

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6分冊 -

ゲルダイナミクスシミュレータ

Geldyn

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

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 GelDyn とは？	1
第 2 章 GelDyn の理論背景	3
2.1 高分子ゲルのダイナミクス	3
2.1.1 概要	3
2.1.2 パラメータの記号と変数定義	3
2.1.3 方程式の無次元化と無次元化された変数とパラメータ	4
2.1.4 高分子ネットワーク共同拡散モデル	5
2.1.5 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデル	5
2.2 高分子ゲルの自由エネルギーと応力テンソル	6
2.3 Geldyn の各場の境界条件の定式化	7
2.3.1 境界条件の概要	7
2.3.2 圧力場 p に対する境界条件	7
2.3.3 変位場 \mathbf{u} (高分子速度場 \mathbf{v}_p) に対する境界条件	8
2.4 高分子ゲルの大変形ダイナミクスに対するシミュレーション法	8
2.4.1 高分子ネットワーク共同拡散モデルの陽解法	9
2.4.2 高分子ネットワーク共同拡散モデルの陰解法	9
2.4.3 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルの陽解法	10
2.4.4 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルの陰解法	11
第 3 章 GelDyn の応用操作	13
3.1 Geldyn の高分子ゲルの膨潤問題への応用操作	13
3.1.1 応用例 1: 2 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象	13
3.1.2 応用例 2: 3 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象 (陰的ソルバと陽的ソルバ)	14
3.1.3 応用例 3: 2 次元板状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)	16
3.1.4 応用例 4: 3 次元の長い棒状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)	18
3.1.5 応用例 5: 3 次元の広い板状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)	19
第 4 章 GelDyn リファレンス	21
4.1 Geldyn の入力パラメータ	21
4.1.1 Geldyn のソルバ制御パラメータ一覧	21
4.1.2 Geldyn の物理パラメータ一覧	21
4.1.3 Geldyn の解析結果データ一覧	23
4.2 Geldyn の場とコマンド	23
4.2.1 Geldyn の利用可能な場の一覧	23
4.2.2 Geldyn の場のコマンド一覧	23
References	33

目 次

3.1 Geldyn 応用例 1 : 2 次元板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象	14
3.2 Geldyn 応用例 2 : 3 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象	16
3.3 Geldyn 応用例 3 : 2 次元板状ゲルの自由膨潤	18
3.4 Geldyn 応用例 4 : 3 次元の長い棒状ゲルの自由膨潤	19
3.5 Geldyn 応用例 5 : 3 次元の広い板状ゲルの自由膨潤	20

第1章 GelDyn とは？

高分子ゲル大変形動力学シミュレータ **GelDyn** は、温度や圧力などの変化に伴う刺激応答、重力などの体積力の印加、表面力の印加に伴う、高分子ゲルや弾性体の大変形を扱う有限要素法 (FEM) シミュレータであり、以下のような仕様となっている。

1. 解析対象

- 弾性体の変形ダイナミクス。
- 高分子ゲルの膨潤・収縮と変形。
- 溶媒透過壁および溶媒非透過壁を持つ高分子ゲル内部および表面での溶媒の流動拡散。
- 2次元と3次元の両者をサポート。

2. ダイナミクス

- 準静的な弾性体の変形ダイナミクス。
- 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデル。
- 高分子ネットワーク共同拡散モデル。(為比較)

3. シミュレーションスキーム

2次元三角形要素および3次元四面体要素を用いた線型補完による有限要素法 (FEM)。

- ミニマイザを用いた陽的な時間発展。(陽的ソルバ)
- 行列 (線型) ソルバを用いた陰的な時間発展。(陰的ソルバ)

4. ソルバ

- 陽的応力拡散カップリングソルバ (2次元および3次元系)
- 陽的高分子ネットワーク共同拡散ソルバ (2次元および3次元系)
- 陰的応力拡散カップリングソルバ (3次元系)
- 陰的高分子ネットワーク共同拡散ソルバ (3次元系)
- 弾性体変形ダイナミクスソルバ (3次元系)

5. 高分子ゲルのデザイン

- 形状のデザイン
- モルフォロジーのデザイン ... 高分子濃度分布, χ -パラメータ, 弾性率分布 (架橋点密度分布), カウンターイオン濃度分布

6. 刺激応答

- 温度変化
- χ -パラメータの変化

- 浸透壁での溶媒の圧力変化
- 体積力 (重力) や表面印加力の変化

7. 境界条件

- 溶媒 (水) の圧力
 - － 浸透壁 (デリクレ条件)
 - － 不浸透壁 (ノイマン条件)
- 高分子ネットワークの変位 (速度)
 - － 壁の固定または定速での壁の移動 (デリクレ条件)
 - － 壁への表面力の印加 (ノイマン条件)

8. 応用範囲

- 使い捨てオムツ (超吸収性高分子)
- 温度感受性ゲル
- 薬剤放出制御 (DDS)
- アクチュエータ、センサー

第2章 GelDynの理論背景

2.1 高分子ゲルのダイナミクス

2.1.1 概要

高分子ゲルは液体で膨潤した架橋した高分子ネットワークであり、ほとんどの組成は液体であるが、せん断弾性率を持つために、液体と固体の両方の性質を持つ。高分子ゲルのダイナミクスは、高分子ネットワーク共同拡散モデルで記述されてきた。[?, 1] 高分子ネットワーク共同拡散モデルは、球状ゲルなどの一軸方向の膨潤過程をよく再現するが、二軸や三軸方向の膨潤過程や、収縮過程における表面でのスキン層の生成や収縮の停滞現象などの非線型現象を再現しない。

最近、二流体モデルを基礎とする幾つかのモデル [2] がゲルのダイナミクスとして提案されている。[2, 3] ここで、我々はゲルの大変形ダイナミクスのシミュレーションスキームを構築し、高分子ネットワークのストレスと溶媒の拡散の動的結合を考慮した、ゲルの応力拡散カップリングモデルに基づくゲルダイナミクスシミュレータを開発した。[4] 我々はまた、比較のために高分子ネットワーク共同拡散モデルに基づくゲルシミュレータも開発した。

2.1.2 パラメータの記号と変数定義

Geldyn シミュレータの解説で用いる、パラメータと変数の記述は以下の通りである。

パラメータの記述	パラメータの意味
d	系の次元 (2 or 3)
v_1	モノマーの体積 (ex. 標準 NIPA ゲルについて $v_1 = 3.0 \times 10^{-29} m^3$)
$k_B T$	1 粒子あたりの熱エネルギー ($1 k_B T = 4.12 \times 10^{-21}$ J at $T = 298K(25^\circ C)$)
η_s	溶媒の粘度 (水の場合 $= 0.89 \times 10^{-3}$ Pa \cdot sec $= 0.89 \times 10^{-2}$ Poise)
ν	指数 (1/2 for <i>theta</i> 溶媒 and 3/5 for 良溶媒)
ξ_b	ゲルのブロッブサイズ
ρ_s	純溶媒の質量密度
ρ_p	純高分子の質量密度
g	重力加速度
B	架橋点の並進エントロピーによる弾性エネルギーの大きさ
変数の記述	変数の意味
\mathbf{x}	高分子の物質点の座標
\mathbf{x}_0	基準座標系における高分子の物質点の座標
$\mathbf{u}(\mathbf{x})$	高分子の物質点の変位
$\phi(\mathbf{x})$	高分子の体積分率
$\phi_0(\mathbf{x})$	基準座標系における高分子の体積分率 (標準 NIPA で 0.07)
$\mathbf{v}_s(\mathbf{x})$	溶媒の速度
$\mathbf{v}_p(\mathbf{x})$	高分子の速度 ($\equiv \dot{\mathbf{u}}$)
$p(\mathbf{x})$	溶媒の圧力
$F\{\mathbf{x}\}$	高分子ゲルの自由エネルギー
$\sigma_{ij}(\mathbf{x})$	高分子ネットワークのコーシー応力テンソル
$W_{ij}(\mathbf{x})$	高分子ネットワークのフィンガー歪みテンソル
$\rho(\mathbf{x})$	高分子ゲルの質量密度 ($\equiv \rho_p \phi + \rho_s (1 - \phi)$)
$\mathbf{J}(\mathbf{x})$	溶媒流束
$\chi(\mathbf{x})$	溶媒と高分子間の相互作用パラメータ
$\nu_0(\mathbf{x})$	基準座標系における架橋点数密度
$\nu_{i0}(\mathbf{x})$	基準座標系におけるカウンターイオン数密度
$\zeta(\phi)$	溶媒と高分子間の摩擦係数
$K(\mathbf{x})$	ゲルの等方的なバルク弾性率
$\mu(\mathbf{x})$	ゲルの等方的なせん断弾性率

2.1.3 方程式の無次元化と無次元化された変数とパラメータ

ここでは、Geldyn で用いる変数とパラメータの無次元化について述べる。以下では、MKSA 単位系を用いる。

物理量の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
長さ x	l	システムサイズ (ex. $= 1.0mm = 1.0 \times 10^{-3}m$)
架橋点数密度 ν_0	v_1	0.036 (ex. 標準 NIPA で $\nu_0 = 1.2 \times 10^{27}m^{-3}$)
イオン数密度 ν_{i0}	v_1	0.072 (ex. 標準 NIPA で $\nu_{i0} = 2.4 \times 10^{27}m^{-3}$)
エネルギー密度、応力	$l^d k_B T / v_1$	
摩擦係数 $\zeta(\phi)$	$\zeta_0 \equiv \zeta(\phi_0)$	$\zeta/\zeta_0 \approx (\phi/\phi_0)^{2\nu/(3\nu-1)}$, ($\zeta \approx 6\pi\eta_s \xi_b^{-2} \propto \phi^{2\nu/(3\nu-1)}$)
時間 t	τ	$\tau = \zeta_0 l^d (2-d) v_1 / k_B T$
速度 v	v^*	$v^* = l/\tau$
圧力 p	p^*	$p^* = \eta_w/\tau$
質量密度 ρ	ρ^*	(ex. 水の質量密度 $\rho = 1.0g/cm^3 = 1.0 \times 10^3 kg/m^3$)

2.1.4 高分子ネットワーク共同拡散モデル

高分子ゲルのダイナミクスは、高分子溶液のダイナミクスの視点より議論されるべきである。しかし、高分子ゲルは化学結合 (化学ゲル) や、水素結合や疎水性相互作用のような相互作用 (物理ゲル) により弾性的性質を持つことから、高分子ゲルのダイナミクスは弾性論 [5] で記述される。ここでは、高分子ゲルネットワーク共同拡散理論 (田中-Fillmore 理論) について簡単に解説する。[1]

ゲルの弾性ネットワークの運動方程式は、以下のように書ける。

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} - \zeta \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \quad (2.1)$$

ここで、右辺の第1項は弾性力、第2項は高分子ネットワークと溶媒の摩擦力の寄与を表す。ほとんどの場合、慣性力項は他の項よりもずっと小さく、高分子ゲルネットワーク共同拡散モデルの運動方程式は以下のように書ける。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \zeta^{-1} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

2.1.5 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデル

高分子ゲルのダイナミクスは、高分子溶液のダイナミクスの視点より議論される必要がある。近年、2流体モデルを基礎とし、高分子ネットワークの応力と溶媒の拡散の動的結合 [2] を考慮した幾つかのモデルが高分子ゲルのダイナミクスとして提案されている。[2, 3]

ここでは、2流体モデルを基礎とする高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルについて解説する。高分子ゲルの運動方程式は以下のように書ける。

$$\zeta(\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_s) = -\phi \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho_p \phi \mathbf{g} \quad (2.3)$$

$$\zeta(\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_p) = -(1-\phi) \nabla p + \rho_s (1-\phi) \mathbf{g} \quad (2.4)$$

ここで、高分子ゲルの非圧縮条件は以下のように書ける。

$$\nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_p + (1-\phi) \mathbf{v}_s) = 0. \quad (2.5)$$

eq.(2.3) と eq.(2.4) は、溶媒の圧力と高分子ネットワークの応力との力の釣合式が得られる。

$$\nabla p = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (2.6)$$

ここで、 ρ は高分子ゲルの平均質量密度であり、以下のように定義される。

$$\rho \equiv \rho_p \phi + \rho_s(1 - \phi)$$

2.2 高分子ゲルの自由エネルギーと応力テンソル

高分子ゲルの一般的な自由エネルギーは、以下のように3つの項を含む。

$$F = F_{mix} + F_{ion} + F_{el} \quad (2.7)$$

ここで、 F_{mix} は溶媒と高分子との混合自由エネルギーである。

$$F_{mix} = \int_V d^d x f_m(\phi) \quad (2.8)$$

混合自由エネルギー $f_m(\phi)$ の具体的な表式として、Flory-Huggins 型と Ginzburg-Landau 型の2つを用意している。

- Flory-Huggins 型

$$f_m = (1 - \phi) \ln(1 - \phi) + \chi \phi(1 - \phi) \quad (2.9)$$

- Ginzburg-Landau 型

$$f_m = \left(\frac{1}{2} - \chi\right) \phi^2 + \frac{1}{6} \phi^3 + \frac{1}{12} \phi^4 \quad (2.10)$$

F_{ion} は高分子電解質ゲルの並進エントロピーであり、 ν_{i0} は基準座標系でのカウンターイオンの数密度を表す。

$$F_{ion} = \int_V d^d x \nu_{i0} \left(\frac{\phi}{\phi_0}\right) \ln \left(\frac{\phi}{\phi_0}\right) \quad (2.11)$$

F_{el} は任意の高分子ネットワークの変形に対する弾性エネルギーの項であり、以下のように書ける。

$$F_{el} = \int_{V_0} d^d x_0 \frac{\nu_0}{2} (\text{tr} W - 2B \ln \frac{\phi}{\phi_0}) \quad (2.12)$$

$$= \int_V d^d x \frac{\phi}{\phi_0} \frac{\nu_0}{2} (\text{tr} W - 2B \ln \frac{\phi}{\phi_0}) \quad (2.13)$$

$$= \int_V d^d x \frac{\nu}{2} (\text{tr} W - 2B \ln \frac{\phi}{\phi_0}) \quad (2.14)$$

ここで、 W_{ij} は以下のように定義されるフィンガー歪みテンソルである。

$$W_{ij} = \frac{dx_i}{dx_{0k}} \cdot \frac{dx_j}{dx_{0k}} \quad (2.15)$$

ここで、 \mathbf{x}_0 は基準座標系での高分子ゲルの物質点のカルテシアン座標を、 ν は架橋点数密度を、 ν_0 は基準座標系での架橋点数密度を、 B は架橋点の並進エントロピーに起因する弾性エネルギーの大きさを、 ϕ は高分子の体積分率を、 ϕ_0 は基準座標系での高分子の体積分率を表す。高分子の体積分率はフィンガー歪みテンソルと関連しており、 $\phi = \phi_0 \det \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}}$ と書ける。

ゲルの無限小変形 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{u}$ に対する自由エネルギーの変化は、高分子ネットワークのコーシー応力 $\boldsymbol{\sigma}$ を用いて以下のように書ける。

$$\delta F = \int d^{d-1} x n_j (\sigma_{ij}) u_i - \int d^d x \nabla_j \sigma_{ij} u_i = \int d^d x \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.16)$$

よって、高分子ネットワークのコーシー応力テンソル σ は、以下のように書ける。

$$-\sigma_{ij} = \left[\phi f'_m - f_m \right] \delta_{ij} - \nu_0 \frac{\phi}{\phi_0} (W_{ij} - (B + \frac{\nu_{i0}}{\nu_0}) \delta_{ij}) \quad (2.17)$$

陰的ソルバで必要となるゲルの等方的なバルク弾性率 K とせん断弾性率 μ は、以下のように書ける。

$$K = \phi^2 f''_m + \nu_0 \left[\left(\frac{2}{d} - 1 \right) \left(\frac{\phi}{\phi_0} \right)^{1-2/d} - \left(B + \frac{\nu_{i0}}{\nu_0} \right) \frac{\phi}{\phi_0} \right] \quad (2.18)$$

$$\mu = \nu_0 \left(\frac{\phi}{\phi_0} \right)^{1-2/d} \quad (2.19)$$

2.3 Geldyn の各場の境界条件の定式化

Geldyn で場に与えることの出来る境界 (部分領域) 条件は、次の通りである。

2.3.1 境界条件の概要

- 周期境界条件：

メッシュタイプが、UNSTRUCTURED_RECT の場合に設定可能。Geldyn では、周期境界条件はメッシュ構造の幾何学的境界条件に組込まれているためすべての場の量に自動的に適用される。

- デリクレ境界条件：

部分領域で一定値に固定する条件。

陰的ソルバでは、デリクレ境界条件に対しては、ペナルティー数法を用いている。[6]

- ノイマン境界条件：

境界に垂直方向の物理量の勾配を与える。境界に垂直方向の勾配をゼロとする場合 $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$ は、有限要素法 (FEM) では自然境界条件で満されるので、現わに指定する必要はない。

2.3.2 圧力場 p に対する境界条件

圧力場 p に与えることの出来る境界条件は以下の通り。

- 周期境界条件

メッシュタイプが、UNSTRUCTURED_RECT の場合に設定可能。

例えば、X 方向に周期境界の場合には、以下の式が境界条件として自動的に与えられる。

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

- 透過壁 (デリクレ境界条件)

透過壁に壁での溶媒の圧力 p_0 を加える。

$$p(\mathbf{x})|_{Boundary} = p_0$$

圧力場にこのようなデリクレ境界条件を加えるには、条件の名前に "D_PERMEABLE" を入力し、条件の値の先頭データに壁での溶媒の圧力の値を入力する。

- **非透過壁 (ノイマン境界条件)**

非透過壁での溶媒の圧力勾配を与える。圧力場にこのようなノイマン境界条件を加えるには、条件の名前に“N”を入力し、条件の値の先頭データに壁での溶媒の圧力勾配の値を入力する。

非透過壁については、条件の名前に“N IMPERMEABLE”を入力し、

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

を与えることが出来る。しかし、有限要素法の自然境界条件により特に指定の必要はなくとも満たされる。(逆に圧力場への境界条件が無い場合には非透過壁とみなされる。)

2.3.3 変位場 \mathbf{u} (高分子速度場 \mathbf{v}_p) に対する境界条件

変位場 \mathbf{u} (高分子速度場 \mathbf{v}_p) に与えることの出来る境界条件は以下の通り。

- **周期境界条件**

メッシュタイプが、UNSTRUCTURED_RECT の場合に設定可能。

例えば、X 方向に周期境界の場合には、以下の式が境界条件として自動的に与えられる。

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

- **境界面の固定や一定速度での移動 (デリクレ境界条件)**

境界面を固定したり、一定速度 \mathbf{v}_{p0} で移動させる条件は、以下のデリクレ境界条件で記述できる。

$$\mathbf{v}_p(x, y, z)|_{wall} = \mathbf{v}_{p0}$$

境界での速度を設定するには、条件の名前に“D.VX”(X 成分を指定)、“D.VY”(Y 成分を指定)、または、“D.VZ”(Z 成分を指定)のいずれかを入力し、条件の値の先頭データに壁の移動速度の値を入力する。或いは、条件の名前に“D.VEC”を入力し、条件の値の配列データに先頭から壁の移動速度の X,Y,Z 成分の値を入力する。

- **表面力の印加 (ノイマン境界条件)**

境界面に表面力を印加することが出来る。高分子ゲルでは、表面印加力 \mathbf{T} 、高分子のネットワーク応力 σ 、溶媒の圧力 p に以下の関係が成り立つ。

$$\mathbf{n} \cdot (\sigma - p\mathbf{I})|_{Boundary} = \mathbf{T}$$

境界への表面力の印加を設定するには、条件の名前に“N.LOAD”を入力し、条件の値の配列データに先頭から印加力ベクトルの X,Y,Z 成分の値を入力する。または、常に表面の法線方向に力を印加する場合には、条件の名前に“N.LOAD.NORMAL”を入力し、条件の値の先頭データに印加力ベクトルの大きさの値を入力する。ここで、正值は外向きの表面力を、負値は内向きの表面力を表す。

2.4 高分子ゲルの大変形ダイナミクスに対するシミュレーション法

高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルでの時間発展に対して以下の2つのシミュレーション法が考えられる。

1. 溶媒の拡散と弾性変形の時間スケールの分離 [3]
→ 応力拡散カップリングモデルの陽的ソルバ
2. 2 流体モデルに基づくレイリー関数 (エネルギー散逸関数) をオンザガーのエネルギー散逸最小の原理により最小化 [2, ?]
→ 応力拡散カップリングモデルの陰的ソルバ

2.4.1 高分子ネットワーク共同拡散モデルの陽解法

高分子ゲルネットワーク共同拡散モデルは、eq.(2.2) のように単純な自由エネルギーの緩和ダイナミクスとして記述できる。よって、eq.(2.2) は、次の積分方程式として書き変えることが出来る。

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = -\zeta^{-1} \frac{\delta}{\delta \mathbf{x}} \left[F - \int_V d^d x \rho \mathbf{g} \cdot \delta \mathbf{x} - \int_S d^{d-1} x \mathbf{T} \cdot \delta \mathbf{x} \right] \quad (2.20)$$

eq.(2.7) の自由エネルギーの表式を有限要素法 (FEM) の 4 面体要素 (3D)/3 角形要素 (2D) による線型補完より離散化すると、eq.(2.20) の陽的時間発展は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \dot{x}_i^J &= u_i^J / \delta t \\ &= - \frac{\sum_{e(\ni J)} \left[-\frac{1}{V_e^0} \frac{\delta V_e}{\delta x_i^J} \int_e d^d x_0 (\phi f'_m(\phi) - f_m(\phi)) + \left(\frac{\delta}{\delta x_i^J} \text{tr} \mathbf{W} \right) \sum_{I(\in e)} \frac{\nu_e^I}{2} \int_e d^d x_0 L_I(\mathbf{x}_0) \right]}{\sum_{e(\ni J)} \frac{V_e}{d+1}} \\ &\quad + \frac{\sum_{e(\in V)} \sum_{I(\in e)} \rho^I g_i \int_e d^d x L_I(\mathbf{x}) L_J(\mathbf{x})}{\sum_{e(\ni J)} \frac{V_e}{d+1}} + \frac{\sum_{e(\in S)} \sum_{I(\in e)} T_i^I \int_e d^{d-1} x L_I(\mathbf{x}) L_J(\mathbf{x})}{\sum_{e(\ni J)} \frac{V_e}{d+1}} \end{aligned} \quad (2.21)$$

ここで、 I と J は節点番号を、 V_e は有限要素の体積 (3D) または面積 (2D) を表す。

ここでは、eq.(2.21) を用いて、高分子ネットワーク共同拡散モデルの陽的ソルバを開発した。(応用例 01、02 および 03 を参照。)

2.4.2 高分子ネットワーク共同拡散モデルの陰解法

高分子ゲルネットワーク共同拡散モデル eq.(2.2) に対するレイリー関数は、以下のように書ける。

$$R\{\mathbf{v}_p(t), \mathbf{x}(t)\} = \int_V d^d x \left[\frac{1}{2} \zeta v_p^2 + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \right] - \int_V d^d x \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}_p - \int_S d^{d-1} x \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}_p \quad (2.22)$$

ここで、右辺第 1 項は高分子と溶媒の摩擦によるエネルギー散逸を、右辺第 2 項は自由エネルギーの変化を、右辺第 3 項は体積力 (重力) によるエネルギーの変化を、右辺第 4 項は表面印加力によるエネルギーの変化を表す。 \mathbf{D} は高分子の変形速度テンソルであり、以下のように定義されている。

$$D_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_{pi}}{\partial x_j} + \frac{\partial v_{pj}}{\partial x_i} \right) \quad (2.23)$$

半陰的時間発展の定式化のために、高分子の応力テンソル σ_{ij} を以下のように展開する。

$$\sigma_{ij}(t + \delta t) = \sigma_{ij}(t) + \delta t [2\mu(t) D_{ij} + (K(t) - \frac{2}{d} \mu(t)) D_{ll} \delta_{ij}] \quad (2.24)$$

ここで、 K 、 μ 、 $K - 2/d\mu$ は、各々、時刻 t でのゲルのバルク弾性率、せん断弾性率、ラメ定数を表す。eq.(2.22) と eq.(2.24) より、高分子ネットワーク共同拡散モデルのレイリー関数は、時刻 t から $t + \delta t$ での高分子の変位 \mathbf{u} について以下のように 2 次形式で書ける。

$$R\{\mathbf{u}, \mathbf{x}(t), \delta t\} \delta t = \int_V d^d x \left[\frac{1}{2} \frac{\zeta}{\delta t} \mathbf{u}^2 + \mu(e_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} e_{ll})^2 - \frac{K}{2} e_{ll}^2 \right] - \int_V d^d x (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}) \cdot \mathbf{u} - \int_S d^{d-1} x \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} \quad (2.25)$$

ここで、 e は線型弾性の歪みエネルギーであり、以下のように定義されている。

$$e_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.26)$$

線型方程式のための行列ソルバを用いて、上記の汎関数を最小化することで、 δt 時刻後の変位 \mathbf{u} を解くことが出来る。このように、高分子ネットワーク共同拡散モデルの陰的ソルバを開発した。

(応用例 02 を参照。)

2.4.3 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルの陽解法

ここでは、以下のように、溶媒の拡散と弾性変形の時間スケールの分離により、[3] 2 流体モデル eqs.(2.3, 2.4, 2.5) に基づく応力拡散カップリングモデルを単純化した非線型シミュレーションスキームを構築した。[4] eq.(2.4) より、高分子の速度に対する溶媒の速度は Darcy 則より、溶媒の圧力勾配に比例する。

$$\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_p = -\zeta^{-1}(1 - \phi)\nabla p \quad (2.27)$$

ここで、溶媒の圧力勾配と高分子の応力勾配の力学的釣合により、以下の式が成立する。

$$\nabla_i p = \nabla_j \sigma_{ij} \quad (2.28)$$

高分子に対する溶媒の流束 \mathbf{J} は、次のように記述できる。

$$\begin{aligned} J_i &= (\phi v_{pi} + (1 - \phi)v_{si}) - v_{pi} \\ &= -\zeta^{-1}(1 - \phi)^2 \nabla_j \sigma_{ij} \end{aligned} \quad (2.29)$$

よって、高分子の体積分率の時間発展は、次の連続の式よりオイラー描像により解かれる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi = -\nabla_i L_{ij}(\phi) \nabla_k \sigma_{jk} = \int_V d^d x L(\phi) (\nabla_j \sigma_{ji}) \frac{\delta}{\delta \sigma_{ik}} (\nabla_l \sigma_{kl}) + \int_S d^{d-1} x J_i n_i \quad (2.30)$$

ここで、 $L_{ij}(\phi) = L(\phi)\delta_{ij}$ は、等方的なオンザガー係数である。

ゲルにおいては、弾性的な力の釣合は弾性波が系を伝わる速度で瞬時に成立し、一方、溶媒の拡散は非常にゆっくりであるので、各々の時刻での高分子ネットワークの変形は、ゲル各点での局所的な高分子体積分率を保ったまま弾性的な力の釣合いを解くことにより得られる。

この弾性的な釣合いは、ラグランジュ描像により物質点を移動し、以下の高分子体積分率の固定条件を付加した弾性自由エネルギーを最小化することにより解くことが出来る。

$$\frac{D}{Dt'} x_i(\mathbf{x}_0, t') = -\zeta^{-1} \frac{\delta F'}{\delta x_i} \quad (2.31)$$

$$F'(\mathbf{x}) = \int_V d^d x' \left[\alpha(\phi' - \phi)^2 + \frac{\nu_0}{2} \frac{\phi'}{\phi_0} \text{tr} W \right] \quad (2.32)$$

ここで、 ϕ', t' は弾性安定を解く過程での仮想的な高分子体積分率と仮想的な時間を表す。右辺第 1 項は大きい係数 α に対して、局所的な高分子体積分率 $\phi(\mathbf{x}_0, t)$ を保存するための制約項を表す。ここでは、eqs.(2.30, 2.31, 2.29) についての陽的な時間発展ソルバを FEM による線型補完を用いて構築した。FEM による eq.(2.31) の定式化は、eq.(2.21) と同様な式により扱える。eq.(2.30) の FEM 定式化は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \dot{\phi}^J \sum_{e(\ni J)} \frac{V_e}{d+1} &= \sum_{e(\ni J)} \sum_{I(\in e)} \sum_{i,j} (\nabla_j L_I) (\nabla_i L_J) \sigma_{ij}^I \sum_{K(\in e)} L(\phi^K) \int_e d^d x L_K \\ &+ \sum_{e(\in S)} \sum_{I(\in e)} \sum_i J_i^I n_i \int_S d^{d-1} x L_I \end{aligned} \quad (2.33)$$

ここで、 I と J は節点番号を、 V_e は有限要素の体積 (3D) または面積 (2D) を表す。

上式を用いて、高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルの陽的ソルバを開発した。

(応用例 03 を参照。)

2.4.4 高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルの陰解法

ここでは、

高分子ゲルの応力拡散カップリングモデル eqs.(2.3, 2.4, 2.5) のレイリー関数 [2, ?] を最小化することにより、高分子ゲルの速度と溶媒の圧力を解く、応力拡散カップリングモデルの陰的ソルバを開発した。

$\mathbf{v}_p \cdot \text{eq.}(2.3) + \mathbf{v}_s \cdot \text{eq.}(2.4)$ により、高分子ゲルの応力拡散カップリングモデルのレイリー関数は、以下のよう書ける。

$$\begin{aligned} R\{\dot{p}(\mathbf{x}(t)), \mathbf{v}_p(t), p(\mathbf{x}(t)), \mathbf{x}(t)\} &= \int_V d^d x \left[\frac{1}{2} \zeta (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_s)^2 - p \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_p + (1 - \phi) \mathbf{v}_s) + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \right] \\ &- \int_V d^d x (\rho_p \phi \mathbf{v}_p + \rho_s (1 - \phi) \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{g} \\ &+ \int_S d^{d-1} x [p(\phi \mathbf{v}_p + (1 - \phi) \mathbf{v}_s) \cdot \mathbf{n} - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}_p] \end{aligned} \quad (2.34)$$

ここで、右辺第1項は高分子と溶媒の摩擦によるエネルギー散逸を、右辺第2項は非圧縮条件を、右辺第3項は自由エネルギーの変化を表す。 \mathbf{D} は高分子の変形速度テンソルであり、eq.(2.23) のように定義されている。

高分子の応力と溶媒の圧力と表面印加力の関係を表す境界条件

$$(\boldsymbol{\sigma} - p\mathbf{I}) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{T}$$

を用いて、eq.(2.34) は以下のように書き変えることができる。

$$\begin{aligned} R\{\dot{p}(\mathbf{x}(t)), \mathbf{v}_p(t), p(\mathbf{x}(t)), \mathbf{x}(t)\} &= \int_V d^d x \left[-\frac{1}{2\zeta} (1 - \phi)^2 (\nabla p - \rho_s \mathbf{g})^2 - p \nabla \cdot \mathbf{v}_p + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \right] \\ &- \int_V d^d x (\rho_p \phi + \rho_s (1 - \phi)) \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}_p \\ &- \int_S d^{d-1} x \mathbf{T} \cdot \mathbf{v}_p \end{aligned} \quad (2.35)$$

半陰的時間発展の定式化のために、高分子の応力テンソル σ_{ij} を以下のように展開する。

$$\sigma_{ij}(t + \delta t) = \sigma_{ij}(t) + \delta t [2\mu(t) D_{ij} + (K(t) - \frac{2}{d}\mu(t)) D_{ll} \delta_{ij}] \quad (2.36)$$

ここで、 K 、 μ 、 $K - 2/d\mu$ は各々、時刻 t でのバルク弾性率、せん断弾性率、ラメ定数を表す。よって、半陰的応力拡散カップリングモデルのレイリー関数は時刻 t から $t + \delta t$ での高分子の変位 \mathbf{u} と時刻 $t + \delta t$ での溶媒の圧力 p について以下のように2次形式で書ける。

$$\begin{aligned} R\{\dot{p}(\mathbf{x}(t)), \mathbf{v}_p(t), p(\mathbf{x}(t)), \mathbf{x}(t)\} &= \int_V d^d x \left[-\frac{1}{2\zeta} (1 - \phi)^2 (\nabla p)^2 + \frac{1}{\zeta} (1 - \phi)^2 (\nabla p) \cdot (\rho_s \mathbf{g}) - p \nabla \cdot \mathbf{u} / \delta t + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{e} / \delta t \right] \\ &+ \int_V d^d x \left\{ \mu (e_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} e_{ll})^2 - \frac{K}{2} e_{ll}^2 \right\} / \delta t \\ &- \int_V d^d x (\rho_p \phi + \rho_s (1 - \phi)) \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} / \delta t \\ &- \int_S d^{d-1} x \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} / \delta t \end{aligned} \quad (2.37)$$

ここで、 \mathbf{e} は線型弾性の歪みエネルギーであり、eq.(2.26) のように定義されている。

線型方程式のための行列ソルバを用いて、上記の汎関数を最小化することで、 δt 時刻後の変位 \mathbf{u} (ゲルの形状) と溶媒の圧力 p を解くことが出来る。このように、応力拡散カップリングモデルの陰的ソルバを開発した。(応用例 04 と 05 を参照。)

第3章 Geldyn の応用操作

3.1 Geldyn の高分子ゲルの膨潤問題への応用操作

この章では、高分子ゲルダイナミクスシミュレータ - Geldyn - の応用操作を解説する。以下で述べる応用例についての入出力 UDF ファイルは、MUFFIN ディレクトリ下の MUFFIN/sample/Geldyn 以下に、各々の問題について MUFFIN/sample/Geldyn/EX01, EX02, ... として入っている。

3.1.1 応用例 1: 2 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象

入力 UDF ファイル:

MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX01_in.udf

入力 UDF 解説:

ここでは、理論編で解説した無次元化パラメータを用いてシミュレーションを行う。

- メッシュパラメータ ... 形状: UNSTRUCTURED_RECT, 次元: 2D, サイズ: 64x8, 分割数: 64x16, X 方向周期
- 膨潤のためのパラメータ

パラメータの名前	値
NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION	$1.0e - 2$
UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY_IN_REFERENCE_STATE	0.025
UNIFORM_VOLUME_FRACTION_IN_REFERENCE_STATE	0.5
TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY	FLORY_HUGGINS
UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_INITIAL_STATE	-20.0

- 境界条件

底辺 “BOUNDARY_VERTEX_YMIN” の固定。

部分領域	場	条件	値
BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Displacement	D_VEC	0.0, 0.0

- 必要な場

Chi, Concentration, DerivedFreeEnergy, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, Volume-Fraction

- ダイナミクスと手法... 陽的高分子ネットワーク共同拡散ソルバ

初期化手続き”INITIALIZE:COLLECTIVE_DIFFUSION_OF_GEL_NETWORKS” の定義は以下の通り。

場	初期化コマンド
Chi	INITIALIZE:CHI_PARAMETER
Concentration	INITIALIZE:ION_CONCENTRATION
Moduli	INITIALIZE:MODULI
VolumeFraction	INITIALIZE:VOLUME_FRACTION
FingerTensor	INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Displacement	MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM

1 ステップ時間発展の手続き”EVOLVE:COLLECTIVE_DIFFUSION_OF_GEL_NETWORKS” の定義は以下の通り。

場	時間発展コマンド
FingerTensor	SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR
VolumeFraction	SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
DerivedFreeEnergy	SOLVE:DERIVED_TOTAL_ENERGY
Displacement	MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION

計算結果

図 3.1.1 に、GOURMET で描画した高分子体積分率場のコンターを示す。左図から時刻 $t = 0.0, 120.0, 140.0, 160.0$ での膨潤の様子である。この描画には、アクション “SHOW_SWELLING_RATIO” を用いている。

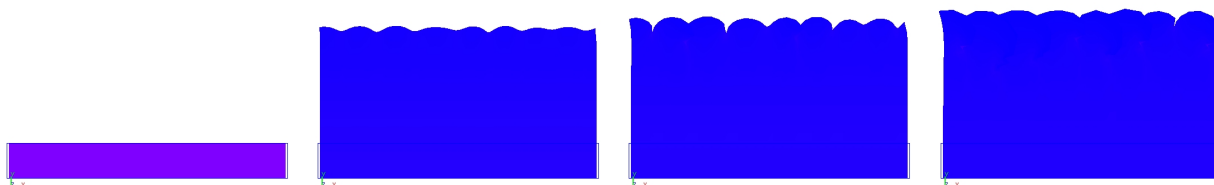


図 3.1: Geldyn 応用例 1 : 2 次元板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象

3.1.2 応用例 2: 3 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象 (陰的ソルバと陽的ソルバ)

入力 UDF ファイル:

陽的ソルバについて MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX02-1_in.udf.

陰的ソルバについて MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX02-2_in.udf.

入力 UDF 解説:

ここでは、理論編で解説した無次元化パラメータを用いてシミュレーションを行う。

- メッシュパラメータ ...形状 : UNSTRUCTURED_RECT, 次元 : 3D, サイズ : 16x16x8, 分割数 : 16x16x4, XY 方向周期

- 膨潤のためのパラメータ

パラメータの名前	値
NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION	$1.0e - 2$
UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY_IN_REFERENCE_STATE	0.025
UNIFORM_VOLUME_FRACTION_IN_REFERENCE_STATE	0.5
TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY	FLORY_HUGGINS
UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_INITIAL_STATE	-20.0

- 境界条件

陽的ソルバに対して、底面 “BOUNDARY_VERTEX_ZMIN” を固定する条件設定。

部分領域	場	条件	値
BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Displacement	D_VEC	0.0, 0.0, 0.0

陰的ソルバに対して、底面 “BOUNDARY_VERTEX_ZMIN” を固定し、上面 “BOUNDARY_VERTEX_ZMAX” を溶媒透過壁とする条件設定。

部分領域	場	条件	値
BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Displacement	D_VEC	0.0, 0.0, 0.0
BOUNDARY_VERTEX_ZMAX	Pressure	D_PERMEABLE	0.0

- 必要な場

陽的ソルバに対して、Chi, Concentration, DerivedFreeEnergy, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, VolumeFraction

陰的ソルバに対して、Chi, Concentration, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, VolumeFraction, PolymerStress, VolumeForce, Pressure

- ダイナミクスと手法

... 「陽的高分子ネットワーク共同拡散ソルバ」 については、応用例 1 と同じ。

... 「陰的高分子ネットワーク共同拡散ソルバ」 について以下に解説。

初期化手続き”INITIALIZE:COLLECTIVE_DIFFUSION_OF_GEL_NETWORKS” の定義は以下の通り。

場	初期化コマンド
Chi	INITIALIZE:CHI_PARAMETER
Concentration	INITIALIZE:ION_CONCENTRATION
Moduli	INITIALIZE:MODULI
VolumeFraction	INITIALIZE:VOLUME_FRACTION
FingerTensor	INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Displacement	MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM

1 ステップ時間発展の手続き”EVOLVE:COLLECTIVE_DIFFUSION_OF_GEL_NETWORKS:IMPLICIT” の定義は以下の通り。

場	時間発展コマンド
FingerTensor	SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR
VolumeFraction	SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Moduli	SOLVE:MODULI_OF_GELS
PolymerStress	SOLVE:POLYMER_STRESS
PolymerStress	APPLY:BOUNDARY_CONDITION
VolumeForce	SOLVE:VOLUME_FORCE_BY_STRESS_AND_GRAVITY
Displacement	MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION:LINEAR_ELASTICITY

計算結果

図 3.1.2 に GOURMET で描画した高分子体積分率場のコンターを示す。左図から時刻 $t = 0.0, 140.0, 180.0$ での膨潤の様子である。これらの描画には、アクション “SHOW_SWELLING_RATIO” を用いている。

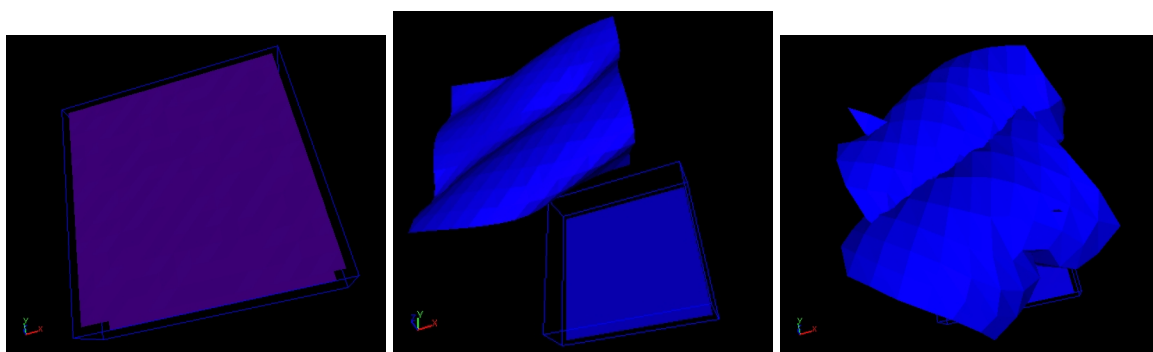


図 3.2: Geldyn 応用例 2 : 3 次元の板状ゲルの膨潤と表面の折れ畳み現象

3.1.3 応用例 3: 2 次元板状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)

入力 UDF ファイル:

高分子ネットワーク共同拡散ソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX03-1_in.udf.

応力拡散カップリングソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX03-2_in.udf.

入力 UDF 解説:

ここでは、理論編で解説した無次元化パラメータを用いてシミュレーションを行う。

- メッシュパラメータ ... 形状 : UNSTRUCTURED_RECT, 次元 : 2D, サイズ : 128x16, 分割数 : 128x16.
- 膨潤のためのパラメータ

パラメータの名前	値
NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION	$1.0e - 3$
UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY_IN_REFERENCE_STATE	0.025
UNIFORM_VOLUME_FRACTION_IN_REFERENCE_STATE	0.9
TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY	GINZBURG LANDAU
UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_INITIAL_STATE	0.6

- 必要な場

高分子ネットワーク共同拡散ソルバに対して、

Chi, Concentration, DerivedFreeEnergy, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, Volume-Fraction.

応力拡散カップリングソルバに対して、

Chi, Concentration, DerivedFreeEnergy, DerivedIncompressibility, Displacement, Flux, FingerTensor, FreeEnergy, Incompressibility, Moduli, VolumeFraction, PolymerStress, Pressure.

- ダイナミクスと手法

... 「高分子ネットワーク共同拡散ソルバ」については、応用例 1 と同じ。

... 「応力拡散カップリングソルバ」について以下に解説。

初期化手続き”INITIALIZE:STRESS_DIFFUSION_COUPLING_OF_GELS” の定義は以下の通り。

場	初期化コマンド
Chi	INITIALIZE:CHI_PARAMETER
Concentration	INITIALIZE:ION_CONCENTRATION
Moduli	INITIALIZE:MODULI
VolumeFraction	INITIALIZE:VOLUME_FRACTION
FingerTensor	INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Displacement	INITIALIZE:MINIMIZER_FOR_LOCAL_EQUILIBRIUM
Displacement	MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM

1 ステップ時間発展の手続き”EVOLVE:STRESS_DIFFUSION_COUPLING_OF_GELS” の定義は以下の通り。

場	時間発展コマンド
FingerTensor	SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR
VolumeFraction	SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
PolymerStress	SOLVE:POLYMER_STRESS
Flux	SOLVE:BY_PRESSURE_COUPLING_WITH_STRESS_AND_GRAVITY
VolumeFraction	SOLVE:BY_SOLVENT_FLUX
Displacement	MOVE:LOCAL_EQUILIBRIUM_WITH_INCOMPRESSIBILITY

計算結果

図 3.1.3 に GOURMET で描画した高分子体積分率場のコンターを示す。左図から時刻 $t = 0.0, 2000.0$ での膨潤の様子である。これらの描画には、アクション “SHOW_SWELLING_RATIO” を用いている。

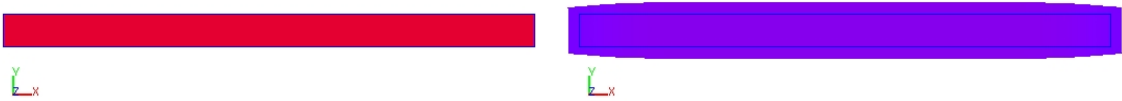


図 3.3: Geldyn 応用例 3 : 2 次元板状ゲルの自由膨潤

3.1.4 応用例 4: 3 次元の長い棒状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)

入力 UDF ファイル:

高分子ネットワーク共同拡散ソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX04-1_in.udf.
応力拡散カップリングソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX04-2_in.udf.

入力 UDF 解説:

ここでは、理論編で解説した無次元化パラメータを用いてシミュレーションを行う。

- メッシュパラメータ ...形状 : UNSTRUCTURED_RECT, 次元 : 3D, サイズ : 4x4x32, 分割数 : 16x16x32.
- 膨潤のためのパラメータ

パラメータの名前	値
NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION	$1.0e-3$
UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY_IN_REFERENCE_STATE	0.025
UNIFORM_VOLUME_FRACTION_IN_REFERENCE_STATE	0.9
TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY	GINZBURG_LANDAU
UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_INITIAL_STATE	0.6

- 必要な場
高分子ネットワーク共同拡散ソルバに対して、
Chi, Concentration, DerivedFreeEnergy, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, Volume-Fraction.
応力拡散カップリングソルバに対して、
Chi, Concentration, Displacement, FingerTensor, FreeEnergy, Moduli, VolumeFraction, PolymerStress, Pressure.
- ダイナミクスと手法
... 「高分子ネットワーク共同拡散ソルバ」については、応用例 1 と同じ。
... 「応力拡散カップリングソルバ」について以下に解説。
初期化手続き”INITIALIZE:STRESS_DIFFUSION_COUPLING_OF_GELS:IMPLICIT” の定義は以下の通り。

場	初期化コマンド
Chi	INITIALIZE:CHI_PARAMETER
Concentration	INITIALIZE:ION_CONCENTRATION
Moduli	INITIALIZE:MODULI
VolumeFraction	INITIALIZE:VOLUME_FRACTION
FingerTensor	INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Displacement	MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM

1 ステップ時間発展の手続き”EVOLVE:STRESS_DIFFUSION_COUPLING_OF_GELS:IMPLICIT” の定義は以下の通り。

場	時間発展コマンド
FingerTensor	SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR
VolumeFraction	SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR
FreeEnergy	SOLVE:TOTAL_ENERGY
Moduli	SOLVE:MODULI_OF_GELS
PolymerStress	SOLVE:POLYMER_STRESS
Displacement	MOVE:BY_STRESS_DIFFUSION_COUPLING:LINEAR_ELASTICITY

計算結果

図 3.1.4 に GOURMET で描画した結果の高分子体積分率場のコンターを示す。左図から時刻 $t = 0.0, 1000.0$ での膨潤の様子である。これらの描画には、アクション “SHOW_SWELLING_RATIO” を用いている。

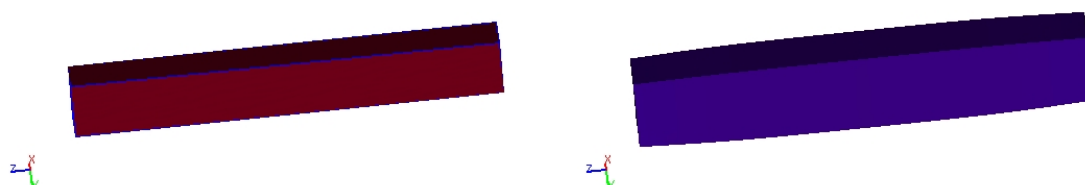


図 3.4: Geldyn 応用例 4 : 3 次元の長い棒状ゲルの自由膨潤

3.1.5 応用例 5: 3 次元の広い板状ゲルの自由膨潤 (2 つのダイナミクスの比較)

入力 UDF ファイル:

高分子ネットワーク共同拡散ソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX05-1_in.udf.

応力拡散カップリングソルバに対して、
MUFFIN/sample/Geldyn/EX01/EX05-2_in.udf.

入力 UDF 解説:

ここでは、理論編で解説した無次元化パラメータを用いてシミュレーションを行う。

- メッシュパラメータ ...形状 : UNSTRUCTURED_RECT, 次元 : 3D, サイズ : 32x32x4, 分割数 : 32x32x16.
- 膨潤のためのパラメータは、応用例 4 と同じ。
- 必要な場 ... 応用例 4 と同じ。
- ダイナミクスと手法
... 「高分子ネットワーク共同拡散ソルバ」については、応用例 1 と同じ。
... 「応力拡散カップリングソルバ」については、応用例 4 と同じ。

計算結果

図 3.1.5 に GOURMET で描画した結果の高分子体積分率場のコンターを示す。左図から時刻 $t = 0.0, 1000.0$ での膨潤の様子である。これらの描画には、アクション “SHOW_SWELLING_RATIO” を用いている。

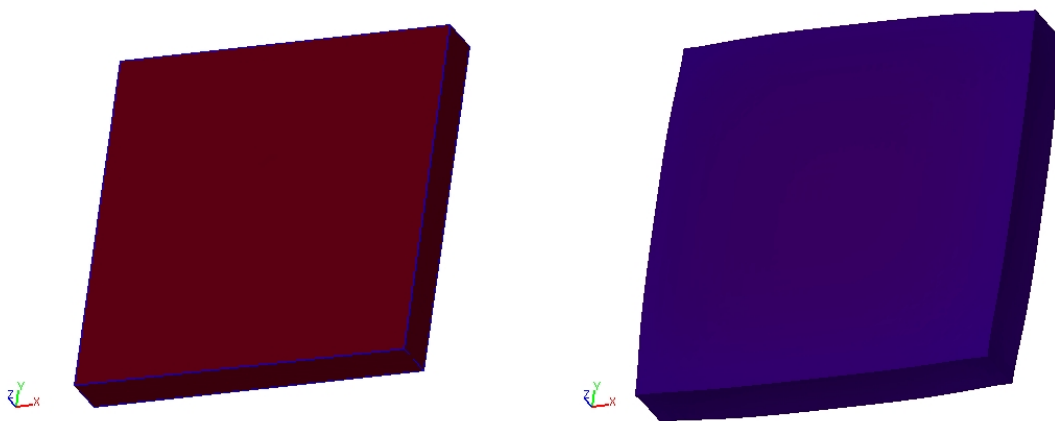


図 3.5: Geldyn 応用例 5 : 3 次元の広い板状ゲルの自由膨潤

第4章 GelDyn リファレンス

4.1 Geldyn の入力パラメータ

4.1.1 Geldyn 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
INTERVAL_OF_MINIMIZER _OUTPUT	ミニマイザ探索過程のモニタ出力ステップ幅
MAX_ITERATION_OF_MINIMIZER	“SIMPLEMIN” の最大探索ステップ数
DT_FOR_LOCAL_EQUILIBRIUM _MINIMIZER	陽的応力拡散カップリングミニマイザでの探索の仮想時間ステップ幅
DT_FOR_STATIC_EQUILIBRIUM _MINIMIZER	陽的平衡形状探索ミニマイザでの探索の仮想時間ステップ幅
ENERGY_WEIGHT_IN_MINIMIZER	陽的応力拡散カップリングミニマイザでの弾性エネルギーの重み係数
INCOMPRESSIBILITY_WEIGHT _IN_MINIMIZER	陽的応力拡散カップリングミニマイザでの非圧縮項の重み係数 (大きい数)
MATRIX_SOLVER	陰的ソルバで用いる連立一次方程式の行列ソルバを選択。“ICCG”(デフォルト) または “CG”
CONVERGENCE_CRITERION _FOR.CG.1	CG 法で一次方程式を解くときの収束判定条件。残差ベクトルのノルムがこの値以下であるとき収束とみなす。デフォルト値は 0.5×10^{-6} 。
CONVERGENCE_CRITERION _FOR.CG.2	CG 法で一次方程式を解くときのもう一つの収束判定条件。デフォルト値は 0。ペナルティ法による変位境界条件を適用している場合には 0 にしておくべきである。
PENALTY_NUMBER _FOR.DIRICHLET_BC	デリクレ条件を満たすために行列ソルバに与えるペナルティ数 (非常に大きい数)。デフォルト値は 10^{13} 。
ELEMENTS_PER_MATRIX_MERGE	マトリックスの計算をここで指定した要素を単位として行う。デフォルトは 5000。この数値を小さくするとマトリックス合成時のメモリを削減できるが、処理時間は大きくなる可能性がある。

4.1.2 Geldyn 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
----------	------------------

SEED_OF_RANDOM_NUMBER	乱数による初期ノイズのための乱数の種 (長整数)
NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION	乱数による初期ノイズの大きさ
EXPONENT_NU	ブロッブサイズの高分子体積分率依存性の指数 ν 。 θ 溶媒に対し 1/2、良溶媒に対し 3/5 となる。
MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM	架橋点の並進エントロピーに由来する弾性エネルギー項の大きさ。(デフォルト値 0.0)
TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY	混合自由エネルギーの選択。 “FLORY_HUGGINS” または “GINZBURG_RANDAU”。 デフォルト値は、“GINZBURG_RANDAU”。
GRAVITY_X	X 軸方向の重力加速度
GRAVITY_Y	Y 軸方向の重力加速度
GRAVITY_Z	Z 軸方向の重力加速度
GRAVITY	各座標軸方向の重力加速度を配列で与える。 ex.) [X 方向の重力加速度, Y 方向の重力加速度, Z 方向の重力加速度]
MASS_DENSITY	高分子と溶媒の各々が体積分率 1 で含まれた場合の 重量密度。2 成分の配列 [高分子の質量密度, 溶媒の質量密度] で与える。
UNIFORM_VOLUME_FRACTION _IN_REFERENCE_STATE	基準座標系での一様な高分子体積分率。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF の “VolumeFraction” 場のデータが適用される。
UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY _IN_REFERENCE_STATE	基準座標系での一様な架橋点密度。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF “Moduli” 場の第一成分のデータが適用される。
UNIFORM_SHEAR_MODULUS	一様な等方せん断弾性率 (弾性体ダイナミクス用)。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF “Moduli” 場の第二成分のデータが適用される。
UNIFORM_BULK_MODULUS	一様な等方バルク弾性率 (弾性体ダイナミクス用)。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF “Moduli” 場の第三成分のデータが適用される。
UNIFORM_CHI_PARAMETER _IN_INITIAL_STATE	初期状態での一様な溶媒と高分子の相互作用パラメータ。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF “Chi” 場の第一成分のデータが適用される。
STIMULI_OF_QUENCH	系をクエンチする刺激の選択。 “CHI” (χ パラメータ場を変化) または “TEMPERATURE” (系の温度 (均一) を変化)。 デフォルト値は “CHI”。
TEMPERATURE_IN_INITIAL_STATE	初期状態 (クエンチ前) での系の温度 (均一)。 パラメータ “STIMULI_OF_QUENCHI” で “TEMPERATURE” を選択した場合に必要。
TEMPERATURE_IN_FINAL_STATE	クエンチ後での系の温度 (均一)。 パラメータ “STIMULI_OF_QUENCHI” で “TEMPERATURE” を選択した場合に必要。
UNIFORM_CHI_PARAMETER	クエンチ後での一様な溶媒と高分子の

IN_FINAL_STATE	相互作用パラメータ。 パラメータ “STIMULI_OF_QUENCHI” で ”CHI” を選択した場合に必要。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF ”Chi” 場の第二成分のデータが適用される。
UNIFORM_ION_CONCENTRATION IN_REFERENCE_STATE	基準座標系での一様なカウンターイオン数密度。 このパラメータが存在しない場合には、入力 UDF ”Concentration” 場の第一成分のデータが適用される。

4.1.3 Geldyn の解析結果データ一覧

結果データの名前	結果データの意味と理論編での記号
TOTAL_FREE_ENERGY	ゲルの全自由エネルギー
TOTAL_ELASTIC_FREE_ENERGY	ゲルの全弾性エネルギー
TOTAL_ERROR_OF_INCOMPRESSIBILITY	陽的応力拡散カップリングソルバ でのゲルの非圧縮性の全残差

4.2 Geldyn の場とコマンド

4.2.1 Geldyn 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
Displacement	高分子の変位 (速度)(必須)
FingerTensor	高分子のフィンガーテンソル (必須)
VolumeFraction	高分子の体積分率 (必須)
Moduli	架橋点密度、バルク弾性率、せん断弾性率 (必須)
Chi	高分子と溶媒の相互作用パラメータ (必須)
Concentration	カウンターイオン濃度 (必須)
FreeEnergy	自由エネルギー (陽的ソルバで必要)
PolymerStress	高分子のコーシー応力 (応力拡散カップリングソルバと陰的高分子ネットワーク共同拡散ソルバで必要)
Pressure	溶媒の圧力 (応力拡散カップリングソルバで必要)
Flux	溶媒流束 (応力拡散カップリングソルバで必要)
VolumeForce	ゲルの体積力 (陰的高分子ネットワーク共同拡散ソルバと弾性体ダイナミクスソルバで必要)
DerivedFreeEnergy	節点座標での自由エネルギーの微分 (陽的応力拡散カップリングソルバで必要)
Incompressibility	ゲルの局所的な非圧縮条件の残差 (陽的応力拡散カップリングソルバで必要)
DerivedIncompressibility	節点座標でのゲルの局所的な非圧縮条件の残差の微分 (陽的応力拡散カップリングソルバで必要)

4.2.2 Geldyn の場のコマンド一覧

VolumeFraction : 高分子体積分率場 コマンド一覧

VolumeFraction	名称
初期化	"INITIALIZE:VOLUME_FRACTION"
時間発展	"SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR"
時間発展	"SOLVE:BY_SOLVENT_FLUX"

1. VolumeFraction : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:VOLUME_FRACTION"
機能	入力 UDF データまたは入力パラメータ (一様) により、 高分子体積分率場を初期化する。 入力パラメータ (一様) が存在しない場合に、入力 UDF データが適用される。
依存パラメータ	UNIFORM_VOLUME_FRACTION_IN_REFERENCE_STATE

2. VolumeFraction : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:BY_FINGER_STRAIN_TENSOR"
機能	フィンガー歪みテンソルから高分子体積分率を解く。
依存している場	FingerTensor

名称	"SOLVE:BY_SOLVENT_FLUX"
機能	連続の式より高分子体積分率を 1 ステップ時間発展
依存している場	Flux
依存パラメータ	DT

Displacement : 高分子変位 (速度) 場 コマンド一覧

Displacement	名称
初期化	"INITIALIZE:MINIMIZER_FOR_LOCAL_EQUILIBRIUM"
時間発展	"MOVE:POSITION_OF_VERTEX"
時間発展	"MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM"
時間発展	"MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION"
時間発展	"MOVE:GO_TO_STATIC_EQUILIBRIUM"
時間発展	"MOVE:LOCAL_EQUILIBRIUM_WITH_INCOMPRESSIBILITY"
時間発展	"MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION:LINEAR_ELASTICITY"
時間発展	"MOVE:BY_STRESS_DIFFUSION_COUPLING:LINEAR_ELASTICITY"
時間発展	"MOVE:BY_LINEAR_ELASTICITY_DYNAMICS"

1. Displacement : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:MINIMIZER_FOR_LOCAL_EQUILIBRIUM"
機能	陽的応力拡散カップリングミニマイザの初期化
依存パラメータ	MINIMIZER
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_X
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_X
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_Y
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_Y
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_Z
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_Z

2. Displacement : 時間発展関数 詳細

名称	"MOVE:POSITION_OF_VERTEX"
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、メッシュの節点座標を移動。

名称	"MOVE:POSITION_OF_VERTEX_BY_RANDOM"
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、節点座標をランダムノイズにより移動。
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER
依存パラメータ	NOIZE_OF_INITIAL_DEFORMATION

名称	"MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION"
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、陽的高分子ネットワーク共同拡散ソルバにより 1 時間ステップ変形。
依存している場	FreeEnergy
依存している場	DerivedFreeEnergy
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	EXPONENT_NU

名称	"MOVE:GO_TO_STATIC_EQUILIBRIUM"
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、平衡形状まで変形。
依存している場	FreeEnergy
依存している場	DerivedFreeEnergy
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存パラメータ	MINIMIZER
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_X
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_X
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_Y
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_Y
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MIN_Z
依存パラメータ	MINIMIZER_REGION_MAX_Z
依存パラメータ	INTERVAL_OF_MINIMIZER_OUTPUT
依存パラメータ	MAX_ITERATION_OF_MINIMIZER
依存パラメータ	DT_FOR_STATIC_EQUILIBRIUM_MINIMIZER

名称	”MOVE:LOCAL_EQUILIBRIUM _WITH_INCOMPRESSIBILITY”
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、陽的応力拡散カップリングソルバにより 1 時間ステップ変形。
依存している場	FreeEnergy
依存している場	DerivedFreeEnergy
依存している場	Incompressibility
依存している場	DerivedIncompressibility
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存パラメータ	ENERGY_WEIGHT_IN_MINIMIZER
依存パラメータ	INCOMPRESSIBILITY_WEIGHT_IN_MINIMIZER
依存パラメータ	INTERVAL_OF_MINIMIZER_OUTPUT
依存パラメータ	MAX_ITERATION_OF_MINIMIZER
依存パラメータ	DT_FOR_LOCAL_EQUILIBRIUM_MINIMIZER
名称	”MOVE:BY_COLLECTIVE_DIFFUSION :LINEAR_ELASTICITY”
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、陰的高分子ネットワーク共同拡散ソルバにより 1 時間ステップ変形。
依存している場	VolumeForce
依存している場	Moduli
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	ELEMENTS_PER_MATRIX_MERGE
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	EXPONENT_NU
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR.CG_1
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR.CG_2

名称	”MOVE:BY_STRESS_DIFFUSION_COUPLING :LINEAR_ELASTICITY”
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、陰的応力拡散カップリングソルバにより圧力場と変位を解き、1 時間ステップ変形。
依存している場	Pressure
依存している場	Moduli
依存している場	VolumeFraction
依存している場	PolymerStress
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	ELEMENTS.PER_MATRIX_MERGE
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	EXPONENT_NU
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_1
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_2
依存パラメータ	GRAVITY
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
依存パラメータ	MASS_DENSITY

名称	”MOVE:BY_LINEAR_ELASTICITY_DYNAMICS
機能	変位のデリクレ条件を満たしつつ、弾性体ダイナミクスソルバにより 1 時間ステップ変形。
依存している場	VolumeForce
依存している場	Moduli
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER
依存パラメータ	ELEMENTS.PER_MATRIX_MERGE
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_1
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_CG_2

3. Displacement : 境界 (部分領域) 条件 詳細

境界 (部分領域) 条件	条件の意味とパラメータ
D_VEC	境界節点での高分子の速度を与えることで、固定境界や一定速度で移動する境界を指定できる。三次元ベクトルを配列で与える。
D_VX	境界節点での高分子の速度の X 成分を与える。
D_VY	境界節点での高分子の速度の Y 成分を与える。
D_VZ	境界節点での高分子の速度の Z 成分を与える。
N_LOAD	境界面 (辺) に印加する表面力を与える。三次元ベクトルを配列で与える。
N_LOAD_NORMAL	境界面 (辺) に常に垂直な方向へ印加する表面力を与える。 スカラーを与え、正は境界外向きを、負は境界内向きを表す。

FingerTensor : フィンガーテンソル場 コマンド一覧

FingerTensor	名称
初期化	"INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR"
時間発展	"SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR"

1. FingerTensor : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:FINGER_STRAIN_TENSOR"
機能	現在の形状を基準座標系としてフィンガーテンソルを初期化する。

2. FingerTensor : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:FINGER_STRAIN_TENSOR"
機能	現在の形状よりフィンガーテンソルを解く。

PolymerStress : コーシー応力テンソル場 コマンド一覧

PolymerStress	名称
時間発展	"SOLVE:POLYMER_STRESS"
時間発展	"APPLY:BOUNDARY_CONDITION"

1. PolymerStress : 初期化 詳細

名称	"SOLVE:POLYMER_STRESS"
機能	フィンガーテンソルより、高分子ネットワークのコーシー応力テンソルを解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存している場	Chi
依存している場	Moduli
依存している場	Concentration
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM
依存パラメータ	TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY
名称	"APPLY:BOUNDARY_CONDITION"
機能	溶媒の圧力、表面印加力の境界条件を適用する。
依存している場	Pressure
依存している場	Displacement

Pressure : 溶媒圧力場 コマンド一覧

1. Pressure : 境界 (部分領域) 条件 詳細

境界 (部分領域) 条件	条件の意味とパラメータ
D.PERMEABLE	溶媒を透過する表面について、境界での純溶媒の圧力を設定する。(デリクレ条件)(応力拡散カップリングソルバ)。他の表面は非透過壁とみなされる。(参考, 高分子ネットワーク共同拡散ソルバでは、全表面が透過壁とみなされる。)

Flux : 溶媒流束場 コマンド一覧

Flux	名称
時間発展	"SOLVE:BY_PRESSURE_COUPLING_WITH_STRESS_AND_GRAVITY"

1. Flux : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:BY_PRESSURE_COUPLING_WITH_STRESS_AND_GRAVITY"
機能	重力と境界条件を考慮して、溶媒流束を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	PolymerStress
依存している場	Pressure
依存している場	Displacement
依存パラメータ	EXPONENT_NU
依存パラメータ	GRAVITY
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
依存パラメータ	MASS_DENSITY

VolumeForce : 体積力場 コマンド一覧

VolumeForce	名称
時間発展	"SOLVE:VOLUME_FORCE_BY_STRESS_AND_GRAVITY"
時間発展	"SOLVE:VOLUME_FORCE_BY_GRAVITY"

1. VolumeForce : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:VOLUME_FORCE_BY_STRESS_AND_GRAVITY"
機能	重力と高分子ネットワークの応力勾配より、高分子ゲルの体積力を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	PolymerStress
依存パラメータ	GRAVITY
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
依存パラメータ	MASS_DENSITY
名称	"SOLVE:VOLUME_FORCE_BY_GRAVITY"
機能	重力より高分子ゲルの体積力を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	GRAVITY
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
依存パラメータ	MASS_DENSITY

Moduli : 架橋点密度、弾性率場 コマンド一覧

Moduli	名称
初期化	"INITIALIZE:MODULI"
時間発展	"SOLVE:MODULI_OF_GELS"

1. Moduli : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:MODULI"
機能	入力のパラメータ (一様) や場の UDF データより、基準座標で架橋点密度、弾性率を初期化する。 入力のパラメータ (一様) が存在しない場合に、場の UDF データが入力される。
依存パラメータ	UNIFORM_CROSSLINKING_DENSITY_IN_REFERENCE_STATE
依存パラメータ	UNIFORM_SHEAR_MODULUS
依存パラメータ	UNIFORM_BULK_MODULUS

2. Moduli : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:MODULI_OF_GELS"
機能	高分子ゲルの等方的なバルク弾性率とせん断弾性率を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	Chi
依存している場	Concentration
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM
依存パラメータ	TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY

Chi : 高分子-溶媒 相互作用パラメータ場 コマンド一覧

Chi	名称
初期化	"INITIALIZE:CHI_PARAMETER"
時間発展	"QUENCH:CHANGE_CHI_PARAMETER"

1. Chi : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:CHI_PARAMETER"
機能	入力のパラメータ (一様) や場の UDF データより、 χ パラメータを初期化する。 入力のパラメータ (一様) が存在しない場合に、場の UDF データが入力される。
依存パラメータ	UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_INITIAL_STATE

2. Chi : 時間発展関数 詳細

名称	"QUENCH:CHANGE_CHI_PARAMETER"
機能	系の温度や χ パラメータ分布を変化させ系をクエンチする。
依存パラメータ	STIMULI_OF_QUENCH
依存パラメータ	TEMPERATURE_IN_INITIAL_STATE
依存パラメータ	TEMPERATURE_IN_FINAL_STATE
依存パラメータ	UNIFORM_CHI_PARAMETER_IN_FINAL_STATE

Concentration : カウンターイオン濃度場 コマンド一覧

Concentration	名称
初期化	"INITIALIZE:ION_CONCENTRATION"

1. Concentration : 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE:ION_CONCENTRATION"
機能	入力のパラメータ (一様) や場の UDF データより、カウンターイオン濃度を初期化する。 入力のパラメータ (一様) が存在しない場合に、場の UDF データが入力される。
依存パラメータ	UNIFORM_ION_CONCENTRATION_IN_REFERENCE_STATE

FreeEnergy : 自由エネルギー、弾性エネルギー場 コマンド一覧

FreeEnergy	名称
時間発展	"SOLVE:TOTAL_ENERGY"
時間発展	"SOLVE:ELASTIC_ENERGY"

1. FreeEnergy : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:TOTAL_ENERGY"
機能	ゲルの自由エネルギーを解き、全自由エネルギーを計算する。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存している場	Chi
依存している場	Moduli
依存している場	Concentration
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM
依存パラメータ	TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY
解析結果	TOTAL_FREE_ENERGY

名称	"SOLVE:ELASTIC_ENERGY"
機能	ゲルの弾性エネルギーを解き、全弾性エネルギーを計算する。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存している場	Moduli
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM
解析結果	TOTAL_ELASTIC_FREE_ENERGY

Incompressibility : 非圧縮条件残差場 コマンド一覧

Incompressibility	名称
時間発展	"SOLVE:INCOMPRESSIBILITY"

1. Incompressibility : 初期化 詳細

2. Incompressibility : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:INCOMPRESSIBILITY"
機能	ゲルの局所的な非圧縮条件の残差を解き、非圧縮条件の全残差を計算する。
依存している場	VolumeFraction
解析結果	TOTAL_ERROR_OF_INCOMPRESSIBILITY

DerivedFreeEnergy : 自由エネルギー場 節点変分 コマンド一覧

DerivedFreeEnergy	名称
時間発展	"SOLVE:DERIVED_TOTAL_ENERGY"
時間発展	"SOLVE:DERIVED_ELASTIC_ENERGY"

1. DerivedFreeEnergy : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:DERIVED_TOTAL_ENERGY"
機能	ゲルの自由エネルギーの節点座標での変分を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存している場	Chi
依存している場	Moduli
依存している場	Concentration
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM
依存パラメータ	TYPE_OF_MIXING_FREE_ENERGY

名称	"SOLVE:DERIVED_ELASTIC_ENERGY"
機能	ゲルの弾性エネルギーの節点座標での変分を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor
依存している場	Moduli
依存パラメータ	MAGNITUDE_OF_ELASTIC_LOGTERM

DerivedIncompressibility : 非圧縮条件残差場 節点変分 コマンド一覧

DerivedIncompressibility	名称
時間発展	"SOLVE:DERIVED_INCOMPRESSIBILITY"

1. DerivedIncompressibility : 時間発展関数 詳細

名称	"SOLVE:DERIVED_INCOMPRESSIBILITY"
機能	ゲルの局所的な非圧縮条件の残差についての節点座標での変分を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	FingerTensor

参考文献

- 1) T.Tanaka, and D.J.Fillmore, : *J.Chem.Phys*, Vol. 70, p. 1214 (1979).
- 2) M.Doï, A. and K.Kawasaki, e. eds.: *Dynamics and Patters in Complex Fluids*, Springer (1990).
- 3) Y.Li, and T.Tanaka, : *J.Chem.Phys*, Vol. 92, p. 1365 (1990).
- 4) T.Yamaue, T. and M.Doï, : *AIP Conference Proceedings*, Vol. 519, p. 584 (2000).
- 5) L.D.Landau, and E.M.Lifshitz, eds.: *Theory of Elasticity - 3rd Edition*, Butterworth-Heinemann (1986).
- 6) 矢川元基, 吉村忍：有限要素法 (計算力学と CAE シリーズ 1), 培風館 (1991).