

OCTA

ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ

多相構造シミュレータ

Muffin

version 4.1

ユーザーズマニュアル

- 第4分冊 -

マイクロ流体チップシミュレータ

MEMFluid

OCTA ユーザーズグループ

March 03 2005

執筆者

山上達也

プログラム開発者

山上達也、佐々木誠

バージョン 4.1 リリース

プログラム、マニュアル修正 山上達也

謝辞

本プログラム開発の初版は、経済産業省の出資・補助を受け、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) が (財) 化学技術戦略推進機構に委託した、大学連携型産業科学技術研究開発プロジェクト「高機能材料設計プラットフォーム」通称「土井プロジェクト (OCTA プロジェクト)」の下で行われたものである。

また、2003 年度からの本プログラム開発の一部は、科学技術振興機構 (JST)・戦略的創造研究推進事業 (CREST)・バイオレオプロジェクト (2002 年度採択事業) の支援の下で行われたものである。

Copyright ©2000-2005 OCTA Licensing Committee All rights reserved.

目次

第 1 章 MEMFluid の理論背景	1
1.1 MEMFluid とは？	1
1.2 MEMFluid の基礎理論	2
1.2.1 パラメータの記号と変数定義	2
1.2.2 MEMFluid を記述する方程式	2
1.2.3 方程式の無次元化と無次元化されたパラメータ	3
1.2.4 MEMFluid の無次元化された方程式	4
1.3 MEMFluid の有限要素法による定式化	5
1.4 MEMFluid の各場の境界条件の定式化	5
1.4.1 濃度場 C_α に対する境界条件	6
1.4.2 流束場 j_α / 体積力場 K に対する境界条件	6
1.4.3 速度場 v に対する境界条件	7
1.4.4 圧力場 p に対する境界条件	9
1.4.5 静電ポテンシャル場 Φ に対する境界条件	9
1.4.6 電荷密度場 ρ_e, σ に対する境界条件	11
1.4.7 誘電率場 ϵ に対する境界条件	11
1.4.8 粘度場 η に対する境界条件	11
第 2 章 MEMFluid の応用操作	13
2.1 MEMFluid のマイクロリアクタへの応用操作	13
2.1.1 応用例 1: 圧力印加によるフローインジェクションマイクロチップの検出効率	13
2.1.2 応用例 2: 電気泳動によるフローインジェクションマイクロチップの検出効率	17
第 3 章 MEMFluid リファレンス	21
3.1 MEMFluid の入力パラメータ	21
3.1.1 MEMFluid のソルバ制御パラメータ一覧	21
3.1.2 MEMFluid の物理パラメータ一覧	21
3.2 MEMFluid の場とコマンド	22
3.2.1 MEMFluid の利用可能な場の一覧	22
3.2.2 MEMFluid の場のコマンド一覧	22

目 次

2.1	MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションと化学反応	13
2.2	MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションと反応生成物の濃度分布	16
2.3	MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションでの反応生成率の時間変化	16
2.4	MEMFluid 適用例：電場印可によるフローインジェクションと反応生成物の濃度分布	20
2.5	MEMFluid 適用例：電場印加によるフローインジェクションでの反応生成率の時間変化	20

第1章 MEMFluidの理論背景

1.1 MEMFluid とは？

Micro Electro Mechanical Fluid Dynamics Simulator, MEMFluid は、メゾ～マクロ境界のスケール ($1\mu\text{m} \sim 1\text{mm}$) での電解質流体の化学反応を伴う拡散流動を扱うシミュレータであり、マイクロフルイディティチップなどの細線内部での流動挙動の解析をターゲットとしている。

電解質シミュレータ Electrolyte との大きな違いは、対象とするスケールである。Electrolyte はビヨルン長 (Bjerrum length) ($\sim 10\text{nm}$) のスケールを対象としており電解質の界面近傍での電気 2 重層の形成、および、電気浸透流の生成などを得意とする比較的微小なスケールのシミュレータであるが、MEMFluid は、上述のようなメゾ～マクロなスケール ($1\mu\text{m} \sim 1\text{mm}$) での流動拡散を扱う。このスケールでは、バルクのあらゆる点では電気的中性条件が常に成立しており、また、電気 2 重層などの界面での重要な現象は境界条件として繰り込まれる。

主な解析機能を以下に挙げる。

1. 電解質流体への電場印加や圧力印加による拡散と流動。

但し、電場印加での電気浸透については境界での速度場を境界条件として与える。境界での速度場の計算法として、以下の 2 つを組み込んでいる。

- Helmholtz-Smoluchowski の式
Helmholtz-Smoluchowski の式で必要となる境界でのゼータ電位の計算については、以下の 2 つを組み込んでいる。
 - － パラメータで実験などの測定値を与える。
 - － 表面電荷を与え、1 次元 Poisson-Boltzmann 方程式の厳密解より計算する。
- 電解質流体シミュレータ Electrolyte シミュレータを組み込む。(ズーミング)
計算時間はかかるが、高精度である。

2. $1 \sim 100\mu\text{m}$ のサイズの細管の合流と層流の形成。

マイクロスケールでの流体は、レイノルズ数が小さくなるため乱流は生成されず、層流を形成する。Muffin は、レイノルズの小さい流体をストークス近似で解いており、このようなマイクロなスケールでの流動挙動のシミュレーションに適している。

3. 層流界面での化学反応と生成物の拡散流動。

化学反応としては、以下の 2 通りを組み込んでいる。

- 成分 A が、(計算対象では無い成分との) 反応により成分 B に変化。 : $A \rightarrow B$
- 成分 A と成分 B が反応して、成分 C が生成。 : $A + B \rightarrow C$

4. 物質間の化学ポテンシャルの違いによる生成物の分離・抽出。

各成分間の χ パラメータを自由エネルギーに導入して、相分離・抽出を扱っている。

以上の機能を元に、近年、研究開発の盛んなマイクロフルイディティチップを解析対象とすることが可能である。

1.2 MEMFluid の基礎理論

1.2.1 パラメータの記号と変数定義

シミュレータの基礎理論を説明するするために、パラメータの記号と変数の記号の定義を行う。

パラメータの記号	意味
e	素電荷 ($= 1.602 \times 10^{-19}$ C(oulomb))
ϵ_o	真空の誘電率 ($= 8.854 \times 10^{-12}$ C ² N ⁻¹ m ⁻²)
ϵ_r	純水の比誘電率 ($\epsilon_r = 78.2$)
η_w	水の粘度 ($= 0.89 \times 10^{-3}$ Pa · sec $= 0.89 \times 10^{-2}$ Poise)
w_0	水分子の体積
N_c	イオンの成分数
Z_α	α 種イオンの荷数 (Valency)
D_α	α 種イオンの拡散係数
w_α	α 種イオンの体積
$\chi_{\alpha\alpha'}$	χ -パラメータ ($\chi_{\alpha\alpha} \equiv 0$)
$k_B T$	熱エネルギー ($1k_B T = 4.12 \times 10^{-21}$ J at $T = 298\text{K}(25^\circ\text{C})$)
RT	熱エネルギー ($1RT = 1k_B N_B T = 2477.7\text{J/mol}$ at $T = 298\text{K}(25^\circ\text{C})$)
変数の記号	変数の意味
$C_\alpha(\mathbf{x})$	α 種イオンの濃度 (数密度)
$\mathbf{v}(\mathbf{x})$	速度場
$p(\mathbf{x})$	圧力場
$\Phi(\mathbf{x})$	ポテンシャル場
\mathbf{E}_0	外部印加電場
$\rho_e(\mathbf{x})$	電荷密度
$\rho(\mathbf{x})$	質量密度
$\mathbf{j}_\alpha(\mathbf{x})$	α 種イオンの拡散流束場
$\mathbf{K}(\mathbf{x})$	ストークス方程式のソース場
$\epsilon(\mathbf{x})$	純水との比誘電率場

添字の α はイオンの種類を表し、 N_c が全イオン種の種類の数を表すとき 0 から $N_c - 1$ のまでの値を取る

1.2.2 MEMFluid を記述する方程式

MEMFluid を記述する方程式は、基本的に電解質流体シミュレータ Electrolyte の方程式系と同じであるが、

- イオン濃度 C_α の時間発展方程式に反応の項が含まれる点
- 反応生成物の分離や抽出をシミュレーションするための χ -パラメータの項が含まれる点
- バルクでの局所的な電気的中性条件 $\sum_\alpha e Z_\alpha C_\alpha = 0$ を入れて定式化する点

の 3 点で異なる。

N_c 成分のイオンからなる電解質溶液を考える。この溶液での α 種のイオンの濃度 C_α の時間発展方程式を次のように書く。

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + \sum_\beta R1_{\alpha\beta} C_\beta + \sum_{\beta, \gamma} R2_{\alpha\beta\gamma} C_\beta C_\gamma \quad (1.1)$$

ここで、右辺第 1 項は移流項、第 2 項は拡散項、第 3 項と第 4 項は各々、

- 第3項： β 種のイオンが反応により α 種のイオンに変化。： $\beta \rightarrow \alpha$
- 第4項： β 種のイオンと γ 種のイオンが反応して、 α 種のイオンが生成。： $\beta + \gamma \rightarrow \alpha$

の反応を表す。

上記の方程式 (1.1) での、イオンの拡散流束密度 \mathbf{j}_α は次のように定義される

$$\mathbf{j}_\alpha = -L_\alpha \left[k_B T \{ \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} \frac{w_\beta w_\alpha}{w_0} C_\alpha \nabla C_\beta \} + e Z_\alpha C_\alpha (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0) \right] \quad (1.2)$$

ここで、 L_α はオンサガーの輸送係数である。¹

速度場に対する方程式は次の Navier-Stokes 方程式 (Stokes 近似) により書かれる。

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla (\eta_w \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \}) + \mathbf{K} \quad (1.3)$$

通常、粘度が十分に大きい系や、マイクロフルイディティチップのようなミクロスケールな系など、レイノルズ数 (後述) が十分に小さい系では力学的釣合が瞬時に成立するので、この釣合いが成立する時間スケールよりも長い時間スケールの流動を計算対象とする場合には、流れの時間変化が十分に小さいとして、以下の運動方程式を用いる。

$$-\nabla p + \nabla (\eta_w \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \}) + \mathbf{K} = 0 \quad (1.4)$$

MEMFluid は、両者の運動方程式を非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ 下で解くソルバを備えている。上式で、体積力項 \mathbf{K} は以下のように書ける。

$$\mathbf{K} = - \sum_\alpha \left[k_B T \{ \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} \frac{w_\beta w_\alpha}{w_0} C_\alpha \nabla C_\beta \} + e Z_\alpha C_\alpha (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0) \right] \quad (1.5)$$

$$= - \sum_\alpha k_B T \{ \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} \frac{w_\beta w_\alpha}{w_0} C_\alpha \nabla C_\beta \} \quad \dots (in \text{ bulk.}) \quad (1.6)$$

静電ポテンシャルはマクスウェル方程式に従う。

$$\Delta \Phi = - \frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \sum_\alpha e Z_\alpha C_\alpha \quad (1.7)$$

$$= 0 \quad \dots (in \text{ bulk.}) \quad (1.8)$$

式 (1.5) および (1.7) の第2式のバルクでの方程式については、局所的電気的中性条件 $\sum_\alpha e Z_\alpha C_\alpha = 0$ を用いた。

1.2.3 方程式の無次元化と無次元化されたパラメータ

以下では単位系として MKSA 単位系を用いる。

¹ 拡散流束は、通常、輸送係数 $\mathcal{L}_{\alpha\alpha'} = \mathcal{L}_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}$ と化学ポテンシャル μ_α で、 $\mathbf{j}_\alpha = -\mathcal{L}_{\alpha\alpha'} \nabla \mu_{\alpha'} = -\mathcal{L}_\alpha \nabla \mu_\alpha$ と書かれる。 \mathcal{L}_α のイオン濃度依存性については、ここでは、一相状態で拡散係数に一致するように、 $\mathcal{L}_\alpha = L_\alpha w_\alpha C_\alpha$ として定式化している。よって、(1.2) のオンサガーの輸送係数 L_α はイオン種 α の一相状態での拡散定数である。

無次元化のための単位一覧

物理量	無次元化の単位	意味と表式
空間長さ x	l	システムサイズ (ex. $= 1.0\mu m = 1.0 \times 10^{-6}m$)
拡散定数 D_α	D^*	(ex. $= 1.0 \times 10^{-5}cm^2/sec = 1.0 \times 10^{-9}m^2/sec$)
時間 t	τ	$\tau = l^2/D^*$ (ex. $= 1.0 \times 10^{-3}sec$)
速度 \mathbf{v}	\mathbf{v}^*	$\mathbf{v}^* = l/\tau$ (ex. $= 1.0 \times 10^3\mu m/sec = 1.0 \times 10^{-3}m/sec$)
イオンの体積 w_α	w_0	1.0mmol で 1.0ℓ の体積を持つ粒子の体積 $w_0 = 1.0ml/mol$
イオン濃度 C_α	C^*	$C^* = w_0^{-1} = 1.0mmol/\ell$
化学反応係数 $R1$	$R1^*$	$R1^* = \tau^{-1}$ (ex. $= 1.0 \times 10^3/sec$)
化学反応係数 $R2$	$R2^*$	$R2^* = \tau^{-1}C^{*-1}$ (ex. $= 1.0 \times 10^3\ell/mmol/sec$)
電位 Φ	Φ_0	(ex. $= 1.0mV$)
電場 \mathbf{E}	\mathbf{E}^*	$\mathbf{E}^* = \Phi_0/l$ (ex. $= 1.0 \times 10^3V/m$)
圧力 p	p^*	$p^* = \eta_w/\tau$ (ex. $= 0.89Pa$)
質量密度 ρ	ρ^*	(ex. 水の質量密度 $\rho = 1.0g/cm^3 = 1.0 \times 10^3kg/m^3$)

無次元化パラメーター一覧

無次元化パラメータ	意味	入力変数と計算式
R	静電エネルギーと熱エネルギーの比	$R = e\Phi_0/k_B T$ (ex. $= 3.89 \times 10^{-2}$)
D	$D = D^{(l)}/D^*$	$D^{(l)} = k_B T/6\pi\eta_w(l/6\pi)$ (ex. $= 4.63 \times 10^{-8}cm^2/sec$) (ex. $D = 4.63 \times 10^{-3}$)
M	単位体積辺りに含まれる粒子数	$M = C^*l^3N_B$ (ex. $= 6.02 \times 10^5$)
Re	レイノルズ数	$Re = \rho^*lv^*/\eta_w$ (ex. $= 1.12 \times 10^{-3}$)
L	システムサイズとビヨルン長の比	$L = l_b/l = e^2/(k_B T\epsilon_o\epsilon_r l)$ (ex. $= 8.89 \times 10^{-3}$)

2

1.2.4 MEMFluid の無次元化された方程式

MEMFluid を記述する無次元化された方程式を以下に示す。すべての変数は、上記の無次元化単位により無次元化された値である。

α 種のイオンの濃度 C_α の時間発展方程式は次のように書ける。

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + \sum_{\beta} R1_{\alpha\beta}C_\beta + \sum_{\beta,\gamma} R2_{\alpha\beta\gamma}C_\beta C_\gamma \quad (1.9)$$

上記の方程式 (1.9) での、イオンの拡散流束密度 \mathbf{j}_α は次のように定義される

$$\mathbf{j}_\alpha = -D_\alpha \left[\nabla C_\alpha + \sum_{\beta} \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta + RZ_\alpha C_\alpha (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0) \right] \quad (1.10)$$

速度場に対する方程式は次の Navier-Stokes 方程式 (Stokes 近似) により書かれる。

$$Re\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla(\eta_w \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \}) + MD\mathbf{K} \quad (1.11)$$

ここでは、流れの時間変化は極めてゆっくりなので、

$$-\nabla p + \nabla(\eta_w \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \}) + MD\mathbf{K} = 0 \quad (1.12)$$

² $D^{(l)}$ は、流体力学効果による単位長移動時間の拡散定数勘算であり、 $D = D^{(l)}/D^*$ は、長さのスケールが小さいほど大きくなり、長さのスケールが³ 10 分の 1 になると、10 倍になる。

非圧縮条件は、 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ 。上式の体積力項 \mathbf{K} の無次元係数 MD の値は、およそ $MD = 6.02 \times 10^5 \times 4.63 \times 10^{-3} = 2.79 \times 10^3$ となる。上式で、体積力項 \mathbf{K} は以下のように書ける。

$$\mathbf{K} = - \sum_{\alpha} \left[\nabla C_{\alpha} + \sum_{\beta} \chi_{\alpha\beta} C_{\alpha} \nabla C_{\beta} + R Z_{\alpha} C_{\alpha} (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0) \right] \quad (1.13)$$

$$= - \sum_{\alpha} \left[\nabla C_{\alpha} + \sum_{\beta} \chi_{\alpha\beta} C_{\alpha} \nabla C_{\beta} \right] \quad \cdots (in \text{ bulk.}) \quad (1.14)$$

静電ポテンシャルはマクスウェル方程式より、

$$\Delta \Phi = - \frac{M}{R} L \sum_{\alpha} Z_{\alpha} C_{\alpha} \quad (1.15)$$

$$= 0 \quad \cdots (in \text{ bulk.}) \quad (1.16)$$

式 (1.13) および (1.15) の第 2 式のパルクでの方程式については、局所的電気的中性条件 $\sum_{\alpha} Z_{\alpha} C_{\alpha} = 0$ を用いた。上式の無次元係数 ML/R の値は、およそ $ML/R = 1.38 \times 10^5$ となる。

1.3 MEMFluid の有限要素法による定式化

MEMFluid は、有限要素法 (FEM) による離散化を用いて、前述の方程式系を解くシミュレータであり、以下のような仕様となっている。

- 計算手法として三次元 Euler 描像の有限要素法を用いる。四面体一次補間要素を使用し、Galerkin-Ritz 法による重みつき残差法による有限要素化を行なっている。
- 流体流れ場として遅い流れを対象とする。移流項を無視する近似を行い、さらに慣性項をも無視した Stokes 流として流れ場を計算する。流れ場の計算では流速修正法を用いている。³
- 場の量に対する境界条件として Dirichlet 条件、Neumann 条件および周期境界条件 (体系が矩形の場合のみ) を指定することができる。

1.4 MEMFluid の各場の境界条件の定式化

MEMFluid で場に課することができる境界条件 (部分領域条件) には以下のようなものがある。

- 周期境界条件：

周期境界をもつことのできる UNSTRUCTURED_RECT タイプのメッシュでのみ可能。MEMFluid では幾何学的に周期境界を扱っているため、メッシュを周期境界とすると、すべての物理量に対して自動的に周期境界条件が適用されるので、入力 UDF において明示的に指定する必要はない。

- Dirichlet 条件：

部分領域に対して一定の値を課す条件。

- Neumann 条件：

物理量の勾配ベクトルの境界面法線方向成分を与える。

有限要素法による離散化では、 $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$ の形の境界面法線方向成分がゼロである Neumann 条件 (自然境界条件) は明示的に与える必要はない。また、何も条件が指定されない境界面に対して、自動的にこの条件が適用される場もある逆に、 $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$ のみが指定可能である場の量については、表面での境界条件を明示的に与えることができない実装となっているので注意。

³流速修正法の詳細は、有限要素法多成分流体シミュレータ PhaseSeparation_FEM の理論編を参照。

- 計算結果を利用する Dirichlet 条件:

電場印加での電気 2 重層の生成による表面での電場の飛びや、電気浸透効果を速度場や電位の境界条件に組み込むために、Helmholtz-Smoluchowski の式による電気泳動による流速を境界での速度場として Dirichlet 条件 で与えたり、1 次元 Poisson-Boltzmann 方程式の厳密解や線形近似式により、ゼータ電位を計算し、境界での電位の飛びを見積り、境界電位を Dirichlet 条件 で与える条件。

1.4.1 濃度場 C_α に対する境界条件

濃度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- 周期境界条件

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$C_\alpha(x, y, z) = C_\alpha(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。 α は成分を表すインデックス。

- バルク境界条件 (Dirichlet 条件)

任意の境界面に対して、バルク境界条件を課することができる。バルク境界条件とは、その境界面より先ではある値 (バルク値: 一定) になっているとするもので、境界上での値を与える。式で表すと次のようになる。

$$C_\alpha(x, y, z)|_{Boundary} = \text{Constant}_\alpha$$

である。初期化でのバルク境界条件の指定には、条件名 "L.CONSTANT.VALUE.FOR.A.COMPONENT" を用いて、成分の番号と値を部分領域条件に入力する。計算を通してバルク境界条件を指定するには、条件名 "D.CONSTANT.VALUE.FOR.A.COMPONENT" を用いて、成分の番号と値を部分領域条件に入力する。

1.4.2 流束場 j_α / 体積力場 K に対する境界条件

流束場/体積力場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- 周期境界条件

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$j_{\alpha x}(x, y, z) = j_{\alpha x}(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- 壁面境界条件 (Dirichlet 条件)

流束壁面上での値を指定する。式で表すと

$$j_\alpha(x, y, z)|_{wall} = j_{wall}$$

ここで記号 $|_{wall}$ は壁面上での値を意味する。壁面境界条件を指定するには、条件名 "D.CONSTANT.VALUE.FOR.A.COMPONENT" を用いて、成分の番号とベクトル量を部分領域条件に入力する。物質を透過しない壁では、 $\mathbf{0}$ とする。

- バルク境界条件

流束の境界面上での勾配がゼロ。バルク境界条件とは、その境界面より先で濃度はある値 (バルク値：一定) になっているとするもので、流束場の境界面に垂直な方向の勾配がゼロとする。例えば、境界条件を式で表すと次のようになる。

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_\alpha(x, y, z)|_{Boundary} = 0$$

周期境界でない境界については、MEMFluid では自動的にこの条件が課され、流束場の Neumann 条件の値の入力はサポートしていない。

1.4.3 速度場 \mathbf{v} に対する境界条件

速度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- 周期境界条件

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向が周期境界条件を課した場合次の式が課される。

$$\mathbf{v}(x, y, z) = \mathbf{v}(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- 境界上で速度場の値を設定

ある境界面で速度の値を X、Y、Z 成分ごとに与える壁面がある速度 \mathbf{v}_0 で動くとする境界条件を課すことができ、以下の式で表わされる。

$$\mathbf{v}(x, y, z)|_{wall} = \mathbf{v}_0$$

ここで記号 $|_{wall}$ は壁面上での値を意味する。また $\mathbf{v}_0 \perp \mathbf{n}$ である。

初期化での境界上での速度場を指定するには、条件名を “LVX”(X 成分を指定)、“LVY”(Y 成分を指定)、“LVZ”(Z 成分を指定) とし、値に、速度を入力する。或は、条件名を “LVEC” とし、値に速度の X,Y,Z 成分の 3 つの値を配列で入力する。計算を通じて、境界上での速度場を指定するには、条件名を “D_VX”(X 成分を指定)、“D_VY”(Y 成分を指定)、“D_VZ”(Z 成分を指定) などとし、値に、速度を入力する。或は、条件名を “D_VEC” とし、値に速度の X,Y,Z 成分の 3 つの値を配列で入力する。

- 電場印加下での電気浸透効果による境界上の速度場の計算結果を境界条件に設定

電場下での電気浸透効果による境界面で速度の値を X、Y、Z 成分ごとに与える。壁面での速度 \mathbf{v}_{eo} で動くとする境界条件を課ことができ、以下の式で表わされる。

$$\mathbf{v}(x, y, z)|_{wall} = \mathbf{v}_{eo}(\Phi, \{C_\alpha\})$$

ここで記号 $|_{wall}$ は壁面上での値を意味する。また $\mathbf{v}_{eo} \perp \mathbf{n}$ である。

初期化で、この条件により境界の速度場を決定するには、条件名を “IF_VX_ELECTRO_OSMOSIS”(X 成分を指定)、“IF_VY_ELECTRO_OSMOSIS”(Y 成分を指定)、“IF_VZ_ELECTRO_OSMOSIS”(Z 成分を指定)、或は、“IF_VEC_ELECTRO_OSMOSIS”(全成分を指定) とする。計算を通じて、この条件により境界の速度場を決定するには、条件名を “DF_VX_ELECTRO_OSMOSIS”(X 成分を指定)、“DF_VY_ELECTRO_OSMOSIS”(Y 成分を指定)、“DF_VZ_ELECTRO_OSMOSIS”(Z 成分を指定)、或は、“DF_VEC_ELECTRO_OSMOSIS”(全成分を指定) とする。

\mathbf{v}_{eo} の計算法としては、以下を組み込んでいる。

– Helmholtz-Smoluchowski の式

$$v_{eo} = \frac{\epsilon_o \epsilon_r}{\eta_w} \zeta \mathbf{E} \quad (1.17)$$

ここで、 ζ は境界でのゼータ電位、 \mathbf{E} は境界での電場である。無次元化すると、

$$v_{eo} = \frac{DR^2}{L} \zeta \mathbf{E} \quad (1.18)$$

ここで、無次元係数 $DR^2/L \sim 7.88 \times 10^{-4}$ である。

この式を用いるには、条件の値の先頭データに、“HELMHOLTZ_SMOLUCHOWSKI” を入力する。Helmholtz-Smoluchowski の式で必要となる境界でのゼータ電位 ζ の計算については、以下の2つを組み込んでいる。

* パラメータで実験などの測定値を与える。

これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の2番目のデータに、

“ZETA.POTENTIAL.INPUT.PARAM” を、3番目のデータにゼータ電位の値を入力する。

* 表面電荷密度 σ を与え、1次元 Poisson-Boltzmann 方程式の厳密解より計算する。1種類づつのアニオン・カチオン系では、荷数の絶対値を Z 、バルク濃度 (両者で一致) を C とすると、ゼータ電位の厳密解は、以下のように書ける。

$$\zeta = \frac{2k_B T}{Ze} \ln \left[\frac{\sigma}{(8C\epsilon_o\epsilon_r k_B T)^{1/2}} + \left(\frac{\sigma^2}{8C\epsilon_o\epsilon_r k_B T} + 1 \right)^{1/2} \right] \quad (1.19)$$

無次元化すると、

$$\zeta = \frac{2}{ZR} \ln \left[\frac{\sigma}{(8C/(ML))^{1/2}} + \left(\frac{\sigma^2}{8C/(ML)} + 1 \right)^{1/2} \right] \quad (1.20)$$

ここで、無次元係数の値は、およそ、 $2/R = 51.4$ 、 $8/(ML) = 1.50 \times 10^{-3}$ である。

これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の2番目のデータに、

“ZETA.POTENTIAL.POISSON.BOLTZMANN” を入力する。パラメータ R, M, L, Z (荷数), 境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。

* 表面電荷密度 σ を与え、簡単なコンデンサーで界面をモデル化する。(1次元 Poisson-Boltzmann 方程式の厳密解の線形近似に相当⁴)

$$\zeta = \frac{\sigma}{\epsilon_o \epsilon_r \kappa} \quad (1.21)$$

ここで、 κ は電気2重層の厚さ (電位が e^{-1} に減衰する距離) の逆数であり、

$$\kappa = \left(\frac{\sum Z_\alpha^2 C_\alpha e^2}{\epsilon_o \epsilon_r k_B T} \right)^{1/2} \quad (1.22)$$

と書ける。これらの式を無次元化すると、

$$\zeta = \frac{(ML)^{1/2}}{R} \frac{\sigma}{(\sum_\alpha Z_\alpha^2 C_\alpha)^{1/2}} \quad (1.23)$$

と書ける。ここで、無次元係数の値は、およそ、 $(ML)^{1/2}/R = 1.88 \times 10^3$ である。

これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の2番目のデータに、

“ZETA.POTENTIAL.LINEAR.CONDENSATOR” を入力する。パラメータ R, M, L, Z (荷数), 境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。

⁴線形近似が妥当である条件は、電位 ζ が低く従って電荷密度も低く、 $\frac{Ze|\zeta|}{k_B T} \ll 1$ が満足される場合である。室温で1-1型電解質の場合 ($Z=1$) には、この条件は、 $\zeta \leq 25mV$ となる。

- * 電解質流体シミュレータ Electrolyte シミュレータを組み込む。(ズーミング)
計算時間はかかるが、高精度である。
これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の 2 番目のデータに、
“ZETA_POTENTIAL_MUFFIN_ELECTROLYTE” を入力する。パラメータ R,M,L,Z(荷数)、
境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。
- 電解質流体シミュレータ Electrolyte シミュレータを組み込む。(ズーミング)
計算時間はかかるが、高精度である。
この式を用いるには、条件の値の先頭データに、“MUFFIN_ELECTROLYTE” を入力する。パラメータ D,R,M,L,Z(荷数)、境界でのバルク濃度場 (Concentration)、電場 (ElectricField)、および、外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。

● 境界上で圧力値を設定した場合

その境界面上で速度場の勾配がゼロを課す

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(x, y, z)|_{wall} = 0$$

自動的になされるので、指定の必要はない。

1.4.4 圧力場 p に対する境界条件

圧力場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

● 周期境界条件

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向が周期境界条件を課した場合次の式が課される。

$$p(x, y, z) = p(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

● 境界上で速度場の値を設定した場合

圧力勾配がゼロ

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p(x, y, z)|_{Boundary} = 0$$

このようなノイマン境界条件を圧力場に与えるには、条件名を”N” とし、条件の値の先頭データにその勾配の値 (0.0 など) を入力する。

● 境界上で圧力値を設定

ある境界面で圧力の値 p_o を設定する。

$$p(x, y, z)|_{Boundary} = p_o$$

このようなディリクレ境界条件を圧力場に与えるには、条件名を”D” または”D_CONSTANT_VALUE” とし、条件の値の先頭データに境界での圧力場の値を入力する。

1.4.5 静電ポテンシャル場 Φ に対する境界条件

静電ポテンシャル場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- **周期境界条件**

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向が周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$\Phi(x, y, z) = \Phi(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- **境界上で表面電荷密度 σ を与える (Neumann 境界条件)**

(境界面に垂直方向の静電ポテンシャルの勾配) を設定することが可能。式で表すと。

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi(x, y, z)|_{Boundary} = -\sigma / \epsilon_r \epsilon_o$$

ある。無次元化すると

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi(x, y, z)|_{Boundary} = -\sigma ML / R$$

である。表面電荷の無い面など、周期境界ではない面では、自動的に、

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi(x, y, z)|_{Boundary} = 0$$

が満たされる。

- **境界上で電位を設定 (Dirichlet 境界条件)**

境界面での電位を設定することが可能。

$$\Phi(x, y, z)|_{Boundary} = \Phi_o \quad (= \text{Constant})$$

この境界条件を指定するには、条件名を”D” とし、条件の値の先頭データに固定する印加電位を入力する。

- **電場印加がある系の境界上でゼータ電位を計算し電位を設定**

電場印加による境界面への充電電流がバルクに生じている場合には、境界への充電量より境界の電気 2 重層電位 (ゼータ電位) を求め、境界上の電位を設定することが可能。

$$\Phi(x, y, z)|_{Boundary} = \Phi_{el}(\Phi_{Applied}, \{C_\alpha\})$$

この境界条件を指定するには、条件名を”DF_ZETA_POTENTIAL” とし、条件の先頭データに外部から境界に印加している電位を、2 番目のデータにゼータ電位の計算法を指定する。バルクへの境界電位として、外部印加電位からゼータ電位を引いた値がデリクレ条件で与えられる。

境界でのゼータ電位の計算については、以下の 4 つを組み込んでいる。

- パラメータで実験などの測定値を与える。

これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の 2 番目のデータに、“INPUT_PARAMETER” を、3 番目のデータにゼータ電位の値を入力する。

- 表面電荷を与え、1 次元 Poisson-Boltzmann 方程式の厳密解より計算する。

具体的な表式については、速度場の境界条件の項を参照。

これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の 2 番目のデータに、“POISSON_BOLTZMANN” を入力する。パラメータ R,M,L,Z(荷数), 境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。

- 表面電荷を与え、簡単なコンデンサーで界面をモデル化する。(線形近似)
具体的な表式については、速度場の境界条件の項を参照。
これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の2番目のデータに、“LINEAR_CONDENSOR”を入力する。パラメータ R,M,L,Z(荷数), 境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。
- 電解質シミュレータ Electrolyte の計算結果を用いる。(ブーミング)
これを用いてゼータ電位を計算するには、条件の値の2番目のデータに、“MUFFIN_ELECTROLYTE”を入力する。パラメータ R,M,L,Z(荷数), 境界でのバルク濃度場 (Concentration) および外部境界の電荷密度場 (ChargeDensity) が必要となる。

1.4.6 電荷密度場 ρ_e , σ に対する境界条件

電荷密度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- **周期境界条件**

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$\rho(x, y, z) = \rho(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- **固定電荷 境界 (部分領域) 条件 (Dirichlet 条件)**

任意の境界面または部分領域に対して、一定の電荷を与えるデリクレ境界条件を課することができる。初期化での固定電荷条件の指定には、条件名 “I” または “I_CONSTANT_VALUE” と、その値を部分領域条件に入力する。計算を通して固定電荷条件を指定するには、条件名 “D” または “D_CONSTANT_VALUE” と、その値を部分領域条件に入力する。

1.4.7 誘電率場 ϵ に対する境界条件

(純水との) 比誘電率場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- **周期境界条件**

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$\epsilon(x, y, z) = \epsilon(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- **溶媒組成固定 部分領域条件 (Dirichlet 条件)**

任意の部分領域に対して、一定の誘電率を課することができる。これは、領域 1、領域 2 などで溶媒が異なるために、各成分の誘電率が異なる場合などに用いる。溶媒組成固定 部分領域条件を指定するには、条件名 “D” または “D_CONSTANT_VALUE” と、各イオンのその領域での誘電率の値を部分領域条件に入力する。

1.4.8 粘度場 η に対する境界条件

粘度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- **周期境界条件**

メッシュ形状タイプが UNSTRUCTURED_RECT の場合のみ適用可能である。x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

$$\eta(x, y, z) = \eta(x + L_x, y, z)$$

y 方向や z 方向にも周期境界条件を課す場合には同様な式が各方向に対して課される。

- **溶媒組成固定 部分領域条件** (Dirichlet 条件)

任意の部分領域に対して、一定の粘度を課することができる。これは、領域 1 では水、領域 2 では有機溶媒など、領域毎に溶媒が異なる場合に用いる。溶媒組成固定 部分領域条件を指定するには、条件名”D”または”D_CONSTANT_VALUE”と、その領域での溶媒の粘度の値を部分領域条件に入力する。

第2章 MEMFluid の応用操作

2.1 MEMFluid のマイクロリアクタへの応用操作

この節では有限要素法による MEMFluid のマイクロリアクタへの応用例を示す。これらの応用例に対応する入力 UDF ファイル、出力ファイル等は Muffin の配布版のディレクトリ MUFFIN/sample/MEMFluid 以下に問題別のディレクトリ MUFFIN/sample/MEMFluid/EX01, EX02, .. 等として納められている。

2.1.1 応用例 1: 圧力印加によるフローインジェクションマイクロチップの検出効率

ここでは、図 2.1.1 に示すように、成分 A と成分 B の細管が合流する系で、圧力勾配 Δp の印加により成分 A と成分 B を流し、化学反応 $A + B \rightarrow C$ により成分 C が生成する場合の成分 C の生成率の時間変化をシミュレーションする。

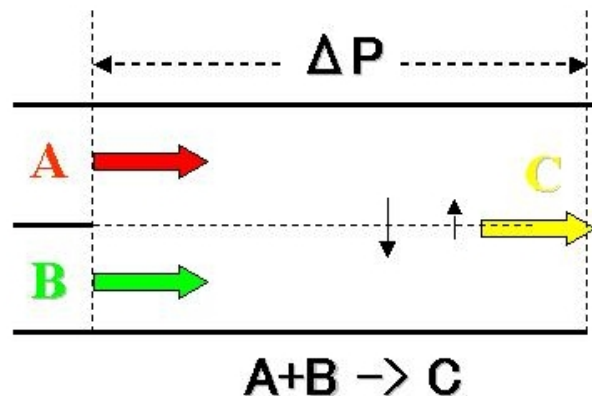


図 2.1: MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションと化学反応

入力 UDF ファイル:

MUFFIN/sample/MEMFluid/EX01/EX01_in.udf

入力 UDF 解説

ここでは、理論編で解説した、単位長さを $1\mu m$ とした場合の無次元パラメータの値を用いて、シミュレーションを行う。

- parameter.mesh_parameter:
形状タイプ UNSTRUCTURED_RECT、64x32x2 分割。
- parameter.pysical_parameter[] :

Parameter 名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	3
VISCOSITY	1.0, 1.0, 1.0
Z	1, 1, 2
R	3.89e-2
M	6.02e2
D	4.63e-3
DIELECTRIC_CONSTANT	1.0, 1.0, 1.0
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0, 1.0
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	0.0, 0.0, 0.0
D_PRESSURE	10.0
REACTION_COEFFICIENT_2.0	0, -1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
REACTION_COEFFICIENT_2.1	0, -1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
REACTION_COEFFICIENT_2.2	0, 1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0

- partial_region[]

ここでは、細管が合流する面である”BOUNDARY_VERTEX_XMIN”のうち、成分 A の細管の入口の領域を”BOUNDARY_VERTEX_XMIN_YUPPER”として、成分 B の細管の入口の領域を”BOUNDARY_VERTEX_XMIN_YLOWER”として、部分領域を作成している。

- region.condition[]

以下に部分領域条件を示す。

部分領域	場	条件名	値
BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_ZMAX	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VEC	0.0, 0.0, 0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VEC	0.0, 0.0, 0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Pressure	D	\$(D_PRESSURE)
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Pressure	D	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Concentration	D_CONSTANT_VALUE _FOR_A_COMPONENT	2, 0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN _YUPPER	Concentration	D_CONSTANT_VALUE _FOR_A_COMPONENT	0, 1.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN _YLOWER	Concentration	D_CONSTANT_VALUE _FOR_A_COMPONENT	1, 1.0

- dynamics_manager.registered_field[]

ElectricPotential, ElectricField を除く、MEMFluid で使用可能なすべての場を指定している。

- dynamics_manager.procedures.table_for_initialization[].command.list[]

初期化手続き ”INITIALIZE:REACTOR:UNDER_PRESSURE” を以下のように定義している。

場	初期化コマンド
Pressure	INITIALIZE:TO_ZERO
Viscosity	UPDATE:TO_CONSTANT
Velocity	INITIALIZE:TO_ZERO
Concentration	INITIALIZE:UNIFORM
Obstacle	INITIALIZE:TO_ZERO
K_Field	SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY
Velocity	SOLVE:STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE
Concentration	INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION

初期化の手続きは以下のようになっている。

- 圧力場、速度場、イオン濃度場を 0.0 に初期化。粘度場を一定値 1.0 に初期化。
 - 体積力を電気的中性条件下で計算。(ここでは、すべて 0.0 となる。)
 - 境界条件下で Stokes 方程式を解き、定常状態の速度場と圧力場を求める。
 - イオン濃度場に部分領域条件を課し、細管合流部に成分 A, 成分 B のバルク条件を与える。
- `dynamics_manager.procedures_table_for_evolution[].command_list[]`

時間進行手続き "SOLVE:REACTOR:UNDER_PRESSURE" を以下のように定義する。

場の名前	コマンド
K_Field	SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY
Flux	SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY
Velocity	SOLVE:VELOCITY_AND_PRESSURE
Concentration	SOLVE:WITH_FLOW:WITH_REACTION
Concentration	UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION

時間進行の手続きは以下のようになっている。

- 体積力場を電気的中性条件の下で解く。
- イオンの各成分の拡散流束を解く。
- 体積力場を用いて、Navier-Stokes 方程式を 1 ステップ解き、速度場と圧力場を時間発展。
- イオンの拡散流束場と速度場を用いて、イオン濃度場を、移流・拡散・化学反応より時間発展。
- イオン濃度場に部分領域条件を課し、細管合流部でのバルク条件を再設定する。

計算結果

イオン濃度場 (Concentration) を GOURMET の View 機能で表示した例を図 2.1.1 に示す。上図より時刻 $t = 10.0, 25.0, 50.0$ での、左図より成分 A, 成分 B, 成分 C のイオン濃度分布を表示している。表示用の Python スクリプトには `MeshfieldShow.py` を使用している。

続いて、細管の下流面の "BOUNDARY_VERTEX_XMAX" 面上の各成分の平均濃度や速度場の時間変化を python プログラムより解析し、続いて、反応生成率の時間変化を Plot 表示したグラフを図 2.1.1 に示す。解析用の python プログラムには、`memfluid/analysis_reactor_pressure.py` を用いて、グラフシート (`GraphSheet[]`) を作成し、グラフ表示用の `gnuplot` スクリプトには、`memfluid/plot_average_reaction_rate.gp` を使用している。

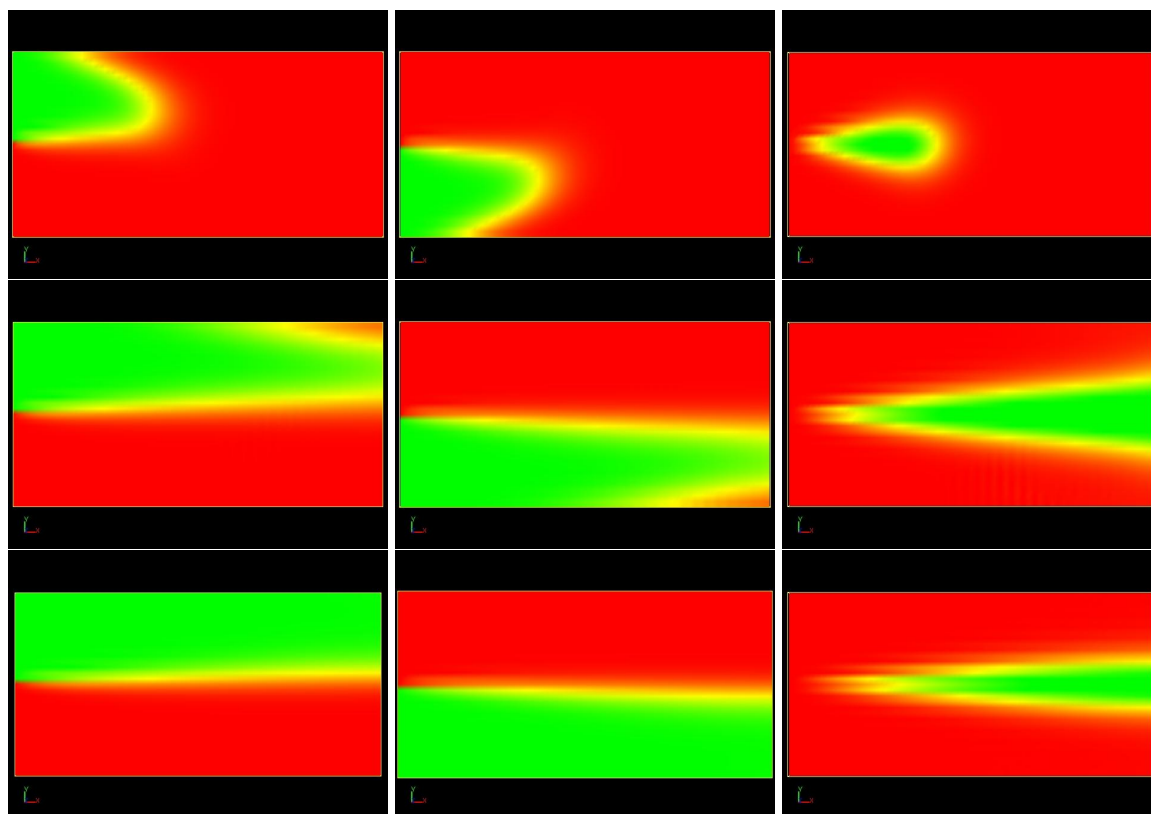


図 2.2: MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションと反応生成物の濃度分布

図 2.3: MEMFluid 適用例：圧力印加によるフローインジェクションでの反応生成率の時間変化

2.1.2 応用例 2: 電気泳動によるフローインジェクションマイクロチップの検出効率

ここでは、電場下で、イオン成分 A とイオン成分 B の細管が合流する系で、壁面での電気 2 重層の生成と印可電場により壁面近傍で電気浸透流が起こり、これにより、成分 A と成分 B が流れ、化学反応 $A + B \rightarrow C$ により成分 C が生成する場合の成分 C の生成率の時間変化をシミュレーションする。

入力 UDF ファイル:

MUFFIN/sample/MEMFluid/EX01/EX02_in.udf

入力 UDF 解説

ここでは、理論編で解説した、単位長さを $1\mu\text{m}$ とした場合の無次元パラメータの値を用いて、シミュレーションを行う。

- parameter.mesh_parameter:
形状タイプ UNSTRUCTURED_RECT、64x32x2 分割。

- parameter.pysical_parameter[] :

Parameter 名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	3
VISCOSITY	1.0, 1.0, 1.0
Z	1, 1, 2
R	3.89e-2
M	6.02e2
D	4.63e-3
L	8.89e-3
DIELECTRIC_CONSTANT	1.0, 1.0, 1.0
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0, 1.0
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	0.0, 0.0, 0.0
EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD	10.0, 0.0, 0.0
ZETA_POTENTIAL	100.0
REACTION_COEFFICIENT_2_0	0, -1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
REACTION_COEFFICIENT_2_1	0, -1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0
REACTION_COEFFICIENT_2_2	0, 1.0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0

- partial_region[]
ここでは、細管が合流する面である”BOUNDARY_VERTEX_XMIN”のうち、成分 A の細管の入口の領域を”BOUNDARY_VERTEX_XMIN_YUPPER”として、成分 B の細管の入口の領域を”BOUNDARY_VERTEX_XMIN_YLOWER”として、部分領域を作成している。
- region.condition[]
以下に部分領域条件を示す。

部分領域	場	条件名	値
BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_ZMAX	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	DF_VX _ELECTRO_OSMOSIS	HELMHOLTZ _SMOLUCHOWSKI, ZETA.POTENTIAL _INPUT_PARAM, \$(ZETA.POTENTIAL)
BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	DF_VX _ELECTRO_OSMOSIS	HELMHOLTZ _SMOLUCHOWSKI, ZETA.POTENTIAL _INPUT_PARAM, \$(ZETA.POTENTIAL)
BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VY	0.0
BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VZ	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Pressure	D	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Pressure	D	0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A_COMPONENT	2, 0.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN _YUPPER	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A_COMPONENT	0, 1.0
BOUNDARY_VERTEX_XMIN _YLOWER	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A_COMPONENT	1, 1.0

- dynamics_manager.registered_field[]

ElectricPotential を除く、MEMFluid で使用可能なすべての場を指定している。

- dynamics_manager.procedures.table_for_initialization[].command.list[]

初期化手続き "INITIALIZE:REACTOR:UNDER_ELECTRO_OSMOSIS" を以下のように定義している。

場	初期化コマンド
Pressure	INITIALIZE:TO_ZERO
Viscosity	UPDATE:TO_CONSTANT
Velocity	INITIALIZE:TO_ZERO
Concentration	INITIALIZE:UNIFORM
Obstacle	INITIALIZE:TO_ZERO
ElectricField	SOLVE:BY_ELECTRIC.POTENTIAL:WITH.EXTERNAL.FIELD
K.Field	SOLVE:WITH.CHARGE.NEUTRALITY
Velocity	SOLVE:STOKES.EQUATION.AND.PRESSURE
Concentration	INITIALIZE:PARTIAL_REGION.CONDITION

初期化の手続きは以下のようにになっている。

- 圧力場、速度場、イオン濃度場を 0.0 に初期化。粘度場を一定値 1.0 に初期化。
 - 電場を外部印可電場 (パラメータ EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD) で初期化。
 - 体積力を電気的中性条件下で計算。(ここでは、すべて 0.0 となる。)
 - 境界条件下で Stokes 方程式を解き、定常状態の速度場と圧力場を求める。
 - イオン濃度場に部分領域条件を課し、細管合流部に成分 A, 成分 B のバルク条件を与える。
- dynamics_manager.procedures.table_for_evolution[].command_list[]

時間進行手続き "SOLVE:REACTOR:UNDER_ELECTRO_OSMOSIS" を以下のように定義する。

場の名前	コマンド
K_Field	SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY
Flux	SOLVE:WITH_ELECTRIC_POTENTIAL:WITH_EXTERNAL_FIELD
Velocity	SOLVE:VELOCITY_AND_PRESSURE
Concentration	SOLVE:WITH_FLOW:WITH_REACTION
Concentration	UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION

時間進行の手続きは以下のようにになっている。

- 体積力場を電気的中性条件の下で解く。
- 外部印可電場下でのイオンの各成分の拡散流束を解く。
- 体積力場を用いて、Navier-Stokes 方程式を 1 ステップ解き、速度場と圧力場を時間発展。
- イオンの拡散流束場と速度場を用いて、イオン濃度場を、移流・拡散・化学反応より時間発展。
- イオン濃度場に部分領域条件を課し、細管合流部でのバルク条件を再設定する。

計算結果

イオン濃度場 (Concentration) を GOURMET の View 機能で表示した例を図 2.1.2 に示す。上図より時刻 $t = 10.0, 25.0, 50.0$ での、左図より成分 A, 成分 B, 成分 C のイオン濃度分布を表示している。表示用の Python スクリプトには MeshfieldShow.py を使用している。

続いて、細管の下流面の "BOUNDARY_VERTEX_XMAX" 面上の各成分の平均濃度や速度場の時間変化を python プログラムより解析し、続いて、反応生成率の時間変化を Plot 表示したグラフを図 2.1.2 に示す。解析用の python プログラムには、memfluid/analysis_reactor_electro_osmosis.py を用いて、グラフシート (GraphSheet[]) を作成し、グラフ表示用の gnuplot スクリプトには、memfluid/plot_average_reaction_rate.gp を使用している。

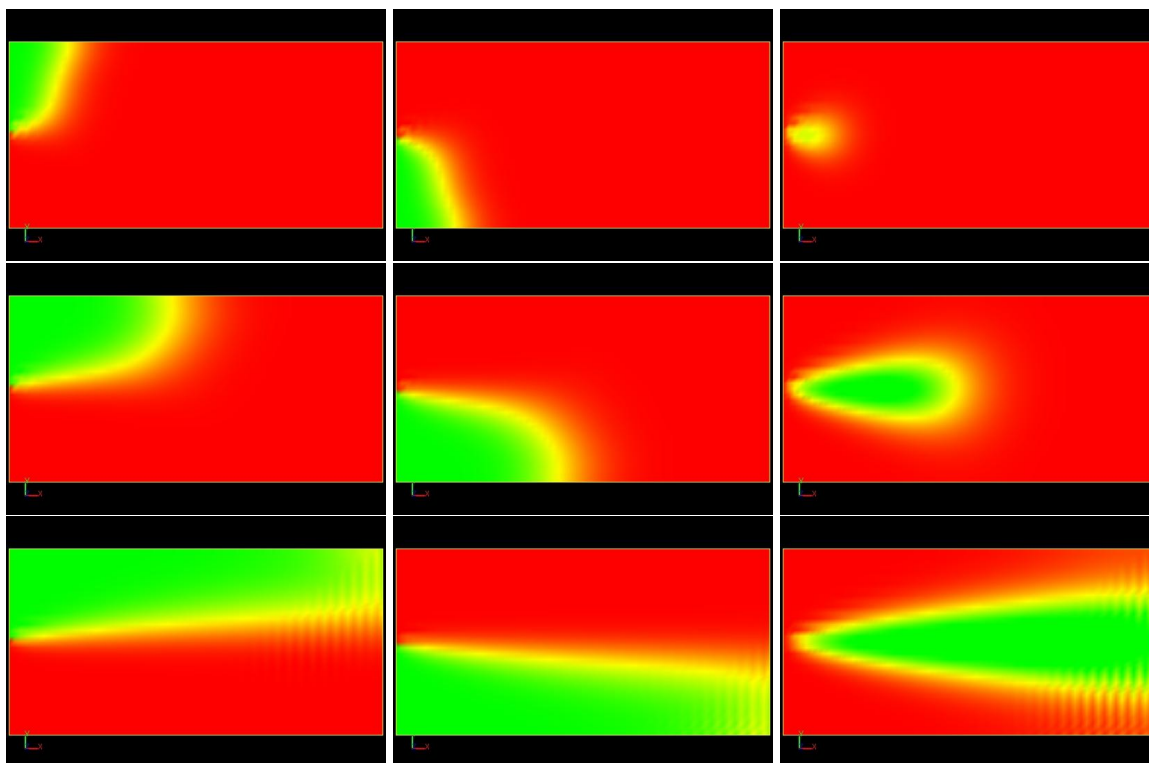


図 2.4: MEMFluid 適用例：電場印可によるフローインジェクションと反応生成物の濃度分布

図 2.5: MEMFluid 適用例：電場印加によるフローインジェクションでの反応生成率の時間変化

第3章 MEMFluid リファレンス

3.1 MEMFluid の入力パラメータ

3.1.1 MEMFluid のソルバ制御パラメーター一覧

パラメータの名前	パラメータの意味と理論編での記号
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	乱数の種 (長整数)
DT_FOR_V	Stokes 流計算に使用する時間刻み
MAX_ITERATION_FOR _VELOCITY_SOLVER	Stokes 流計算の最大繰り返し数
CONVERGENCE_CRITERION_FOR _VELOCITY_SOLVER	Stokes 流計算の収束判定値 > 0 : 速度絶対値の相対変化率 (default: 1.0^{-3}) < 0 : 速度絶対値の変化量 (default: 1.0^{-3})
PENALTY_NUMBER	Dirichlet 境界条件に使用するペナルティ数
MATRIX_SOLVER _FOR_ELECTRIC_FIELD	電場ポテンシャル計算での一次方程式の解法 ("ICCG" (デフォルト) または "CG")
MATRIX_SOLVER	圧力場計算での一次方程式の解法 ("ICCG" (デフォルト) または "CG")

3.1.2 MEMFluid の物理パラメーター一覧

パラメータの名前	パラメータの意味と理論編での記号
NUMBER_OF_COMPONENTS	成分数
DEVIATION_FROM_AVERAGED_CONCENTRATION	イオン濃度場に与える揺らぎの大きさ
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	各イオンの初期濃度の平均値 $C_{\alpha 0}$
DIFFUSION_COEFFICIENT	各成分の拡散係数 D_{α}
GRAVITY_X	流体場に与える一定外力の X 成分
GRAVITY_Y	流体場に与える一定外力の Y 成分
GRAVITY_Z	流体場に与える一定外力の Z 成分
EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD	外部印加電場 (ベクトル量) \mathbf{E}_0
VALENCY	各イオン成分の電荷数 Z_{α}
Z	各イオン成分の電荷数 Z_{α}
R	静電エネルギーと熱エネルギーの比 $R = e\Phi_0/k_B T$
CHI _{mn}	成分 n, m の χ -パラメータ ($m < n$ のみ与える)
D	無次元パラメータ D (体積力の係数)
L	システムサイズとビヨルン長の比
M	無次元パラメータ M (単位体積辺りの粒子数)
REYNOLDS	レイノルズ数

RE	レイノルズ数
DIELECTRIC_CONSTANT	(純水との) 比誘電率 ϵ_α 。成分毎に配列で与える
VISCOSITY	成分毎の粘性係数 η_α
REACTION_COEFFICIENT_1_α	反応係数 $R1_{\alpha\beta}$ (β についてのサイズ N_c の配列)
REACTION_COEFFICIENT_2_α	反応係数 $R2_{\alpha\beta\gamma}$ (β, γ についてのサイズ N_c^2 の配列)

3.2 MEMFluid の場とコマンド

3.2.1 MEMFluid の利用可能な場の一覧

場の名前	場の意味と理論編での記号
Flux	イオン拡散流束場
Velocity	速度場
Obstacle	内部構造 (障害物) 場
Concentration	イオン濃度場
ElectricPotential	電場ポテンシャル
ElectricField	電場
ChargeDensity	電荷密度場
Pressure	圧力場
K_Field	体積力場
Viscosity	粘度場
DielectricConst	(純水との) 比誘電率場

3.2.2 MEMFluid の場のコマンド一覧

Concentration : イオン濃度場 コマンド一覧

Concentration	名称
初期化	"INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
初期化	"INITIALIZE:ADD_NOISE"
初期化	"INITIALIZE:UNIFORM"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
時間発展	"SOLVE:WITH_FLOW:WITH_REACTION"
時間発展	"SOLVE:WITHOUT_FLOW:WITH_REACTION"
時間発展	"SOLVE:WITH_FLOW:WITHOUT_REACTION"
時間発展	"SOLVE:WITHOUT_FLOW:WITHOUT_REACTION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. Concentration : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件の初期化条件 ("LXXX") を用いて場を初期化
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
名称	"INITIALIZE:ADD_NOISE"
機能	場の初期分布にノイズを与える
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DEVIATION_FROM_AVERAGED_CONCENTRATION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER
名称	"INITIALIZE:UNIFORM"
機能	複数成分が均一に混合した場を初期生成する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AVERAGED_ION_CONCENTRATION

2. Concentration : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
名称	"SOLVE:WITH_FLOW:WITH_REACTION"
機能	移流、拡散、化学反応を入れて解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (v C_\alpha) - \nabla \cdot j_\alpha + \sum_\beta R1_{\alpha\beta} C_\beta + \sum_{\beta,\gamma} R2_{\alpha\beta\gamma} C_\beta C_\gamma$
依存している場	Flux
依存している場	Velocity
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT
名称	"SOLVE:WITHOUT_FLOW:WITH_REACTION"
機能	拡散、化学反応を入れて解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot j_\alpha + \sum_\beta R1_{\alpha\beta} C_\beta + \sum_{\beta,\gamma} R2_{\alpha\beta\gamma} C_\beta C_\gamma$
依存している場	Flux
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT
名称	"SOLVE:WITH_FLOW:WITHOUT_REACTION"
機能	移流、拡散を入れて解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (v C_\alpha) - \nabla \cdot j_\alpha$
依存している場	Flux
依存している場	Velocity
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT

名称	"SOLVE:WITHOUT_FLOW:WITHOUT_REACTION"
機能	拡散のみ入れて解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha$
依存している場	Flux
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT

3. Concentration : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
I.CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	ψ_α を一定の値に初期化する。 条件の値に、成分の番号 α と 値 ψ_α を入れる。
D.CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	ψ_α を一定の値に固定する。(デリクレ条件) 条件の値に、成分の番号 α と 値 ψ_α を入れる。

4. Concentration : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

5. Concentration : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

Flux : イオン拡散流束場, K_Field : 体積力場 コマンド一覧

K_Field	名称
初期化	"INITIALIZE:TO_ZERO"
初期化	"INITIALIZE:TO_CONSTANT_FORCE"
時間発展	"UPDATE:TO_ZERO"
時間発展	"SOLVE:WITH_ELECTRIC_POTENTIAL"
時間発展	"SOLVE:WITH_ELECTRIC_POTENTIAL:WITH_EXTERNAL_FIELD"
時間発展	"SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. K_Field : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:TO_ZERO"
機能	すべての節点での場の値を 0 に初期化する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
名称	"INITIALIZE:TO_CONSTANT_FORCE"
機能	一定値の体積力に初期化する
依存パラメータ	GRAVITY_X
依存パラメータ	GRAVITY_Y
依存パラメータ	GRAVITY_Z

2. K_Field : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:TO_ZERO"
機能	すべての場の値を 0 にする。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
名称	"SOLVE:WITH_ELECTRIC_POTENTIAL"
機能	電場ポテンシャルを入れて各々のイオンの流束を解く $\mathbf{j}_\alpha = \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta + R Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi$
依存している場	Concentration
依存している場	ElectricPotential
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	Z (or VALENCY)
依存パラメータ	R
依存パラメータ	CHI _{mn}
名称	"SOLVE:WITH_ELECTRIC_POTENTIAL :WITH_EXTERNAL_FIELD"
機能	電場ポテンシャルと外部印加電場を入れて各々のイオンの流束を解く $\mathbf{j}_\alpha = \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta + R Z_\alpha C_\alpha (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0)$
依存している場	Concentration
依存している場	ElectricPotential
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ Z (or VALENCY)	
依存パラメータ	R
依存パラメータ	CHI _{mn}
名称	"SOLVE:WITH_CHARGE_NEUTRALITY"
機能	電気的中性条件で各々のイオンの体積力を解く $\mathbf{j}_\alpha = \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta$
依存している場	Concentration
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CHI _{mn}

名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

3. K_Field : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D_CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	j_α を一定の値に固定する。(デリクレ条件) 条件の値に、成分の番号 α と 値 $j_{\alpha x}, j_{\alpha y}, j_{\alpha z}$, を入れる。

4. K_Field : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

5. K_Field : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

Velocity : 速度場 コマンド一覧

Velocity	名称
初期化	"INITIALIZE:TO_ZERO"
初期化	"INITIALIZE:DIRICHLET_CONDITION"
初期化	"INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
時間発展	"SOLVE:VELOCITY_AND_PRESSURE"
時間発展	"SOLVE:STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
時間発展	"UPDATE:DIRICHLET_CONDITION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. Velocity : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:TO_ZERO"
機能	すべての節点での場の値を 0 に初期化する

名称	”INITIALIZE:DIRICHLET_CONDITION”
機能	部分領域条件のうちデリクレ条件を用いて場を初期化
依存している場	ElectricField
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存パラメータ	D
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	”INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION”
機能	部分領域条件の初期化条件を用いて場を初期化
依存している場	ElectricField
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存パラメータ	D
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

2. Velocity : 時間発展関数 詳細

名称	”SOLVE:VELOCITY_AND_PRESSURE”
機能	Navier-Stokes 方程式により速度場を圧力場を 1 ステップ解く $Re\rho\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla(\eta_w\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + MD\mathbf{K}$
依存している場	Pressure
依存している場	ElectricField
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存している場	K_Field
依存している場	Viscosity
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	RE or REYNOLDS
依存パラメータ	D
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	”SOLVE:STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE”
機能	Stokes 方程式により定常流まで速度場を圧力場と共に解く $-\nabla p + \nabla(\eta_w\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + MD\mathbf{K} = 0$
依存している場	Pressure
依存している場	ElectricField
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存している場	K_Field
依存している場	Viscosity
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	DT_FOR_V
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	D
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	VALENCY
依存パラメータ	Z

名称	”UPDATE:DIRICHLET_CONDITION”
機能	部分領域条件のうちデリクレ条件を適用する
依存している場	Velocity
依存している場	ElectricField
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存パラメータ	D
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY

3. Velocity : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
L_VX L_VY L_VZ L_VEC	初期化処理で v_x を一定の値に固定する。 初期化処理で v_y を一定の値に固定する。 初期化処理で v_z を一定の値に固定する。 初期化処理で \mathbf{v} を一定の値に固定する。
D_VX D_VY D_VZ D_VEC	常に v_x を一定の値に固定する。(デリクレ条件) 常に v_y を一定の値に固定する。(デリクレ条件) 常に v_z を一定の値に固定する。(デリクレ条件) 常に \mathbf{v} を一定の値に固定する。(デリクレ条件)
IF_VX_ELECTRO_OSMOSIS IF_VY_ELECTRO_OSMOSIS IF_VZ_ELECTRO_OSMOSIS IF_VEC_ELECTRO_OSMOSIS	初期化処理で v_x に電気浸透流速を与える。 初期化処理で v_y に電気浸透流速を与える。 初期化処理で v_z に電気浸透流速を与える。 初期化処理で \mathbf{v} に電気浸透流速を与える。
DF_VX_ELECTRO_OSMOSIS DF_VY_ELECTRO_OSMOSIS DF_VZ_ELECTRO_OSMOSIS DF_VEC_ELECTRO_OSMOSIS	常に v_x に電気浸透流速を与える。 常に v_y に電気浸透流速を与える。 常に v_z に電気浸透流速を与える。 常に \mathbf{v} に電気浸透流速を与える。
ELECTRO_OSMOSIS パラメータ	
value[0]	流速計算法 HELMHOLTZ_SMOLUCHOWSKI or MUFFIN_ELECTROLYTE
value[1]	ゼータ電位計算法 (HELMHOLTZ_SMOLUCHOWSKI の時のみ) ZETA_POTENTIAL_INPUT_PARAM or ZETA_POTENTIAL_POISSON_BOLTZMANN or ZETA_POTENTIAL_LINEAR_CONDENSOR or ZETA_POTENTIAL_MUFFIN_ELECTROLYTE
value[2]	ゼータ電位の値 (ZETA_POTENTIAL_INPUT_PARAM の時のみ)

4. Velocity : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

5. Velocity : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

Pressure : 圧力場 コマンド一覧

Pressure	名称
初期化	"INITIALIZE:TO_ZERO"
時間発展	"SOLVE:WITH_VELOCITY"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. Pressure : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:TO_ZERO"
機能	すべての節点での場の値を 0 に初期化する

2. Pressure : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:WITH_VELOCITY"
機能	中間流速場を用いて圧力のポアソン方程式を解く $\Delta p = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^*$
依存している場	Pressure
依存している場	Velocity
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	DT_FOR_V
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER

3. Pressure : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D or D.CONSTANT.VALUE	境界の圧力を一定値に固定 (デリクレ条件)
N	$\mathbf{n} \cdot \nabla p = \bar{p}_n$ (ノイマン条件)

4. Pressure : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

5. Pressure : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

ElectricPotential : 電場ポテンシャル コマンド一覧

ElectricPotential	名称
時間発展	"SOLVE:POISSON"
時間発展	"SOLVE:POISSON:WITH_CHARGE_NEUTRALITY"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. ElectricPotential : 時間発展関数 詳細

名称	”SOLVE:POISSON”
機能	電場ポテンシャルをポアソン方程式より解く $\Delta\Phi = -\frac{M}{R}L\sum_{\alpha}Z_{\alpha}C_{\alpha}$
依存している場	DielectricConst
依存している場	ChargeDensity
依存している場	ElectricPotential
依存している場	Concentration
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER.FOR.ELECTRIC_FIELD
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	”SOLVE:POISSON:WITH_CHARGE_NEUTRALITY”
機能	電気的中性条件の下での電場ポテンシャルをラプラス方程式より解く $\Delta\Phi = 0$
依存している場	DielectricConst
依存している場	ElectricPotential
依存している場	ChargeDensity
依存している場	Concentration
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER.FOR.ELECTRIC_FIELD
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	R
依存パラメータ	L
依存パラメータ	M
依存パラメータ	Z or VALENCY
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

2. ElectricPotential : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D DF_ZETA_POTENTIAL	境界の電位を一定値に固定する。(デリクレ条件) ゼータ電位の計算結果より境界での電位を計算する。
ZETA_POTENTIAL パラメータ	
value[0]	境界への外部印加電位の値
value[1]	ゼータ電位計算法 INPUT_PARAM or POISSON_BOLTZMANN or LINEAR_CONDENSOR or MUFFIN_ELECTROLYTE
value[2]	ゼータ電位の値 (INPUT_PARAM の時のみ)

3. ElectricPotential : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

4. ElectricPotential : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

ElectricField : 電場 コマンド一覧

ElectricField	名称
時間発展	"SOLVE:BY_ELECTRIC_POTENTIAL"
時間発展	"SOLVE:BY_ELECTRIC_POTENTIAL:WITH_EXTERNAL_FIELD"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. ElectricField : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:BY_ELECTRIC_POTENTIAL"
機能 $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$	電場ポテンシャルの勾配より電場を解く
依存している場	ElectricPotential
名称	"SOLVE:BY_ELECTRIC_POTENTIAL :WITH_EXTERNAL_FIELD"
機能 $\mathbf{E} = -\nabla\Phi + \mathbf{E}_0$	外部印加電場と電場ポテンシャルの勾配より電場を解く
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD

2. ElectricField : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

3. ElectricField : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

ChargeDensity : 電荷密度場 コマンド一覧

ChargeDensity	名称
初期化	"INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
初期化	"INITIALIZE:UNIFORM"
時間発展	"UPDATE:TO_ZERO"
時間発展	"SOLVE:BY_ION_CONCENTRATION"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. ChargeDensity : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件の初期化条件を用いて場を初期化
名称	"INITIALIZE:UNIFORM"
機能	複数成分が均一に混合した場を初期生成する
依存パラメータ	UNIFORM.CHARGE_DENSITY

2. ChargeDensity : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:TO_ZERO"
機能	すべての場の値を 0 にする。
名称	"SOLVE:BY_ION_CONCENTRATION"
機能	イオン濃度場より解く $\rho_e = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} C_{\alpha}$
依存している場	Concentration
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	Z or VALENCY
名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する

3. ChargeDensity : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
I or I.CONSTANT_VALUE	境界の電荷密度を一定値に初期化
D or D.CONSTANT_VALUE	境界の電荷密度を一定値に固定 (デリクレ条件)

4. ChargeDensity : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

5. ChargeDensity : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

DielectricConst : 誘電率場 コマンド一覧

DielectricConst	名称
時間発展	"UPDATE:TO_CONSTANT"
時間発展	"SOLVE:BY_CONCENTRATION"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. DielectricConst : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:TO_CONSTANT"
機能	DIELECTRIC_CONSTANT の成分 0 の値で一定にする。
依存パラメータ	DIELECTRIC_CONSTANT
名称	"SOLVE:BY_CONCENTRATION"
機能	イオン濃度場より解く $\epsilon = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} C_{\alpha}$
依存している場	Concentration
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIELECTRIC_CONSTANT
名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する

2. DielectricConst : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D or D.CONSTANT_VALUE	領域の誘電率を一定値に固定 (デリクレ条件)

3. DielectricConst : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

4. DielectricConst : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

Viscosity : 粘度場 コマンド一覧

Viscosity	名称
時間発展	"UPDATE:TO_CONSTANT"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT:AVS"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. Viscosity : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:TO_CONSTANT"
機能	VISCOSITY の成分 0 のデータで一定値にする。
依存パラメータ	VISCOSITY
名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する

2. Viscosity : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D or D_CONSTANT_VALUE	領域の粘度を一定値に固定 (デリクレ条件)

3. Viscosity : 解析関数 詳細

名称	"OUTPUT:AVS"
機能	AVS 形式で場のデータ出力する

4. Viscosity : 評価関数 詳細

名称	"EVALUATE:TRUE"
機能	常に真値を返す評価関数

Obstacle : 内部構造 (障害物) 場 コマンド一覧

Obstacle	名称
初期化	"INITIALIZE:TO_ZERO"
時間発展	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
評価関数	"EVALUATE:TRUE"

1. Obstacle : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:TO_ZERO"
機能	すべての節点での場の値を 0 に初期化する

2. Obstacle : 時間発展関数 詳細

名称	"UPDATE:PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する

3. Obstacle : 部分領域 (境界) 条件 詳細

条件の名前	意味と条件のパラメータ
D or D.CONSTANT_VALUE	一定値に固定 (デリクレ条件)