

研 究 報 告 書

「界面をもつポリマー流体の3次元挙動の数理解析」

研究タイプ: 通常型

研究期間: 2016 年 10 月～2020 年 3 月

研 究 者: 野津 裕史

1. 研究のねらい

特に熱可塑性樹脂によるポリマー製品成形過程を考え、界面をもつポリマー流体の3次元挙動を明らかにしようとするものです。例えば、ポリマーの射出成型では、高温となったポリマー流体が金型に流し込まれ、ポリマーと空気の2つの流体の境界(界面)が形成されます。このような界面をもつポリマー流体を3次元において精度よく数値シミュレーションし、その挙動を数理的・数値的に理解することが本研究の目的です。

ポリマーは、現在しばしば用いられ、改良されている材料で、総じて密度が低く、軽いという利点があります。しかしながら、製品の(とくに量産)製造においては、成形過程を経ることから、その製品の物性値や形状等が期待通りになるかどうかは、やってみなければわからない、という部分が少なくありません。

しかしながら、その高精度な数値シミュレーションは容易とはいえません。本研究を推進することにより、数学的視点から高品質な数値シミュレーションを実現し、製造工程を効率化することが期待できます。具体的には、車のバンパーなどのポリマー製品を成形する際における金型内部のポリマー充填のシミュレーションを行い、製造工程のデザインや金型製造コストを削減することが期待できます。また、射出成形の実験をせずに、起こりうる現象の予測や改良の可能性をシミュレーションから示すことが可能になります。

2. 研究成果

(1)概要

本研究において、界面をもつポリマー流体のための高品質な数値シミュレーション手法を開発し、3次元において実装しました。以下に述べる成果は、いずれも数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装的な観点から高度にバランスが取られています。

有限要素法を基礎として、2流体問題の定式化を採用し、任意領域における界面をもつ数値シミュレーションを可能としました。3次元におけるアダプティブ・メッシュ・リファインメント手法を独自に実装し、界面付近において動的に空間的なメッシュ解像度を高めることに成功しました。また、時間2次精度を達成し、精度を高めることに成功しました。ここに、オイラー座標とラグランジュ座標を自在に操り、それぞれ、長所を生かし短所を克服しています。ペテリン粘性弾性流体モデルについて数値解析を行い、最良誤差評価を得ました。それまで知られていなかった圧力に関する誤差評価を得ることに成功しました。一方で、拡張マックスウェル粘性弾性モデルに関する変分構造を明らかにしました。これらを踏まえて、数値シミュレーションを実施し、定性的な研究を遂行しました。定量的な研究の準備が整い、今後の発展が期待できます。詳細および今後の展開を以下に述べます。

(2) 詳細

研究テーマ A「高品質アダプティブ・メッシュ・リファインメント手法の開発」

3次元空間内における2次元の界面を精度よく捉えることを可能にします。有限要素法で用いる3次元空間内の非一様な四面体要素分割を行います。細分および粗くする要素の指定は自由であり、界面付近を細分するように、(界面から遠い要素を粗くすることで、)高精度に界面を捉えます。このアダプティブ・メッシュ・リファインメント手法は、固定メッシュによる数値計算に対して得られている既存の理論結果を維持します。四面体要素の最も長い辺を細分するため、扁平な要素は現れません。また、メッシュは各ステップでアップデートされるため、プログラムに組み込むことが容易になります。[主な学会発表-1]

研究テーマ B「質量保存型時間2次精度ラグランジュ・ガレルキン法の構築」

流れ問題において、ラグランジュ座標に基づく数値解法は強力であることはよく知られています。しかしながら、移流方程式や移流拡散方程式がもつ質量保存性と時間2次精度を同時に達成する数値解法はこれまで存在しませんでした。これを達成することに成功しました。その達成には、上流点を与える写像にシンプルなものを選び、その写像のヤコビアンを掛ければ良いというシンプルな結果です。移流方程式については、質量保存性と2次精度打ち切り誤差を示しました。移流拡散方程式の場合には、さらに、厳密解への収束性を示しました。このアイデアは、ナヴィエ・ストークス方程式および界面を表現するレベルセット関数についての移流方程式に利用可能です。[主な学会発表-1, 3]

研究テーマ C「拡張マックスウェル粘弾性モデルに関する変分構造の発見」研究成果[2]

拡張マックスウェル粘弾性モデルに対して、粘性と弾性の2つの効果を明確に表す関係式である勾配流構造を発見しました。変位量を表す関数とダッシュポットのような粘性効果を表す関数の間の関係を表しています。勾配流構造から自然にエネルギー評価が得られ、安定性を示すことができます。この発見により、数値シミュレーション手法開発への重要な示唆を得ることができます。実際に、拡張マックスウェル粘弾性モデルに対して、安定な数値計算法を提案しました。[論文発表-1]、[主な学会発表-2, 4]

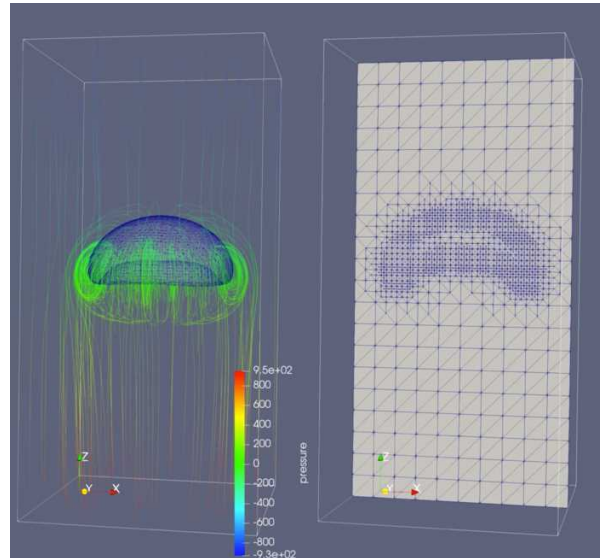
研究テーマ D「粘弾性流体の数値解析」

ペテリン粘弾性流体モデルのための安定化ラグランジュ・ガレルキンスキームを提案しました。移流項について線形化したオセーン型のモデルを考えて、その数値解析を行い、最良誤差評価を与えました。とくに、圧力の誤差評価は、それまで誰も成功していなかったため、重要な結果です。[論文発表-2]、[主な学会発表-5]

研究テーマ E「2流体問題の高品質数値シミュレーション手法の開発」

研究テーマ AB を融合させ、2流体問題の数値シミュレーション手法を開発しました。界面を符号付距離関数によるレベルセット関数により表現し、界面付近において、研究テーマ A によるアダプティブ・メッシュ・リファインメント手法を適用し、ナヴィエ・ストークス方程式の数値解法に研究テーマ B によるラグランジュ・ガレルキン法を用いています。なお、ラグランジュ・ガレル

キン法は、研究テーマ D により数学的信頼性があります。複雑な現象なため、まだ改良すべき点はあるものの、粘性2流体問題に対する高品質な数値シミュレーション手法の開発に成功しました。[主な学会発表-1]



3. 今後の展開

現在、開発した数値シミュレーション手法を基礎として、国際共同研究や企業等との共同研究への展開を進めています。具体的な製品のパラメータにおいて利用価値があること、および、複雑な系における未知の挙動を予想することを念頭において研究開発を続けます。具体的な予定として、様々な流体と接触角の関係への自然な展開を考えています。さらに、機械学習やデータサイエンスとの関わりが増えていくものと想定され、実際に、その方面の応用についても研究を進めています[その他の論文-3]。

本研究課題において、複雑な系の数値シミュレーション手法を数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装の観点からバランスよくデザインしたことは意義があります。開発した数値シミュレーション手法は、数学・数値解析理論を背景とした、シンプル・ローコスト・ハイクオリティーなものとなっています。実際、基本的なデザインにおいては、アイデアは精選されたシンプルかつ本質的なものを組み合わせており、高品質でありながらも個々の技術は難しいものではありません。また、スーパーコンピュータのような大規模並列計算機ではなく、市販の共有メモリ型計算機をターゲットにして開発し、さらに、プログラム開発が容易なように工夫しています。これらの知見を産学の研究者等と共有することで、誰でも無理なく高品質な数値シミュレーション手法を開発・利用でき、産学協働による研究推進と発展・展開が期待できます。

4. 自己評価

[研究目的の達成状況]

複雑な現象である界面をもつ粘弾性流体のための3次元数値シミュレーション手法を構築し

ました。定量的な検討は今後の課題ではありますが、当初実現したいと考えていた理論構築と数値シミュレーションの技術をほぼ全て妥協なく実現したことは重要な成果であり評価できます。(なお、本研究で得られた結果の論文執筆は続きます。)

[研究の進め方(研究実施体制及び研究費執行状況)]

- ・研究体制について: 学内外のネットワークを構築しました。学内では、金沢大学数理科学連携研究拠点(MIRS)の数理モデル解析部門の部門長を務めて、本研究課題を中心として、同部門の研究推進を牽引しました。学外においてもリーダーシップを発揮して、複数の国際研究集会を主催(次の予算についてを参照)して国際ネットワークを構築しました。研究者(野津)あるいは MIRS を中心に良好な研究体制が構築されました。
- ・予算について: 本研究を進める上で重要な計算機に予算を割り、また、国内(東京)および海外(ロンドン)において、国際研究集会(シンポジウム)を主催しました。必要十分な研究費を適切に使用しました。

[研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果(今後の見込みを含む)]

今後の展開でも述べたように、複雑な系の数値シミュレーション手法を数学・数値解析的な観点と数値シミュレーション実装の観点からバランスよくデザインしたことは意義があります。収束性などの数学・数値解析理論を背景とした、シンプル・ローコスト・ハイクオリティーな数値シミュレーション手法は、次第に普及していくことが予想されます。また、その使い易さから、機械学習やデータサイエンスなどとの融合研究を効率的に推進するための基本ツールとしても期待できます。このような高い信頼性と使い易さを高レベルに両立する数値シミュレーション手法を構築したことは大きな成果であり、今後の展開・発展が期待できます。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. M. Kimura, H. Notsu, Y. Tanaka and H. Yamamoto. The gradient flow structure of an extended Maxwell viscoelastic model and a structure-preserving finite element scheme. *Journal of Scientific Computing*, Vol.78(2019), pp.1111-1131. doi:10.1007/s10915-018-0799-2
2. M. Lukacova-Medvidova, H. Mizerova, H. Notsu and M. Tabata. Numerical analysis of the Oseen-type Peterlin viscoelastic model by the stabilized Lagrange-Galerkin method, Part II: A linear scheme. *ESAIM: M2AN*, Vol.51(2017), pp.1663-1689. doi:10.1051/m2an/2017032

(2) 特許出願

研究期間累積件数:0 件(公開前の出願件名については件数のみ記載)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

主要な学会発表

1. H. Notsu. A Lagrange-Galerkin scheme with adaptive mesh refinement for two-fluid flow problems. AFSI 2019: Advances in Computational Fluid-Structure Interaction and Flow Simulation, June 25, 2019, Okinawa, Japan.

2. H. Notsu. The gradient flow structure of an extended Maxwell viscoelastic model. MAFELAP 2019: The Mathematics of Finite Elements and Applications 2019, June 18, 2019, Brunel University, London.
3. H. Notsu. A mass-conservative Lagrange-Galerkin scheme of second-order in time with AMR for convection problems. CJK2018: The Seventh China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics, August 21, 2018, Shiinoki Cultural Complex, Kanazawa.
4. H. Notsu. The gradient flow structure of the Maxwell viscoelastic model and a structure-preserving finite element scheme. KSIAM 2018 Spring Conference, May 25, 2018, KAIST, Korea.
5. H. Notsu. Numerical analysis of the Oseen-type Peterlin viscoelastic model. 2018 A3 Fluid Mechanics Workshop, March 10, 2018, Zhejiang University, Hangzhou, China.

著作物

1. 流体シミュレーションの数理(1). 数学セミナー, 2019 年 4 月号, pp.68-72.
2. 流体シミュレーションの数理(2). 数学セミナー, 2019 年 5 月号, pp.81-85.

その他の論文

1. I. Wijaya and H. Notsu. Stability estimates and a Lagrange-Galerkin scheme for a Navier-Stokes type model of flow in non-homogeneous porous media. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - S*. doi:10.3934/dcdss.2020234
2. M.M. Murshed, K. Futai, M. Kimura and H. Notsu. Theoretical and numerical studies for energy estimates of the shallow water equations with a transmission boundary condition. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - S*. doi:10.3934/dcdss.2020230
3. T. Taniguchi, N. Akashi, H. Notsu, M. Kimura, H. Tsukahara, K. Nakajima. Chaos in nanomagnet via feedback current. *Physical Review B*, Vol.100(2019), 174425. doi:10.1103/PhysRevB.100.174425
4. M. Kimura, K. Matsui, A. Muntean and H. Notsu. Analysis of a projection method for the Stokes problem using an ε -Stokes approach. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol.36(2019), pp.959-985. doi:10.1007/s13160-019-00373-3
5. O. Fuchiwaki, Y. Tanaka, H. Notsu and T. Hyakutake. Multi-axial non-contact in situ micromanipulation by steady streaming around two oscillating cylinders on holonomic miniature robots. *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol.22 (2018), 80. doi:10.1007/s10404-018-2098-5