

MPS法による粘弾性流体の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Viscoelastic Fluid by the MPS Method



博士(工学) 福澤 洋平*

Dr. Yohei Fukuzawa



博士(工学) 松永 拓也**

Dr. Takuya Matsunaga



工学博士 越塚 誠一***

Dr. Seiichi Koshizuka

要 旨

粘弾性流体の挙動と自由表面形状を正確に予測することを目的とし、移動サーフェスマッシュLSMPS法に粘弾性流体のOldroyd-Bモデルを適用し、粘弾性流体の挙動を高精度に予測する演算手法を新たに開発した。本解析手法を用いることで、粘弾性流体の特異挙動であるワイゼンベルグ効果を高精度に再現・予測でき、開発した解析手法の有用性が示唆された。

Synopsis

We have developed a method to predict phenomena of viscoelastic fluids by particle method. With the aim of accurately simulating the behaviors of viscoelastic fluids with free surfaces, the moving surface mesh-incorporated LSMPS (Least Squares Moving Particle Semi-implicit) method has been extended to viscoelastic fluids based on the Oldroyd-B model. The developed method is verified using Weissenberg effect, which is a phenomenon unique to viscoelastic fluids. As a result, we succeeded in reproducing the Weissenberg effect.

1. はじめに

スクリュ回転による押出機内部の流れ場はせん断流れが支配的となるため、流動解析を実施する際には樹脂の流体モデルを一般的に純粘性非ニュートン流体として扱う。これらの流動解析は実績も豊富でありほぼ確立された技術となっている。一方で、押出後の自由表面を有する流動解析では、ダイスウェル現象やワイゼンベルグ効果に代表されるように、粘弾性流体の特性が顕著に現れる。これらの挙動を正確に再現・予測するためには、流体モデルを粘弾性流体として扱い、自由表面形状を妥当に予測する解析手法が必要となる。粘弾性流体の流動解析では格子法による予測技術が古くから開発されている。格子法はオイラー法であるため支配方程式に移流項が存在し、この移流項を離散化する過程で数値拡散や数

値振動が発生しやすいことから、これらを抑制して高精度に予測するための課題を有する。また、自由表面を扱う主な手法として界面捕獲法であるVOF (Volume of Fluid)法やレベルセット法が用いられるが、これらの手法は自由表面の応力境界条件を厳密に取り扱うことができないため、粘弾性の効果によって大きく変形する自由表面形状の予測が難しい。一方で、ラグランジュ法である粒子法は連続体を粒子の集合体で表し、各粒子の運動を計算することで連続体の挙動を予測する手法であり、自由表面の追跡や大変形問題を容易に予測できることが最大の特徴である。粒子法の解法としてMPS (Moving Particle Simulation)法⁽¹⁾とSPH (Smoothed Particle Hydrodynamics)法⁽²⁾が広く普及しており、粒子法の特徴を活かして幅広い産業分野で実用されている。しかしながら、計算過程で粒子配置が乱雑になった際には、

*: イノベーションマネジメント本部 先端技術研究所 Advanced Technology Laboratory, Innovation Management Headquarters

** : 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 人間環境学専攻 Human and Engineered Environmental Studies, The University of Tokyo

*** : 東京大学大学院 工学系研究科 システム創生学専攻 Department of Systems Innovation School of Engineering, The University of Tokyo

圧力振動が生じ予測精度が著しく低下する課題がある。この課題に対して、圧力振動を低減し予測精度を高めるための研究が活発に行われるようになり、中でも最小二乗法を用いる高精度スキームのLSMPS (Least Squares Moving Particle Semi-implicit)法⁽³⁾によって予測精度が劇的に向上した。さらに、自由表面に厳密な応力境界条件を課すことができ、自由表面形状を正確に予測できる移動サーフェスマッシュ LSMPS法⁽⁴⁾へと発展しており、この移動サーフェスマッシュ LSMPS法を用いることで、未だ確立されていない粘弾性流体の解析を高精度に再現・予測することが期待できる。

そこで本研究では、移動サーフェスマッシュ LSMPS法に粘弾性モデルを適用し、粘弾性流体の挙動を高精度に予測する演算手法を新たに開発したので、その内容について述べる。

2. 演算アルゴリズム

2.1 支配方程式

非圧縮性流体の支配方程式は連続の式とナビエストークス方程式、および粘弾性流体を表す構成方程式として Oldroyd-B モデル⁽⁵⁾を用いる。

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

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla P + \mu_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{\tau} - [(\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{u}] = \frac{1}{\lambda} (2\mu_p \mathbf{D} - \boldsymbol{\tau}) \quad (3)$$

\mathbf{u} は流速ベクトル、 ρ は密度、 t は時間、 P は圧力、 μ_s は溶媒粘性率、 $\boldsymbol{\tau}$ は応力テンソル、 \mathbf{g} は重力ベクトル、 λ は緩和時間、 μ_p は高分子粘性率、 \mathbf{D} は変形速度テンソルである。本手法の特徴として、(2)式に対流項を含む点にある。ラグランジュ法では粒子(計算点)が移動することで対流項の役割を果たすため、対流項を計算式に含める必要がないと考えられており、従来の MPS 法と SPH 法も対流項は現れない。この対流項の取扱いが、タイムステップごとに圧力誤差が発生する要因とされており、本手法では対流項を考慮することで、誤差の発生を回避でき計算精度の向上が見込める。

自由表面では次式に示す応力の釣り合いを境界条件として与える。

$$(P - P_{gas})\mathbf{n} + \mathbf{f}_{st} = (\mu_s - \mu_{gas})[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]\mathbf{n} \quad (4)$$

P_{gas} は流体周囲の気体圧力、 \mathbf{n} は外向き単位法線ベクトル、 \mathbf{f}_{st} は表面張力ベクトル、 μ_{gas} は気体粘度である。

(2)

ここで、気体密度は無視できるほど微小と仮定すると、 $P_{gas} = 0$ (一定)と $\mu_{gas} = 0$ (一定)となり、以下の式となる。

$$P\mathbf{n} + \mathbf{f}_{st} = \mu_s[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]\mathbf{n} \quad (5)$$

2.2 時間進行法と空間離散化

時間進行法は松永ら⁽⁶⁾によって提案された新たなフラクショナルステップ法を用いる。この手法では、(2)式に対流項を陽的オイラー法にて定式化((6)式)し、粒子移動による速度と応力変化を Taylor 展開近似によって求める((11)、(12)式)。

具体的な計算手順として、まずは仮速度 \mathbf{u}^* を求める。

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^k + \Delta t \left[-(\mathbf{u}^k \cdot \nabla)\mathbf{u}^k + \mu_s \nabla^2 \mathbf{u}^k + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^k + \mathbf{g}^k \right] \quad (6)$$

添字 k は時間ステップ、 Δt は刻み時間である。圧力は圧力ポアソン方程式を陰的に解いて求める。

$$\nabla^2 P^k = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (7)$$

次に、現在位置 \mathbf{r}^k での新しい時刻の速度 $\tilde{\mathbf{u}}^{k+1}$ と応力テンソル $\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{k+1}$ を計算する。

$$\tilde{\mathbf{u}}^{k+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla P^k \quad (8)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}}^{k+1} = \boldsymbol{\tau}^k + \Delta t \left[-(\mathbf{u}^k \cdot \nabla)\boldsymbol{\tau}^k + [(\nabla \mathbf{u}^k)^T \cdot \boldsymbol{\tau}^k + \boldsymbol{\tau}^k \cdot (\nabla \mathbf{u}^k)] + \frac{1}{\lambda} (2\mu_p \mathbf{D}^k - \boldsymbol{\tau}^k) \right] \quad (9)$$

最後に粒子を移動し、新しい位置 \mathbf{r}^{k+1} での速度 \mathbf{u}^{k+1} と応力テンソル $\boldsymbol{\tau}^{k+1}$ を求める。

$$\mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k + \Delta \mathbf{r}^k \quad (10)$$

$$\mathbf{u}^{k+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{k+1} + \sum_{m=1}^p \frac{1}{m!} (\Delta \mathbf{r}^k \cdot \nabla)^m \tilde{\mathbf{u}}^{k+1} \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\tau}^{k+1} = \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{k+1} + \sum_{m=1}^p \frac{1}{m!} (\Delta \mathbf{r}^k \cdot \nabla)^m \tilde{\boldsymbol{\tau}}^{k+1} \quad (12)$$

p は近似の次数を決める正の整数、 $\Delta \mathbf{r}$ は位置の修正距離である。位置の修正は粒子配置が乱雑になっていくのを防ぐために必要な処理となる。タイムステップごとに流体粒子が移動する際、計算時間の経過とともに粒子の乱雑さが増していき、最終的に数値不安定性や計算誤差に繋がるからである^{(7),(8)}。

流体内部粒子の空間離散化には、重み付き最小二乗法を用いた LSMPS スキーム⁽³⁾を用いる。標準 MPS 法は

勾配(∇)とラプラシアン(∇^2)の微分演算子に対して、ある粒子*i*とその近傍の粒子*j*との間で粒子間相互作用モデルを与え離散化を行うが、この粒子間相互作用モデルは等方的な粒子配置を仮定し導出しているため、計算過程中に粒子が不規則な配置になると予測精度が著しく低くなることが知られている。一方でLSMPS法はこの問題を改善するために考案された手法で、Taylor展開と最小二乗法を用いて空間離散化を施すことで、不規則な粒子配置に関わらず高精度の予測が可能となる。LSMPS法にはtype-Aとtype-Bの形式があるが、本論文では、最も基本的なLSMPS type-Aを用いた離散化について説明する。

ある粒子*i*の近傍粒子*j*における関数 ϕ のTaylor展開は以下となる。

$$\phi_j = \phi_i + \sum_{m=1}^p \left[\frac{1}{m!} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla)^m \phi \right]_{r=r_i} + O(|\mathbf{r}_{ij}|^{p+1}) \quad (13)$$

$$\Rightarrow \sum_{m=1}^p \left[\frac{r_s^m}{m!} \left(\frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_s} \cdot \nabla \right)^m \phi \right]_{r=r_i} \simeq \phi_j - \phi_i \quad (14)$$

$\phi_i = \phi(\mathbf{r}_i)$ 、 $\phi_j = \phi(\mathbf{r}_j)$ 、 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ であり、 p は近似の次数を決める正の整数、 $r_s (> 0)$ はスケール係数である。(14)式は以下のように表すことができる。

$$[\mathbf{p}_{ij} \cdot H_{r_s}^{-1} \mathbf{D} \phi]_{r=r_i} \simeq \phi_j - \phi_i \quad (15)$$

\mathbf{p}_{ij} は多項式ベクトル、 H_{r_s} はスケール行列、 \mathbf{D} は微分作用素ベクトルである。例えば、 $p=2$ の場合は以下のように成分表示される。

$$\mathbf{p}_{ij} = p \left(\frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_s} \right) = \left[\frac{x_{ij}}{r_s}, \frac{y_{ij}}{r_s}, \frac{x_{ij}^2}{r_s^2}, \frac{x_{ij}y_{ij}}{r_s^2}, \frac{y_{ij}^2}{r_s^2} \right]^T \quad (16)$$

$$H_{r_s} = \text{diag} \left(\frac{1}{r_s}, \frac{1}{r_s}, \frac{2}{r_s^2}, \frac{1}{r_s^2}, \frac{2}{r_s^2} \right) \quad (17)$$

$$\mathbf{D} = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right]^T \quad (18)$$

$x_{ij} = x_j - x_i$ 、 $y_{ij} = y_j - y_i$ である。(15)式において、重み付き二乗誤差 J は以下となる。

$$J(\mathbf{c}_i) = \sum_{j \neq i} w_{ij} (\mathbf{p}_{ij} \cdot \mathbf{c}_i - \phi_j + \phi_i)^2 \quad (19)$$

$$\mathbf{c}_i = [H_{r_s}^{-1} \mathbf{D} \phi]_{r=r_i} \quad (20)$$

$$w_{ij} = \begin{cases} \left(1 - \frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{r_e} \right)^2 & (|\mathbf{r}_{ij}| < r_e) \\ 0 & (|\mathbf{r}_{ij}| \geq r_e) \end{cases} \quad (21)$$

\mathbf{c}_i は未知数ベクトル、 w_{ij} は重み関数、 r_e は影響半径である。重み付き二乗誤差 J を最小化する正規方程式は次のようになる。

$$\mathbf{c}_i = M_i^{-1} \sum_{j \neq i} w_{ij} \mathbf{p}_{ij} (\phi_j - \phi_i)^2 \quad (22)$$

$$M_i = \sum_{j \neq i} w_{ij} \mathbf{p}_{ij} \otimes \mathbf{p}_{ij} \quad (23)$$

モーメント行列 M_i が特異行列でない場合はただ一つの解が存在し、正規方程式(22)式の解が得られる。

$$[\mathbf{D} \phi]_{r_i} = H_{r_s} M_i^{-1} \sum_{j \neq i} w_{ij} \mathbf{p}_{ij} (\phi_j - \phi_i)^2 \quad (24)$$

最終的に、勾配(∇)とラプラシアン(∇^2)は以下のように計算することができる。

$$\nabla \phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^T = \begin{pmatrix} \mathbf{D} \phi \cdot (1, 0, 0, 0, 0) \\ \mathbf{D} \phi \cdot (0, 1, 0, 0, 0) \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \mathbf{D} \phi \cdot (0, 0, 1, 0, 1) \quad (26)$$

3. 検証解析

3.1 円筒回転問題による検証解析

本解析手法の妥当性を検証するために、図1に示す円筒回転問題での解析を行った。円筒半径 $r_0=0.1$ mの内部に高さ $h_0=0.2$ mの流体を配置し、重力加速度 $g=10$ m/s²を与え回転速度 $\Omega=5, 10$ rad/sの2条件で回転させた。流体は密度 $\rho=1000$ kg/m³、粘度 $\eta=0.001$ Pa·sの純粘性ニュートン流体とし、粒子間距離(粒子径) l_0 を 1.25×10^{-3} mと 2.5×10^{-3} mの2流体とした。また、解析対象領域は2次元軸対称問題として扱った。

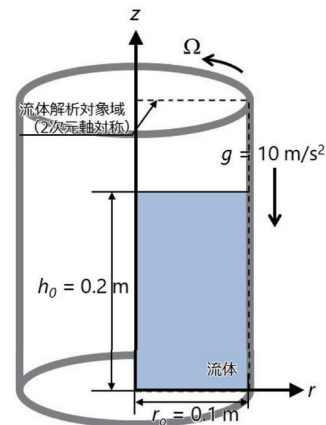


図1 円筒回転問題の計算モデル

図2に粒子間距離 $l_0 = 1.25 \times 10^{-3}$ m、回転速度 $\Omega = 10$ rad/sとした条件での時間ごとの圧力分布と速度分布の予測結果を示す。圧力分布の結果から、流体は重力の作用によって自由表面から底面に向かって圧力が高くなっており、妥当な予測結果が得られている。また、どの時間に対しても圧力振動が発生しておらず、滑らかな圧力分布が得られている。これは粒子配置の乱れに応じた空間離散化が行えているためであり、LSMPSの予測精度の高さが窺える。速度分布については、計算開始から3秒にかけて、流体粒子が外側円筒に向かうような速度ベクトルとなっており、これは外側円筒の回転によって流体に遠心力が作用しているためと考えられる。その後4秒から次第に速度が小さくなり、5秒では半径と高さ方向の速度はほぼ0と平衡状態に達していることが分かる。

次に、自由表面形状の理論解と予測結果との比較評価を行った。次式に理論解を示す。

$$z(r) = h_0 + \frac{\Omega^2(2r^2 - r_0^2)}{4g} \quad (27)$$

$z(r)$ は半径位置 r での界面高さ、 h_0 は初期界面高さである。図3に各解析条件での予測結果とそれに伴った理論解を示す。自由表面形状は、粒子間距離 l_0 と回転速度 Ω を変化させた全4ケースとも予測結果と理論解とで良好な一致が見られ、本手法は高精度の予測が可能である。

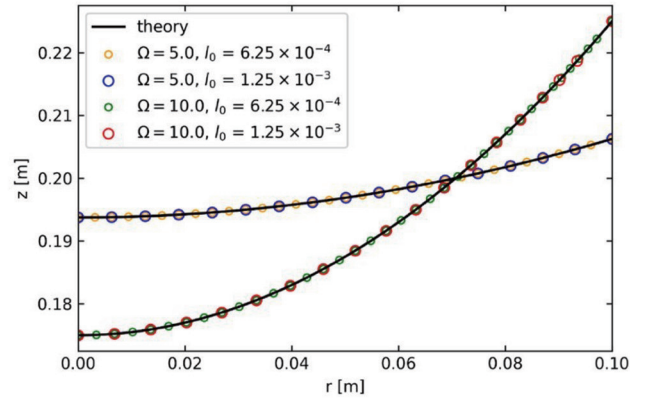
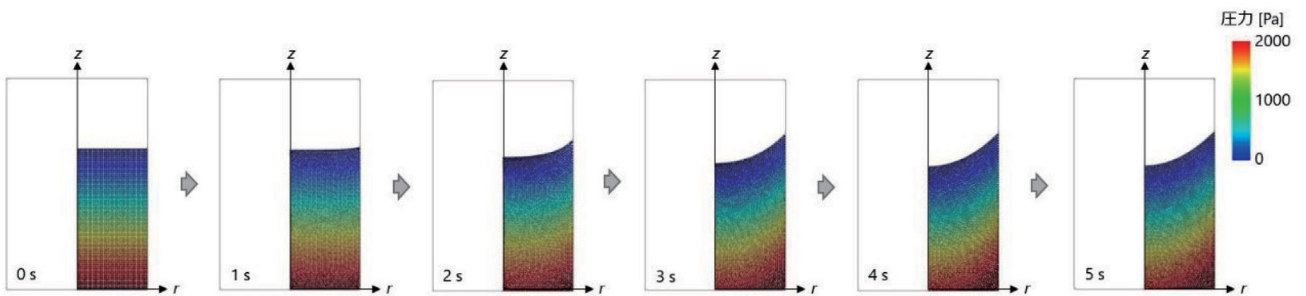


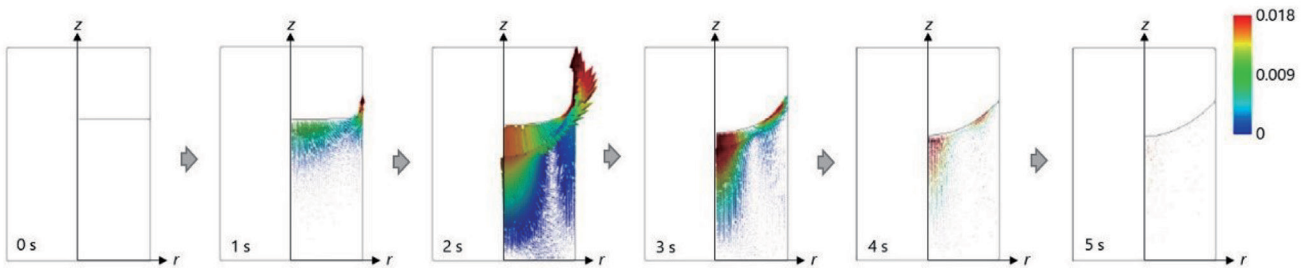
図3 自由表面形状の計算結果と理論解との比較

3.2 ワイゼンベルグ効果シミュレーション

同心二重円筒間に一定体積の流体を配置し、内側円筒(以下、中心ロッド)を回転させワイゼンベルグ効果のシミュレーションを行った。座標系は2次元軸対称とし、シミュレーションモデルを図4に示す。計算条件は、粒子間距離 $l_0 = 1.25 \times 10^{-3}$ m、溶媒粘度比率 $\beta = (\mu_s / (\mu_s + \mu_p)) = 0.5$ 、回転速度 $\Omega = 5$ rad/sとし、緩和時間 $\lambda = 0.1, 0.3, 0.5$ sの3ケースでの粘弾性流体、およびニュートン流体とした。図5に $\lambda = 0.1, 0.5$ sでの速度場の計算結果を示す。 $\lambda = 0.1$ sの場合では、中心ロッド近傍で下向き速度場になっており、液面が低下している。一方 $\lambda = 0.5$ sでは、中心ロッド近傍で上向き速度が発生し液面が盛り上がっていることが確認できる。



(a) 圧力分布



(b) 速度分布

図2 円筒回転問題の計算結果

図6に各 λ の条件とニュートン流体の定常状態での自由表面形状の計算結果、およびニュートン流体の理論解を示す。ニュートン流体は外向きに遠心力が働くことで、中心ロッドから流体が離れる挙動となり、中心ロッド近傍で液面が初期液面高さよりも低くなっている。また、自由表面形状は理論解と良好に一致しており、計算結果の妥当性が示唆された。粘弾性流体では、 λ が大きくなるにつれ、中心ロッド近傍での液面が高くなる結果が得られた。中心ロッドが回転すると、内側の流体に生じる応力は外側に比べ大きく、また伸びも大きくなる。粘弾性流体は伸びが大きいほど、元の状態を維持する張力、すなわち法線応力差が発生し、この法線応力差による内

側方向への力が大きくなる。その結果、外側の流体は内側へと流れ、中心ロッド部で盛り上がる挙動となる。

次に、粒子間距離 $l_0 = 6.25 \times 10^{-4}$ mの高解像度とし、回転速度 Ω を変化させて計算を行った際の、流体がロッドに巻き付く高さ h について理論解⁽⁹⁾と比較した。以下に理論解を示す。

$$h = \frac{R}{2\sigma\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}}\left[\frac{4\hat{\beta}}{4 + R\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}} - \frac{\rho R^2}{2 + R\sqrt{\frac{\rho g}{\sigma}}}\right]\frac{Wi^2}{\lambda^2} + O(Wi^4) \quad (28)$$

$$\hat{\beta} = \left[\left(1 - \frac{\mu_s}{\mu_p}\right)(\mu_s + \mu_p)\lambda\right](1 - 2\xi) \quad (29)$$

$$Wi = \lambda\Omega \quad (30)$$

R は中心ロッド半径、 σ は表面張力、 ρ は流体密度、 Wi はワイゼンベルグ数、 ξ はパラメータである。図7に各回転速度 Ω での h/R と Wi^2 の関係について、予測結果と理論解をそれぞれ示す。予測結果は、ワイゼンベルグ数が小さい(回転速度が小さい)場合に理論解とよく一致しており、一方で、回転速度が大きくなるにつれて予測結果が理論解から徐々に乖離している。この原因は、巻き高さの理論解(28)式の右辺第2項において4次以上の項を無視しており、回転速度が増すにつれて理論解自体の誤差が次第に大きくなるためと考えられ、これらの誤差を考慮すると、計算結果は理論解と同等の結果が得られている。

以上のことから、本解析手法によって粘弾性流体のワイゼンベルグ効果を高精度に再現できている。

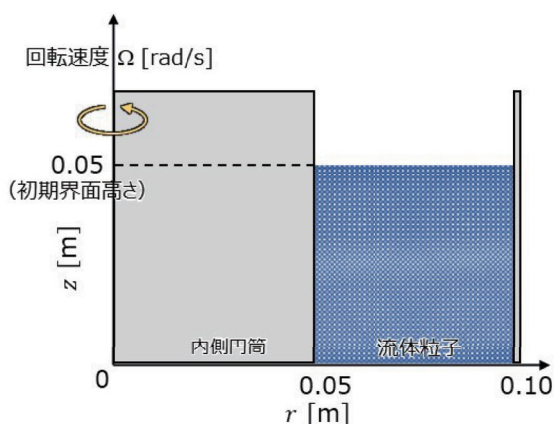


図4 ワイゼンベルグ効果の計算モデル

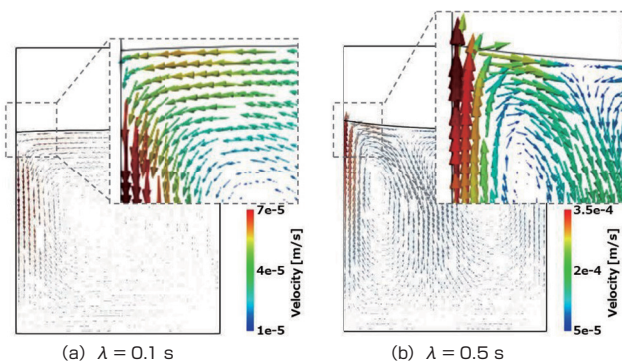


図5 速度分布の計算結果

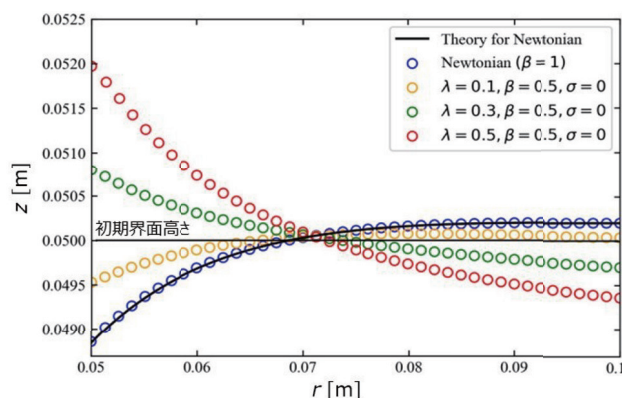


図6 粘弾性流体とニュートン流体の自由表面形状、および理論解

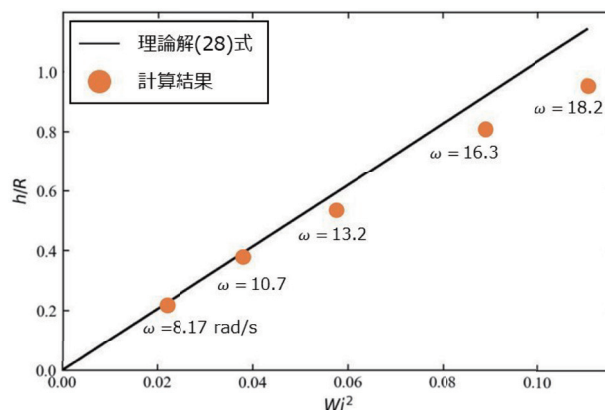


図7 巻き高さの計算結果と理論解との比較

4. おわりに

移動サーフェスマッシュ LSMPs 法に粘弾性流体の Oldroyd-B モデルを適用し、粘弾性流体の挙動を高精度に予測する演算手法を新たに開発した。本解析手法によって粘弾性流体で発生するワイゼンベルグ効果を再現・予測でき、自由表面形状の理論解ともよく一致した。以上より、本報の解析手法は粘弾性流体の挙動を予測できる有用な手法といえる。今後は、ダイスウェル現象などの粘弾性流体で生じる特異的な現象の予測や、非線形粘弾性モデルである Giesekus モデルや PTT モデルへの拡張を行う所存である。

参考文献

- (1) S. Koshizuka and Y. Oka: "Moving particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid", *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 123 (1996), pp. 421-434
- (2) J. Monaghan: "Smoothed particle hydrodynamics", *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, Vol. 30 (1992), pp. 543-574
- (3) T. Tamai and S. Koshizuka: "Least squares moving particle semi-implicit method", *Computational Particle Mechanics*, Vol. 1 (2014) No. 3, pp. 277-305
- (4) T. Matsunaga, S. Koshizuka, T. Hosaka and E. Ishii: "Moving surface mesh-incorporated particle method for numerical simulation of a liquid droplet", *Journal of Computational Physics*, Vol. 409 (2020), p. 109349
- (5) J. G. Oldroyd: "On the formulation of rheological equations of state", *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 200 (1950) No. 1063, pp. 523-541
- (6) 松永拓也, 越塚誠一: "粒子法における時間進行法の改良", 日本機械学会論文集, Vol. 87 (2021) No. 895, 20-00437
- (7) R. Xu, P. Stansby and D. Laurence: "Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach", *Journal of computational Physics*, Vol. 228 (2009) No. 18, pp. 6703-6725
- (8) T. Matsunaga, N. Yuhashi, K. Shibata and S. Koshizuka: "A wall boundary treatment using analytical volume integrations in a particle method", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 121 (2020), pp. 4101-4133
- (9) G. S. Beavers and D. D. Joseph: "The rotating rod viscometer", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 69 (1975) No. 3, pp. 475-511