

卒業論文要旨

OpenFoam を用いた TIF モデルの数値シミュレーション

システム工学群

流体工学研究室 1240133 日野 航

1. 緒言

日常に溢れているほとんどのものが、ニュートン流体ではなく、非ニュートン流体である。しかしながら、現在 Openfoam での非ニュートン流体の解析結果は多くない。Openfoam にはこれまで、多くの粘弾性モデルが導入されてきた。CAE 技術によって、十分に成形流れを予測することに関して、ここ 10 年でかなり進歩してきた。結果として、現在、多くの一般的な用途シミュレーションプログラムが市場で利用可能となっている。高い機能性と高いパフォーマンスを持つスーパーエンジニアリングである PLCs のレオロジー的ふるまいは、とても複雑である。例えば PLCs は反対方向に第一通常応力差を持ち、等方性ポリマー材料にかなり遅れをとっている。

本研究では、Openfoam に TIF モデルを導入することによって、PLCs の成形流れを容易にシミュレートできる環境を実現する。

2. 理論

Openfoam とは、C++ で書かれた流体解析を主な機能としたオープンソースソフトウェアである。Openfoam は三次元の流れに対応しているだけでなく、様々な流れに対応したソルバーが用意されているため、多くの流れ場への適用が可能となる。system ディレクトリという解析に関するパラメータが入っているディレクトリと constant ディレクトリという物性値とメッシュ構造が保存されているファイルと time ディレクトリという各セルにおける速度や圧力等のデータが格納されたこの 3 つのファイルで Openfoam の計算は実行される。System ディレクトリでは、緩和係数やソルバーの選択、また計算条件や離散化の方法などを設定する。Constant ディレクトリでは、係数の設定やメッシュの設定などを行う。Time ディレクトリでは、初期条件や境界条件などの設定を行う。

TIF モデルとは、L-E (Leslie-Ericksen) 理論を単純化し得られたものを、構成方程式として使用しているモデルである。一般的に、液晶の流れは、内力、粘性力、圧力による力、分子方向の空間的なねじれに基づいた弾性力によって決定される。PLCs (polymeric liquid crystals) では、慣性力と弾性力は無視できるので、粘性力はとても大きい。ネマティック液晶のための理論である L-E(Leslie-Ericksen)理論は、エリクセンによって派生され、弾性力を無視し、TIF 理論に変化する。

(1) TIF モデルの構成方程式は以下のように表される。(1)
Constitutive equation

$$\boldsymbol{\tau} = \beta_1 \mathbf{A} + \beta_2 \mathbf{A} : \mathbf{n} \mathbf{n} \mathbf{n} + \beta_3 (\mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} \mathbf{n}) \quad (1)$$

粘性係数 β_1 から β_3 はレスリー粘度に関連したものである。 $\boldsymbol{\tau}$ は応力テンソルを、 \mathbf{n} はディレクターを表している。 \mathbf{A} は、

変形速度テンソルを表す。

TIF モデルの式に出てくるディレクター、変形テンソルに関して以下のように設定して導入した。

ディレクター \mathbf{n} に関しては以下のような形で方程式に代入した。

$$\mathbf{n} = (1,0,0) \quad (2)$$

この式は、Openfoam に以下のようにして、TIF.C ファイルに記入した。

```
// Director
dimensionedVector
n_("n", dimensionSet(0,0,0,0,0,0),
vector(1.,0.,0.));
```

変形速度テンソル \mathbf{A} は以下のように表される。

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}((\nabla \mathbf{v})^T + \nabla \mathbf{v}) \quad (3)$$

∇ は、勾配演算子を表し、 \mathbf{v} は速度を表す。また添え字の T は転置を表す。

変形速度テンソル \mathbf{A} については以下のように設定を行った。

```
// Velocity gradient tensor
volTensorField L = fvc::grad(U());

// Twice the rate of deformation tensor
volSymmTensorField A = twoSymm(L);
```

テンソル場 \mathbf{L} は速度勾配を表し、 \mathbf{A} は速度勾配の対称テンソルを表す。

最終的なゴールは、PLCs の薄型の流れを予測することができるシミュレーションプログラムの一般的な用途として開発することである。現在では、私たちは L-E 理論を単純化し、それを構成方程式として使用し、いくつかの計算結果を示してきた Transversely Isotropic Fluids (TIF)理論を用いている。ここでは、PLCs のワンドメインのみを扱う。なぜなら、2 ドメインの構造を十分に代表する理論がないからだ。

3. 結果

計算モデルのパラメータは以下に示す。

Table 1 Computational Models.

	流入口直 径 D1	流出口直 径 D2	流入口奥 行 L1	流出口奥 行 L2
単位(m)	0.00256	0.00064	0.00576	0.0144

計算モデルは以下のような計算モデルを用いた。

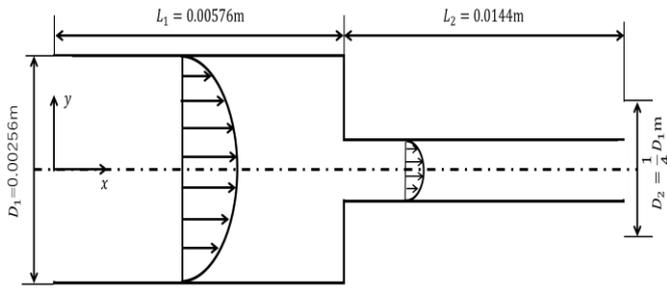


Fig.1 Section of TIF model.

流入口の直径を 0.00256m として、流出口の直径を流入口の 1/4 となるようにした。また、流入口直径の長さを 0.00576m とし、流出口直径の長さを 0.0144m とした。

計算方法は、スタート時間は 0s、終了時間は 15s とし、時間刻み幅は 10^{-4} s、結果書き込み感覚は 1s とし、ソルバーは viscoelasticfoam を用いた。時間微分の離散化スキームはガウス法を用いた。緩和係数は、速度は 0.05、圧力は 0.1、せん断応力は、0.05 と小さい値にし、計算が安定するようにした。緩和係数は大きいほど収束が早まり、小さいほど計算が安定する。

初期条件は速度、圧力、せん断応力共に 0 として定義した。境界条件は、流入口の入口速度として、x 方向に 0.00125m/s の速度を与え、円管周りの壁は 0m/s として、速度を持たないよう設定し、静止壁とした。流出口は速度勾配 0 とした。

TIF モデルを用いた計算結果を Paraview で速度と圧力、せん断応力について表示した。

ディレクター \mathbf{n} の設定は (1,0,0) で行い、設定 1 とした。

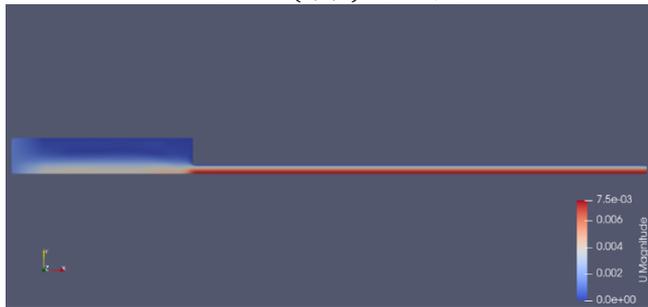


Fig.2 Velocity of TIF model Setting1.

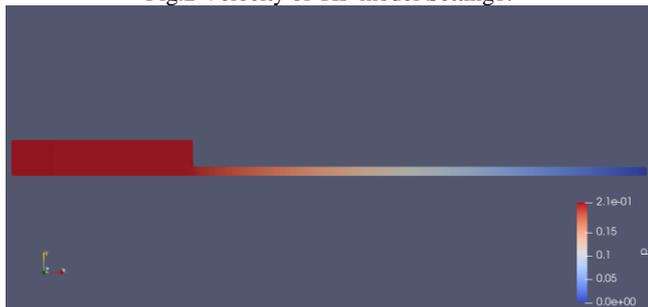


Fig.3 Pressure of TIF model Setting1.



Fig.4 Shear stress of TIF model Setting1.

ディレクター \mathbf{n} の設定は $(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$ で行い、設定 2 とした。

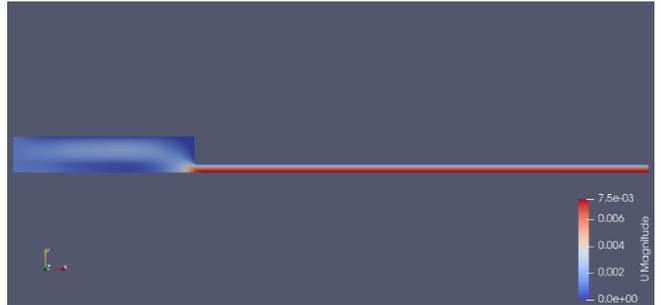


Fig.5 Velocity of TIF model Setting2.

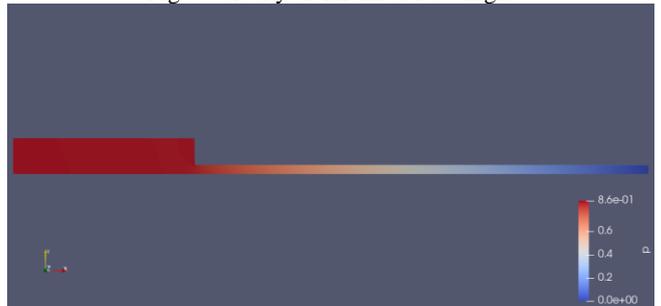


Fig.6 Pressure of TIF model Setting2.

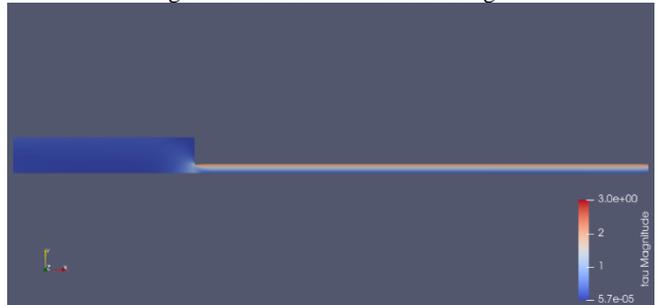


Fig.7 Shear stress of TIF model Setting2.

シミュレーションを行った結果、円管中央付近の速度が高くなり、外側の速度が小さくなった。また、圧力は流入口付近が一番高く、そこから流出口に近づくにつれて小さくなった。急縮小後のせん断応力は、中央部分が小さい値となり、円管外側付近が高い値となった。

4. 結言

今回は Openfoam を用いて数値シミュレーションを行った。速度が円管が急縮小する前と後で比べると、急縮小した後のほうが速くなったのは、連続の式より、面積流量は一定であるために、面積が縮小した分速度が速くなった。

また、せん断応力の値が円管の外側のほうが高くなるのは、円管の外側には配管の内壁と流体との間には、流れと反対向きの摩擦力が生じるためである。せん断応力は速度を直行方向に空間微分したものであり、壁では管摩擦損失が生じるため、せん断応力は大きくなる。

TIF モデルを PLCs の成形流れを予測するための構成方程式として用いて、TIF モデルを Openfoam に実装することにより、PLCs(polymeric liquid crystals)の成形流れを予測するためのプログラムとして開発した。

文献

- (1) Shigeomi CHONO, Tomohiro TSUJI, Jianye SUN, Numerical Simulation of Molding Hele-Shaw Flow of Polymeric Liquid Crystals, Journal of Fluid Science and Technology,(2007) Volume 2 Issue 2 Pages 368-379.