向を示し、本方法が粘弾性流体の慣性力を考慮した流れをシミュレートするのに有効であることがわかった。
2. Giesekus モデルおよび PTT モデルによる数値解析の結果、急縮小部上流側の流線が開く流れは伸長速度による伸長粘度の変化に依存することが分かった。
3. 第2ニュートン粘度を考慮した場合には、ゼロせん断粘度 η_0 と第2ニュートン粘度 η_2 の差が流れパターンに影響を与える。

以上のように、本方法による数値計算結果と可視化実験結果とを比較したものであったが、さらに高濃度の水溶液を用いた場合、急縮小コーナ部 (B 点) に大きな再循環領域が観察された。しかし、このような場合に対する数値計算は発散してしまい、解を得ることができなかった。したがって再循環領域を生じるような粘弾性流体の流れを解析し得る方法の開発が今後の課題である。

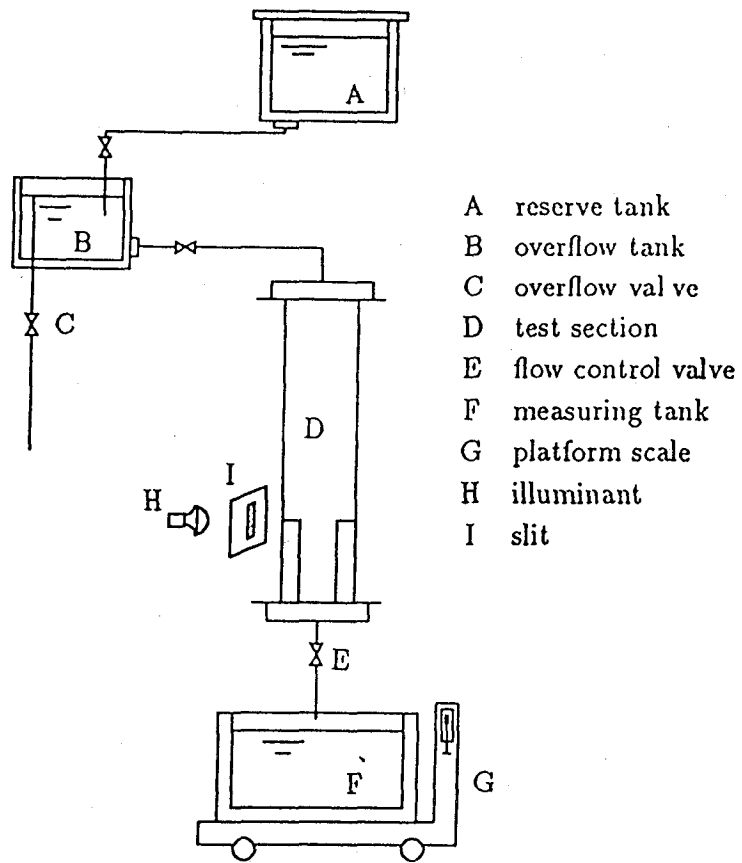


図 3.1 可視化実験装置の概略図

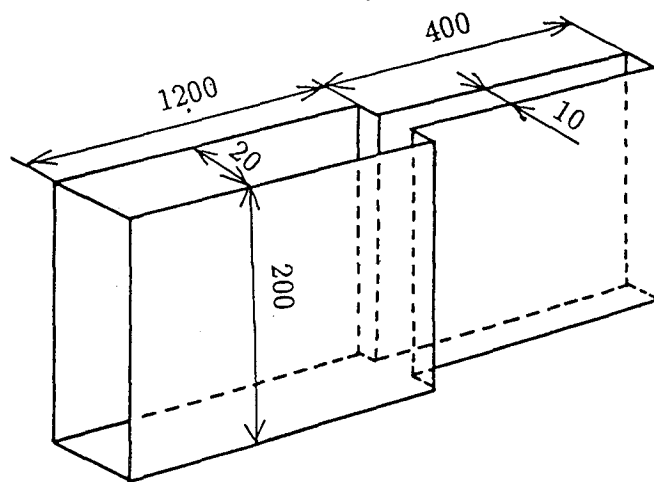


図 3.2 急縮小流路

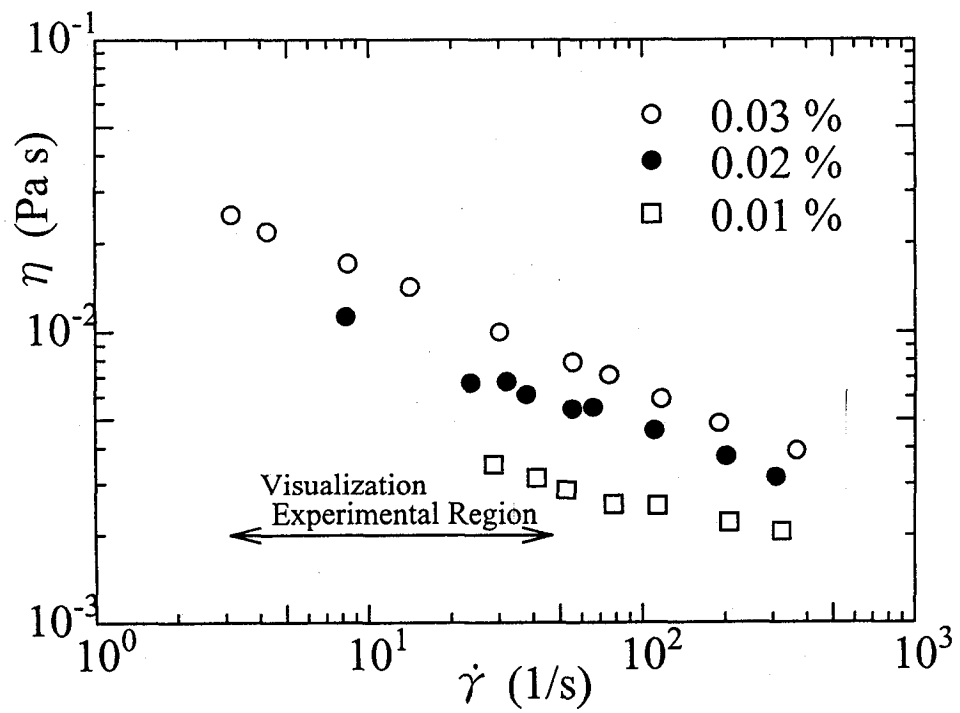


図 3.3 PAA 水溶液の粘性係数

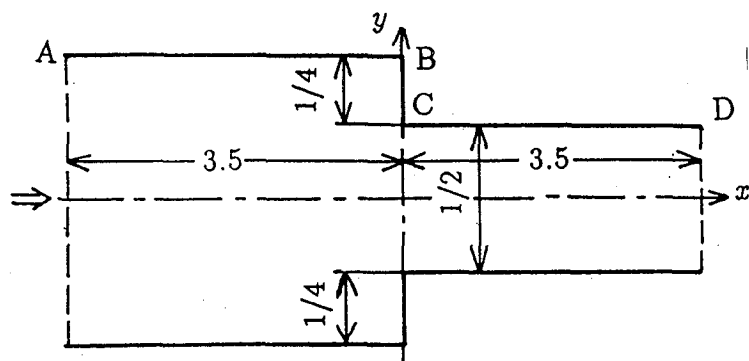
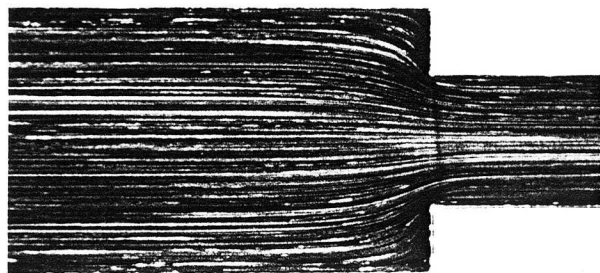
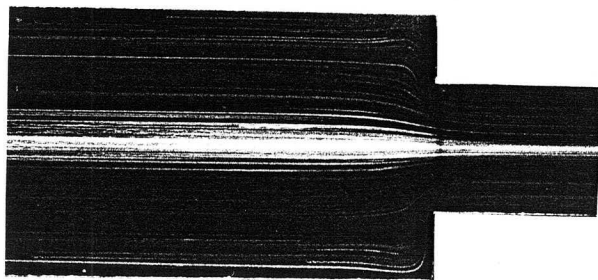


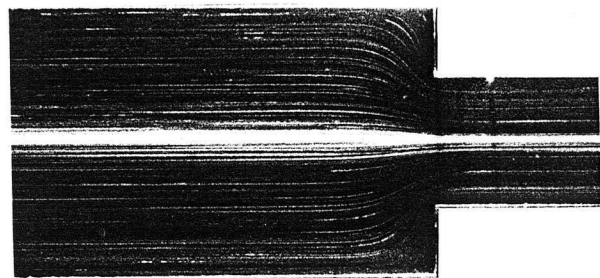
図 3.4 計算領域



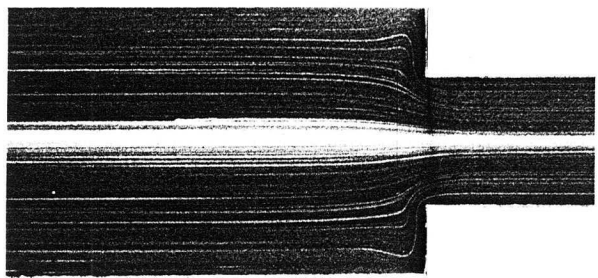
(a) water, $Q = 3.74 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 187$



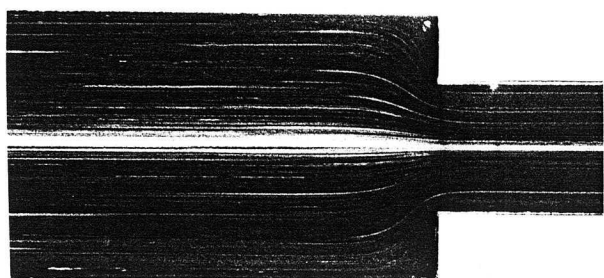
(e) $Q = 7.41 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 22.2$



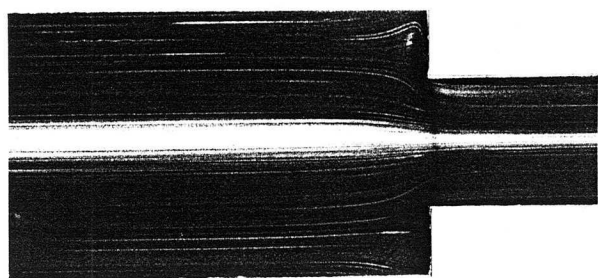
(b) $Q = 1.07 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 3.21$



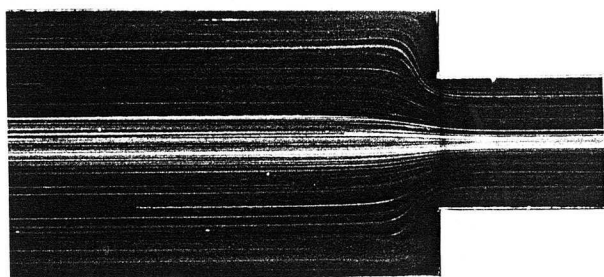
(f) $Q = 1.09 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 32.6$



(c) $Q = 1.94 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 5.83$



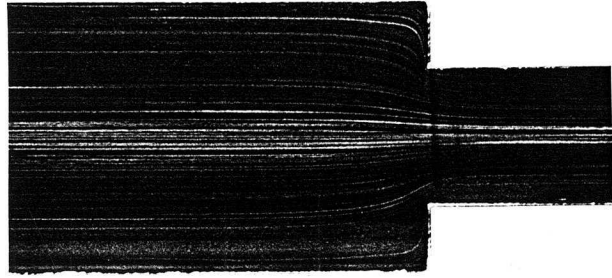
(g) $Q = 1.54 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 46.1$



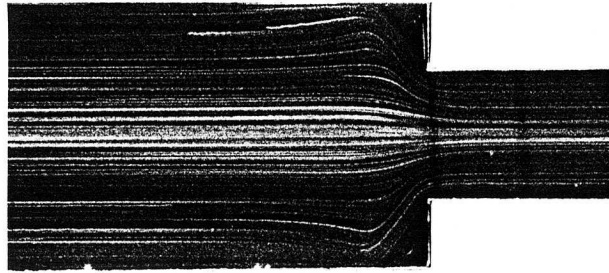
(d) $Q = 4.08 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$, $R = 12.2$

図 3.5 可視化実験結果

(a): ニュートン流体、(b)~(g): PAA 0.02% 水溶液

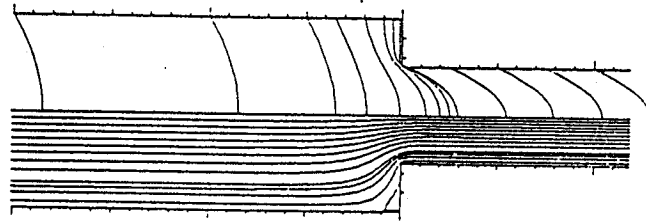


(a) PAA 0.01% 水溶液 ($Q = 7.74 \times 10^{-5} \text{m}^3/\text{s}$, $R = 23.22$)

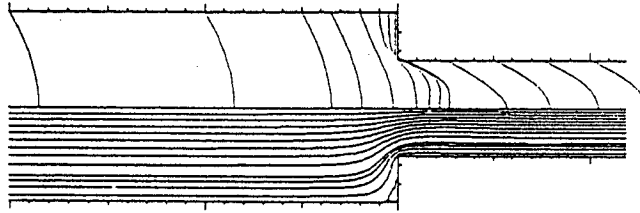


(b) PAA 0.03% 水溶液 ($Q = 1.11 \times 10^{-4} \text{m}^3/\text{s}$, $R = 33.36$)

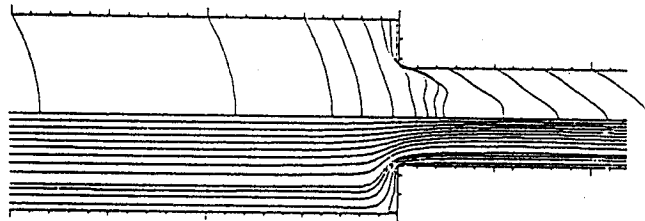
図 3.6 可視化実験結果 (PAA 0.01%, 0.03%)



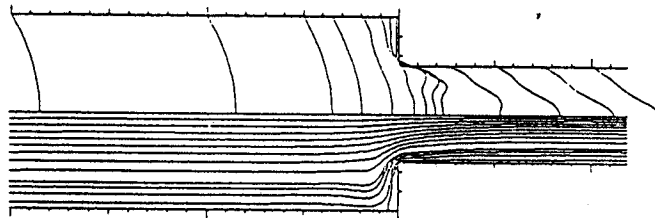
(a) $R=5, W=0.05$



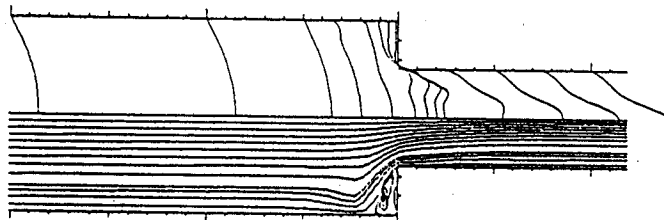
(b) $R=10, W=0.1$



(c) $R=20, W=0.2$



(d) $R=30, W=0.3$



(e) $R=40, W=0.4$

図 3.7 Maxwell モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果 ($W/R = 0.01$)

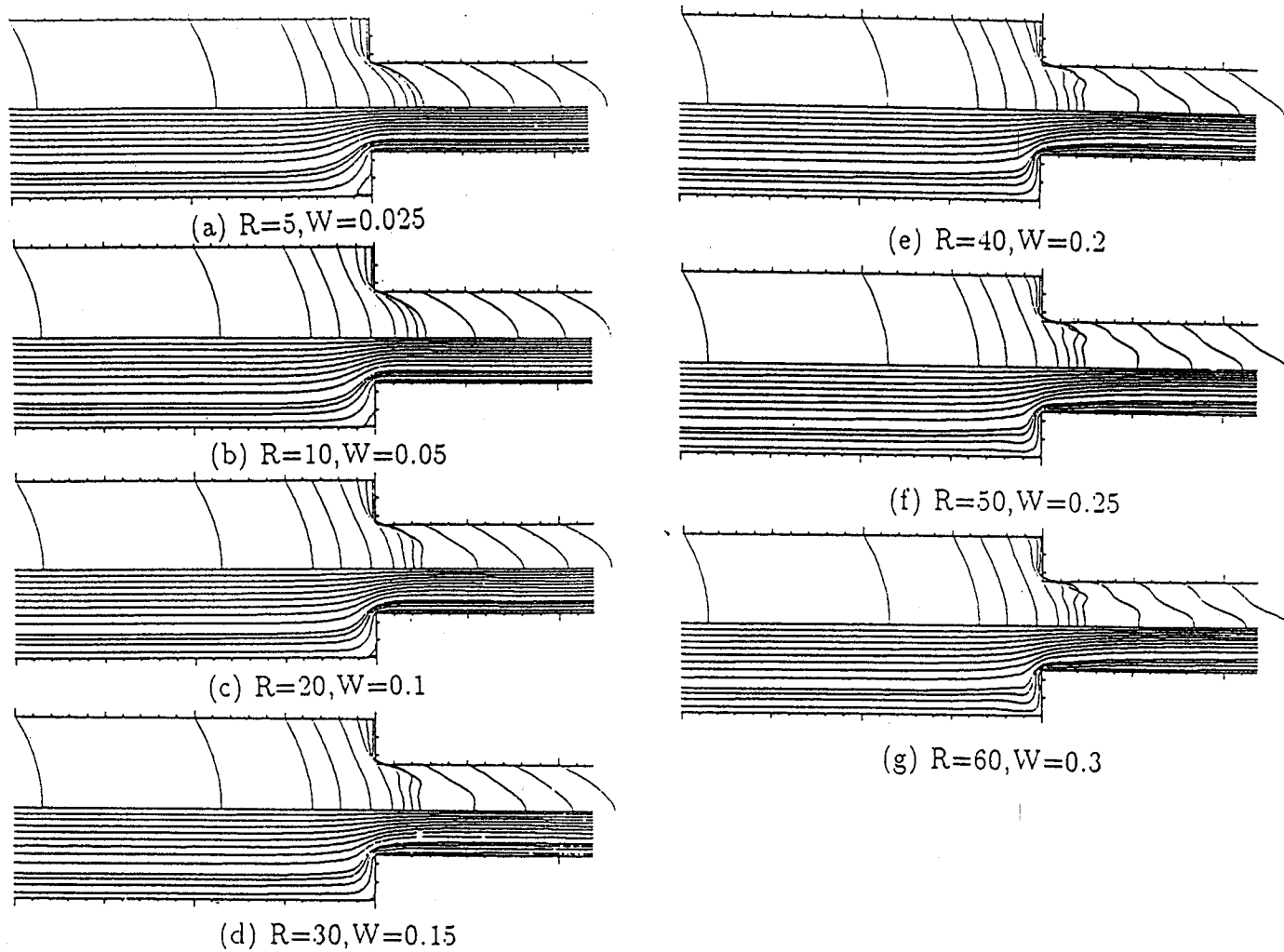
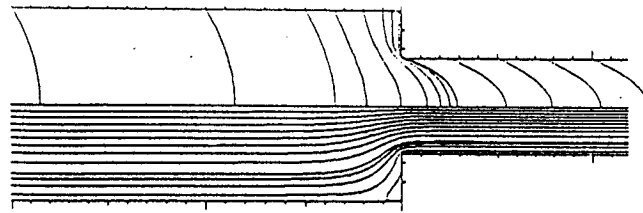
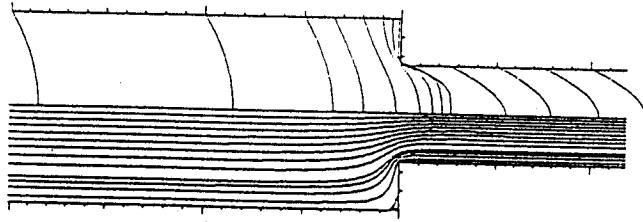


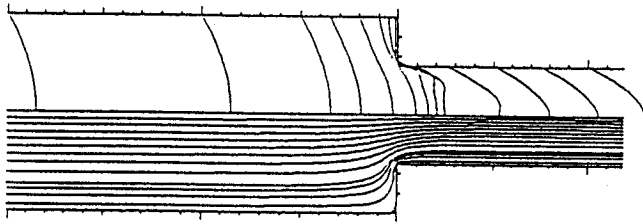
図 3.8 Maxwell モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果 ($W/R = 0.005$)



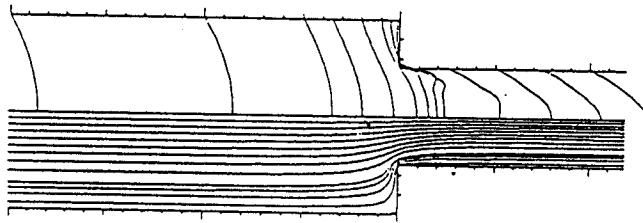
(a) $R=5, W=0.01$



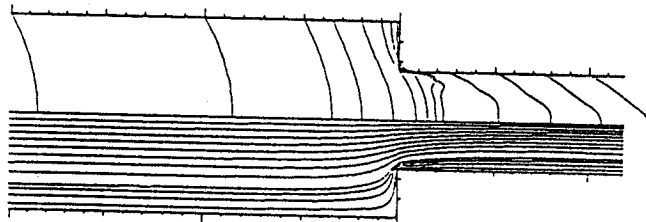
(b) $R=20, W=0.04$



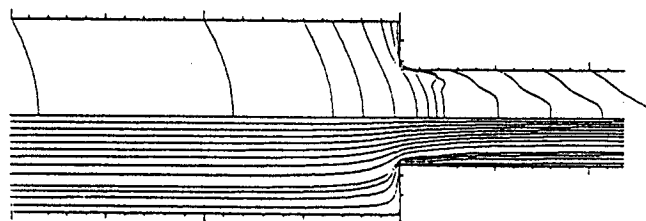
(c) $R=40, W=0.08$



(d) $R=60, W=0.12$

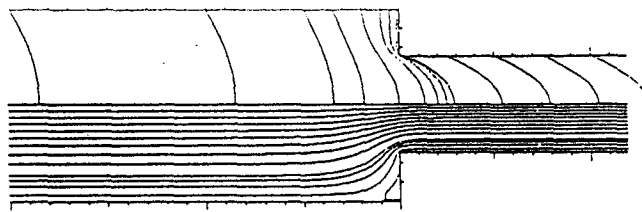


(e) $R=80, W=0.16$

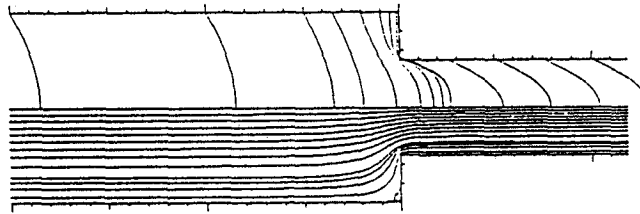


(f) $R=100, W=0.2$

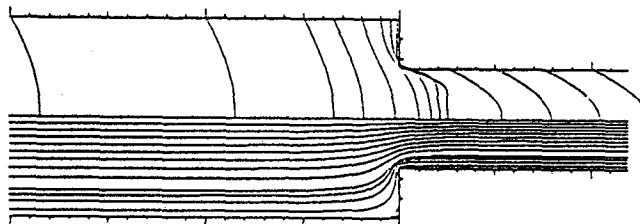
図 3.9 Maxwell モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果 ($W/R = 0.002$)



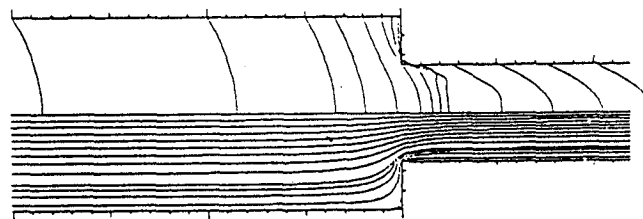
(a) $R=5, W=0.005$



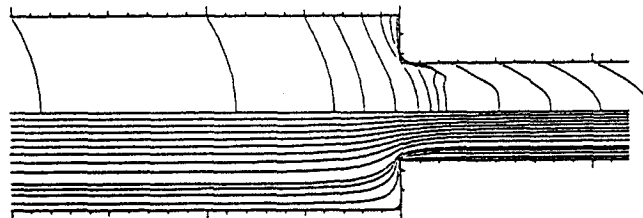
(b) $R=20, W=0.02$



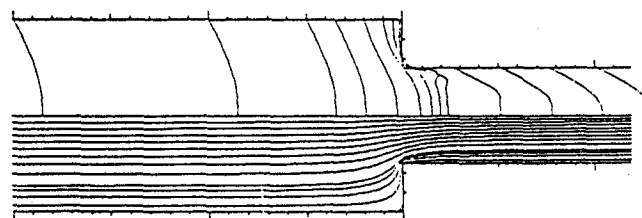
(c) $R=40, W=0.04$



(d) $R=60, W=0.06$



(e) $R=80, W=0.08$



(f) $R=100, W=0.1$

図 3.10 Maxwell モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果 ($W/R = 0.001$)

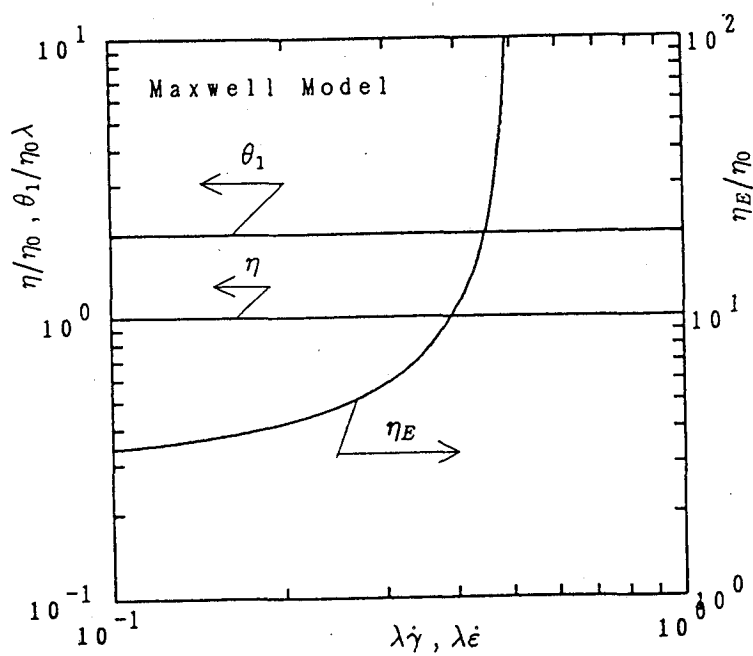


図 3.11 Maxwell モデルによる流動曲線

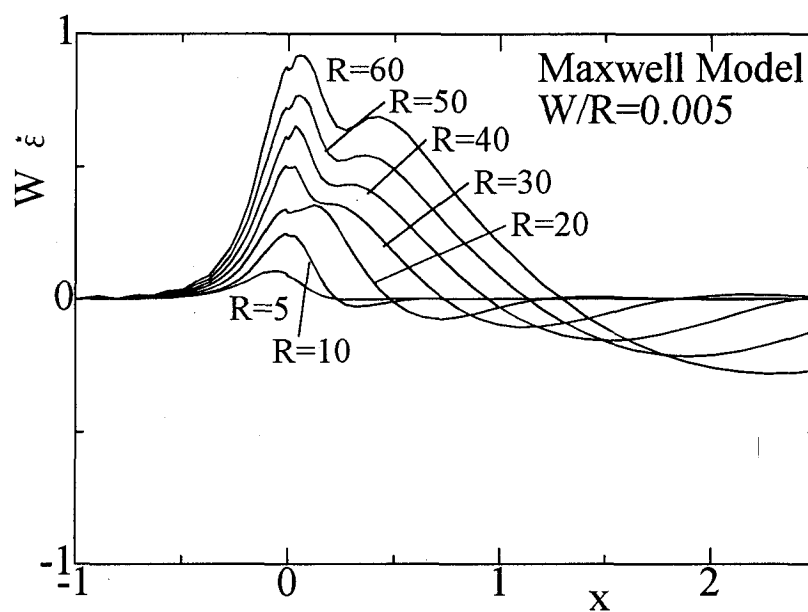
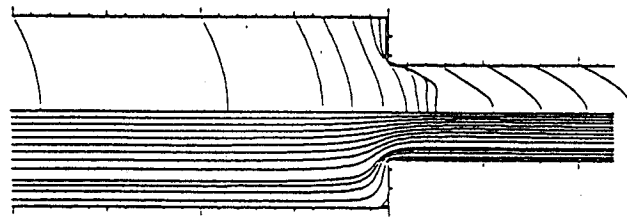
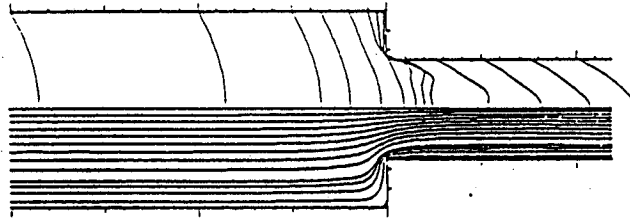


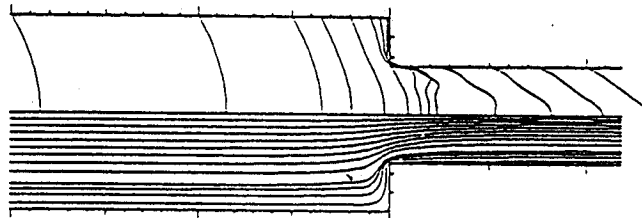
図 3.12 Maxwell モデルによる対称軸上の伸長速度



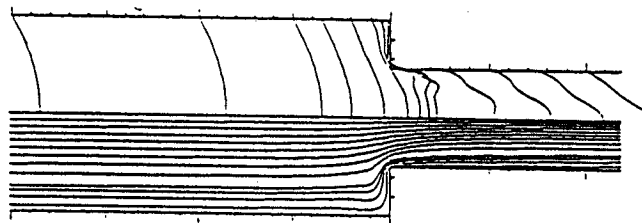
(a) $R=20, W=0.1$



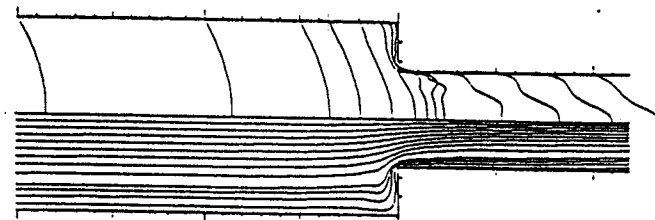
(b) $R=30, W=0.15$



(c) $R=40, W=0.2$

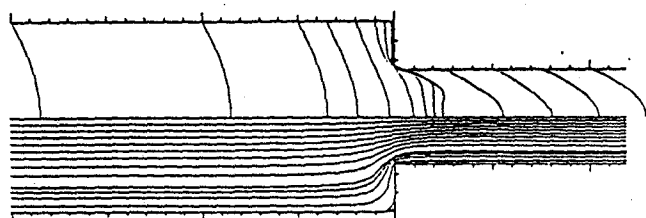


(d) $R=50, W=0.25$

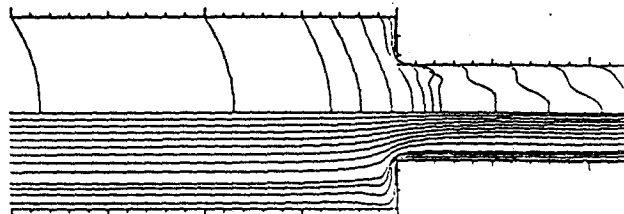


(e) $R=60, W=0.3$

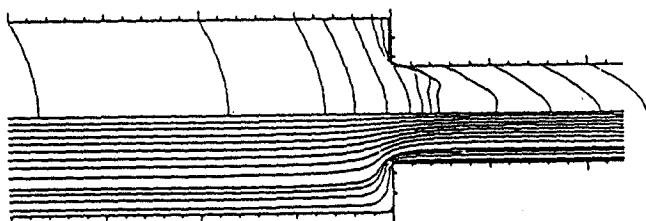
図 3.13 Giesekus モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果
($W/R = 0.005, \alpha = 0.001$)



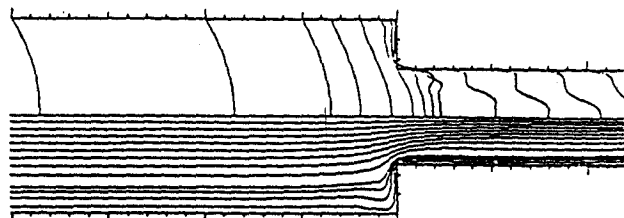
(a) $R=20, W=0.1$



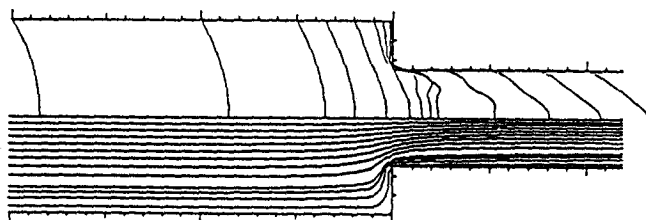
(f) $R=70, W=0.35$



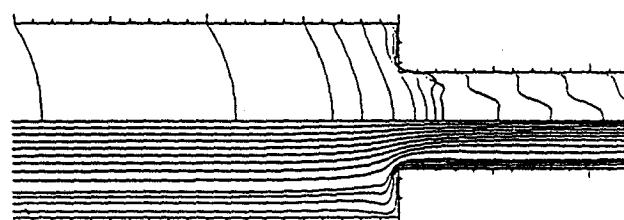
(b) $R=30, W=0.15$



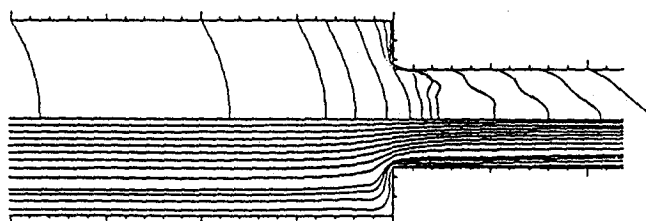
(g) $R=80, W=0.4$



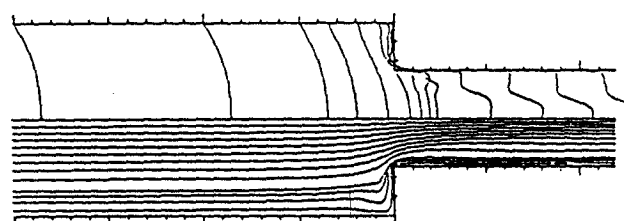
(c) $R=40, W=0.2$



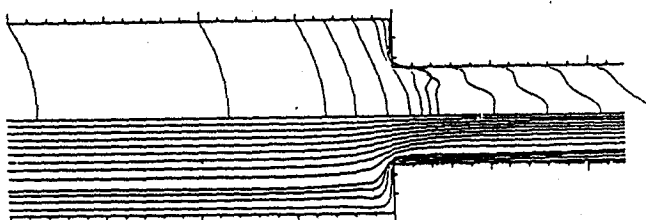
(h) $R=90, W=0.45$



(d) $R=50, W=0.25$

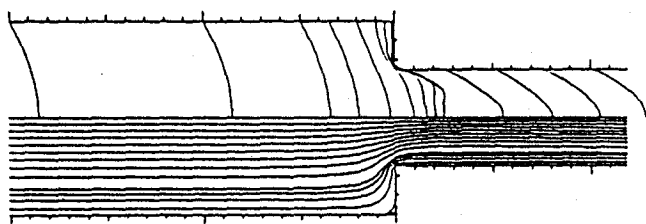


(i) $R=100, W=0.5$

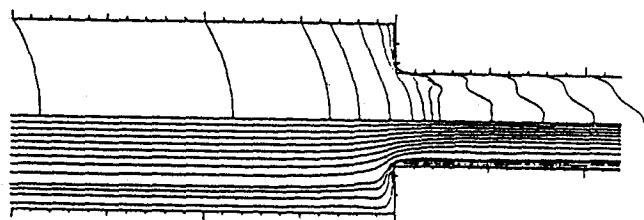


(e) $R=60, W=0.3$

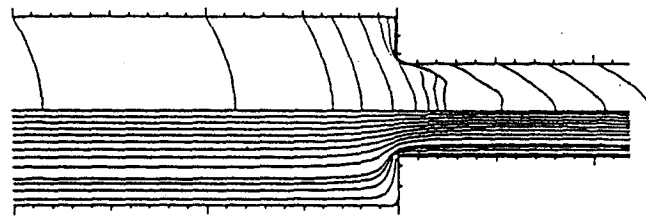
図 3.14 Giesekus モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果
($W/R = 0.005, \alpha = 0.005$)



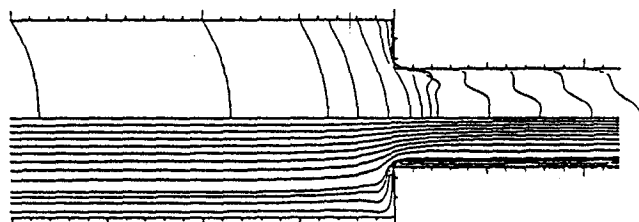
(a) $R=20, W=0.1$



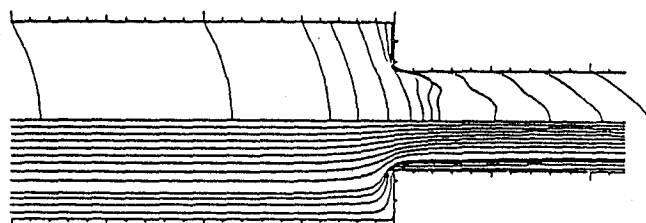
(f) $R=70, W=0.35$



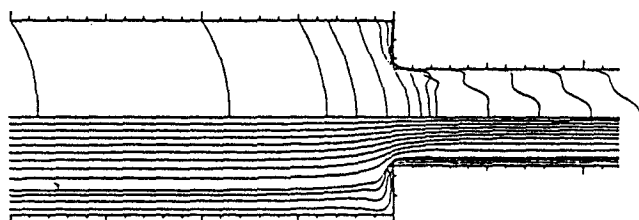
(b) $R=30, W=0.15$



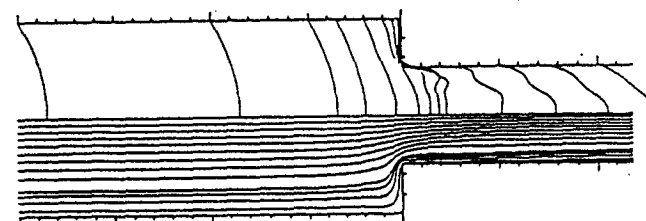
(g) $R=80, W=0.4$



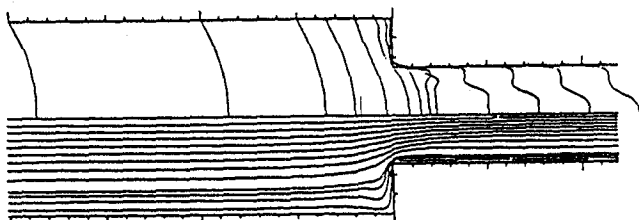
(c) $R=40, W=0.2$



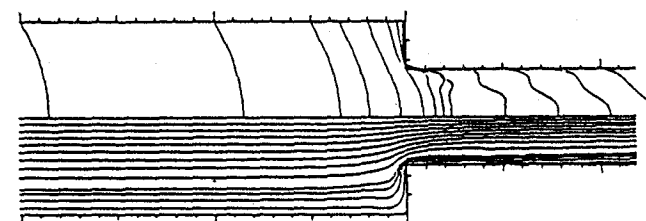
(h) $R=90, W=0.45$



(d) $R=50, W=0.25$

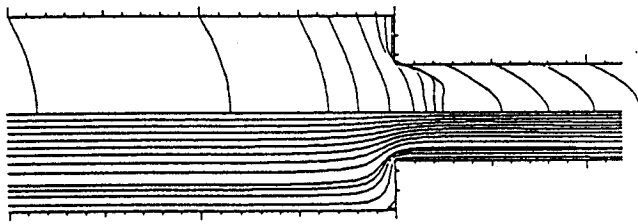


(i) $R=100, W=0.5$

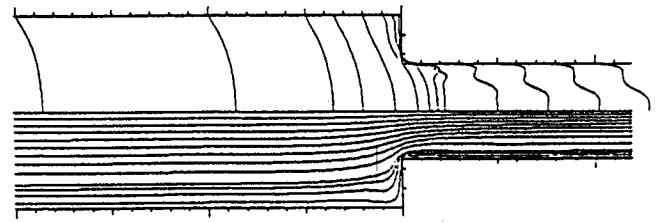


(e) $R=60, W=0.3$

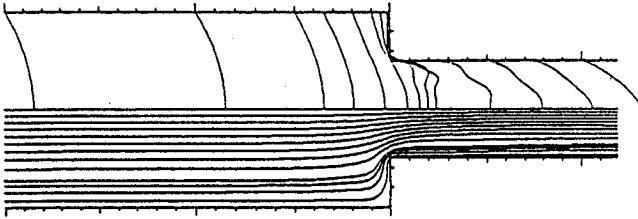
図 3.15 Giesekus モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果
($W/R = 0.005, \alpha = 0.01$)



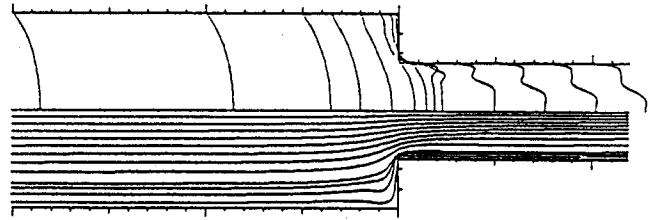
(a) $R=20, W=0.1$



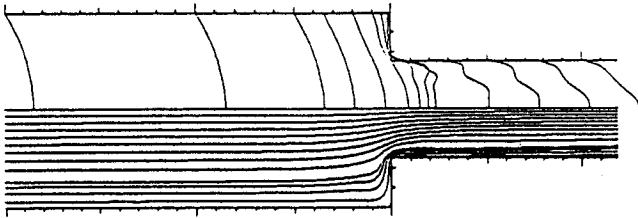
(f) $R=120, W=0.6$



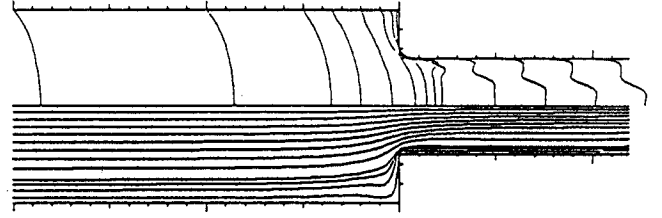
(b) $R=40, W=0.2$



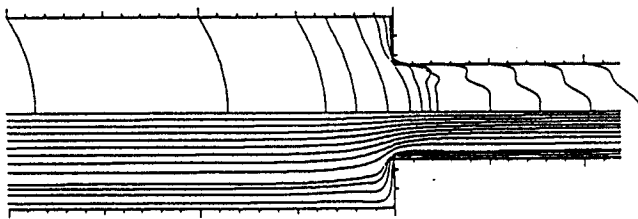
(g) $R=140, W=0.7$



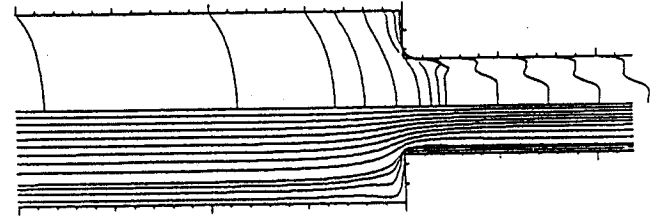
(c) $R=60, W=0.3$



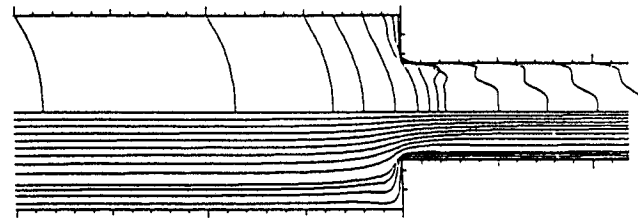
(h) $R=160, W=0.8$



(d) $R=80, W=0.4$

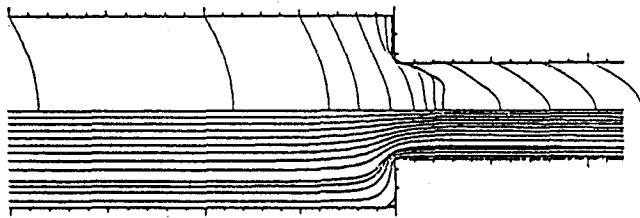


(i) $R=180, W=0.9$

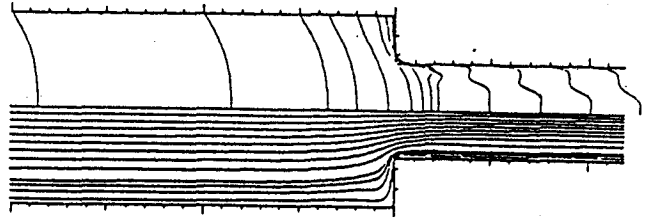


(e) $R=100, W=0.5$

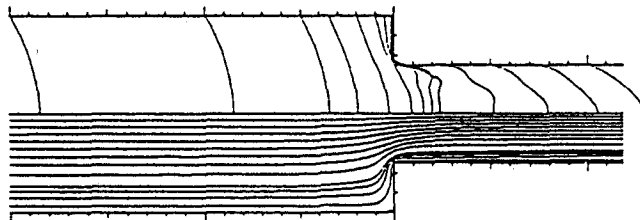
図 3.16 Giesekus モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果
($W/R = 0.005, \alpha = 0.015$)



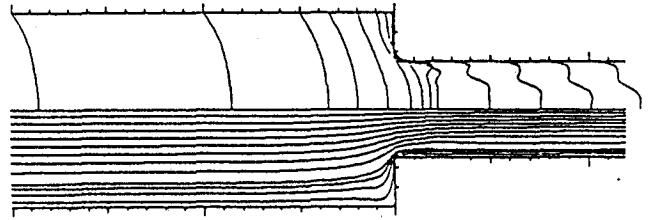
(a) $R=20, W=0.1$



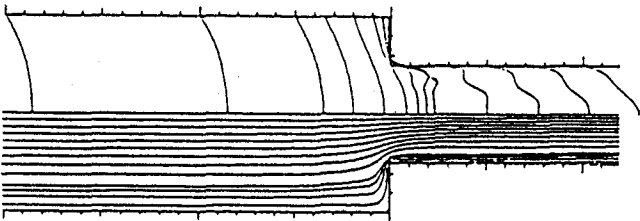
(f) $R=120, W=0.6$



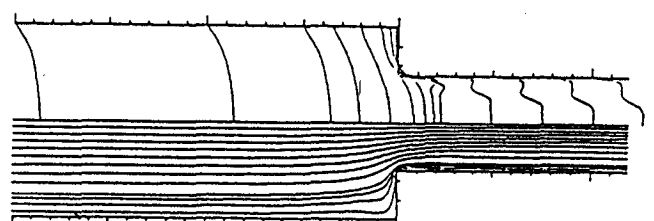
(b) $R=40, W=0.2$



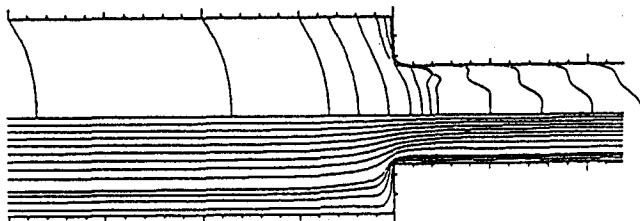
(g) $R=140, W=0.7$



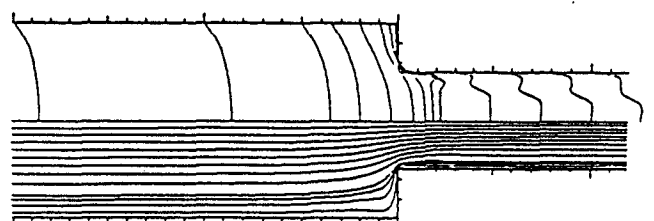
(c) $R=60, W=0.3$



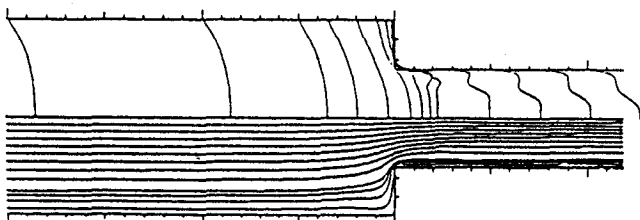
(h) $R=160, W=0.8$



(d) $R=80, W=0.4$



(i) $R=180, W=0.9$



(e) $R=100, W=0.5$

図 3.17 Giesekus モデルによる二次元急縮小流れの数値計算結果
($W/R = 0.005, \alpha = 0.02$)

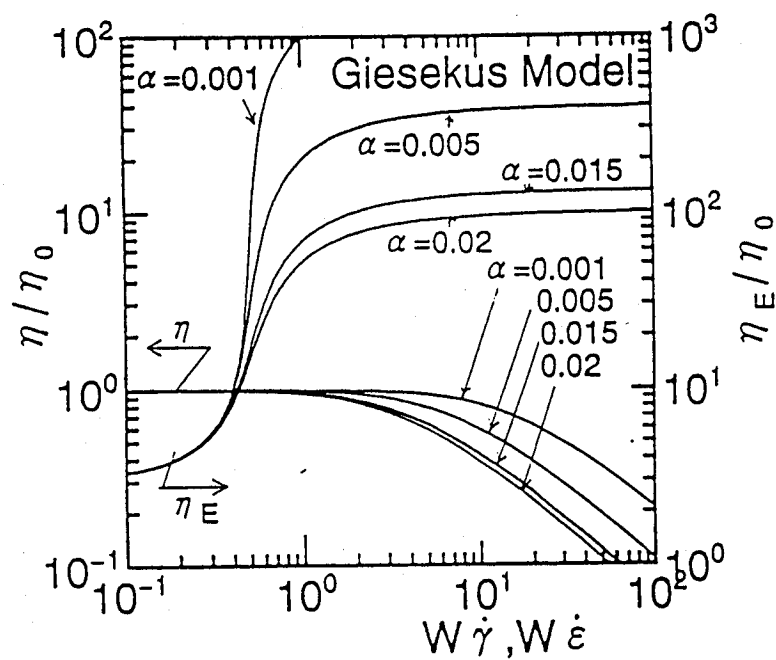


図 3.18 Giesekus モデルによる流動曲線

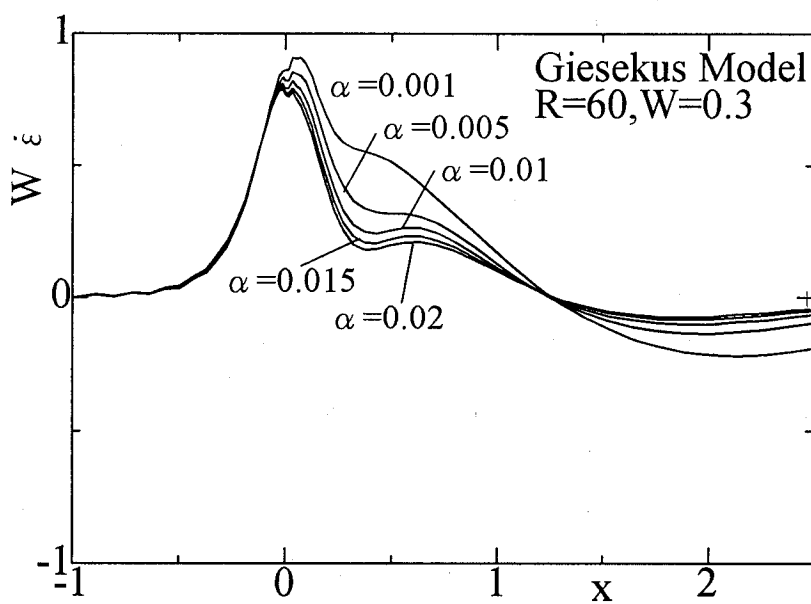


図 3.19 Giesekus モデルによる対称軸上の伸長速度

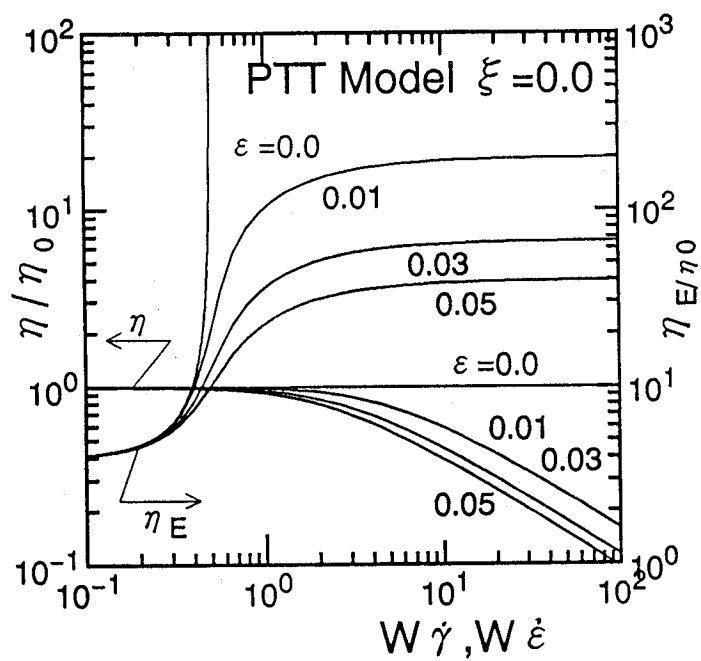
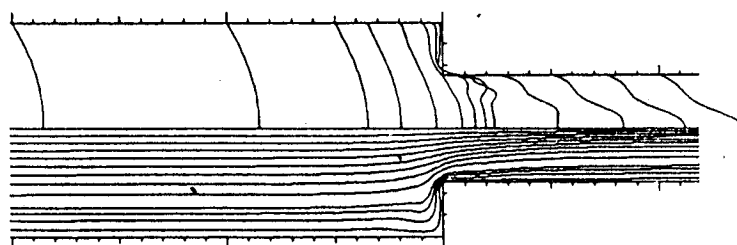
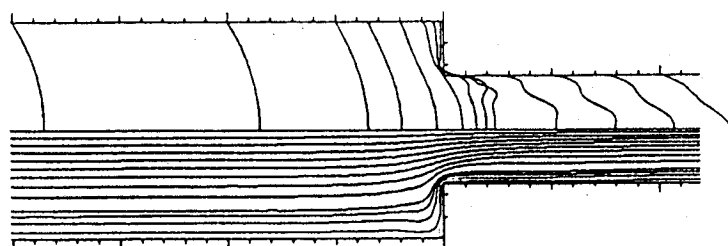


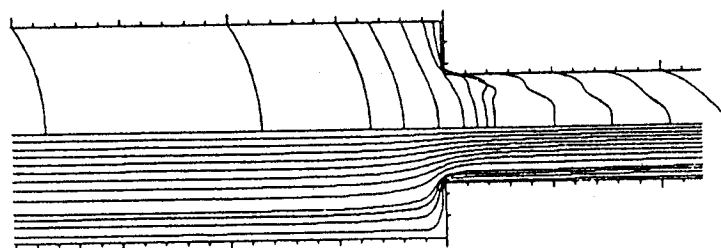
図 3.20 PTT モデルによる基本流動曲線 (ε の変化、 $\xi = 0.0$)



(a) $\varepsilon = 0$



(b) $\varepsilon = 0.01$



(c) $\varepsilon = 0.03$

図 3.21 PTT モデルによる二次元急縮小流れの計算結果
($R = 60, W = 0.3, \xi = 0.0$)

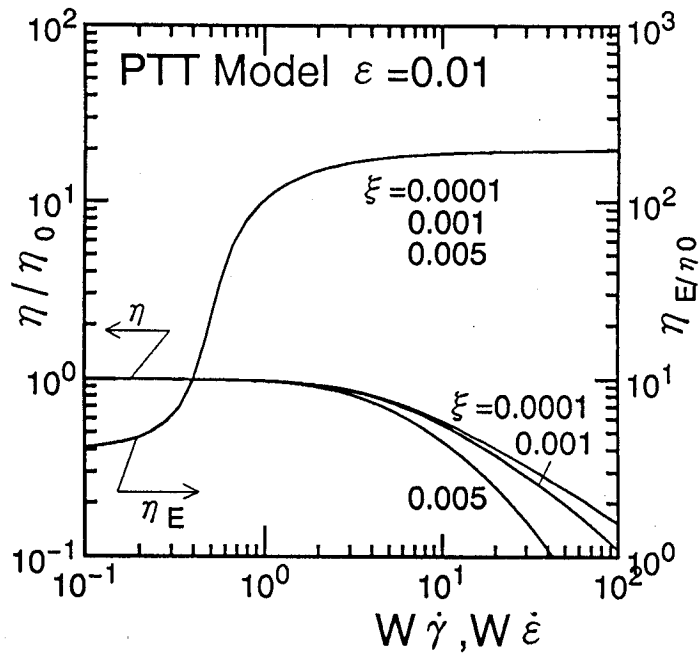


図 3.22 PTT モデルによる基本流動曲線 (η の変化、 $\varepsilon = 0.01$)

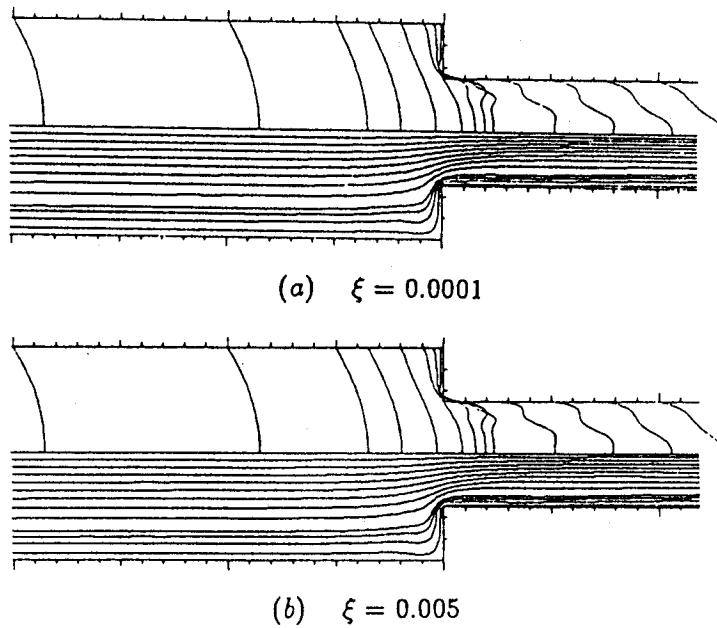


図 3.23 PTT モデルによる二次元急縮小流れの計算結果
($R = 60, W = 0.3, \varepsilon = 0.01$)

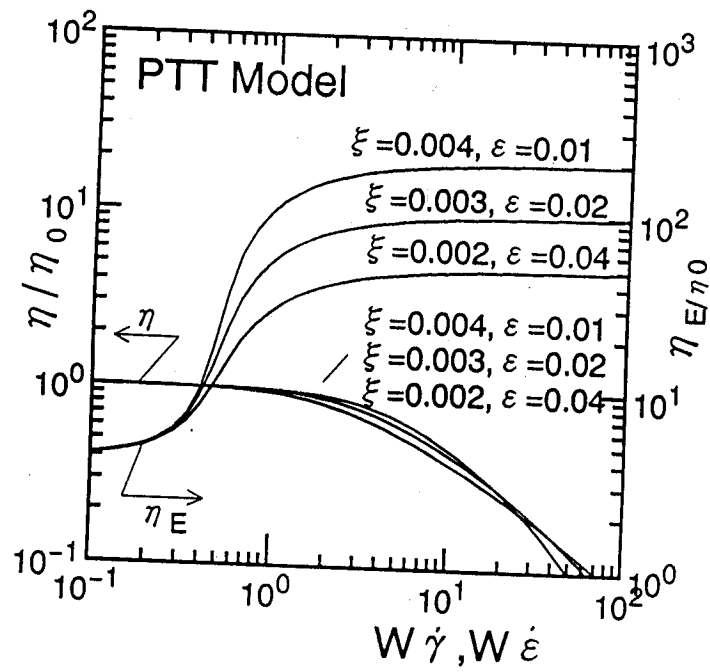


図 3.24 PTT モデルによる基本流動曲線 (粘性係数の変化が同じ場合)

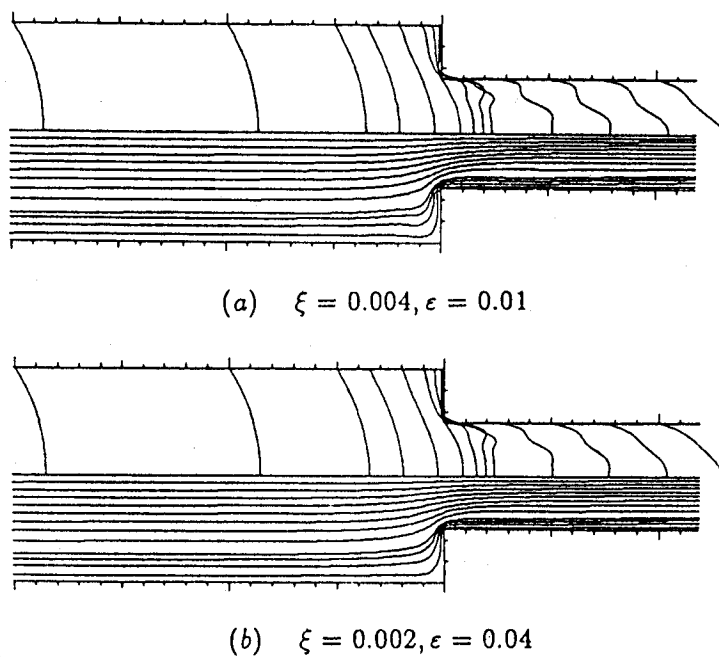


図 3.25 PTT モデルによる二次元急縮小流れの計算結果 ($R = 60, W = 0.3$)

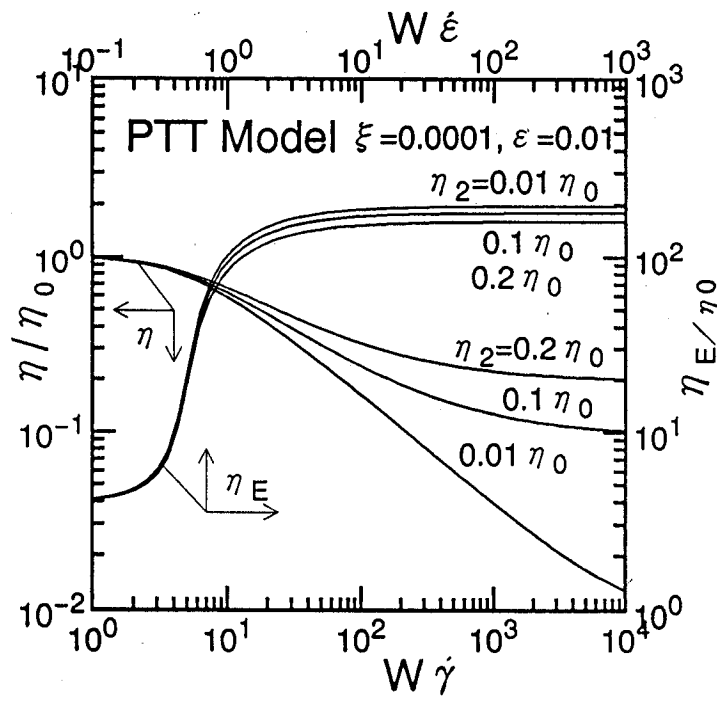


図 3.26 PTT モデルによる基本流動曲線 ($\xi = 0.0001, \varepsilon = 0.01$)

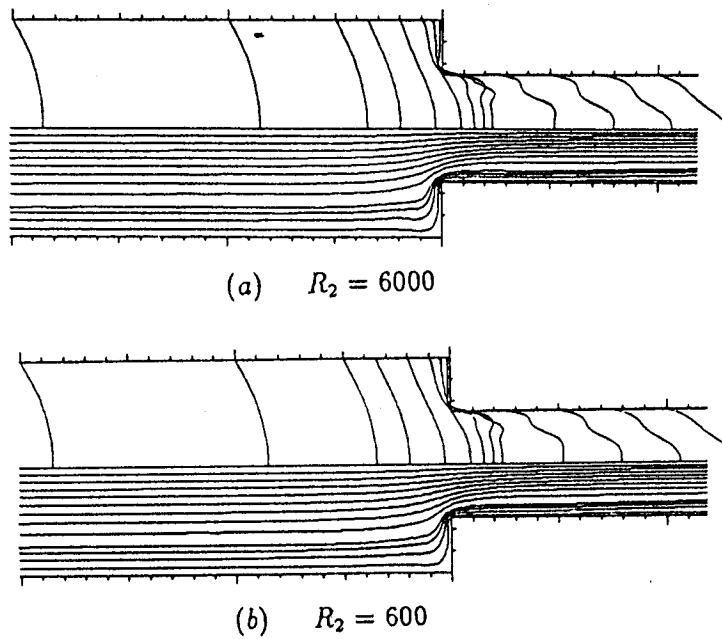


図 3.27 PTT モデルによる二次元急縮小流れの計算結果
($R = 60, W = 0.3, \xi = 0.0001, \varepsilon = 0.01$)

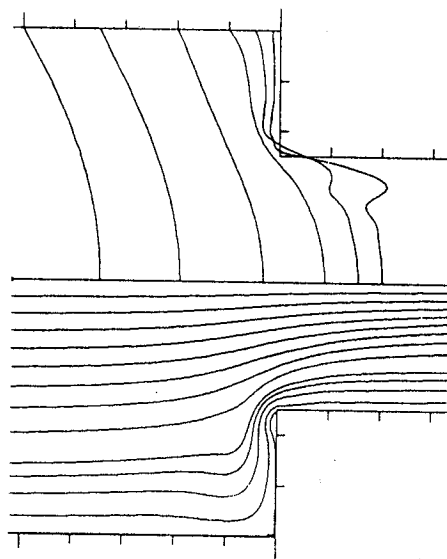


図 3.28 細かい格子 (160×60) を用いた場合の二次元急縮小流れの計算結果
($R = 60, W = 0.2$, Maxwell モデル)

第4章

後向きステップ流れの構成方程式を用いた数値解析

4.1 緒言

流路内の流れを考えると、どのように複雑な流路であっても拡大、縮小、曲がりの組み合わせたものであると考えることができる。従来の粘弾性流体の流れにおける計算は、レイノルズ数が1以下としたクリープ流れとして求められている場合がほとんどである。レイノルズ数およびワイセンベルグ数が高くなると非線形性が強くなり計算が困難になる。また、流れ場が複雑になるほど計算が行い難い、ということもいえる。

そこで本章では、拡大する流路として後向きステップのある二次元流路内流れを取り上げ、差分法により数値解析を行った。拡大流のように再循環領域の発生しやすい流れ場においては、第2章で提案したCIP法は適用できない。従って、このような流れ場においては数値粘性を導入する方法を用いざるを得ない。構成方程式の解法には、構成方程式の時間進行にLax法を陰的に処理する方法^[108]を適用する。Lax法は双曲型方程式の解法のひとつであるが、数値粘性が大きく解が鈍る。しかし、粘弾性流体の流れは不連続なシャープな変化がないので、Lax法の適用が可能であると考えられる。この方法を使って川端ら^[108]は急縮小流れを計算し、再循環領域の挙動などについて考察した。

このLax法による計算により、比較的高い範囲のレイノルズ数($R = 100$)とワイセンベルグ数($W = 1$)における計算が可能であることを示した。粘弾性モデルとしてMaxwellモデルとDennモデルを用い、ステップ後方に発生する再循環領域の挙動への流体の弾性、非ニュートン粘性の影響などについて検討を加えた。

4.2 流路形状および計算条件

計算流路は、図 4.1 に示すように x 方向に $-2.0 \sim 8.0$ 、 y 方向に $0.0 \sim 1.0$ をとり、ステップの高さは流路幅の $1/2$ とする。格子はステップ角部に格子点が集中するような不等間隔の直線直交格子を用いた。分割数は、 x 方向が 100 (上流 25、下流 75)、 y 方向が 40 (上流 20、下流 40) である。最小の格子間隔は x 方向が 0.01557、 y 方向が 0.01182、最大格子間隔は x 方向が 0.2103、 y 方向が 0.03119 である。

4.3 ニュートン流体による実験結果との比較

まず、本計算の精度を調べるために、ニュートン流体について、Armaly らの行った実験結果⁽⁹⁾との比較を行った。図 4.2 に $R = 100$ の場合についての結果を示す。実線が本計算法による計算値、プロットが Armaly らによる実験値である。図より、実験値と計算値は比較的良好に一致しており、本計算はニュートン流体に対しては十分な精度を有することがわかる。

4.4 Maxwell モデルによる結果

本節では、粘弾性流体のレオロジー方程式の中で最も基本的な Maxwell モデルを用いた場合の計算結果を示す。レイノルズ数 R が、10、50、100 の3種類に対してワイセンベルグ数 W は 0.0、0.05、0.1、0.3、0.5、1.0 の6種類について計算を行った。レイノルズ数が大きくなると慣性力の影響が大きくなり、ワイセンベルグ数が大きくなると弾性力の影響が大きくなる¹。図 4.3 に結果の一例を流線図で示す。(a) と (b) は、 $R = 10$ の場合である。図より、ニュートン流体 ($W = 0$) に比べて粘弾性流体 ($W = 0.05$) では、ステップ後方に発生する再循環領域の長さが短くなることがわかる。(c) と (d) は、 $R = 100$ の場合である。このとき、粘弾性流体の再循環領域の長さは、ニュートン流体にくらべて長くなっている。さらに、(a) と (c)、(b) と (d) を比較すると、ニュートン流体、粘弾性流体ともに再循環領域の長さは、レイノルズ数 R の増加と共に長くなる。このように再循環領域の長さは、レイノルズ数 R とワイセンベルグ数 W の二つのパラメータに依存することがわかる。

次に、再循環領域の大きさの目安としてステップ角から再付着点までの長さ L_V 、強さの目安として再循環する流量の流入する流量に対する割合 Q_V を取り、その弾性の効果に対する変化の様子を調べることにする。図 4.4 は (a) L_V および (b) Q_V に対するワイセンベルグ数 W との関係を示したものである。レイノルズ数 $R = 10$ の場合、 L_V 、 Q_V ともに小さいが、ワイセンベルグ数 W が増加すると急激にさらに小さくなり、ワイセンベルグ数 W が 0.1 以上ではどちらも 0 になる。レイノルズ数 $R = 50$ の場合、ワイセンベルグ数 W の増加に伴い Q_V は急激に減少し、ワイセンベルグ数 W が 0.5 以上ではゆるやかに 0 に漸近していくが、 L_V は Q_V ほど急激でなくほぼ直線的に 0 に近づいていく。レイノルズ数 $R = 100$ の場合、 Q_V はワイセンベルグ数 W が 0~0.05 の範囲はわずかに増加するが、それ以上になると $R = 50$ の場合と同様に急激に変化し、0 に漸近していく。また、 L_V は W の増加に伴い、ワイセンベルグ数 $W = 0.2$ 位まで増加し、それ以上になるとゆるやかに減少し、ワイセンベルグ数 W が 0.5 以上になっても、ワイセンベルグ数 $W = 0$ のニュートン流体の場合と同程度の L_V になる。これらのことから、弾性の効果は、再循環する流量を急激に減少させるように作用するが、再付着点までの距離 L_V については、レイノルズ数 R の低い場合は減少させるように、レイノルズ数 R が高くワイセンベルグ数 W が低い場合は増加させるように、レイノルズ

¹レイノルズ数 = $\frac{\text{慣性力}}{\text{粘性力}}$ 、ワイセンベルグ数 = $\frac{\text{弾性力}}{\text{粘性力}}$ ^[32]

数 R が高くワイセンベルグ数 W が高い場合はわずかに減少させるように作用することがわかる。

ステップ下流の x 方向速度分布 u の $R = 100$ における発達状態を図 4.5 に示した。(a) はニュートン流体 ($W = 0$) の場合、(b) は $W = 0.05$ の場合、(c) は $W = 1$ の場合である。図より、再循環領域内で逆流する速度は (a) および (b) では大きい、(c) になるとかなり小さくなり、再循環領域内の速度はほぼ 0 になることがわかる。さらに、ステップからかなり下流になっても粘弾性流体の分布は、ニュートン流体よりも速度分布がつぶれるような形状になっている。すなわち、粘弾性流体の方がニュートン流体に比べ速度分布の回復が遅いことがわかる。

4.5 Denn モデルによる結果

前項で用いた Maxwell モデルは非ニュートン粘性は示さないが、実際に使用される粘弾性流体は非ニュートン粘性を示すものがほとんどである。そこで本節では、工学上よく使用される Denn モデル^[15] を用いた場合の計算結果を示す。計算は、レイノルズ数 R が 50、ワイセンベルグ数 W が 0.05 および 0.5 の場合に対して Denn モデルのレオロジー定数 n 、 s を変化させた場合について行った。ここで、 n はせん断応力に対するずり速度の非線形性を表す指数、 s は第一法線応力差に対するずり速度の非線形性を表す指数である。

図 4.6 にワイセンベルグ数 $W = 0.05$ の場合、および図 4.7 にワイセンベルグ数 $W = 0.5$ の場合に対する流線図を示す。それぞれの図において (a)、(b) は $s - n$ を 1 に固定してそれぞれ n を 1 と 0.7 とした場合、(b)、(c) は n を 0.7 に固定して $s - n$ を、ワイセンベルグ数 $W = 0.05$ の場合は 1 と 0.5、ワイセンベルグ数 $W = 0.5$ の場合は 1 と 0.6 とした場合である。ワイセンベルグ数 W が 0.05 および 0.5 とも、 n の値が小さくなるとステップ後方に発生する再循環領域の長さが長くなっている。次に、 $s - n$ の値が小さくなるとワイセンベルグ数 $W = 0.05$ のときは再循環領域の長さにはほとんど変化がないが、ワイセンベルグ数 $W = 0.5$ のときは長くなっている。以上のことより、ステップ後方の再循環領域の状態は n と $s - n$ によって変化していることがわかる。

そこで Maxwell モデルの場合と同様に、 n および $s - n$ に対するステップ後方に発生する再循環領域の変化の様子を調べることにする。

図 4.8 に $s - n = 1.0$ とした場合の (a) L_V および (b) Q_V の n による変化をワイセンベルグ数 $W = 0.05$ および $W = 0.5$ の場合について示す。図より、ワイセンベルグ数 W が 0.5 のときは、 n の値が小さくなるとそれぞれ直線的に L_V は長く、 Q_V は大きくなる。しかし、 W が 0.05 の場合では、 L_V は直線的に長くなるが、 Q_V はほぼ一定となることがわかる。

図 4.9 に $n = 0.7$ とした場合の (a) L_V および (b) Q_V の $s - n$ による変化をワイセンベルグ数 $W = 0.05$ および $W = 0.5$ の場合について示す。ワイセンベルグ数 W が 0.5、0.05 ともに $s - n$ の値が小さくなるに従って、 L_V は長く、 Q_V は大きくなることがわかる。ただし、その変化の割合は 0.5 の方が 0.05 よりも大きくなっている。

以上のことより、レイノルズ数 $R = 50$ の場合については、ステップ後方の再循環領域は一般に $s - n$ の値が小さくなるに従って発達していく。しかし、 n が 1 より

り小さくなり非ニュートン粘性の非線形性が強くなると、 W が小さい場合は L_V は長くなるが、 Q_V はほとんど変化がない。しかし、ワイセンベルグ数 W が大きくなると、 n の減少に伴い再循環領域が徐々に発達していくように、 L_V 、 Q_V とも増加することがわかる。

図 4.10 にワイセンベルグ数 $W = 0.5$ 、 $n = 0.7$ のときのステップ下流における x 方向速度分布 u の発達状態を示した。図より、 $s - n = 1.2$ のときは逆流する速度はほぼ 0 に等しいが、 $s - n$ の値が小さくなると、逆流の速度の大きさは大きくなっていることがわかる。

4.6 結 言

構成方程式の時間進行に Lax 法を適用した方法を用いて粘弾性流体の後向きステップのある二次元流路内層流を差分法により数値解析した。モデルは、Maxwell モデルと Denn モデルを使用した。その結果、次のことが明らかになった。

1. ステップ後方に発生する再循環領域は、弾性により大きく影響を受け、弾性の効果は、再循環する流量を急激に減少させるように作用するが、再付着点までの距離 L_V については、レイノルズ数 R の低い場合は減少させるように、レイノルズ数 R が高くワイセンベルグ数 W が低い場合は増加させるように、レイノルズ数 R が高くワイセンベルグ数 W が高い場合はわずかに減少させるように作用する。
2. ステップ下流の流れの回復は同じレイノルズ数のもとでは流体の弾性により遅くなる。

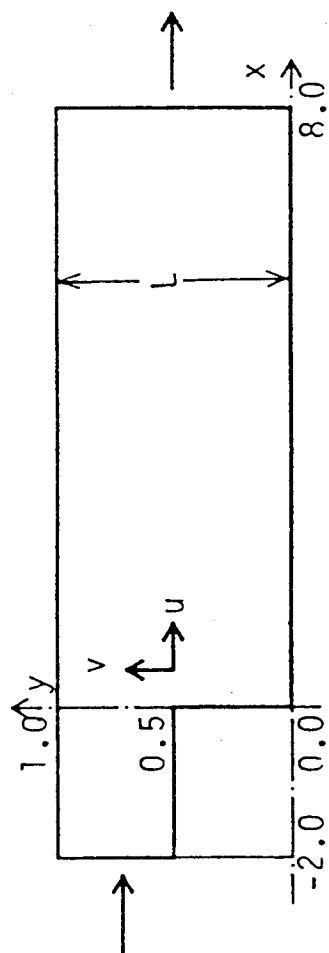


図 4.1 後向きステップのある二次元流路

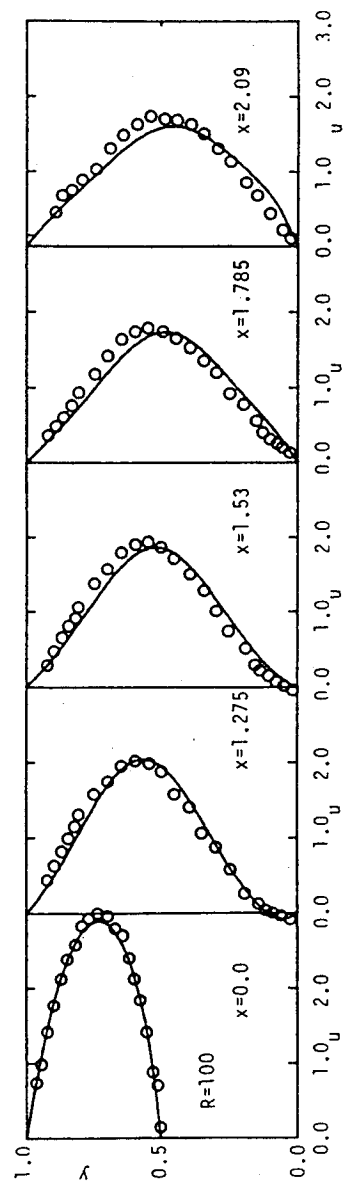
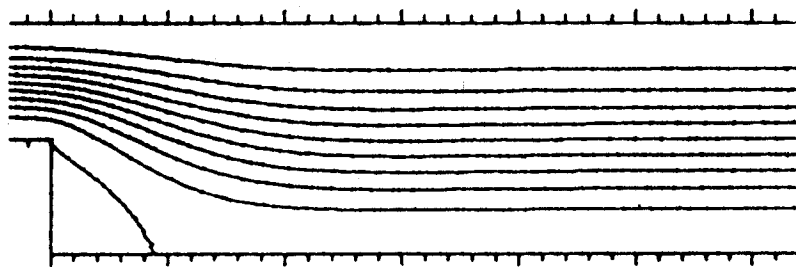
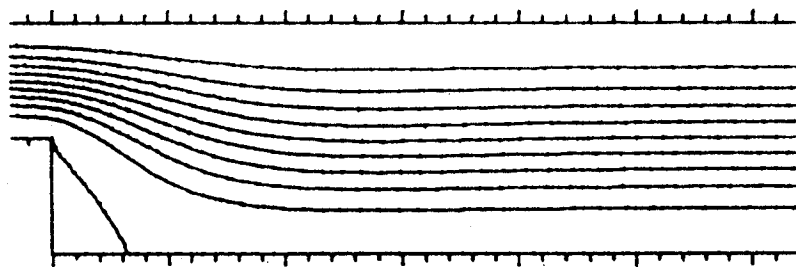


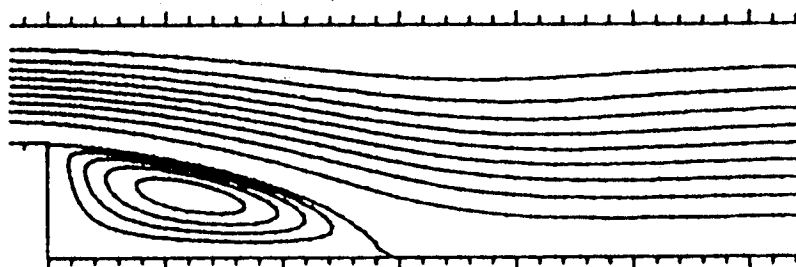
図 4.2 ステップ下流の速度分布 ($R = 100$)



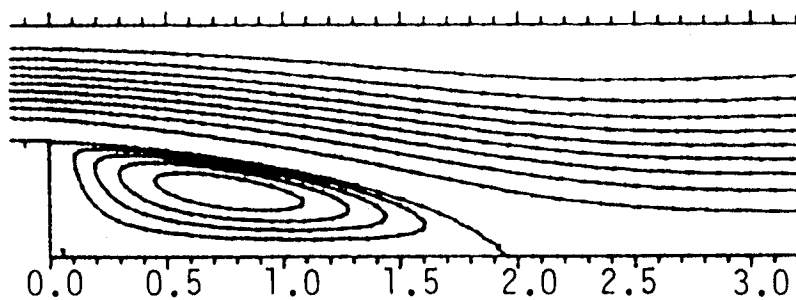
(a) $R=10, W=0.0$



(b) $R=10, W=0.05$

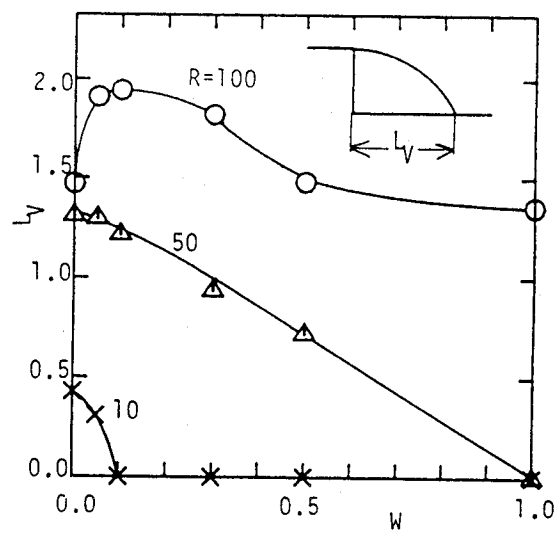


(c) $R=100, W=0.0$

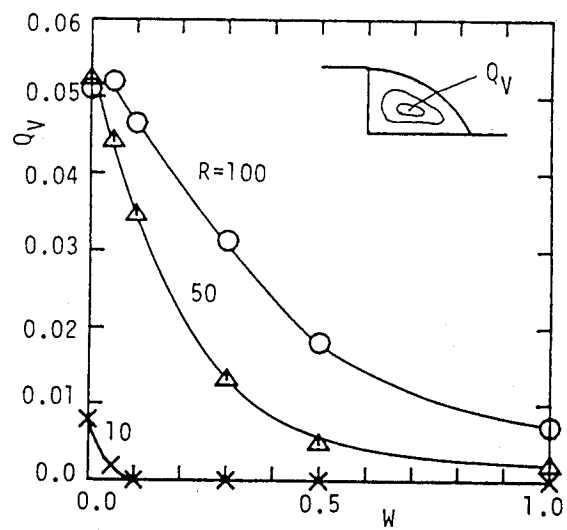


(d) $R=100, W=0.05$

図 4.3 流線図 (Maxwell モデル)



(a) 再循環領域の長さ



(b) 再循環する流量

図 4.4 再循環領域に対するワイセンベルグ数の影響

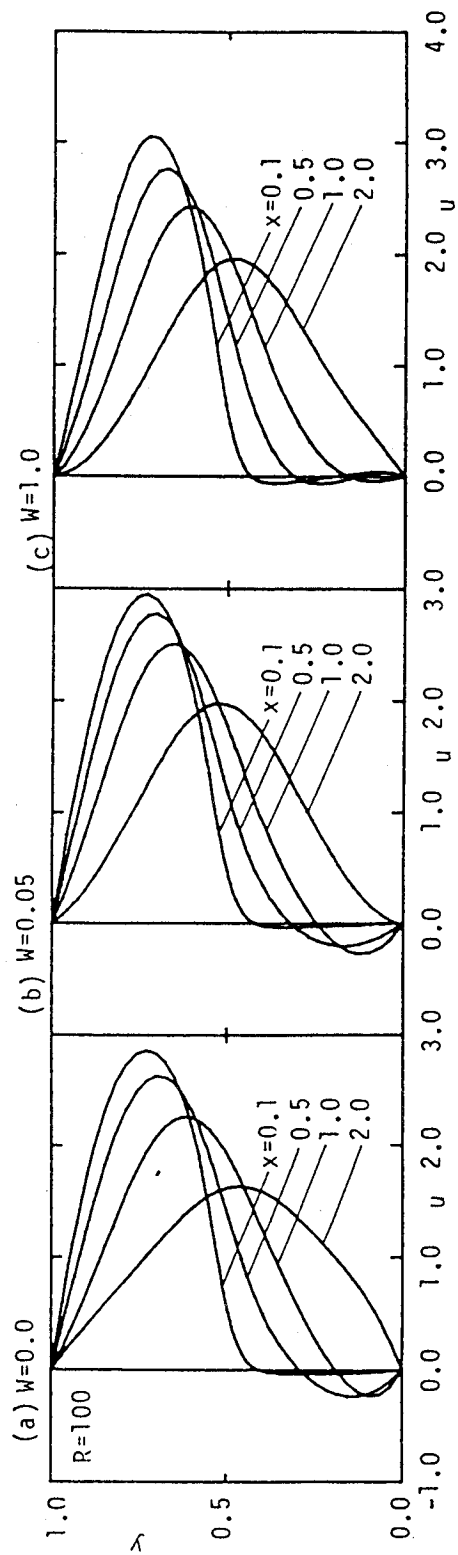
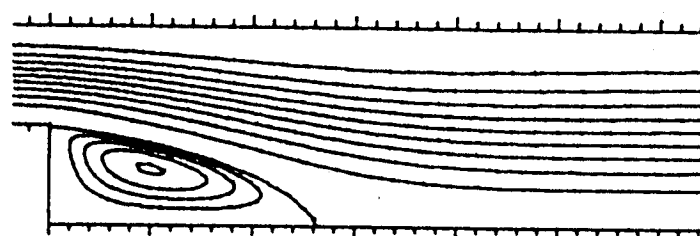
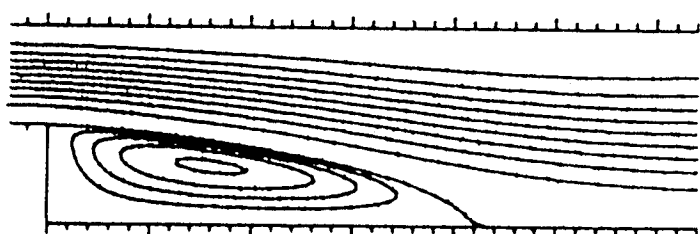


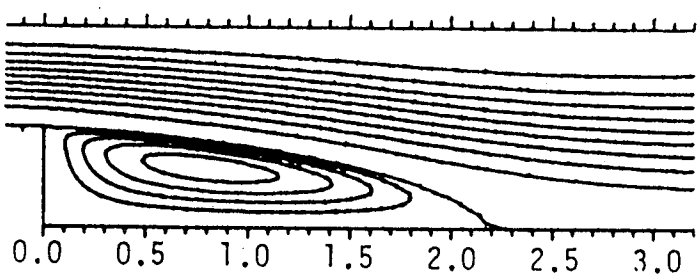
図 4.5 ステップ下流の速度分布 ($R = 100$)



(a) $R=50, W=0.05, n=1.0, s-n=1.0$

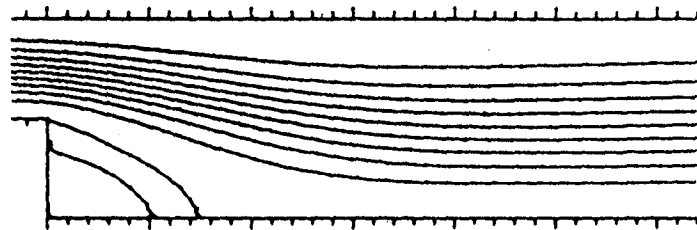


(b) $R=50, W=0.05, n=0.7, s-n=1.0$

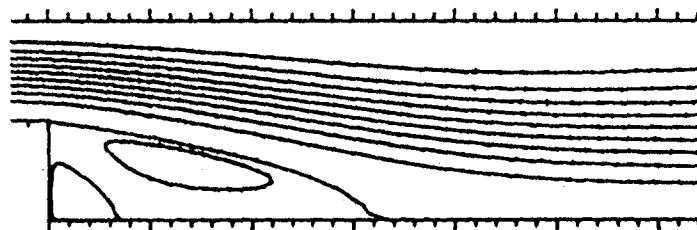


(c) $R=50, W=0.05, n=0.7, s-n=0.5$

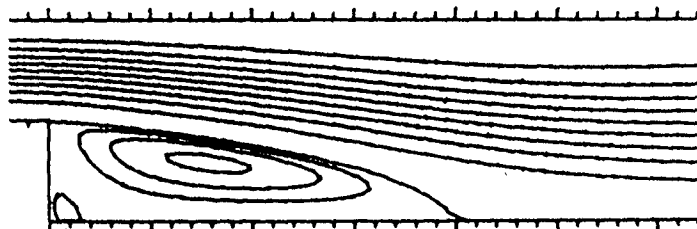
図 4.6 流線図 ($W = 0.05$)



(a) $R=50, W=0.5, n=1.0, s-n=1.0$

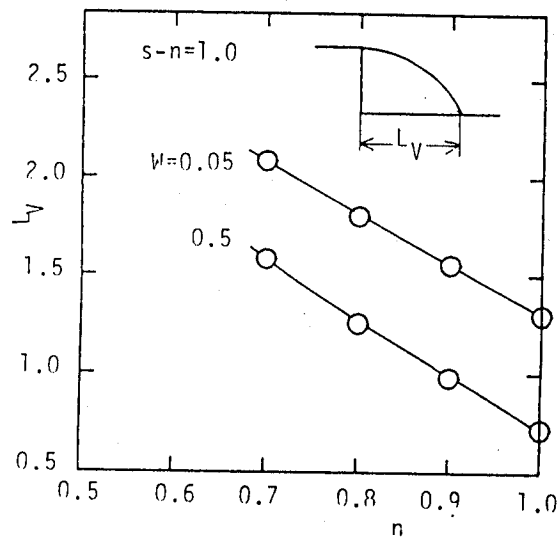


(b) $R=50, W=0.5, n=0.7, s-n=1.0$

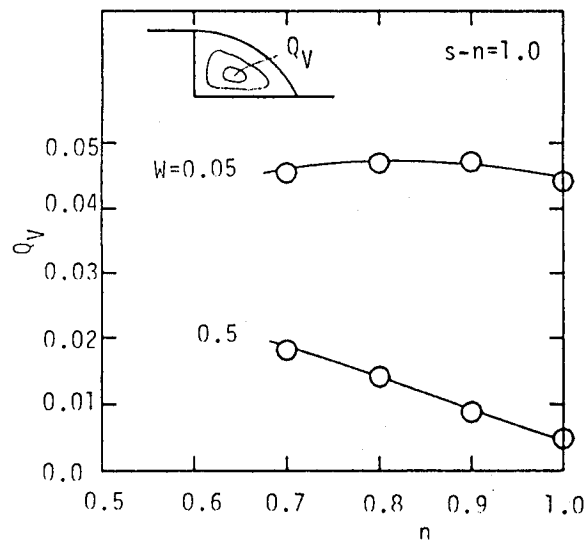


(c) $R=50, W=0.5, n=0.7, s-n=0.6$

図 4.7 流線図 ($W = 0.5$)

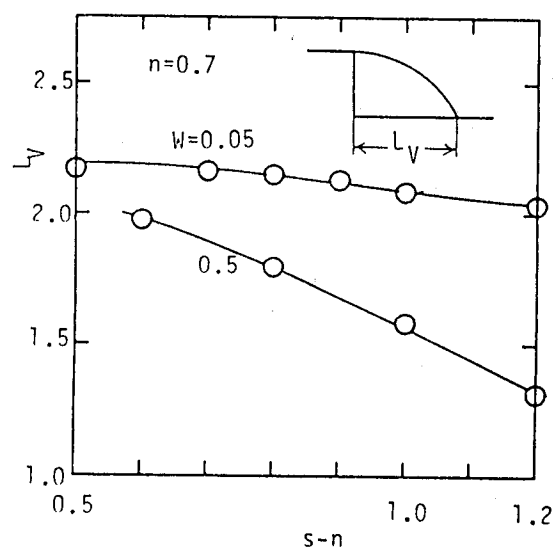


(a) 再循環領域の長さ

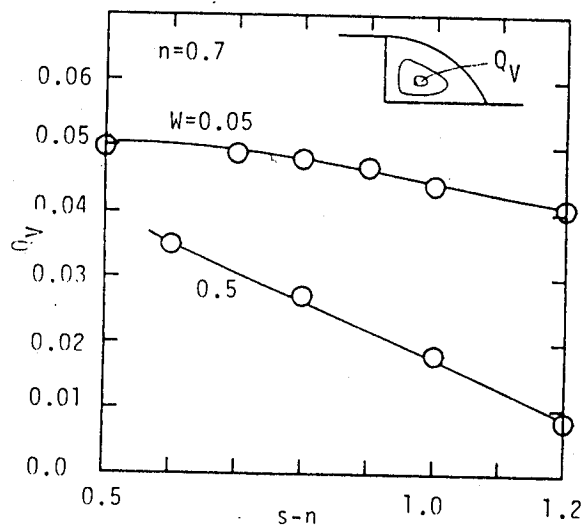


(b) 再循環する流量

図 4.8 再循環領域に対する n の影響



(a) 再循環領域の長さ



(b) 再循環する流量

図 4.9 再循環領域に対する $s-n$ の影響

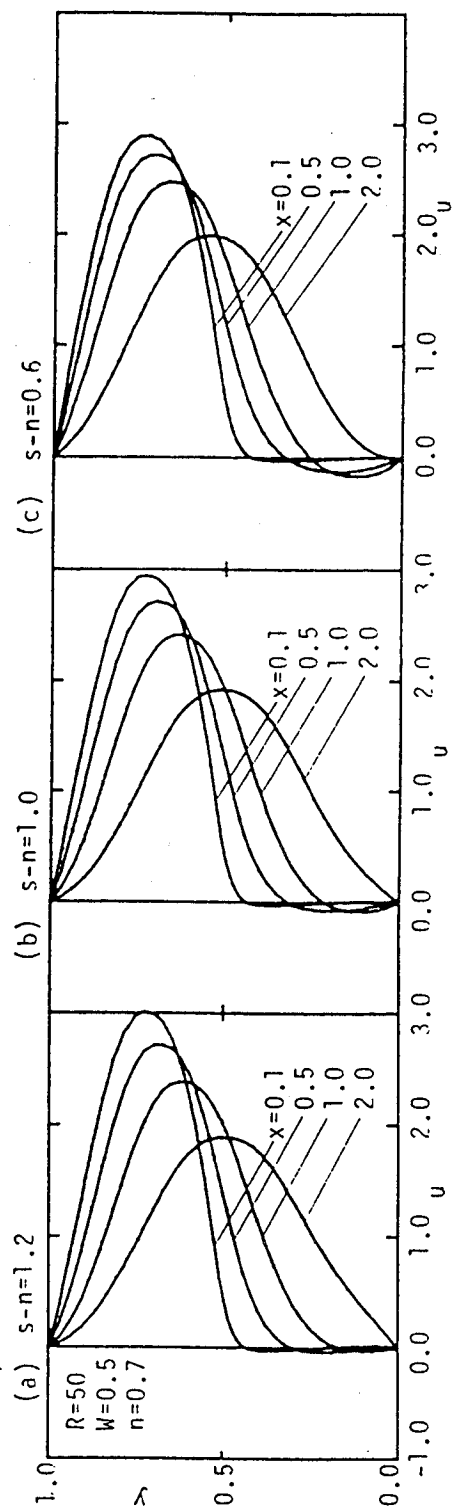


図 4.10 ステップ下流の速度分布 ($R = 50, W = 0.5, n = 0.7$)

第5章

球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の流れの数値計算法

5.1 緒言

高分子溶液、融液に代表される粘弾性流体はニュートン流体とは異なる様々な特異な流れを示すことが報告されている[88],[39]。しかし、その特異流れのメカニズムの解明はまだ不十分である。従来行われてきた粘弾性流体の流れ解析は、流体の変形速度と応力の関係を記述した微分形の構成方程式と、流体の運動を支配するコーシーの運動方程式を取り扱うのが一般的である[70],[120],[108]。構成方程式にはバネとダッシュポットの直列モデルに基づいた Maxwell モデルに代表される現象論的モデル[32],[2]、網目理論に関連するモデル[41],[46]、弾性論を拡張した Leonov モデル[37]、管模型理論に関連したモデル[64]、一本の高分子鎖を球要素とバネ要素の直列モデルでモデル化するもの[3],[5],[87]に分類できる[98],[135]。しかし、これらの構成方程式を用いた解析手法は、工業的用途の流動解析に用いるには有効と考えられるが、特異流れのメカニズムを解明するために用いるには不十分である。

そこで、流動する流体中の高分子鎖の変形・挙動を直接数値シミュレーションすることによって粘弾性流体の特異流れのメカニズムを解明していくことを目的として研究を開始した。本研究では高分子溶液を、多数の高分子鎖が絡み合った集合が流体中に多数分散しているとして、一つの集合を球とバネによる立体モデル（本研究では四面体）でモデル化する手法について述べる。本研究の球・バネモデルは立体的な構造を持つモデルとなり、従来の一本の高分子鎖を一つの球・バネモデルでモデル化する場合とは異なる。本研究と同様に、粘い液体を含んだスポンジボールのようなものを高分子の流動単位と考え、フォークトモデルよりなる粘弾性要素がい

くつか集まってできるものと考えモデル化したものを、堀・大久保は提案している[40]。これはモデルの変形を2次元で考えたものであり、本研究のモデルは3次元挙動をするとしている。1995年には van der Vorst らは、高分子のからみあいの房に対して Rouse モデルを立体モデルにすることでモデル化する試みを行っている[152]。バネは線形バネ、球はストークス流でブラウン運動を考慮している。三次元の処理をしながら、配列分布関数に対する拡散方程式を導出し、応力テンソルを算出した。1993年に Yamamoto and Matsuoka は、変形と破断を伴う繊維の運動挙動を解析する粒子シミュレーション法を提案した[136]。これは、繊維を球の集合体としてモデル化したもので、流れ場において各球の運動方程式を解くことで繊維全体の運動を解析するものである。隣り合う球をバネで連結することで繊維の変形と破断を解析できることが特徴である。さらに、Yamamoto and Matsuoka は粘度について解析を行った[146]。shear-thinning 性を示す範囲では、モデルが変形する。せん断速度が大きい範囲になると、モデルはS字型により潰れようとすることを示した。

第5章および第6章で用いる主な記号を以下に示すが、論文中的「」付きの文字は以下の（ ）内の値で無次元化されている量を意味している。

- a : バネの平衡長さ l_0 /球の直径 d .
- C_k : 球に作用するバネ力と粘性抗力の比. $= (k/3\pi\mu U)(d/L)$
- d : 球の直径.
- E : 単位質量流体中のバネに蓄えられている弾性エネルギー. $(k/\rho L)$
- f_i : 球 i に作用する流体抗力.
- k : バネ定数.
- k_{ij} : バネ ij によって球 i に作用する力.
- l_0 : バネの平衡長さ. $= ad$
- L : 流れ場の代表長さ.
- m : 一つの球の質量.
- n : 一つの球・バネマクロモデル中の球の数.
- N : 流れ場に存在する球の総数.
- p : 圧力 (ρU^2)
- r_g : 球・バネマクロモデルの重心の座標. (L)
- r_i : 球の中心の座標. (L)
- R : 単位質量流体中に存在する球・バネモデルの角運動量. $(mU/\rho L^2)$
- Re : レイノルズ数. $= \rho UL/\mu$
- t : 時間. (L/U)

- $\boldsymbol{u}$: 溶媒流体の速度. $= (u_x, u_y, u_z)$ (U)
 U : 代表速度.
 $\boldsymbol{v}$: 球の速度. $= (v_x, v_y, v_z)$ (U)
 W_p : 球・バネマクロモデルの質量濃度.
 $\delta \boldsymbol{r}_i$: 球・バネマクロモデルの重心から球 i までの位置ベクトル.
 $= \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_g$ (L)
 ΔN : 一つのセル ΔV 内に存在する球の個数.
 ΔV : 流れ場中の微小セルの体積. (L^3)
 μ : 溶媒流体の粘性係数 (第2ニュートン粘性係数).
 μ_b : 球・バネマクロモデルを含む流体の見かけの粘性係数.
 ρ : 溶媒流体の密度.

5.2 球・バネマクロモデル

高分子水溶液では図 5.1 (a) の様に溶媒流体中で多数の高分子鎖が絡み合った集合が多数存在し、流体の流動に伴ってこれらの集合体が 3 次的に伸縮・回転することによって、非ニュートン粘性や弾性効果を示すと考えられる。そこでこの多数の高分子鎖が絡まって作られる一つの集まりを、いくつかの球とそれぞれの球を連結するバネによってモデル化して取り扱うことにする。ここで考える球は高分子鎖の絡まりとその間に含まれる流体をモデル化したものである。本研究では図 5.1 (b) に示す 4 個の球と 6 本のバネで構成される 4 球 6 バネモデル（正四面体モデル）を考える。この様に考えると、球には球同士を連結するバネの伸び縮みに応じてバネ力が作用し、その結果、球と周囲流体の速度が異なり、その速度差に起因する流体抗力が球に作用する。

本研究で考える高分子鎖の絡み合った一つの集合体は、高分子鎖が不規則に綿状に絡み合ったもの、あるいは網目構造を有して絡み合っているものであり、その大きさは 0.2～2.5mm 程度^[142]と考えている。本研究と同様に高分子鎖が絡み合った一つの集合体をモデル化する試みは堀・大久保^[40]による濃厚溶液を対象にして、フォークトモデルの集合体として 2 次元モデル化する例があるだけである。このような高分子鎖の集まりを流体を含めてモデル化する球・バネモデルと、一本の高分子鎖をモデル化する従来の球・バネモデルを区別するため、以下では、前者を球・バネマクロモデル、後者を球・バネミクロモデルと呼ぶことにする。

この球・バネマクロモデルを用いて粘弾性流体の流れを解析するに際して、次のような仮定をする。

- 溶媒流体と球・バネモデルの速度差による流体抗力は球にのみ作用し、球まわりのストークス流れとして評価する。
- 球・バネマクロモデル同士の衝突や絡み合い等の相互の影響は考えない。（希薄水溶液の場合を考える）
- 流れは一方向あるいは二次元、三次元として取り扱うが、球・バネマクロモデルの運動は常に三次元として取り扱う。
- 各球を連結するバネの平衡長さ (l_0) は全て等しいとし、バネ定数 (k) は同一とする。
- 球に含まれるのはほとんどが溶媒流体と考え、その密度は溶媒流体と同じとし、大きさも一定とする。

5.3 球・バネマクロモデルの運動方程式

前節に示したような仮定に基づいて、球・バネモデルの一つの球 (図5.2) についての運動方程式を導くと

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n \mathbf{k}_{ij} \quad (5.1)$$

となる。ここで、添え字 $i, j (= 1, \dots, n)$ は一つの球・バネモデルに含まれる各球につけた番号である。なお、本研究の四面体モデルでは $n = 4$ である。また、 $\mathbf{f}_i$ は球 i に作用する流体抗力であり、ストークス抵抗則から、

$$\mathbf{f}_i = 3\pi\mu d(\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_i) \quad , \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \quad (5.2)$$

と表される。 $\mathbf{k}_{ij}$ は球 i と球 j を連結するバネによって球 i に作用するバネ力であり、バネ定数を一定とすると

$$\mathbf{k}_{ij} = k \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} (|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| - l_0) \quad (5.3)$$

と表される。

球・バネマクロモデルの重心位置 $\mathbf{r}_g$ は、各球の質量が等しいことから、

$$\mathbf{r}_g = \sum_{k=1}^n \mathbf{r}_k / n \quad (5.4)$$

となり、式(5.1)に代入して $\mathbf{r}_g$ に対する運動方程式を導くと、バネ力 $\mathbf{k}_{ij}$ による項が消去でき、

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_g}{dt^2} = 3\pi\mu d(\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_g) \quad , \quad \mathbf{u}_g = \sum_{k=1}^n \mathbf{u}_k / n \quad (5.5)$$

となる。ここで $\mathbf{v}_g$ は重心点の移動速度ベクトルである。また、式(5.5)と式(5.1)の差をとり、重心を基点とした各球の位置ベクトルを $\delta \mathbf{r}_i$ とする (図5.2) と、各球の運動方程式は

$$m \frac{d^2 \delta \mathbf{r}_i}{dt^2} = 3\pi\mu d \left(\delta \mathbf{u}_i - \frac{d\delta \mathbf{r}_i}{dt} \right) + \sum_{j=1, j \neq i}^n k \frac{\delta \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{r}_i}{|\delta \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{r}_i|} (|\delta \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{r}_i| - l_0) \quad (5.6)$$

となる。

粘弾性流体は非ニュートン粘性と弾性を示す。非ニュートン粘性は、せん断流中におかれた高分子鎖の回転による運動量の伝達効果、弾性は高分子鎖の伸縮による弾性エネルギーの蓄積・放出の効果がその主な原因と考えられる。したがって粘弾性流体のメカニズムを調べる上で、球・バネマクロモデルが有する角運動量と弾性

エネルギーを求めることが必要になる。一つの球・バネマクロモデルが有する角運動量 R_l は、それぞれの球が有する重心まわりの角運動量を合計して、

$$R_l = \sum_{i=1}^n m(\delta \mathbf{r}_i \times \delta \mathbf{v}_i)_l \quad (5.7)$$

である。また1つの球・バネマクロモデルに蓄えられる弾性エネルギー E_l は、それぞれのバネの弾性エネルギーを合計して

$$E_l = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{k}{2} (|\delta \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{r}_i| - l_0)^2 \quad (5.8)$$

である。また、単位質量流体中に含まれる球・バネマクロモデルが有する重心まわりの角運動量とバネの弾性エネルギーは

$$R = \frac{m}{\rho \Delta V} \sum_{l=1}^{\Delta N} \sum_{i=1}^n (\delta \mathbf{r}_i \times \delta \mathbf{v}_i)_l \quad (5.9)$$

$$E = \frac{k}{\rho \Delta V} \sum_{l=1}^{\Delta N} \left\{ \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n (|\delta \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{v}_i| - l_0)^2 \right\}_l \quad (5.10)$$

となる。

5.4 流体の運動方程式

流体の運動を考える場合には球の大きさを考慮せず、球の流体抗力の反力が集中力として球中心点の流体に作用すると考える。流れ場中に微小領域 ΔV を考え、 ΔV の運動方程式を考えると、単位質量当たりの流体の運動方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{3\pi\mu d}{\rho\Delta V} \sum_{l=1}^{\Delta N} (\mathbf{u}_l - \mathbf{v}_l) \quad (5.11)$$

が得られる。ここで、添え字 l は ΔV 内に存在する球（総数 ΔN ）に付けた番号であり、 $\mathbf{u}_l$ は球 l の位置の溶媒流体の速度ベクトルである。上式右辺第3項が球・バネモデルからの流体抗力の成分である。上式以外に連続の式を考える。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5.12)$$

5.5 無次元化

無次元化の基準量として、長さ L 、速さ U 、時間 L/U を用いると、流体の運動方程式(5.1)は

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} = -\nabla \bar{p} + \frac{1}{Re} \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} - \frac{3\pi}{Re \Delta \bar{V}} \left(\frac{d}{L} \right) \sum_{l=1}^{\Delta N} (\bar{\mathbf{u}}_l - \bar{\mathbf{v}}_l) \quad (5.13)$$

の様に無次元化される。ここで、 Re は溶媒流体の粘性係数 μ を用いたレイノルズ数である。次に球・バネモデルの重心の運動方程式(5.4)を無次元化すると

$$\frac{d^2 \bar{\mathbf{r}}_g}{d\bar{t}^2} = \frac{Re}{18} \left(\frac{d}{L} \right)^2 (\bar{\mathbf{u}}_g - \bar{\mathbf{v}}_g) \quad (5.14)$$

となる。同様に、球の運動方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \delta \bar{\mathbf{r}}_i}{d\bar{t}^2} = & \frac{Re}{18} \left(\frac{d}{L} \right)^2 \left\{ \delta \bar{\mathbf{u}}_i - \frac{d \delta \bar{\mathbf{r}}_i}{d\bar{t}} \right. \\ & \left. + C_k \sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{\delta \bar{\mathbf{r}}_j - \delta \bar{\mathbf{r}}_i}{|\delta \bar{\mathbf{r}}_j - \delta \bar{\mathbf{r}}_i|} (|\delta \bar{\mathbf{r}}_j - \delta \bar{\mathbf{r}}_i| - \bar{l}_0) \right\} \end{aligned} \quad (5.15)$$

となる。ここで、無次元数 C_k は球に作用するバネ力と粘性抗力との比を意味し、次のように表される。

$$C_k = \frac{k}{3\pi\mu U} \frac{L}{d} \quad (5.16)$$

流れ場中（体積 V ）に存在する球の総数を N とすると球・バネモデルの濃度 W_p は、

$$W_p = \frac{\pi N}{6\bar{V}} \left(\frac{d}{L} \right)^3 \quad (5.17)$$

で表される。ただし、球には高分子鎖だけでなく、溶媒流体が含まれているため、この濃度 W_p は実際の高分子鎖の質量濃度とは異なるものである。また、バネの平衡長さ（球中心間の距離） l_0 は球の直径に比例すると考え、次の様に表す。

$$\bar{l}_0 = \frac{l_0}{L} = a \left(\frac{d}{L} \right) \quad (5.18)$$

したがって、入力パラメータとして (Re, C_k, W_p, N, a) の5つの量を設定すれば全ての量が決定することになる。

なお、一つの球・バネマクロモデルが有する角運動量 R_l とバネの弾性エネルギー E_l は

$$\bar{R}_l = \frac{R_l}{mUL(d/L)^2} = \frac{1}{(d/L)^2} \sum_{i=1}^n (\delta \bar{\mathbf{r}}_i \times \delta \bar{\mathbf{v}}_i) \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned}
\overline{E}_l &= \frac{E_l}{kL^2(d/L)^2} \\
&= \frac{1}{2(d/L)^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \left(|\delta \overline{\mathbf{r}}_j - \delta \overline{\mathbf{r}}_i| - \overline{l}_0 \right)^2
\end{aligned} \tag{5.20}$$

の様に無次元化される。

5.6 結 言

粘弾性流体の流れに発生する特異流れのメカニズムの解明を目的として球・バネマクロモデルによるシミュレーション方法を新しく提案した。この計算は、球・バネマクロモデルをニュートン流体中に多数混入させて粘弾性流体の流れを解くものである。この提案したモデルの特徴は以下のようである。

1. 本方法は多数の高分子鎖の一つの絡まりを一つの球・バネモデル（本研究では四面体モデルを用いている）でモデル化するもので、一本の高分子鎖を一つの球・バネモデルでモデル化する従来の球・バネマイクロモデルとは異なるものである。
2. 溶媒流体と球・バネモデルの速度差による流体抗力は球のみに作用し、球まわりのストークス流れとして評価する。
3. 流れは一方向あるいは二次元、三次元として取り扱うが、球・バネモデルの運動は常に三次元として取り扱う。
4. モデルの運動は、モデルの重心に対する運動方程式と重心を基点とした各球の位置ベクトルに対する運動方程式を解いて求める。
5. 流体の運動を考えると球の大きさの影響を考慮せず、球の流体抗力の反力が集中力として球中心点に作用すると考えた流れ場中の微小領域における単位質量当たりの運動方程式を解く。

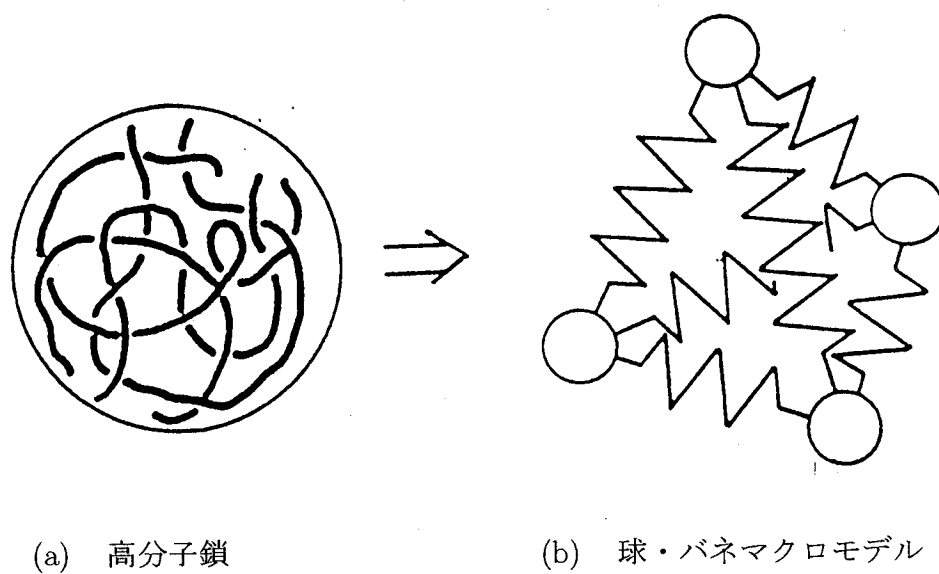


図 5.1 提案するモデル

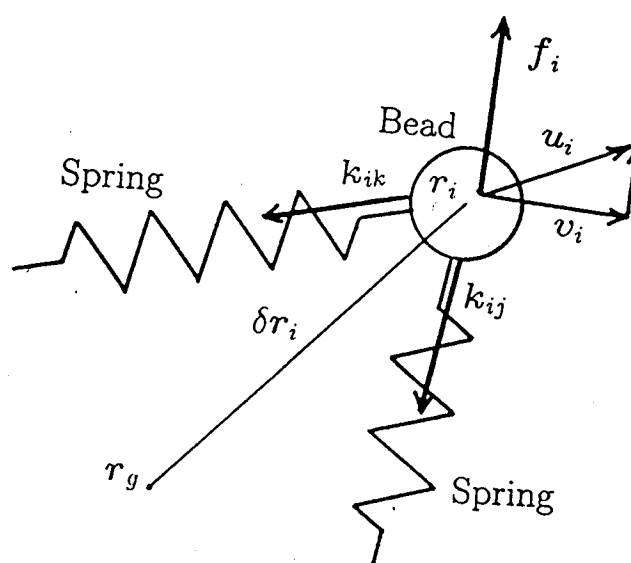


図 5.2 球に作用する力

第6章

球・バネマクロモデルによる平行平板間のポアズイユ流れ

6.1 緒 言

第5章で提案した球・バネマクロモデルを用いて、平行平板間のポアズイユ流れの解析を行い、粘弾性流体の非ニュートン粘性のメカニズムについて検討する。

6.2 2次元1方向流れの取り扱い

平行平板間のポアズイユ流れやクエット流れに代表されるような二次元一方向流れでは、流体の速度は x 方向速度 u_x の y 方向変化のみを考えればよい。従って、流体の運動方程式 (5.13) は、

$$\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{u}_x}{\partial y^2} - \frac{3\pi}{Re \Delta \bar{V}} \left(\frac{d}{L} \right) \sum_{l=1}^{\Delta N} (\bar{u}_{xl} - \bar{v}_{xl}) \quad (6.1)$$

となる。一方、球・バネマクロモデルの挙動は三次元的に取り扱う必要がある。流体の速度ベクトル $\bar{\mathbf{u}}_i$ の y, z 成分は 0 となるため、一つのモデルの重心の y, z 座標は初期値のまま変化しない。また、重心の x 方向速度 v_{xg} は、式 (5.14) で必要になるが、重心の x 座標 x_g は使うことがない。従って球・バネマクロモデルの重心の運動方程式 (5.14) は、

$$\frac{d\bar{v}_{xg}}{dt} = \frac{Re}{18} \left(\frac{d}{L} \right)^2 (\bar{u}_{xg} - \bar{v}_{xg}) , \quad \bar{v}_{yg} = \bar{v}_{zg} = 0 \quad (6.2)$$

となり、 x 方向速度成分 $\bar{v}_{xg}$ のみを求めればよい。

本研究では、4球6バネモデル (四面体モデル) を考える (図 6.1 参照)。この時、 $i = 1, 2, 3$ の球の運動は式 (5.15) を解き、 $i = 4$ の球の運動は、

$$\delta \bar{\mathbf{r}}_4 = -(\delta \bar{\mathbf{r}}_1 + \delta \bar{\mathbf{r}}_2 + \delta \bar{\mathbf{r}}_3) \quad (6.3)$$

$$\delta \bar{\mathbf{v}}_4 = -(\delta \bar{\mathbf{v}}_1 + \delta \bar{\mathbf{v}}_2 + \delta \bar{\mathbf{v}}_3) \quad (6.4)$$

で算出する。従って、 $i = 4$ の球の速度は

$$\bar{\mathbf{v}}_4 = 4\bar{\mathbf{v}}_g - (\bar{\mathbf{v}}_1 + \bar{\mathbf{v}}_2 + \bar{\mathbf{v}}_3) \quad (6.5)$$

で求められる。

平行平板間のポアズイユ流れを図 6.2 に示す。座標原点を流路中央にとり、平板間の距離を代表長さ L とし、平板間上半分 ($y = 0 \sim L/2$) の $L \times L/2 \times L_z$ の領域を計算領域として考える。従って $\bar{u}_x$ の境界条件は

$$\bar{u}_x = 0 \quad : \quad y = L/2 \quad (\text{壁上}) \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} = 0 \quad : \quad y = 0 \quad (\text{対称軸上}) \quad (6.7)$$

となる。

球・バネマクロモデルの運動の領域については次の様に考える。全流路 ($L \times L \times L_z$) 中に合計 N 個の球・バネマクロモデルが均一に分散するとし、1 個のモデルには、 $y = 0$ を対称とした位置に対称な姿勢でもう一つの球・バネマクロモデルが存在するとする。また、流体の運動に影響を与えるのは球に作用する流体抗力のみであるから、 $y = 0$ を対称として $y < 0$ の領域を折り返すのは流体抗力だけで、球・バネマクロモデルは対称な挙動をするため、 $y > 0$ の領域のモデルを解析するだけでよい。この様にすると、球・バネマクロモデルに対する対称条件を用いることなく、 $N/2$ 個の球・バネマクロモデルの挙動を取り扱うだけで、 $-L/2 < y < L/2$ の全領域に存在する合計 N 個のモデルが分散した状態を取り扱うことが出来る。

具体的には次のように取り扱う。式 (6.1) の右辺第 3 項に含まれる流体抗力は、 $\Delta \bar{V}$ と対称になる下領域の微小領域内に含まれる球に作用する流体抗力と $\Delta \bar{V}$ 内に含まれる球に作用する流体抗力の合計が上領域内の $\Delta \bar{V}$ 内に作用するとして評価する。従って、球・バネマクロモデルの運動に対して $y = 0$ における対称条件を適用せずに、 $y = -L/2 \sim L/2$ の上下領域に均等に球・バネマクロモデルを分布させる。

壁近くでの球・バネマクロモデルの挙動については、本来は球と壁との衝突を考えなくてはならないが、この衝突のモデルは未だ確立していない。また、本研究で考える平行平板間の流れでは、球・バネマクロモデルの運動に対する壁の直接の影響は壁近傍に限られ、全体の流れに与える影響は小さいと考えられる。したがって、流体と球の相互作用および流体と壁との相互作用は考えるが、球と壁との相互作用は無視することにし、無限に広がった流体中に流体の速度を 0 にするが、モデルは自由に通り抜ける面を平行に置いた状態を考えることにした。

基礎式の離散化は、流体の運動方程式 (6.1) については y 方向には中心差分を用い、時間積分については流体の運動方程式 (6.1) も球の運動方程式 (5.15), (6.3) も Runge-Kutta 法を用いた。

6.3 定常流れ

$\bar{t} = 0$ の初期状態として流体の速度はニュートン流体の速度分布を、球の速度はニュートン流体の速度と速度差がないように与え、計算を開始する。 $\bar{t} = 60$ 位でほぼ定常 ($\bar{t} = 50 \sim 60$ で $\pm 0.05\%$ 以内の変動) になるが、さらに $\bar{t} = 100$ まで計算し、 $\bar{t} = 60 \sim 100$ の間の平均値をもって定常状態とした。なお、本節の計算では $dp/dx = -0.05$ 、 $Re = 100$ としたが、これは代表速度 U に仮の値を用いているため、物理的に意味のある値ではない。

図 6.3 は、ひとつの球・バネマクロモデルが有する重心まわりの角運動量とバネの運動エネルギーの時間 $\bar{t} = 60 \sim 100$ の変化の様子および球・バネマクロモデルの動的挙動を $\bar{t} = 60 \sim 100$ 、間隔 $\Delta \bar{t} = 5$ で示したものである。(a) は $\bar{y} = 0.1$ の流路中心部近傍、(b) は $\bar{y} = 0.3$ の中心部と壁面の中間部、(c) は $\bar{y} = 0.45$ の壁面近傍の例を示している。図より、角運動量と弾性エネルギーの変化は $\bar{t} = 60 \sim 100$ の間でほぼ定常状態にあると見なせることがわかる。ひとつのモデルが有する重心まわりの角運動量とバネの弾性エネルギーは、4つの球の回転運動に対応して周期的に変動していることがわかる。また図から、モデルの姿勢は、中心部ではあまりバネの伸縮がなく、球・バネモデルはほぼ剛体的にゆるやかに回転すること、壁面近くでは $\bar{y}$ 方向に縮み、 $\bar{x}$ 方向に伸ばされて速く回転することがわかる。

一つのセル $\Delta \bar{V}$ および対称なセル内に存在する球の個数 ΔN は計算結果に不自然なばらつきが現れないように十分多くする必要がある。図 6.4 は流量 $\bar{Q}$ 、球・バネマクロモデルが有する z 軸まわりの角運動量の合計量 $\bar{R}_t$ およびバネの弾性エネルギーの合計量 $\bar{E}_t$ に対する ΔN による影響を示したものである。 ΔN が増加するに従って $\bar{Q}$ のばらつきが少なくなり、一定値に近づくが、 $\Delta N > 100$ であれば誤差は 0.3% 以内、 $\Delta N > 200$ ならば 0.1% 以内となることがわかる。以下の計算では、 $\Delta N = 545$ とした。

図 6.5 は、速度分布 $\bar{u}$ と同一レイノルズ数のニュートン流体の速度分布 $\bar{u}_n$ との差 $\bar{u} - \bar{u}_n$ を示したものである。なおこの場合の圧力勾配は $dp/dx = -0.420$ となり、ニュートン流体の場合は $(dp/dx)_n = -0.348$ となった。従って、球・バネマクロモデルによるシミュレーションの見かけの粘度は $(dp/dx)/(dp/dx)_n \approx 1.2$ 倍に増加することがわかる。また、球・バネマクロモデルによる速度分布 u は壁面 ($\bar{y} = 0.5$) 近傍ではニュートン流体より速くなり、流路中央部 ($\bar{y} = 0$) 近傍では遅くなり、ニュートン流体に比べると扁平な速度分布になることがわかる。

図 6.6 は単位質量内の球・バネマクロモデルの有する z 軸回りの角運動量 $\bar{R}$ の

y 方向分布である。なお、 x 軸および y 軸回りの角運動量は $\bar{R}$ に比べて 10^{-2} 以下のオーダーとなり、ほとんど無視できる。図から中心軸において $\bar{R}$ は 0 となり、壁に近づくにつれて増加することがわかる。これは、速度勾配が大きい程、球・バネモデルに与えられる角運動量が大きくなるためであると思われる。

6.4 非ニュートン粘性

ニュートン流体の2次元ポアズイユ流れとの対応から球・バネマクロモデルの見かけの粘性係数 μ_b を求めることが出来る。本計算に使用したパラメータを表 6.1 にまとめる。計算は、流路幅 ($L = 1$) の上半分を 20 分割 (従ってひとつのセルの幅は 0.025) して行った。表中の dp/dx は圧力勾配であり、 $C_k = 100, 10$ ともに 12 通りの計算を行った。 C_k (式 (5.16)) は球に作用するバネ力と粘性抵抗の比を意味し、バネ定数 k を含んでいる。本計算の場合、他のパラメータは一定であるので、 C_k の変化は k の変化に対応すると考えてよい。また、 N^* は流路全体に与える球・バネマクロモデルの総数である。次に W_p (式 (5.17)) は球・バネマクロモデルの濃度を表すが、0.1 と固定した。(この濃度は高分子鎖の質量濃度とは異なる) a (式 (5.18)) は、バネの平衡長さと球の直径の比を表し、2 と固定した。

図 6.7 は、見かけの粘性係数 μ_b の圧力勾配 dp/dx による変化を示した図で、 $C_k = 10, 100$ の場合である。図から dp/dx が小さい (流量が小さい) 場合、 μ_b/μ は一定値となり、これがゼロせん断粘度に相当すると考えられる。さらに dp/dx の増大に伴い、 μ_b が低下する shear-thinning 性を示すことも分かる。この shear-thinning 性は実際の高分子溶液で示される現象である (図 3.3 参照)。また、 dp/dx が大きい (流量が大きい) 場合、 μ_b/μ は 1 に近づき、溶媒流体の粘性係数 μ (第 2 ニュートン粘度) に近づくことが分かる。

図 6.8 は $C_k = 100$ の時の $\bar{t} = 60 \sim 100$ までの球・バネマクロモデルの挙動を示したものである。この時間の範囲で流れは定常状態を示している。(a) は $dp/dx = 10^{-4}$ で、図 6.7 において見かけの粘性係数 μ_b が一定となるゼロせん断粘度の範囲である。この範囲における球・バネマクロモデルは、バネの伸び縮みがほとんどなく、ほぼ剛体的に回転していることが分かる。(b) は $dp/dx = 5 \times 10^{-2}$ で、ゼロせん断粘度から第 2 ニュートン粘度へと移行する shear-thinning 性を示す領域である。このときの球・バネマクロモデルは x 方向に伸び y 方向に縮んで横長になり、伸び縮みしながら回転することがわかる。(c) は $dp/dx = 10^0$ の場合で、第 2 ニュートン粘度の範囲に含まれる。このときの球・バネマクロモデルは、ほとんど偏平になり、変形しないで流体中を運動していくことが分かる。

図 6.9 は流路中に存在する全球・バネマクロモデルの有する角運動量の総和 $\bar{R}_t$ と圧力勾配の関係を示したものである。図より、 dp/dx が小さい (流量が小さい) 場合、即ちゼロせん断粘度の範囲において、角運動量は流量の増加に従って大きくなることが分かる。さらに流量が増加する shear-thinning 性を示す範囲において、角

運動量は穏やかに減少傾向に転ずることが分かる。第2ニュートン粘度を示す範囲において、流量の増加に従って角運動量が減少していくことが分かる。

図 6.10 は、流路内に存在する全ての球・バネマクロモデルにおけるバネの最大伸び量 Δl_{exp} と最大縮み量 Δl_{con} と圧力勾配の関係を示したものである。図より、 $d\bar{p}/dx$ の増加 (流量の増加) に従って、 $\Delta l_{exp}, \Delta l_{con}$ とともにその値が増加するが、 Δl_{con} は第2ニュートン粘度の範囲において 1 に漸近することがわかる。また図より、 $C_k = 100$ の場合は、

$$0.2 < \Delta l_{exp}/l_0 < 2$$

$$0.15 < \Delta l_{con}/l_0 < 0.85$$

の範囲において見かけの粘度 μ_b は shear-thinning 性を示すことが分かる。

図 6.11 は、最大速度 $\bar{u}_{max}$ と平均速度 $\bar{u}_{mean}$ の比の変化であり、比が 1.5 の時にニュートン流体と同じ速度分布になる。図からゼロせん断粘度の時も、第2ニュートン粘性の時もニュートン流体と同じ速度分布であるが、shear-thinning 性を示している時はニュートン流体より、最大速度が低下した偏平な速度分布を示すことが分かる。

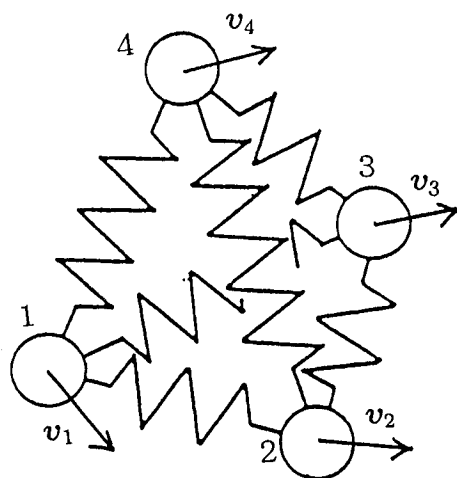
6.5 結 言

第5章で提案した球・バネマクロモデルを用いて、平行2平板間のポアズイユ流れについて数値シミュレーションを行い以下の結果を得た。

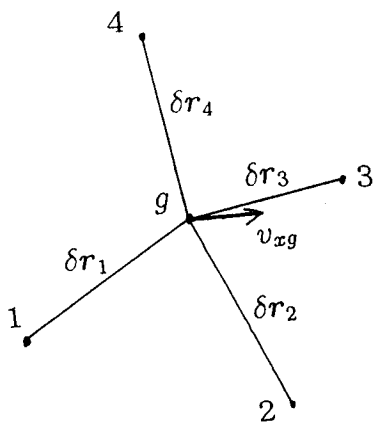
1. 一つのセルに最低限必要な球の個数 ΔN 等、シミュレーションに必要な量を示した。
2. 得られた速度分布が粘弾性流体の速度分布と同様な傾向を示す。
3. 定常ポアズイユ流れの計算から、球・バネマクロモデルによる流れはshear-thinning 性を示し、それはせん断流れによるモデルの回転とバネの伸縮の相互作用によって生ずることを明らかにした。

表 6.1 計算条件

$d\bar{p}/d\bar{x}$	C_k	N^*	W_p	a
10^{-4}	100	3000	0.1	2
10^{-3}	100	3000	0.1	2
5×10^{-3}	100	3000	0.1	2
10^{-2}	100	3000	0.1	2
3×10^{-2}	100	3000	0.1	2
5×10^{-2}	100	3000	0.1	2
10^{-1}	100	3000	0.1	2
3×10^{-1}	100	3000	0.1	2
5×10^{-1}	100	3000	0.1	2
10^0	100	3000	0.1	2
10^1	100	3000	0.1	2
10^2	100	3000	0.1	2
10^{-5}	10	3000	0.1	2
10^{-4}	10	3000	0.1	2
5×10^{-4}	10	3000	0.1	2
10^{-3}	10	3000	0.1	2
3×10^{-3}	10	3000	0.1	2
5×10^{-3}	10	3000	0.1	2
10^{-2}	10	3000	0.1	2
3×10^{-2}	10	3000	0.1	2
5×10^{-2}	10	3000	0.1	2
10^{-1}	10	3000	0.1	2
5×10^{-1}	10	3000	0.1	2
10^0	10	3000	0.1	2



(a) 四面体モデル



(b) 重心を基点とした各球の位置ベクトル

図 6.1 4球6バネモデル

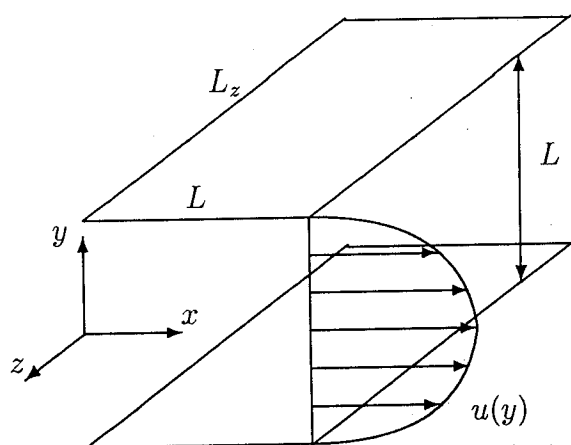


図 6.2 2次元ポアズイユ流れ

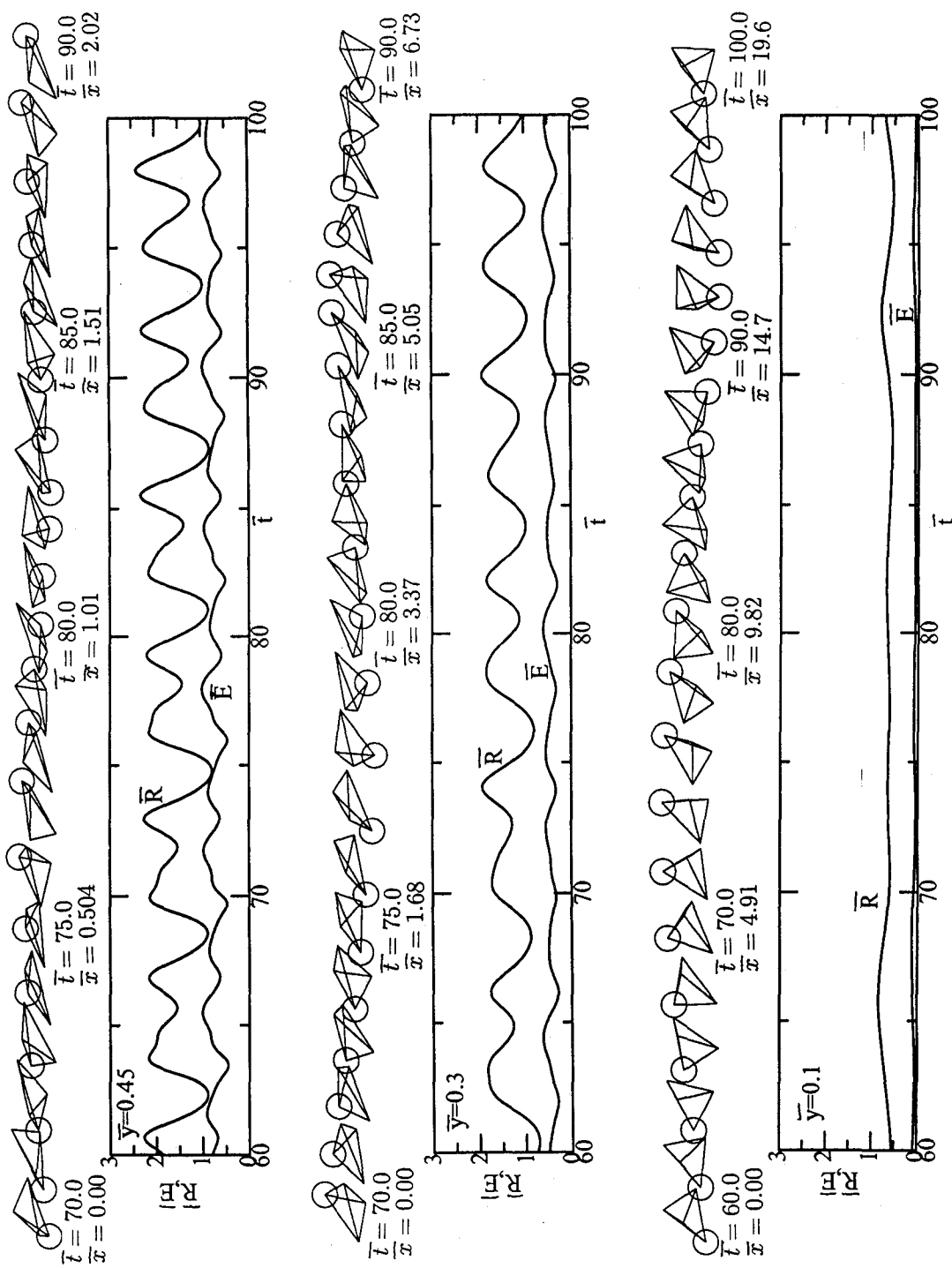


図 6.3 ひとつの球・バネマクロモデルが有する角運動量と弾性エネルギーおよび モデルの挙動

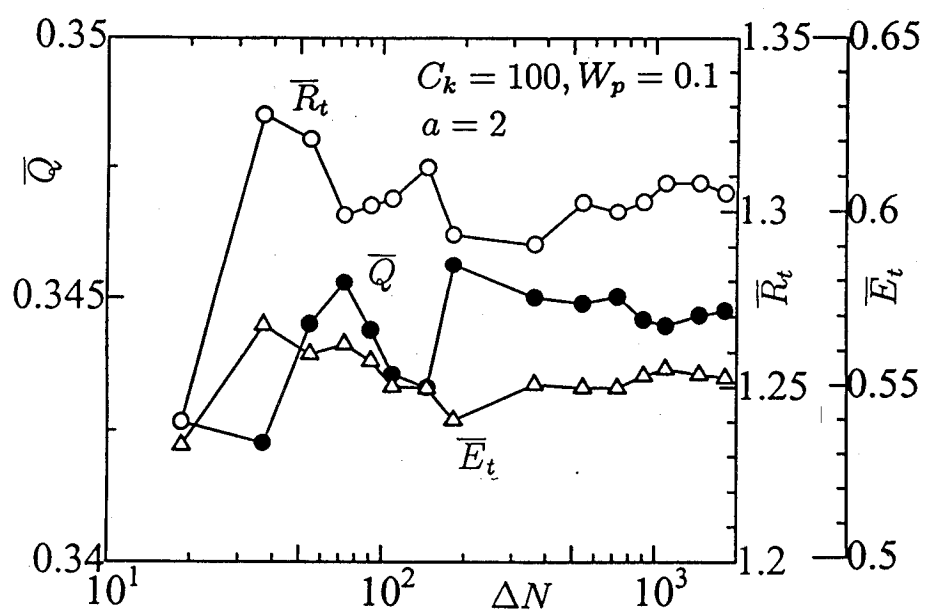


図 6.4 1セルにおける球の個数の影響

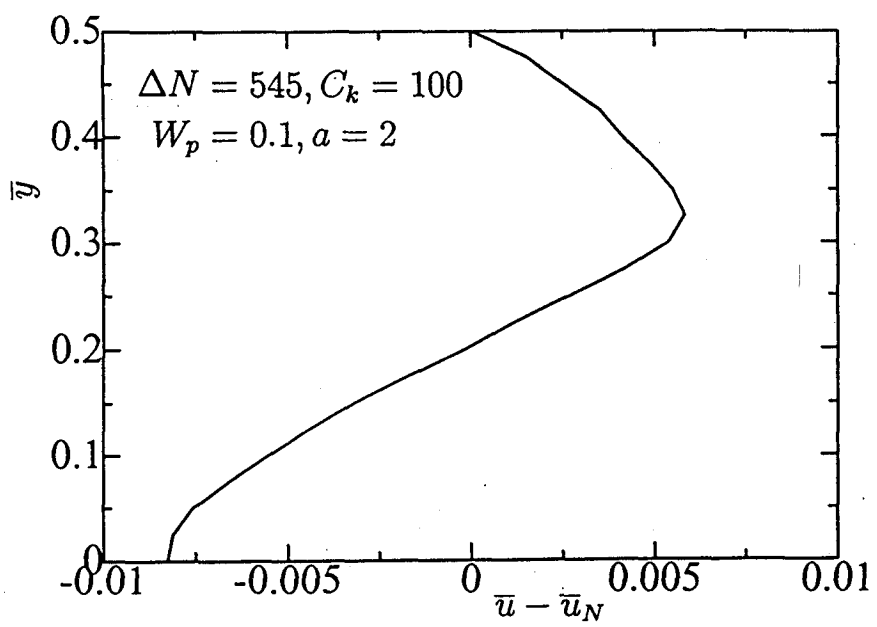


図 6.5 ニュートン流体との速度差

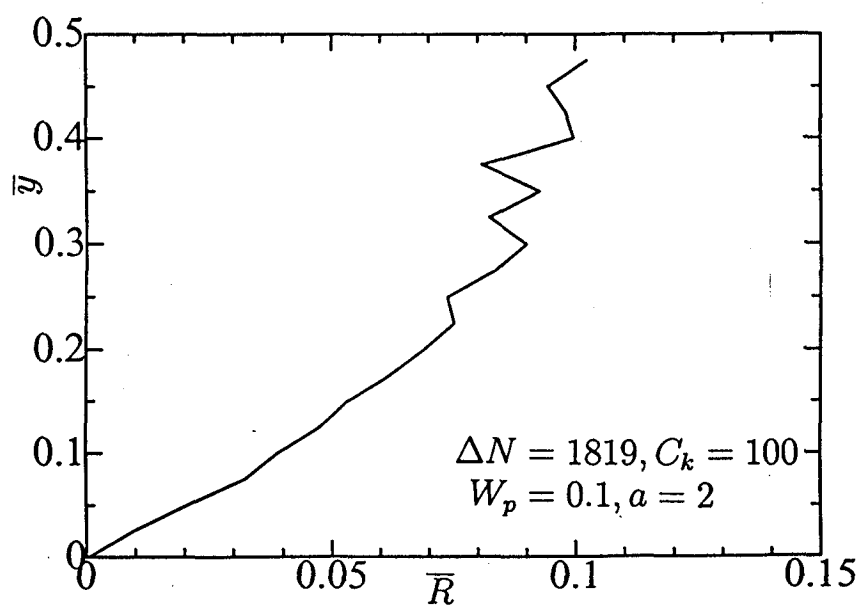


図 6.6 角運動量の分布

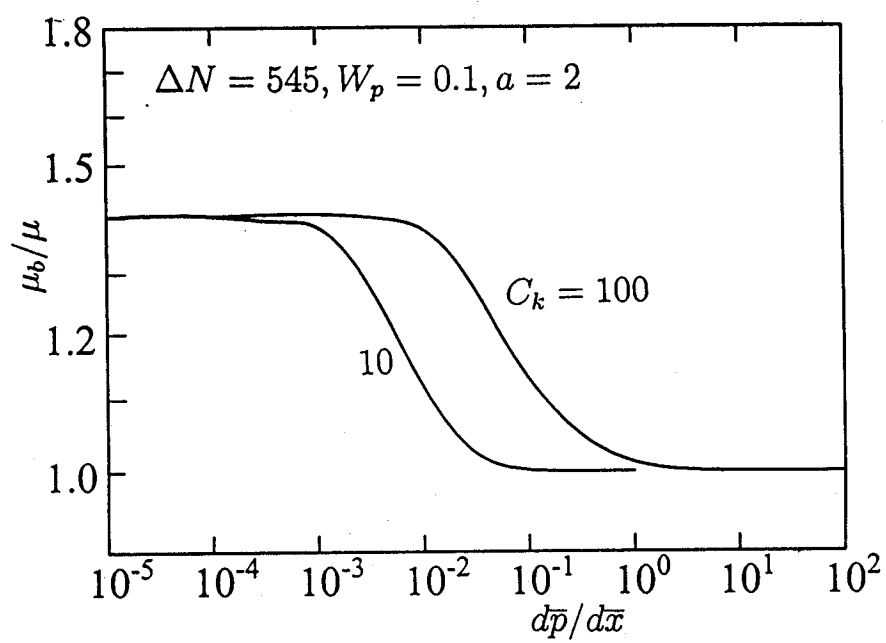
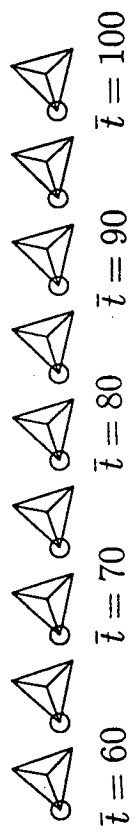


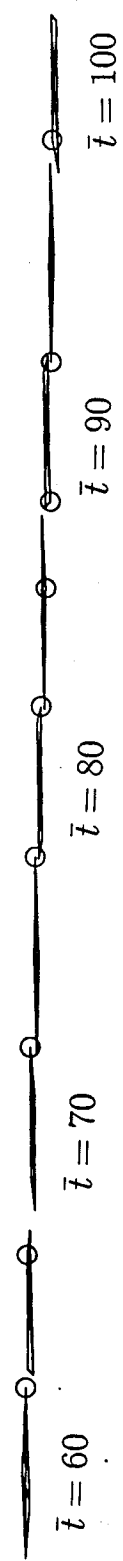
図 6.7 圧力勾配による見かけの粘性係数の変化



(a) $d\bar{p}/d\bar{x} = -10^{-4}$



(b) $d\bar{p}/d\bar{x} = -5 \times 10^{-2}$



(c) $d\bar{p}/d\bar{x} = -10^0$

図 6.8 モデルの姿勢

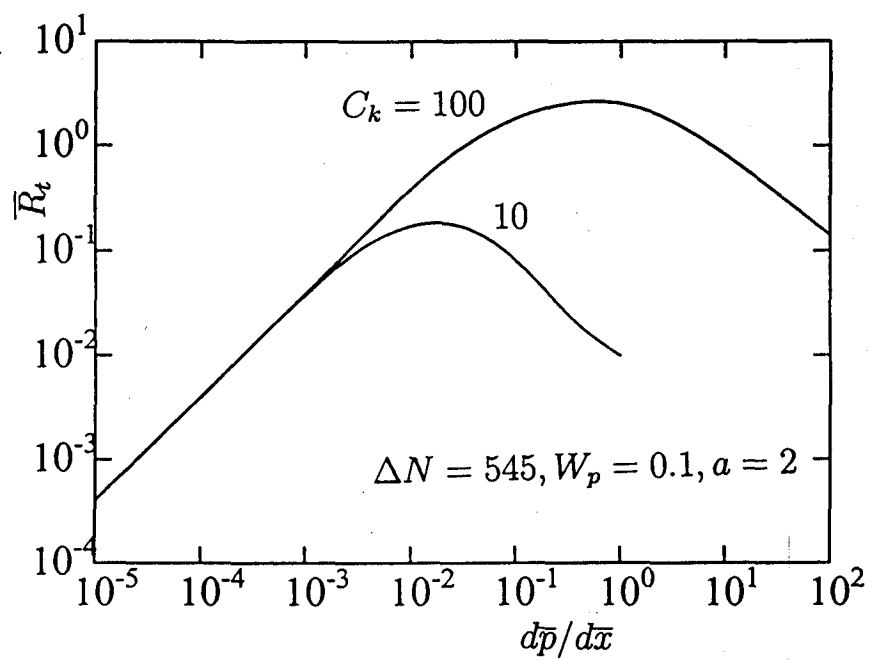


図 6.9 圧力勾配による角運動量の変化

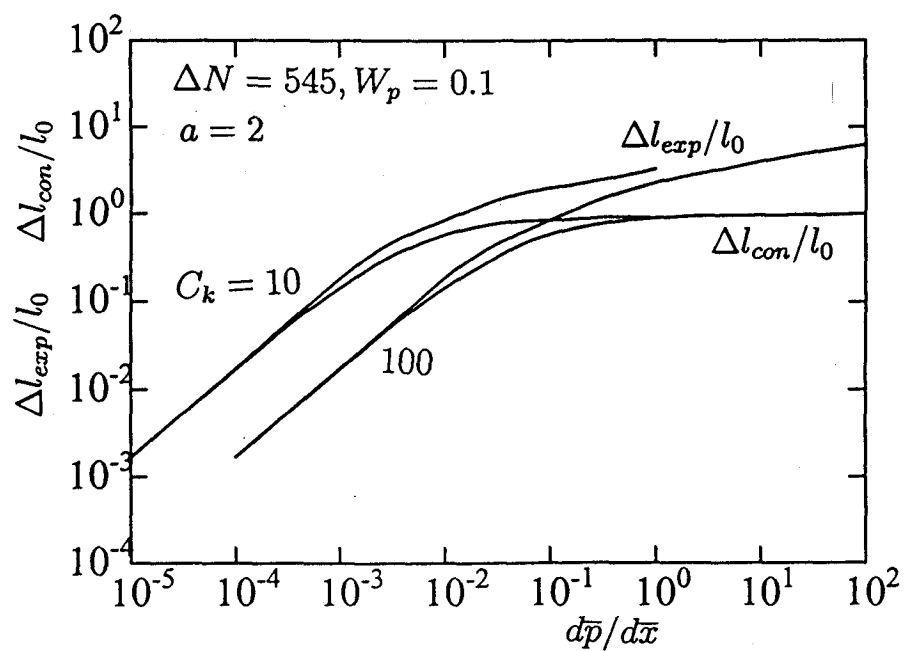


図 6.10 バネの最大伸び、最大縮みの変化

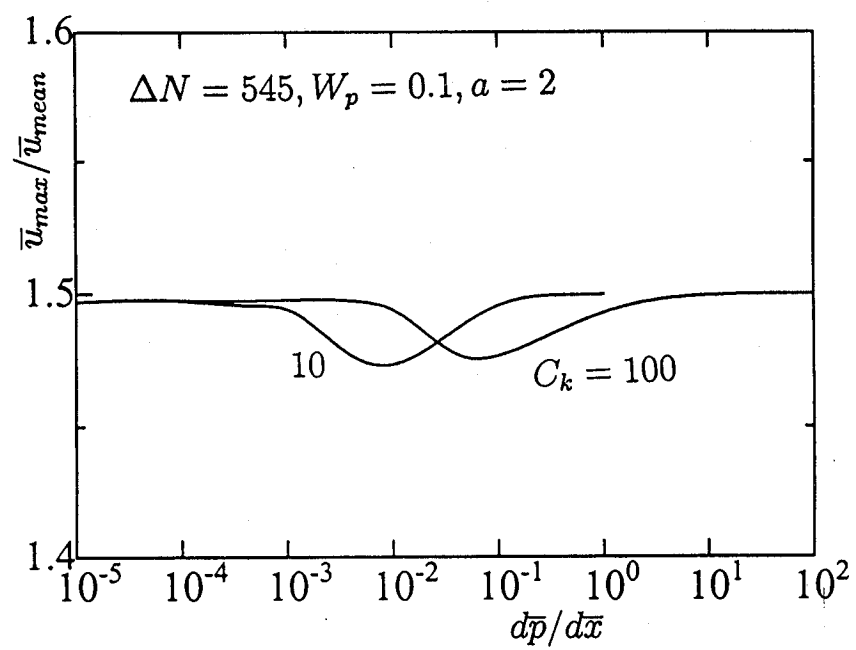


図 6.11 平均流速と最大流速の比

第7章

結 論

本研究は、粘弾性流体の流れに発生する粘弾性流体特有の流れのメカニズムを、解明することを目的として行われたものである。

粘弾性流体に関する研究は古くから行われているが、粘弾性流体特有の流れのメカニズムについてはまだあまり解明されてはいない。粘弾性流体の流れを数値的に解くには、例えば有限要素法において構成方程式に対して上流化スキームを適用する、ことが一般的な方法である。この方法では、高精度な補間法を用いれば、高いワイセンベルグ数でも解を求めることは可能である。しかし、粘弾性流体特有の流れの一つである急縮小流れに発生する流線が外側を開く流れを求めた例はない。本研究では、構成方程式を解く上流化スキームを使わない計算方法を提案し、このような粘弾性流体特有の流れを解くことに成功した。

しかし、粘弾性流体特有の流れメカニズムを解明するには、マクロ的な取り扱いとなる従来の構成方程式でははっきりしないところが多い。そこで、球・バネマクロモデルを混入し、構成方程式を解かずに直接流れ場を解く手法を提案し、粘弾性流体のもつ粘性係数の shear-thinning 性に対するメカニズムを解明した。

つまり、構成方程式に対する高精度な解法を示したこと、流れのメカニズムを解明し得るようなモデルの計算手法を提案したこと、の二つが本研究の特徴である。

以下に各章における結論をまとめる。

第2章は、偏差応力テンソル $\mathbf{P}$ を粘性による応力 $\boldsymbol{\tau}$ とそれ以外の応力 $\boldsymbol{\sigma}$ に分離し、 $\boldsymbol{\sigma}$ について基礎式を導いた。この構成方程式の移流項に CIP 法を適用した方法を提案した。CIP 法は、双曲型方程式に対する高精度解法のひとつであり、空間的な分布を三次スプライン関数で近似するところに特徴がある。速度 $\mathbf{v}$ および圧力 p は、Euler 陰スキームと MAC 法を組み合わせた従来の方法で解いた。また、境界条件を速度 $\mathbf{v}$ 、圧力 p 、応力 $\boldsymbol{\sigma}$ について示した。

第3章では、この第2章で提案した CIP 法を使って急縮小流れを解いた。工業的な要求から急縮小流れに関する研究は盛んに行われている。本研究では慣性力の作用する範囲を考えており、可視化実験結果と数値計算結果の比較を行った。流量を増加すると急縮小部上流側で流線が外側に開く粘弾性流体特有の流れとなり、これは可視化実験および数値計算結果ともに同様な傾向を示した。即ち、再循環領域の発生しない範囲の流れにおいて、提案した CIP 法による方法は有効な方法であることを示した。また、この粘弾性流体特有の流れは、伸長速度の増加による伸長粘度の増加量に依存し、増加量が大いほど流線の開きは大きくなることが分かった。

第4章では、第2章で述べた Lax 法を使って、後向きステップ流れについて計算を行った。モデルは Maxwell モデルおよび Denn モデルを使用し、慣性力、弾性力、非ニュートン粘性の影響を調べた。ステップ後方に発生する再循環領域はワイセンベルグ数の増加（弾性力の影響が大きくなる）と共に小さくなることが分かった。

第5章は、球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の流れに対する数値計算手法について示した。糸まり状になった高分子鎖を球とバネを組み合わせた四面体モデルを用いてモデル化した。この計算方法の特徴は：流体抗力はモデルの球のみに作用し、球のまわりはストークス流れとして評価する。また、モデルの運動は常に3次元として取り扱う。流体の運動を考えると、球の大きさの影響を考慮しないで、球の流体抗力の反力が集中力として作用する。：というところにある。

第6章は、第5章で提案した球・バネマクロモデルによる方法を平行平板間のポアズイユ流れに適用した例を示した。球・バネマクロモデルによる流れは shear-thinning 性を示し、それはせん断流れによるモデルの回転とバネの伸縮の相互作用によって生ずることを明らかにした。

以上のように、構成方程式の解法には双曲型方程式の高精度解法を適用することが非常に有効であり、Maxwell モデルのような単純なモデルでも粘弾性流体の流れを捕らえ得るといえる。また、本研究は球・バネマクロモデルのように直接流れ場に作用するモデルを解くことで、粘弾性流体の特異流れに対するメカニズムの解明にひとつの指針を与えたと考える。

謝 辞

本研究を遂行するにあたり、終始かわらぬご高導を賜りました大阪大学工学研究科機械物理工学専攻 三宅裕教授ならびに福井大学工学部機械工学科 川端信義助教授に深甚なる謝意を心から表します。

また、ご多忙中、懇切丁寧な校閲と助言を賜りました大阪大学工学研究科機械物理工学専攻 中村喜代次教授、辻裕教授に深く感謝いたします。

終始あたたかいご支援とご激励を賜りました福井工業高等専門学校 寺山吉彦名誉教授ならびに福井大学工学部機械工学科 立花規良教授に厚く御礼申し上げます。

さらに、一緒に研究をし、熱心に協力された福井大学工学部機械工学科熱流体講座の当時学生だった木村計介くんならびに西谷義彦くんにも感謝を表します。

平成9年11月 藤田 克志

参考文献

- [1] Kirkwood, J.G. and Riseman, J., The Intrinsic Viscosities and Diffusion Constants of Flexible Macromolecules in Solution, *J.Chem.Phys.*, **16**, (1948), 565-573.
- [2] Oldroyd, J.G., On the Formulation of Rheological Equations of State, *Proc.Poy.Soc.*, **A200**, (1950), 523-541.
- [3] Rouse Jr, P.E., A Theory of the Linear Viscoelastic Properties of Dilute Solutions of Coiling Polymers, *J.Chem.Phys.*, **21**, (1953), 1272-1280.
- [4] Yamamoto, M., The Visco-Elastic Properties of Network Structure, I. General Formalism, *J.Phys.Soc.Japan*, **11**, (1956), 413-421.
- [5] Zimm, B.H., Dynamics of Polymer Molecules in Dilute Solution: Viscoelastic, Flow Birefringence and Dielectric Loss, *J.Chem.Phys.*, **24**, (1956), 269-278.
- [6] Yamamoto, M., The Visco-Elastic Properties of Network Structure, II. Structural Viscosity, *J.Phys.Soc.Japan*, **12**, (1957), 1148-1158.
- [7] Oldroyd, J.G., Non-Newtonian Effects in Steady Motion of Some Idealized Elastico-Viscous Liquids, *Proc.Poy.Soc.*, **A245**, (1958), 278-297.
- [8] Yamamoto, M., The Visco-Elastic Properties of Network Structure, III. Normal Stress Effect (Weissenberg Effect), *J.Phys.Soc.Japan*, **13**, (1958), 1200-1211.
- [9] Coleman, B.D. and Noll, W., Recent Results in the Continuum Theory of Viscoelastic Fluids, *Ann.N.Y.Acad.Sci.*, **89**, (1961), 672-714.
- [10] Bernstein, B., Kearsley, E.A. and Zapas, L.J., A Study of Stress Relaxation with Finite Strain, *Trans.Soci.Rheol.*, **VII**, (1963), 391-410.
- [11] White, J.L. and Metzner, A.B., Development of Constitutive Equations for Polymeric Melts and Solutions, *J.Appl.Poly.Sci.*, **7**, (1963), 1867-1889.

- [12] Fixman, M., Dynamics of Polymer Chains, *J. Chem. Phys.*, **42**, (1965), 3831-3837.
- [13] Pyun, C.W. and Fixman, M., Intrinsic Viscosity of Polymer Chains, *J. Chem. Phys.*, **42**, (1965), 3838-3844.
- [14] White, D.A., Drag Coefficients for Spheres in High Reynolds Number Flow of Dilute Solutions of High Polymer, *Nature*, **212**, (1966), 277-278.
- [15] Denn, M.M., Boundary Layer Flows for a Class of Elastic Fluids, *Chem. Eng. Sci.*, **22**, (1967), 395-405.
- [16] Sanders, J.V., Drag Coefficients of Spheres in Poly(ethylene Oxide) Solutions, *Int. Ship. Prog.*, **14-152**, (1967), 140-157.
- [17] Fields, T.R., Jr and Bogue, D.C., Stress-Birefringent Patterns of a Viscoelastic Fluid at a Sharp-Edged Entrance, *Trans. Soc. Rheol.*, **12**, (1968), 39-55.
- [18] Giesekus, V.H., Nicht-Lineare Effekte Beim Strömen Viskoelastischer Flüssigkeiten Durch Schlitz- und Lochdüsen, *Rheol. Acta*, **7**, (1968), 127-138.
- [19] Lodge, A.S., Constitutive Equations from Molecular Network Theories for Polymer Solutions, *Rheol. Acta*, **7**, (1968), 379-392.
- [20] 岡小天編, レオロジー入門, (1970), 工業調査会.
- [21] de Gennes, P.G., Reptation of a Polymer Chain in the Presence of Fixed Obstacles, *J. Chem. Phys.*, **55**, (1971), 572-579.
- [22] Boger, D.V. and Rama Murthy, A.V., Flow of Viscoelastic Fluids through an Abrupt Contraction, *Rheol. Acta*, **11**, (1972), 61-69.
- [23] Donohue, G.L., Tiederman, W.G. and Reischman, M.M., Flow Visualization of the Near-Wall Region in a Drag-Reducing Channel Flow, *J. Fluid Mech.*, **56**, (1972), 559-575.
- [24] Fortuna, G. and Hanratty, T.J., The Influence of Drag-Reducing Polymers on Turbulence in the Viscous Sublayer, *J. Fluid Mech.*, **53-3**, (1972), 575-586.
- [25] 加藤・立花・及川, 高分子溶液中の球の抵抗について, 日本機械学会論文集(第2部), **38-308**, (1972), 809-820.

- [26] Rudd, M.J., Velocity Measurements Made with a Laser Dopplermeter on the Turbulent Pipe Flow of a Dilute Polymer Solution, *J. Fluid Mech.*, **51**-4, (1972), 673-685.
- [27] Warner, Jr., H.R., Kinetic Theory and Rheology of Dilute Suspensions of Finitely Extendible Dumbbells, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **11**-3, (1972), 379-387.
- [28] de Gennes, P.G., Coil-Stretch Transition of Dilute Flexible Polymers under Ultrahigh Velocity Gradients, *J. Chem. Phys.*, **60**, (1974), 5030-5042.
- [29] Tadmor, Z., Broyer, E. and Gutfinger, C., Flow Analysis Network (FAN)- A Method for Solving Flow Problems in Polymer Processing, *Polym. Eng. Sci.*, **14**, (1974), 660-665.
- [30] 高橋・小野木, 高分子濃厚系の非線形粘弾性現象と構成方程式 [I], 日本レオロジー学会誌, **2**, (1974), 95-105.
- [31] 高橋・小野木, 高分子濃厚系の非線形粘弾性現象と構成方程式 [II], 日本レオロジー学会誌, **3**, (1975), 1-12.
- [32] 富田幸雄, レオロジー, (1975), コロナ社.
- [33] Acierno, D., La Mantia, F.P., Marrucci, G. and Titomanlio, G., A Non-Linear Viscoelastic Model with Structure-Dependent Relaxation Times, I. Basic Formulation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **1**, (1976), 125-146.
- [34] Acierno, D., La Mantia, F.P., Marrucci, G. and Titomanlio, G., A Non-Linear Viscoelastic Model with Structure-Dependent Relaxation Times, II. Comparison with L.D. Polyethylene Transient Stress Results, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **1**, (1976), 147-157.
- [35] Busby, E.T. and MacSporran, W.C., An Experimental Study of Nonrheometric Flows of Viscoelastic Fluids, I. Flow into a ReEntrant Tube. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **1**, (1976), 71-82.
- [36] Crochet, M.J. and Pilate, G., Plane Flow of a Fluid of Second Grade Through a Contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **1**, (1976), 247-258.
- [37] Leonov, A.I., Nonequilibrium Thermodynamics and Rheology of Viscoelastic Polymer Media, *Rheol. Acta*, **15**, (1976), 85-98.

- [38] Christiansen,R.L. and Bird,R.B., Dilute Solution Rheology:Experimental Results and Finitely Extensible Nonlinear Elastic Dumbbell Theory, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**3**,(1977),161-177.
- [39] 後藤・加藤, 高分子溶液の細管流れにおける不安定現象, 日本機械学会論文集 (第2部),**43**-373,(1977),3327-3336.
- [40] 堀・大久保, 法線応力効果とバラス効果の研究, 日本機械学会論文集 (第1部),**43**-368,(1977),1202-1209.
- [41] Johnson,M.W. and Segalman,D., A Model for Viscoelastic Fluid Behavior which Allows Non-Affine Deformation, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**2**,(1977),255-270.
- [42] 加藤, 流動複屈折法と数値解析による流れ解析, (第2報, 付着流れについて), 日本機械学会論文集 (第2部),**43**-366,(1977),589-595.
- [43] Kawahara,M. and Takeuchi,N., Mixed Finite Element Method for Analysis of Viscoelastic Fluid Flow, *Comp. and Fluids*,**5**,(1977),33-45.
- [44] Perera,M.G.N. and Walters,K., Long-Range Memory Effects in Flows Involving Abrupt Changes in Geometry, Part I:Flows Associated with L-Sharped and T-Shaped Geometries, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**2**,(1977),49-81.
- [45] Perera,M.G.N. and Walters,K., Long-Range Memory Effects in Flows Involving Abrupt Changes in Geometry, Part 2:The Expansion/Contraction /Expansion Problem , *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **2**,(1977),191-204.
- [46] Phan-Thien,N. and Tanner,R., A New Constitutive Equation Derived from Network Theory, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**2**,(1977),353-365.
- [47] Cable,P.J. and Boger,D.V., A Comprehensive Experimental Investigation of Tubular Entry Flow of Viscoelastic Fluids: Pats I.Vortex Characteristics in Stable Flow, *AIChE J.*,**24**-5,(1978),869-879.
- [48] Cable,P.J. and Boger,D.V., A Comprehensive Experimental Investigation of Tubular Entry Flow of Viscoelastic Fluids: Pats II.The Velocity Field in Stable Flow, *AIChE J.*,**24**-6,(1978),992-999.
- [49] Doi,M. and Edwards,S.F., Dynamics of Concentrated Polymer Systems, Part 1. - Brownian Motion in the Equilibrium State, *J.Chem.Soc.Faraday trans. II*,**74**,(1978),1789-1801.

- [50] Doi, M. and Edwards, S.F., Dynamics of Concentrated Polymer Systems, Part 2. - Molecular Motion under Flow, *J.Chem.Soc.Faraday trans. II*, **74**, (1978), 1802-1817.
- [51] Doi, M. and Edwards, S.F., Dynamics of Concentrated Polymer Systems, Part 3. - The Constitutive Equation, *J.Chem.Soc.Faraday trans. II*, **74**, (1978), 1818-1832.
- [52] 中川鶴太郎, レオロジー, (1978), 岩波書店.
- [53] Phan-Thien, N., A Nonlinear Network Viscoelastic Model, *J.Rheol.*, **22**, (1978), 259-283.
- [54] Cable, P.J. and Boger, D.V., A Comprehensive Experimental Investigation of Tubular Entry Flow of Viscoelastic Fluids: Pats III. Unstable Flow, *AIChE J.*, **25**-1, (1979), 152-159.
- [55] Crochet, M.J. and Bezy, M., Numerical Solution for the Flow of Viscoelastic Fluids, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **5**, (1979), 201-218.
- [56] 加藤・芝沼, 希薄高分子水溶液の縮小・拡大管流れに関する研究, (第1報, 圧力分布と速度分布), 日本機械学会論文集 (B編), **45**-399, (1979), 1669-1677.
- [57] Nguyen, H. and Boger, D.V., The Kinematics and Stability of Die Entry Flow, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **5**, (1979), 353-368.
- [58] 芝沼・加藤, 希薄高分子水溶液の縮小・拡大管流れに関する研究, (第2報, 拡大管乱流の普遍速度分布), 日本機械学会論文集 (B編), **45**-399, (1979), 1678-1685.
- [59] Bird, R.B., Dotson, P.J. and Johnson, N.L., Polymer Solution Rheology Based on a Finitely Extensible Bead-Spring Chain Model, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **7**, (1980), 213-235.
- [60] Hieber, C.A. and Shen, S.F., A Finite-Element/Finite-Difference Simulation of the Injection-Molding Filling Process, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **7**, (1980), 1-32.
- [61] Viriyayuthakorn, M. and Caswell, B., Finite Element Simulation of Viscoelastic Flow, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*, **6**, (1980), 245-267.
- [62] Cochrane, T., Walters, K. and Webster, M.F., On Newtonian and Non-Newtonian Flow in Complex Geometries, *Phil.Trans.R.Soc.Lond.*, **A301**, (1981), 163-181.

- [63] 尾崎, からみあい高分子系のレオロジー, - Doi-Edwards の管模型理論の実験的検証 -, 日本レオロジー学会誌, **9**, (1981), 139-148.
- [64] Giesekus, H., A Simple Constitutive Equation for Polymer Fluids Based on the Concept of Deformation-Dependent Tensorial Mobility, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **11**, (1982), 69-109.
- [65] Giesekus, H., A Unified Approach to a Variety of Constitutive Models for Polymer Fluids Based on the Concept of Configuration-Dependent Molecular Mobility, *Rheol. Acta*, **21**, (1982), 366-375.
- [66] Mendelson, M.A., Yeh, P.W., Brown, R.A. and Armstrong, R.C., Approximation Error in Finite Element Calculation of Viscoelastic Fluid Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **10**, (1982), 31-54.
- [67] Kim-E, M.E., Brown, R.A. and Armstrong, R.C., The Rolls of Inertia and Shear-Thinning in Flow of an Inelastic Liquid Through an Axisymmetric Sudden Contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **13**, (1983), 341-363.
- [68] Larson, R.G., Convection and Diffusion of Polymer Network Strands, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **13**, (1983), 279-308.
- [69] 西村・中村・堀川, 分岐合流部における高分子溶液の2次元粘弾性流れ, (第1報, T形流路での合流流れ), 繊維機械学会誌, **36-5**, (1983), 67-73.
- [70] Crochet, M.J., Davis, A.R. and Walters, K., Numerical Simulation of Non-Newton Flow, *Rheology Ser. 1*, (1984), Elsevier.
- [71] 土井, 非線形レオロジーにおけるからみ合い効果, 日本レオロジー学会誌, **12**, (1984), 33-36.
- [72] 西村・中村・堀川, 粘弾性流体のT形合流路におけるレーザー流速計による流速測定, 繊維機械学会誌, **37-8**, (1984), 123-129.
- [73] 岡小天, バイオレオロジー, (1984), 裳華房.
- [74] 尾崎, 高分子濃厚系の非線形粘弾性, 日本レオロジー学会誌, **12**, (1984), 22-32.
- [75] Larson, R.G., A Constitutive Equation for Polymer Melts Based on Partially, *J. Rheol.*, **28**, (1984), 545-571.
- [76] 升田, 高分子液体のレオロジー的性質, 日本レオロジー学会誌, **12**, (1984), 7-21.

- [77] 中村・温・西村・五明・堀川, 合流部における粘弾性流体の不安定現象, 繊維機械学会誌, **38-1**, (1985), 1-10.
- [78] 中村・温・西村・五明・堀川, Y 形流路における粘弾性流体の流れ, 分岐流れと合流流れ, 繊維機械学会誌, **38-2**, (1985), 29-36.
- [79] Takewaki, H., Nishiguchi, A. and Yabe, T., Cubic Interpolated Pseudo-Particle Method (CIP) for Solving Hyperbolic-Type Equations, *J. Comput. Phys.*, **61-2** (1985), 261-268.
- [80] Boger, D.V., Hur, D.U. and Binnington, R.J., Further Observations of Elastic Effects in Tubular Entry Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **20**, (1986), 31-49.
- [81] Chiba, K., Song, Ki-W., Horikawa, A., Motion of a Slender Body in Quiescent Polymer Solutions, *Rheol. Acta*, **25**, (1986), 380-388.
- [82] Debbaut, B. and Crochet, M.J., Further Results on the Flow of a Viscoelastic Fluid Through an Abrupt Contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **20**, (1986), 173-185.
- [83] Marchal, J.M. and Crochet, M.J., Hermitian Finite Elements for Calculating Viscoelastic Flow, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **20**, (1986), 187-207.
- [84] 棚橋隆彦, 連続体の力学 (3) -物質の構成方程式-, (1986), 187-190, 理工図書.
- [85] Wang, V.W., Hieber, C.A. and Wang, K.K., Dynamic Simulation and Graphics for the Injection Molding of Three-Dimensional Thin Parts, *J. Polym. Eng.*, **7**, (1986), 21-45.
- [86] White, S.A. and Baird, D.G., The Importance of Extensional Flow Properties on Planar Entry Flow Patterns of Polymer Melts, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **20**, (1986), 93-101.
- [87] Bird, R.B., Curtiss, C.F., Armstrong, R.C. and Hassager O., *Dynamics of Polymeric Liquids Vol.2 Kinetic Theory, 2nd edition*, (1987), JOHN WILEY & SONS.
- [88] Boger, D.V., Viscoelastic Flows Through Contractions, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, **19**, (1987), 157-182.
- [89] Marchal, J.M. and Crochet, M.J., A New Mixed Finite Element for Calculating Viscoelastic Flow, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **26**, (1987), 77-114.

- [90] Öttinger, H.C., A Generalization of the Rouse-Zimm Model, *Colloid Polymer Sci.*, **265-2**, (1987), 101-105.
- [91] Öttinger, H.C., Translational Diffusivity from the Zimm Model, *J. Chem. Phys.*, **87**, (1987), 3156-3165.
- [92] Öttinger, H.C., A Model of Dilute Polymer Solutions with Hydrodynamic Interaction and Finite Extensibility. I. Basic Equations and Series Expansions. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **26**, (1987), 207-246.
- [93] Takewaki, H. and Yabe, T., The Cubic-Interpolated Pseudo Particle (CIP) Method: Application to Nonlinear and Multi-dimensional Hyperbolic Equations, *J. Comput. Phys.*, **70-2** (1987), 355-372.
- [94] White, S.A., Gotsis, A.D. and Baird, D.G., Review of the Entry Flow Problem: Experimental and Numerical, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **24**, (1987), 121-160.
- [95] Choi, H.C., Song, J.H. and Yoo, J.Y., Numerical Simulation of the Planar Contraction Flow of a Giesekus Fluid, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **29**, (1988), 347-379.
- [96] Debbaut, B., Marchal, J.M. and Crochet, M.J., Numerical Simulation of Highly Viscoelastic Flows Through an Abrupt Contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **29**, (1988), 119-146.
- [97] King, R.C., Apelian, M.R. and Armstrong, R.C., Numerical Stable Finite Element Techniques for Viscoelastic Calculations in Smooth and Singular Geometries, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **29**, (1988), 147-216.
- [98] 高橋, 高分子液体の構成方程式の新展開, 日本レオロジー学会誌, **16**, (1988), 53-65.
- [99] Wedgewood, L.E. and Öttinger, H.C., A Model of Dilute Polymer Solutions with Hydrodynamic Interaction and Finite Extensibility. II. Shear Flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **27**, (1988), 245-264.
- [100] Yabe, T. and Takei, E., A New Higher-Order Godunov Method for General Hyperbolic Equations, *J. Phys. Soc. Japan*, **57** (1988), 2598-2601.

- [101] Bird, R.B., Attempts to Find a Molecular Theory for which the High-Frequency Dynamic Viscosity is than the Solvent Viscosity, *Rheol. Acta*, **28**, (1989), 457-463.
- [102] 後藤・加藤, 高分子溶液の押出し流れにおける流入状態 (Denn モデルを用いた数値解析), 日本機械学会論文集 (B 編), **55-510**, (1989), 391-397.
- [103] Grmela, M., Dependence of the Stress Tensor on the Intramolecular Viscosity, *J. Rheol.*, **33**, (1989), 207-231.
- [104] Chiba, K., Sakatani, T. and Nakamura, K., Anomalous Flow Patterns in Viscoelastic Entry Flow Through a Planar Contraction, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36**, (1990), 193-203.
- [105] Chono, S. and Iemoto, Y., Generation of Reverse Flow of Viscoelastic Fluid Upstream of Re-Entrant Corner in Two-Dimensional L-Shaped Channel, *J. Rheol.*, **34**, (1990), 295-308.
- [106] Fortin, A. and Fortin, M., A Preconditioned Generalized Minimal Residual Algorithm for the Numerical Solution of Viscoelastic Fluid Flows, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36**, (1990), 277-288.
- [107] El Hadj, M. and Tanguy, P.A., A Finite Element Procedure Coupled with the Method of Characteristics for Simulation of Viscoelastic Fluid Flow, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36**, (1990), 333-349.
- [108] 川端・立花・葦埜, 粘弾性流体による二次元流路内流れの数値計算, (構成方程式の時間進行に Lax 法に適用した方法), 日本機械学会論文集 (B 編), **56-523**, (1990), 601-608.
- [109] Rajagoplan, D., Armstrong, R.C. and Brown, R.A., Finite Element Methods for Calculation of Steady, Viscoelastic Flow Using Constitutive Equations with a Newtonian Viscosity, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **36**, (1990), 159-192.
- [110] Shiojima, T. and Shimazaki, Y., Three-Dimensional Finite-Element Method for Extrudate Swells of a Maxwell Fluid, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **34**, (1990), 269-288.
- [111] 高橋・小川・升田, 高分子濃厚溶液・溶融物の定常せん断流動と流動停止後の応力緩和に対する Leonov モデルの適用性, 日本レオロジー学会誌, **18**, (1990), 180-189.

- [112] 種谷真一, やさしいレオロジー工学, (1990), 工業調査会.
- [113] Hulsen, M.A. and Van Der Zauden, J., Numerical Simulation of Contraction Flows Using a Multi-Mode Giesekus Model, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **39**, (1991), 183-221.
- [114] 梶原・桑野・船津, 円管急縮小部を通る粘弾性流体の流動シミュレーション, 一渦及び入口圧損に対する伸長流動特性の影響—日本レオロジー学会誌, **19**, (1991), 32-38.
- [115] Mckinley, G.H., Raiford, W.P., Brown, R.A. and Armstrong, R.C., Nonlinear Dynamics of Viscoelastic Flow in Axisymmetric Abrupt Contractions, *J. Fluid Mech.*, **223**, (1991), 411-456.
- [116] 小川明, レオロジー概論, (1991), 山海堂.
- [117] Rao, R.R. and Finlayson, B.A., Adaptive Refinement of a Viscoelastic Flow Problem with the Explicitly Elliptic Momentum Equation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **38**, (1991), 223-246.
- [118] 鈴木・持丸, 粘弾性流体における偏心二重円管内流れの数値計算, 第5回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (1991), 581-584.
- [119] 高橋, CAE 用構成方程式, 成形加工, **3-4**, (1991), 246-251.
- [120] Yoo, J.Y. and Na, Y., A Numerical Study of the Planar Contraction Flow of a Viscoelastic Fluid Using the SIMPLER Algorithm, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **39**, (1991), 89-106.
- [121] Boger, D.V., Crochet, M.J. and Keiller, R.A., On Viscoelastic Flows Through Abrupt Contractions, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **44**, (1992), 267-279.
- [122] Cho, K., Cho, Y.I. and Park, N.A., Hydrodynamics of a Vertically Falling Thin Cylinder in Non-Newtonian Fluids, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **45**, (1992), 105-145.
- [123] Coates, P.J., Armstrong, R.C. and Brown, R.A., Calculation of Steady-State Viscoelastic Flow Through Axisymmetric Contractions with the EEME Formulation, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **42**, (1992), 141-188.
- [124] Fortin, A. and Zine, A., An Improved GMRES Method for Solving Viscoelastic Fluid Flow Problems, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, **42**, (1992), 1-18.

- [125] Fortin,A. and Zine,A., Computing Viscoelastic Fluid Flow Problems at Low Cost, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**45**,(1992),209-229.
- [126] Guéntte,R.,Zine,A.,Fortin,A., Carreau,P. and Grmela,M., Simulation of Viscoelastic Flows Using a Conformation Tensor Model, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**45**,(1992),187-208.
- [127] 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, 日本機械学会論文集 (B編),**58**-552,(1992),2442-2448.
- [128] 桑野・梶原・船津, 流線上流型有限要素法による縮小流れの高ワイセンベルグ数粘弾性流動シミュレーション, 日本レオロジー学会誌,**20**,(1992),184-191.
- [129] Park,H.J. and Mitsoulis,E., Numerical Simulation of Circular Entry Flows of Fluid M1 Using an Integral Constitutive Equation, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**42**,(1992),301-314.
- [130] Rao,R.R. and Finlayson,B.A., Viscoelastic Flow Simulation Using Cubic Stress Finite Elements, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**43**,(1992),61-82.
- [131] Dlugogorki,B.Z.,Grmela,M. and Carreau,P.J., Viscoelastic Functions for FENE and Generalized Lennard-Jones Dumbbell Liquids in Couette Flow: Molecular Dynamics Study, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**48**,(1993),303-335.
- [132] Keiller,R.A., Entry-Flow Calculations for the Oldroyd-B and FENE Equations, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**46**,(1993),143-178.
- [133] Liu,Y.J. and Joseph,D.D., Sedimentation of Particles in Polymer Solutions, *J. Fluid Mech.*,**255**,(1993),565-595.
- [134] 田上・梶原・船津, 慣性項を考慮した粘弾性流体の急縮小流れの数値解析, 日本レオロジー学会誌,**21**,(1993),123-129.
- [135] 高橋, 高分子液体の構成方程式に関する研究, 日本レオロジー学会誌,**21**,(1993),218-226.
- [136] Yamamoto,S. and Matsuoka,T., A Method for Dynamic Simulation of Rigid and Flexible Fibers in a Flow Field, *J.Chem.Phys.*,**98**,(1993),644-650.
- [137] 保田・中村・森, 急絞りおよび急拡大流路における繊維懸濁液の流れの数値解析, 日本レオロジー学会誌,**21**,(1993),103-109.
- [138] 矢部, 面倒臭がり屋の数値流体入門, 日本物理学会誌,**47**-1,(1993),18-25.

- [139] Bernstein,B.,Feigl,K.A. and Olsen,E.T., Steady Flows of Viscoelastic Fluids in Axisymmetric Abrupt Contraction Geometry: A Comparison of Numerical Results, *J.Rheol.*,**38**,(1994),53-71.
- [140] Debae,F.,Legat,V. and Crochet,M.J., Practical Evaluation of Four Mixed Finite Element Methods for Viscoelastic Flow, *J.Rheol.*,**38**,(1994),421-442.
- [141] 後藤・根本・加藤, ニュートン流体および粘弾性流体の分岐流動特性に関する研究, (第2報, 粘弾性流体の二次元定常層流における流れの様相とエネルギー損失), 日本機械学会論文集 (B編),**60**-575,(1994),2411-2418.
- [142] 宮本, せん断流動場におかれた高分子水溶液中のポリマ鎖の可視化に関する一実験, 日本機械学会論文集 (B編),**60**-574,(1994),2038-2043.
- [143] Quinzan,L.M.,Armstrong,R.C. and Brown,R.A., Birefringence and Laser-Doppler Velocimetry(LDV) Studies of Viscoelastic Flow Through a Planar Contraction, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**52**,(1994),1-36.
- [144] Sato,T. and Richardson,S.M., Explicit Numerical Simulation of Time-Dependent Viscoelastic Flow Problems by a Finite Element/Finite Volume Method, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**51**,(1994),249-275.
- [145] 山口・野田, 縮小-拡大流路における粘弾性流体の圧力特性, 日本レオロジー学会誌,**22**,(1992),215-219.
- [146] Yamamoto,S. and Matsuoka,T., Viscosity of Dilute Suspensions of Rodlike Particles: A Numerical Simulation Method, *J.Chem.Phys.*,**100**,(1994),3317-3324.
- [147] Guénette,R. and Fortin,M., A New Mixed Finite Element Method for Computing Viscoelastic Flows, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**60**,(1995),27-52.
- [148] 松岡・山本, 拡大流れにおける繊維配向の数値解析, 日本レオロジー学会誌,**23**,(1995),131-144.
- [149] 松岡, 樹脂射出成形のコンピュータシミュレーションに関する研究, 日本レオロジー学会誌,**23**,(1995),207-216.
- [150] Sasmal,G.P., A Finite Volume Approach for Calculation of Viscoelastic Flow Through an Abrupt Axisymmetric Contraction, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**56**,(1995),15-47.
- [151] Tsai,C.C. and Liu,T.J., Comparison of Three Solvers for Viscoelastic Fluid Flow Problems, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**60**,(1995),155-177.

- [152] van der Vorst,B.,Toose,E.M., van den Ende,D.Jongschaap,R.J.J. and Mellema,J., Generalized Rouse Model for a Dilute Solution of Clustered Polymers, *Rheol. Acta*,**34**,(1995),274-280.
- [153] Xue,S.C.,Phan-Thien,N. and Tanner,R.I., Numerical Study of Secondary Flows of Viscoelastic Fluid in Straight Pipes by an Implicit Finite Volume Method, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**59**,(1995),191-213.
- [154] Azaiez,J.,Guéntte,R. and Aït-Kadi,A., Numerical Simulation of Viscoelastic Flows Through a Planar Contraction, *J.Non-Newtonian Fluid Mech.*,**62**,(1996),253-277.
- [155] Öttinger,H.C., *Stochastic Processes in Polymeric Fluids*,(1996),Springer.
- [156] Takahashi,M.,Urakawa,O.,Ebrahimi,N.G.,Isaki,T. and Masuda,T., Functional Form of a Damping Function for the BKZ Equation Derived from Experimental Data in Entangled Polymer System, *J.Soc.Rheol. Japan*,**24**,(1996),37-42.

本論文に関する発表論文一覧

第2章および第3章に関して

1. 希釈高分子溶液による急縮小流れ

(慣性項を考慮した数値解析と可視化実験)

川端信義, 藤田克志, 立花規良, 木村計介, 吉田喜美

日本機械学会論文集(B編), 58巻555号(1992-11), pp.3280-3285.

2. 粘弾性流体による2次元急縮小流れ

(PTTモデルによる検討)

川端信義, 藤田克志, 立花規良, 木村計介

日本機械学会北陸信越支部第30期総会講演会講演論文集,

No.937-1, (1993-3), pp.253-256.

第4章に関して

3. 粘弾性流体の後向きステップ流れ

川端信義, 立花規良, 葦埜 勲, 藤田克志

日本機械学会論文集(B編), 55巻518号(1989-10), pp.2977-2982.

第5章および第6章に関して

4. 球・バネマクロモデルによる粘弾性流体の直接数値シミュレーション

(モデル化と解析方法)

川端信義, 藤田克志, 三宅 裕

日本機械学会論文集(B編), 63巻609号(1997-5), pp.1568-1575.

5. Direct Numerical Simulation of Viscoelastic Fluid by Bead-Spring Macromodel

(Modeling and Analysis Method)

Fujita, K., Kawabata, N. and Miyake, Y.

Proceedings of the Fifth Asian International Conference on
Fluid Machinery, Volume III, (1997-10), pp.623-630.