

# 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 5.1

ユーザーズマニュアル

- 第2分冊 -

多相流体シミュレータ

## PhaseSeparation

OCTA ユーザーズグループ

January 01 2016

## 執筆者

佐々木誠、谷口貴志

## プログラム開発者

谷口貴志 (FDM)、佐々木誠 (FEM)

## バージョン 5.0 リリース

プログラム、マニュアル修正 山上達也、小沢拓

## バージョン 5.1 リリース

プログラム、マニュアル修正 小沢拓

## 謝辞

本プログラム開発は、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。

Copyright ©2000-2016 OCTA Licensing Committee All rights reserved.

# 目次

<b>第 1 章 PhaseSeparation の理論背景</b>	<b>1</b>
1.1 基礎方程式	1
1.1.1 体積分率に対する方程式	1
1.1.2 流体に対する方程式	2
1.1.3 $M$ 成分高分子混合系の自由エネルギーと化学ポテンシャル	3
1.1.4 電場下での $M$ 成分混合系の自由エネルギーと化学ポテンシャル	4
1.2 様々な系を記述する方程式とその類似性	5
1.3 シミュレーションでの時間空間単位の設定と方程式の無次元化	6
1.3.1 時間及び空間単位の設定の考え方	6
1.3.2 相互作用自由エネルギー密度項の無次元化	10
1.3.3 Maxwell 方程式の無次元化	10
1.3.4 入力に必要な実パラメータと無次元化パラメータ	11
1.4 有限差分法を用いた多相流体シミュレータ PhaseSeparation_FDM	14
1.4.1 計算モデル	14
1.4.2 各場に対する壁面での境界条件	15
1.5 有限要素法を用いた多相流体シミュレータ PhaseSeparation_FEM	20
1.5.1 計算モデル	20
1.5.2 有限要素シミュレータでの流体速度場の計算手法	21
1.5.3 Stokes 流の計算	22
1.5.4 有限要素法での離散化手法と境界条件の関連	22
1.5.5 Partial region condition による境界条件の指定	23
1.5.6 境界条件指定以外への partial region condition の応用	24
1.5.7 PhaseSeparation_FEM での場に対する境界条件	26
<b>第 2 章 PhaseSeparation の応用操作</b>	<b>31</b>
2.1 有限差分法相分離シミュレータ PhaseSeparation_FDM の応用操作	31
2.1.1 応用例 0: Flory-Huggins の相分離 (1)	31
2.1.2 応用例 1: Flory-Huggins の相分離 (2)	33
2.1.3 応用例 2: Flory-Huggins の相分離 (3)	33
2.1.4 応用例 3: 一様な電場	34
2.1.5 応用例 4: 誘電率揺らぎによる電場の変化 (1)	36
2.1.6 応用例 5: 誘電率揺らぎによる電場の変化 (2)	37
2.1.7 応用例 6: Poiseuille 流れ	39
2.1.8 応用例 7: ずり流れ (1)	40
2.1.9 応用例 8: ずり流れ (2)	42
2.1.10 応用例 9: 流れの中のドロップレット	44
2.1.11 応用例 10: Flory-Huggins の相分離 (4)	46
2.1.12 応用例 11: ドロップレットの合体	48
2.2 有限要素法相分離シミュレータ PhaseSeparation_FEM の応用操作	51

2.2.1	応用例 1: 平板内のシアー流れ (Couette 流) . . . . .	51
2.2.2	応用例 2: 平行平板壁内の流れ (Poiseuille 流) . . . . .	52
2.2.3	応用例 3: 2 成分系 Flory-Huggins 自由エネルギーでの相分離 . . . . .	53
2.2.4	応用例 4: 2 成分系 Flory-Huggins 自由エネルギーでの相分離 – 流れ場あり . . . . .	54
<b>第 3 章</b>	<b>PhaseSeparation リファレンス</b>	<b>57</b>
3.1	有限差分法相分離シミュレータ PhaseSeparation_FDM の場のコマンドとパラメータ . . . . .	57
3.1.1	PhaseSeparation_FDM の入力パラメーター一覧 . . . . .	57
3.1.2	PhaseSeparation_FDM の利用可能な場の一覧 . . . . .	60
3.1.3	PhaseSeparation_FDM の場のコマンド一覧 . . . . .	61
3.2	有限要素法相分離シミュレータ PhaseSeparation_FEM の場のコマンドとパラメータ . . . . .	77
3.2.1	PhaseSeparation_FEM の入力パラメーター一覧 . . . . .	77
3.2.2	PhaseSeparation_FEM の利用可能な場の一覧 . . . . .	78
3.2.3	PhaseSeparation_FEM の場のコマンド一覧 . . . . .	78
	<b>References</b>	<b>87</b>

## 図 目 次

1.1	界面幅の図。 $\lambda$ の約 $1/4$ が $\xi$ である。 . . . . .	7
1.2	$Z$ 方向の 2 つの $XY$ 平面の境界 . . . . .	16
1.3	$X$ 方向の 2 つの $YZ$ 平面の境界 . . . . .	16
1.4	$Y$ 方向の 2 つの $ZX$ 平面の境界 . . . . .	16
2.1	PhaseSeparation_FEM 適用例: 平板内のシアー流れ (Couette 流) の設定 . . . . .	51
2.2	PhaseSeparation_FEM 適用例: 平行な壁の間の流れ (Poiseuille 流) の設定 . . . . .	52

# 第1章 PhaseSeparation の理論背景

MUFFIN の流体系相分離シミュレータ PhaseSeparation は熱力学変数や外場の変化による多相構造間の相転移や相構造形成のダイナミクス、電場下での相分離などを取り扱うシミュレータである。MUFFIN の PhaseSeparation シミュレータの主要なターゲットは液体状態での高分子混合系の相構造形成ダイナミクスである。

液体状態での (高分子、低分子) 混合系の相構造形成ダイナミクスを考えると、系が示すある現象と本質的に関係している場は問題に応じて様々である。例えば電解質からなる系を考えると、電場の効果や電場と他の場との結合が重要となる場合もあり、電場は本質的でない現象もある。また、化学ポテンシャルを計算する方程式や計算手法をいろいろ変えてシミュレーションを行ないたい場合があり、自分の考えた化学ポテンシャルの表式を組み込んで解く必要がある場合もある。PhaseSeparation シミュレータの特徴は対象としている系で必要となる (解きたい) 場を選択し、それらを組み合わせによってシミュレータを組み上げられるところにある。

この組み換え可能な場のシミュレータにより、ユーザは研究対象としている様々な系のシミュレーションを行なうことができる。実際に、シミュレーションを実行する場合には、可能な場の中から必要な場のみを選択し、これらの場の組合せの多様性により様々な系のシミュレーションを実現する。

次節 1.1 で、まず多相流体系の計算原理の説明を行う。

## 1.1 基礎方程式

### 1.1.1 体積分率に対する方程式

多相流体シミュレータは流動下での多成分混合系のダイナミクスを取り扱う。今、 $M$  成分からなる混合系を考えよう。系の温度を  $T_0$  とする。各成分は高分子であるか、低分子であるかはこの段階では問わない。このような系を表すために各成分の体積分率場の空間分布を用いる。座標点  $\mathbf{r}$  にある微小体積要素  $v_0 = a^3$  (ここで  $a$  はモノマーサイズ) 中の  $\alpha$  成分<sup>1</sup> の体積分率を  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  で表わすことにする。ここで添字  $\alpha$  は各成分に付けられた番号を意味し、 $\{0, 1, \dots, M-1\}$  の値を取り得る。各成分の体積分率の時間発展は次の連続の方程式で表される、

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha^{(Total)}, \quad (1.1)$$

ここで右辺の  $\mathbf{J}_\alpha^{(Total)}$  は  $\alpha$  成分の流れを表しており、次の3つ寄与から成る。

$$\mathbf{J}_\alpha^{(Total)} = \mathbf{J}_\alpha^{(h)} + \mathbf{J}_\alpha^{(d)} + \mathbf{J}_\alpha^{(r)}, \quad (1.2)$$

$\mathbf{J}_\alpha^{(h)}$  は  $\alpha$  種の物質の流体力学効果による輸送を表し、流体の速度場  $\mathbf{v}$  を用いて  $\mathbf{J}_\alpha^{(h)} = \mathbf{v}\psi_\alpha$  で表される。第二番目の寄与  $\mathbf{J}_\alpha^{(d)}$  は  $\alpha$  種の物質が熱力学力によって拡散する拡散流束を表す。この拡散流束が化学ポテンシャルの空間勾配に比例して生じる場合には

$$\mathbf{J}_\alpha^{(d)} = -\sum_{\alpha'} \mathcal{L}_{\alpha\alpha'} \nabla \mu_{\alpha'}, \quad (1.3)$$

<sup>1</sup>以下では特に注意が無い限り  $\alpha, \beta$  のようなギリシャ文字は組成を表すサフィックスとして使い、 $i, j, k$  は座標を表すサフィックスとして用いる。

で表される。ここで  $\mathcal{L}_{\alpha\alpha'}$  は輸送係数を表し、 $\mu_\alpha$  は化学ポテンシャルである。Flory-Huggins 理論のように自由エネルギー  $F$  の表式が与えられている場合には、化学ポテンシャルは

$$\mu_\alpha^{(FH)} = \frac{\delta F}{\delta \psi_\alpha(\mathbf{r})} \quad (1.4)$$

で求めることが出来る。以下では化学ポテンシャルに対して特に計算方法を指定しない場合には  $\mu_\alpha$  と記し、特定の近似計算方法を明示したい場合には以下のように上添字を用いる。

$$\begin{aligned} \mu_\alpha^{(FH)} &: \text{Flory-Huggins De Gennes 理論} \\ \mu_\alpha^{(GL)} &: \text{対称型 Ginzburg Landau 自由エネルギー} \\ \mu_\alpha^{(OK)} &: \text{Ohta-Kawasaki 理論} \\ \mu_\alpha^{(ADF)} &: \text{Approximate Density Functional Theory} \\ \mu_\alpha^{(SCF)} &: \text{自己無撞着平均場理論} \end{aligned}$$

輸送係数については、通常は  $\mathcal{L}_{\alpha\alpha'} = \mathcal{L}_\alpha \delta_{\alpha\alpha'}$  と仮定することが多く、ここでもこの仮定を採用する。これより拡散流束は  $\mathbf{J}_\alpha^{(d)} = -\mathcal{L}_\alpha \nabla \mu_\alpha$  で表される。また  $\mathcal{L}_\alpha$  の  $\psi_\alpha$  依存性については一相状態での拡散係数に一致するように

$$\mathcal{L}_\alpha = L_\alpha \psi_\alpha \quad (L_\alpha = \text{Const.}) \quad (1.5)$$

と取ることがある。また、輸送係数が特に問題でない系の場合、簡単化のために

$$\mathcal{L}_\alpha = L_\alpha = \text{Const.} \quad (1.6)$$

とすることもある。

電解質系では式 (1.5) を用い、他では式 (1.6) を用いることにする。拡散流束は他の熱力学力によっても生じる。また、粘弾性相分離や温度勾配による拡散流のように拡散流束が幾つかの熱力学力の関数となる場合もある。

第三の寄与は熱揺動によるランダムカレントであり、その大きさは以下の揺動散逸定理を満足するように決定される。 $\langle J_{\alpha i}^{(r)}(\mathbf{r}, t) J_{\alpha i}^{(r)}(\mathbf{r}', t') \rangle = 2k_B T \mathcal{L}_\alpha \delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$

これ以降、式を分かりやすくするために、特に必要でない限りこの熱揺動項を省略する。以上から、体積分率  $\psi_\alpha$  の時間発展方程式は

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad \mathbf{J}_\alpha = -\mathcal{L}_\alpha \nabla \mu_\alpha \quad (1.7)$$

となる。

### 1.1.2 流体に対する方程式

次に流体の運動方程式について考える。流体の密度を  $\rho$ , 速度を  $\mathbf{v}$ , 圧力を  $P$ , 粘度を  $\eta$  で表す。今考えている系は主に高分子系のような一般に粘度が大きい系であり、レイノルズ数が 1 より十分小さい。このような系は対流項を無視した Navier-Stokes 方程式 (Stokes 近似):

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot (\eta \mathbf{D}) - \nabla p + \mathbf{K} \quad (1.8)$$

によって記述される。ここで、 $\mathbf{D}_{ij}$  は

$$\mathbf{D}_{ij} = \partial v_i / \partial x_j + \partial v_j / \partial x_i$$

で表される速度勾配テンソルである。右辺の第 3 項  $\mathbf{K}(\mathbf{r})$  は流体力学効果を引き起こす体積力である。この項は対象としている系に応じて決定される。粘度が十分に大きな場合には力学的釣合いが瞬時に成立するので、

この釣合が成立するまでの時間よりも長い時間スケールでの流動を対象とするならば、流れの時間変化が十分小さい、すなわち  $\partial \mathbf{v} / \partial t = 0$  としてよい。よって、流体の運動方程式は

$$\nabla \cdot (\eta \mathbf{D}) - \nabla p + \mathbf{K} = \mathbf{0} \quad (1.9)$$

となる。また、流体の非圧縮性から速度場  $\mathbf{v}$  は  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  を満足しなければならない。この条件から、圧力に対するポアソン方程式

$$\Delta p = \nabla \nabla (\eta \mathbf{D}) + \nabla \cdot \mathbf{K} \quad (1.10)$$

が導かれる。

ここまでの考察をまとめると以下ようになる。

まとめ

基礎方程式

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (1.11)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot (\eta \mathbf{D}) - \nabla p + \mathbf{K} \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.12)$$

系の固有な特徴は化学ポテンシャル  $\mu_\alpha$  と流体の駆動力項  $\mathbf{K}$  や粘度の表式にあることが分かる。

MUFFIN の PhaseSeparation シミュレータでは、化学ポテンシャルを計算する関数や駆動力項を求める関数等を、解きたい系に応じて組み換え、これらの関数を新たに必要となる場を解くべき場として登録しこれらを解くことにより、様々な系のシミュレーションを実現する。

### 1.1.3 $M$ 成分高分子混合系の自由エネルギーと化学ポテンシャル

Flory-Huggins-deGennes 理論に基づく自由エネルギーは次のように書かれる

$$F^{(FH)} = \frac{k_B T}{v_o} \int dV \left[ \sum_{\alpha=0}^{M-1} \frac{\psi_\alpha}{N_\alpha} \ln \psi_\alpha + \sum_{\alpha < \alpha'}^{M-1} \chi_{\alpha\alpha'} \psi_\alpha \psi_{\alpha'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha < \alpha'}^{M-1} C_{\alpha\alpha'} (\psi_\alpha, \psi_{\alpha'}) [\nabla(\psi_\alpha - \psi_{\alpha'})]^2 \right] \quad (1.13)$$

係数  $C_{ij}$  は乱雑位相近似 (RPA) をシンプルに拡張して

$$C_{\alpha\alpha'} = \frac{a^2}{18\psi_\alpha \psi_{\alpha'}} \quad (1.14)$$

で与えられるとする。ここで、 $v_o$  はモノマーサイズを  $a$  とするとき、 $v_o = a^3$  で与えられる。 $\chi_{\alpha\alpha'}$  はいわゆる  $\chi$ -パラメータであり、 $\chi_{\alpha\alpha} \equiv 0$  である。化学ポテンシャル  $\mu_\alpha = \delta F / \delta \psi_\alpha$  は  $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{M-1}$  を独立変数として  $\delta F / \delta \psi_\alpha$  を計算したものを  $\hat{\mu}_\alpha$  で表すとき以下のように書けることが分かる。

$$\mu_\alpha = \hat{\mu}_\alpha - \hat{\mu}_0 \quad (1.15)$$

以下に、 $\hat{\mu}_\alpha$  の表式を記す。

$$\hat{\mu}_\alpha^{(FH)} = \frac{k_B T}{v_o} \left[ \frac{1}{N_\alpha} \ln \psi_\alpha + \sum_{\alpha'=0}^{M-1} \left[ \chi_{\alpha\alpha'} \psi_{\alpha'} - \frac{1}{2} \frac{\partial C_{\alpha\alpha'}}{\partial \psi_\alpha} \{ \nabla(\psi_\alpha - \psi_{\alpha'}) \}^2 - \nabla \{ C_{\alpha\alpha'} \nabla(\psi_\alpha - \psi_{\alpha'}) \} \right] \right] \quad (1.16)$$

駆動力項  $\mathbf{K}$  は

$$\mathbf{K} = - \sum_{\alpha=1}^{M-1} \psi_\alpha \nabla \mu_\alpha^{(FH)} \quad (1.17)$$

である。



### 1.1.4 電場下での $M$ 成分混合系の自由エネルギーと化学ポテンシャル

前節の系において各成分が電荷を持ち得る場合を考える。微小体積  $v_o$  を  $\alpha$  成分が全て充たしているときに微小体積に含まれる電荷を  $\rho_{e\alpha}v_o$  とするとき、混合系での位置  $\mathbf{r}$  にある微小体積  $v_o$  での電荷密度は

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=0}^{M-1} \rho_{e\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

と書ける。ここで、 $\rho_{e\alpha} = e\zeta_{\alpha}$  であり、 $\zeta_{\alpha}$  は荷数密度である。また、 $\alpha$  成分の誘電率を  $\epsilon_{\alpha}$  とするとき、混合状態での誘電率を混合則

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=0}^{M-1} \epsilon_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \quad (1.19)$$

で近似することにする。以上の表式を用いて自由エネルギーを書くと

$$F = F_{mix} + \int dV \left[ -\frac{1}{2} \epsilon(\{\psi_{\alpha}\}, T) \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \rho_e(\{\psi_{\alpha}\}) \Phi \right] \quad (1.20)$$

となる。ここで、 $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r})$  は電場であり、 $\Phi = \Phi(\mathbf{r})$  は静電ポテンシャル (スカラーポテンシャル) である。よって、化学ポテンシャルは

$$\mu_{\alpha}^{(X)} = \mu_{\alpha mix}^{(X)} - \frac{1}{2} (\epsilon_{\alpha} - \epsilon_0) \mathbf{E}^2 + (\rho_{e\alpha} - \rho_{e0}) \Phi \quad (1.21)$$

となる。ここで  $\mu_{\alpha mix}^{(X)}$  は混合の自由エネルギーを表し、上付き添字  $X$  は計算方法をあらわす ( $X = FH, ADF, SCF, etc.$ )。また流体に働く体積力  $\mathbf{K}(\mathbf{r})$  はこの化学ポテンシャルの表式を用いて

$$\mathbf{K} = - \sum_{\alpha=1}^{M-1} \psi_{\alpha} \nabla \mu_{\alpha} \quad (1.22)$$

と書ける。これは前述の混合系と同じ表式であるが界面張力に加え、新たにマクスウェル応力と電荷による体積力が駆動力として加わっている。

この系の化学ポテンシャルや駆動力項を正しく記述するために必要となった新たな場として、電場  $\mathbf{E}$  とスカラーポテンシャル場が加わったためこれらを解く方程式が必要である。電場に対して  $\nabla \times \mathbf{E} = 0$  が成り立つとすると、電場はスカラーポテンシャルを用いて  $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$  と表される。静電ポテンシャルは Maxwell 方程式  $\text{div} \mathbf{D} = \rho_e(\mathbf{r})$  と  $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$  より、次式

$$\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \nabla \Phi] = -\rho_e(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

で求めることが出来る。

## 1.2 様々な系を記述する方程式とその類似性

以下に4つの例を挙げて、幾つかの系を記述する方程式の類似性について述べる。第1の例はストークス流れの記述する方程式である。ここでは、流体に働く体積力がゼロと考えている。

— ストークス流れ —

$$\nabla \cdot (\eta \mathbf{D}) - \nabla p + \mathbf{K} = 0 \quad (1.24)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.25)$$

$$\mathbf{K} = 0 \quad (1.26)$$

第2の例は多成分混合系のダイナミクスを記述する方程式で、化学ポテンシャル計算方法を変えることにより、高分子ブレンドやブロック共重合体の系、電場下での相分離などを記述することができる。また流体の方程式と組み合わせて解くことにより、流動場の効果も取り入れることができる。 $M$ 成分混合系の化学ポテンシャルに関してはいくつかの近似理論 (Flory-Huggins, Approximate Density Functional Theory, Self-Consistent Field Theory, *etc*) が存在し、それらを要求する近似のレベルに応じて使い分ける。本シミュレータでは Flory Huggins 理論を用いて相分離を取り扱うことにする。他の計算方法により化学ポテンシャルを計算することは、本シミュレータの拡張により可能である。

— 多成分混合系 —

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\psi_\alpha \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad (1.27)$$

$$\mathbf{J}_\alpha = -L_\alpha \nabla \mu_\alpha + \mathbf{J}_\alpha^{(r)} \quad (1.28)$$

$$\mathbf{K} = \sum_{\alpha=1}^{M-1} \mathbf{K}_\alpha = - \sum_{\alpha=1}^{M-1} \psi_\alpha \nabla \mu_\alpha \quad (1.29)$$

and Eq.(1.24) and Eq.(1.25)

第3の例は電解質系で、濃度  $C_\alpha$  と体積分率  $\psi_\alpha$  との違いはあるが、基本的には電場下での  $M$  成分混合系と全く等価であることがわかる。非相溶混合系電気粘性流体、(電場下でのブロックコポリマー)、電解質、高分子電解質は化学ポテンシャル表式の詳細が違っただけで全く同じ方程式系で記述可能であることが分かる。

— 電解質系 —

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad \mathbf{J}_\alpha = -D_\alpha \left[ \nabla C_\alpha + \frac{\rho_{e\alpha} \mathbf{E}(\mathbf{r})}{2k_B T} \right] \quad (1.30)$$

$$\mathbf{K} = -k_B T \sum_{\alpha} \left[ \nabla C_\alpha + \frac{\rho_{e\alpha} \mathbf{E}(\mathbf{r})}{2k_B T} \right] \quad (1.31)$$

$$F = \int d^d \mathbf{r} k_B T C_\alpha \ln C_\alpha + \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} \int d^d \mathbf{r}' \frac{C_\alpha C_\beta q_\alpha q_\beta}{4\pi\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (1.32)$$

and Eq.(1.24) and Eq.(1.25)

第4の例は高分子溶液系での粘弾性相分離を記述する方程式で、二流体モデルに基づいて方程式が導かれる。 $\psi_p$  は高分子の体積分率である。ここで重要となるのはネットワークストレスである。これは高分子の絡み合いに起因する応力場であり構成方程式等を用いて計算する必要がある。

高分子溶液系での粘弾性相分離

$$\frac{\partial \psi_p}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_p) - \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (1.33)$$

$$\mathbf{J} = -L \left[ \psi_p \nabla \mu - \nabla \cdot \sigma^{(N)} \right] \quad (1.34)$$

$$L = \frac{1}{\zeta} \psi_s^2 \psi_p \simeq \frac{a^2}{6\pi\eta_s \psi_p} \quad (\text{in } \Theta \text{ solvent}) \quad (1.35)$$

$$\mathbf{K} = -\psi_p \nabla \mu + \nabla \cdot \sigma^{(N)} \quad (1.36)$$

$$\nabla \cdot \sigma^{(N)} : \text{ネットワークストレスからの寄与} \quad (1.37)$$

and Eq.(1.24) and Eq.(1.25)

以上から、様々な系が同一の方程式の構造をしていることが分かる。これらの系の個性を決めているのは化学ポテンシャルと流体に働く体積力項であるといえる。

## 1.3 シミュレーションでの時間空間単位の決定と方程式の無次元化

### 1.3.1 時間及び空間単位の決定の考え方

シミュレーションを実行する際に無次元化は非常に重要である。その目的は系の特徴的な時間空間スケールを決定し、それを用いて対象としている系のコントロールパラメータを引き出すことにある。もう一度基礎方程式に戻ろう。式 (1.11) をもう一度記す。

基礎方程式

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad (1.38)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \nabla \cdot (\eta \mathbf{D}) - \nabla p + \mathbf{K} \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.39)$$

以下ではこの方程式を無次元化するための考え方と実際にスケールした変数の定義、無次元化パラメータについて説明を行う。

注意

以下では無次元化された変数にはチルド記号をつけることにする。

[シミュレーションでの空間単位]

まず、シミュレーションにおいて用いる空間単位について考えよう。我々が対象としている系には幾つかの物理的に意味の有る特徴的な長さが存在する。例えば、ドメインの特徴的な大きさ  $L(t)$ 、界面幅  $l$ 、ポリマーの回転慣性半径  $R_g$ 、モノマーサイズ  $a$  などである。これらのような系に特有な長さの中で、連続体描像で表現しなくてはならないもっとも短い長さを特定しておくことは非常に重要である。なぜなら、系に出現するもっとも短い長さより大きな格子間隔を用いると、計算の精度が極端に落ち、しばしば計算は破綻する。前述した“幾つかの物理的に意味の有る特徴的な長さ”の中で、連続体描像で表現しなければならない最短の長さは二相間の界面幅  $l$  である。多数の相が共存する場合には、それらの中でもっとも短い界面幅を連続体表現できるよう

にしなければならない。界面幅がこの系に現れる最小の空間変化を表す長さなので、この空間変化を、ある精

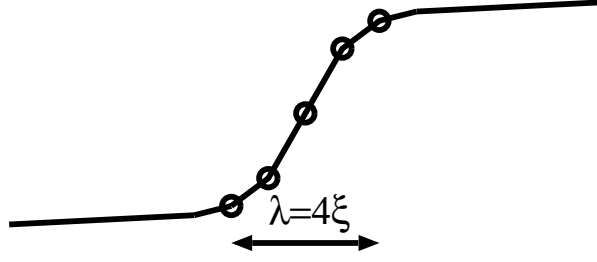


図 1.1: 界面幅の図。λ の約 1/4 が ξ である。

度の範囲内で表現可能な空間格子間隔を用いるのが、最も効率よく、実長さの意味での最大の系をシミュレートする方法であることが分かる。つまり、ある大きさの系 (実長さの意味で) を最小の格子点数を使って実現できることになる。定量的な理論解析結果は無いが、経験則から空間格子間隔  $\Delta x$  を 界面幅  $\lambda$  の約 1/4 (格子点数で言えば、5 点) に取れば精度よく界面形状を表現できることが知られている。以下では、この長さを  $\xi \simeq \lambda/4$  であらわす。ξ は高々 4 倍程度界面幅 λ と違っているだけなので、以後この長さのことを界面幅と呼ぶことにする。界面幅は物質が決定されれば、一定であるかというそうではなく、χ-パラメータ (温度) などに依存する。例えば、界面幅は臨界点近傍では非常に大きくなり、臨界点において発散する。界面幅 ξ が χ-パラメータ (温度) などの物理定数にどのように依存するかを予め知っておくことは非常に重要である。

今  $M$  成分系を考えているので、界面として考えられる組合せは  ${}_M C_2 = M(M-1)/2$  通りある。この  ${}_M C_2$  通りの界面の中で平衡界面幅 ξ が最も短いものを探し、それを系に存在する最小の長さとする。この最小の長さを ξ とし、空間スケールの単位とする。平衡状態での二相間の界面幅は、どのように χ-パラメータや重合度に依存するのであろうか。2つの相の界面について考えると、自由エネルギーに式 (1.13) を用いれば、二相  $(\alpha, \alpha')$  についての臨界点の近くでは、二相  $(\alpha, \alpha')$  間の界面幅  $\xi_{\alpha\alpha'}$  は、

$$\xi_{\alpha\alpha'} \equiv \sqrt{\frac{C_{\alpha\alpha'}}{\Delta\chi_{\alpha\alpha'}}} = \sqrt{\frac{1}{\Delta\chi_{\alpha\alpha'}} \cdot \frac{a^2}{18\bar{\psi}_\alpha\bar{\psi}_{\alpha'}}} \quad (1.40)$$

によって与えられる。ここで、 $\Delta\chi_{\alpha\alpha'} \equiv \chi_{\alpha\alpha'} - \chi_{\alpha\alpha'}^{(c)}$ ,  $\chi_{\alpha\alpha'}^{(c)} \equiv (\sqrt{N_\alpha} + \sqrt{N_{\alpha'}})^2 / 2N_\alpha N_{\alpha'}$  である。ξ<sub>αα'</sub> が最小となる  $(\alpha, \alpha')$  の組合せを求め、求まった組合せを  $(\beta, \beta')$  とし、

$$\xi_{\beta\beta'} \equiv \text{Min}_{<\alpha, \alpha'>} \xi_{\alpha\alpha'} \quad (1.41)$$

により ξ<sub>ββ'</sub> を定義する (記号を省略するため、最小の界面幅の組合せを以下では  $\xi \equiv \xi_{\beta\beta'}$  と記すことにする、また、この組合せ  $(\beta, \beta')$  に対する  $\Delta\chi_{\beta\beta'}$  のことを特に混乱がない場合は記号を省略して  $\Delta\chi$  と書くことにする。) 次に、エネルギー密度の単位として、 $e_o = (k_B T / v_0) \Delta\chi$  を用いると、化学ポテンシャルはスケールされ、

$$\tilde{\mu}_\alpha = \mu_\alpha / e_o \quad (1.42)$$

$$= \frac{1}{\Delta\chi_{\beta\beta'}} \left[ \frac{1}{N_\alpha} \ln \psi_\alpha + \sum_{\alpha'=0}^{M-1} \chi_{\alpha\alpha'} \psi_{\alpha'} \right] - \sum_{\alpha'=0}^{M-1} \frac{C_{\alpha\alpha'}}{C_{\beta\beta'}} \tilde{\Delta} (\psi_\alpha - \psi_{\alpha'}) \quad (1.43)$$

となる。ここで、 $\tilde{\Delta} \equiv \Delta \cdot \xi_{\beta\beta'}^2$  である。以上から、系に特徴的な界面幅 ξ が見積もられた。

## [シミュレーションでの時間単位]

次に、時間を無次元化するための時間の単位について考えよう。時間の単位  $\tau$  には、この系の最も速い物質輸送現象を見積もり、その輸送の特徴的時間を用いて時間の単位を決定するのがよい。第1.1節で述べたように、今考えている系に存在する物質輸送現象には、拡散による物質輸送と流体力学的輸送の2つがある。よって、時間の単位を決定するには、拡散による物質輸送の中で最も速い輸送<sup>2</sup>と流体力学的輸送を比較する必要がある。この2つの特徴的時間はこの系での相分離現象に現れる最短の長さ  $\xi$  を用いて次のように定義する。

1. 成分  $\alpha$  の物質が界面幅  $\xi$  の距離を拡散するのに必要な時間を  $\tau_\alpha^{(D)}$  とするとき、その  $\tau_\alpha^{(D)}$  の最小値 ( $\tau_D = \text{Min}_\alpha \tau_\alpha^{(D)}$ )。
2. 系に存在する流れ  $U$  (印加した流動場もしくは、界面張力により引き起こされる流れ) により物質が界面幅と同じ距離  $\xi$  だけ輸送されるのに必要な時間。

1. の拡散に由来する特徴的時間は、輸送係数を  $L_\alpha$  とすると次式により見積もることが出来る。

$$\tau_o \equiv \xi^2 / D_\alpha^o \quad D_o \equiv k_B T L_\alpha \quad (1.44)$$

しかし、実際の拡散は共同拡散 (相互拡散) であり、 $\xi$  程度の距離を物質が拡散するのに要する時間は式 (1.44) の  $\tau_o$  ではなく  $\chi$  パラメータの値に依存する。<sup>3</sup>、二相  $\alpha, \alpha'$  間の相互拡散係数  $D_{\alpha\alpha' coop}$  は  $D_\alpha^o = k_B T L_\alpha$  を感受率 ( $1/\Delta\chi_{\alpha\alpha'}$ ) で割ったものである。よって、

$$D_{\alpha\alpha' coop} \equiv D_\alpha^o \Delta\chi_{\alpha\alpha'} \quad (1.45)$$

である。これは、溶媒を  $\alpha'$  成分と見立てた時の  $\alpha$  成分の共同拡散係数である。最も速い相互拡散過程は

$$D_{coop} = \text{Max}_{<\alpha\alpha'>} D_{\alpha\alpha' coop} \quad (1.46)$$

で求め、 $\tau_D$  は、 $D_{coop}$  から以下の式で見積もられる。<sup>4</sup> よって、共同拡散による最短の輸送時間は

$$\tau_D = \xi^2 / D_{coop} \quad (1.47)$$

と見積もることが出来る。

次に、2. の流体力学的輸送に由来する特徴的時間  $\tau_H$  を見積もう。流体の特徴的な流れ場の大きさを  $U$  とすると、 $\tau_H$  は

$$\tau_H = \xi / U$$

で与えられる。よって、この二つの特徴的な時間の比が重要な量となる。これを  $g_0$  とし次式

$$g_0 = \tau_D / \tau_H$$

で定義する。それでは、流体の特徴的な流れ場の大きさを  $U$  はどのように決定されるのか。これは粘性項 (式 (1.39) の右辺第二項) と体積力項 (式 (1.39) の  $\mathbf{K}$ ) の釣合いによって決定されることが妥当である。体積力項は扱う系の状況に応じて複数の項から構成される。よって、流れ場の見積りには全ての効果を考慮して決定する必要があるがシミュレータの汎用性により、ある項が存在したり、しなかったりと変化するために一般的な状況に対する正確な見積りは不可能である。よって、体積力が界面張力に由来するとしてこれを近似的に見積りにすることにする。ドメインサイズのスケールで速度の空間変化が起こっているとすると粘性力は  $\eta L_D^{-2} U$  と見積もることが出来る。ここで、 $L_D$  はドメインの特徴的な大きさである。界面張力に由来する体積力の大きさはラプラスの式から見積もることが出来る。圧力勾配が界面幅程度で起こっているとすると  $\nabla p \simeq p/\xi$  であ

<sup>2</sup>ここでの見積もりでは、拡散による輸送は成分に依存するので、それらの中でもっとも速い輸送のみに着目することになる。

<sup>3</sup>臨界点近傍では感受率が発散するため、共同拡散係数は著しく小さくなる。

<sup>4</sup>ここで、 $\text{Max}_{<\alpha\alpha'>} X_{\alpha\alpha'}$  は、成分のあらゆる組合せの中で  $X_{\alpha\alpha'}$  が最大のものを意味する。

り、圧力がラプラスの式で界面張力  $p = \gamma/L_D$  の関係で結び付いているとすると  $\gamma/\xi L_D$  と見積もることが出来る。よって、この二つの力の釣合により特徴的な速度の大きさが以下のように決定される。

$$\text{粘性力} \sim \text{体積力 (界面張力に由来)} \quad (1.48)$$

$$\eta_{min} L_D^{-2} U \sim \frac{\gamma}{\xi L_D} \quad (1.49)$$

ここで、 $\eta_{min}$  は各成分の粘度の中で最も小さなものをさす ( $\eta_{min} \equiv \text{Min } \eta_\alpha$ )。このとき、 $U$  は最大となる。

この見積もりでは流れの変化の特徴的な空間スケールが  $L_D$  (=特徴的なドメインサイズ) であることを仮定している。この等式 (1.49) から、流体の特徴的な流れの大きさ  $U$  は

$$U \sim \frac{\gamma}{\eta_{min}} \frac{L_D}{\xi} \quad (1.50)$$

と見積もることが出来る。ここで、 $\gamma$  は界面張力で

$$\gamma \simeq \frac{\sqrt{2} k_B T}{a^2} \frac{(\Delta \chi_{\beta\beta'})^{3/2}}{\chi_c^2 \sqrt{N_\beta N_{\beta'} \bar{\psi}_\beta \bar{\psi}_{\beta'}}} \quad \chi_c = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{N_b}} + \frac{1}{\sqrt{N_{b'}}} \right)^2$$

で定義される。式 (1.50) で見積もられた速度場の大きさは、ドメインサイズに依存するため、速度場の単位としてはふさわしくない。そこで、速度場の単位として  $U_o = \gamma/\eta_{min}$  を用いる。速度場  $\tilde{\mathbf{v}}$  は、 $U_o$  を用いて

$$\tilde{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{U_o}, \quad U_o \equiv \frac{\gamma}{\eta_{min}}$$

のようにスケールする。また、圧力場  $p$ 、体積力  $\mathbf{K}$ 、粘度  $\eta$  はそれぞれ

$$\tilde{p} = \frac{\xi}{\eta_{max} U_o} p, \quad \tilde{\mathbf{K}} = \frac{\xi}{e_o} \mathbf{K}, \quad \tilde{\mathbf{J}} = \frac{\xi}{e_o} \mathbf{J}, \quad \tilde{\eta} = \frac{\eta}{\eta_{max}}$$

のようにスケールする。ここで、 $\eta_{max}$  は各成分の粘度の中で最大の値 ( $\eta_{max} \equiv \text{Max } \eta_\alpha$ ) を意味する。

実際の物理定数を用いて、物質が界面幅程度の距離を共同拡散によって輸送される特徴的時間  $\tau_D$ 、流体力学的輸送により運ばれる特徴的時間  $\tau_H$  を見積もると、我々が対象としている高分子混合系では、 $\tau_H \ll \tau_D$  であることが分かる。<sup>5</sup> よって時間スケールとしては、最も速い運動から得られる特徴的時間を用いるのがよい。そこで時間の単位として  $\tau_H$  を用いることとし、今後これを  $\tau$  と書くことにする。無次元化された時間は、

$$\tilde{t} = t/\tau$$

で定義される。

#### [方程式の無次元化]

前節、前前節において、空間単位、時間単位を決定した。これらを用いて、方程式を無次元化すると

無次元化された基礎方程式 1：流体の慣性が無視できない場合

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial \tilde{t}} = -\tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\mathbf{v}} \psi_\alpha) - \tilde{D}_\alpha \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{K}}_\alpha \quad (1.51)$$

$$Re \cdot \tilde{\rho} \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial \tilde{t}} = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\eta} \tilde{\mathbf{D}}) + Ca^{-1} \tilde{\mathbf{K}} \quad \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}} = 0 \quad (1.52)$$

$$\tilde{D}_\alpha \equiv D_\alpha |\Delta \chi| \frac{\tau}{\xi^2} \quad Ca^{-1} = \frac{k_B T}{v_o} \frac{\Delta \chi \xi}{\eta_{max} U_o} \quad Re = \frac{\tilde{\rho} \xi U_o}{\eta_{max}} \quad (1.53)$$

ここで、 $\tilde{D}_\alpha$  は無次元化された拡散係数であり、 $Ca$  は通常使われているキャピラリー数  $Ca \equiv \eta U / \gamma$  ( $U$ : 特徴的

<sup>5</sup> 拡散係数  $D_{coop} = 1.0 \times 10^{-9} \sim 10^{-11}$  cm<sup>2</sup>/sec、界面幅  $\xi \sim 5$  nm、界面張力 10.0 mN/m、粘度 1.0 Pa·sec とするとき、 $\tau_D \sim 10^{-3}$  sec、 $\tau_H \sim 10^{-6}$  sec 程度である。

な流れの大きさ) と若干違っているので注意して欲しい。また、慣性項に現れた  $Re$  も流体力学でいうところのレイノルズ数  $Re$  の定義と若干違っているので注意してほしい。 $Re$  の特徴的長さのところにドメインサイズを入れたものが通常レイノルズ数と呼ばれているものである。この  $Re$  は我々が対象としている高分子系では非常に小さいことが多い。このような系では流体の慣性は無視でき、解くべき方程式は以下になる。

— 無次元化された基礎方程式 2 : 流体の慣性が無視できる場合 —

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial \tilde{t}} = -\tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\mathbf{v}} \psi_\alpha) - \tilde{D}_\alpha \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{K}}_\alpha \quad (1.54)$$

$$0 = -\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\eta} \tilde{\mathbf{D}}) + \text{Ca}^{-1} \tilde{\mathbf{K}} \quad \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}} = 0 \quad (1.55)$$

$$\tilde{D}_\alpha \equiv D_\alpha |\Delta \chi| \frac{\tau}{\xi^2} \quad \text{Ca}^{-1} = \frac{k_B T}{v_o} \frac{\Delta \chi \xi}{\eta_{max} U_o} \quad (1.56)$$

### 1.3.2 相互作用自由エネルギー密度項の無次元化

ここでは、式 (1.21) の相互作用エネルギー密度の中で  $\chi$ -パラメータ項以外の項に現れる無次元化パラメータについて整理しよう。式 (1.21) の  $\chi$ -パラメータ項以外の部分を  $f_{int}^{(ex)}$  と呼ぶことにし、

$$f_{int}^{(ex)} = \rho_e(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) - \frac{\epsilon(\mathbf{r})}{2} \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) \quad (1.57)$$

と書き表す。この各項の無次元化をおこなう。電場の大きさの単位  $E_o$  として、1kV/mm を用いることにする。スカラーポテンシャルは  $\phi_o \equiv E_o \xi$  を単位にして無次元化すると、 $\tilde{\Phi}(\tilde{\mathbf{r}}) = \Phi(\mathbf{r})/\phi_o$  となる。一方、誘電率  $\epsilon(\mathbf{r})$  は誘電率  $\epsilon(\mathbf{r})$  各成分の誘電率の中で最大の値  $\epsilon_{max}$  でスケールする。以上から、無次元化された相互作用自由エネルギー密度は

$$\tilde{f}_{int}(\tilde{\mathbf{r}}) = \sum_{\alpha}^{M-1} \tilde{\rho}_{e\alpha} \psi_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}) \tilde{\Phi}(\tilde{\mathbf{r}}) - \frac{1}{2} B \sum_{\alpha}^{M-1} \tilde{\epsilon}_\alpha \psi_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}) \tilde{\mathbf{E}}^2(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (1.58)$$

$$\tilde{\rho}_{e\alpha} \equiv \frac{e \nu_\alpha Z_\alpha \phi_o}{k_B T} \cdot \frac{1}{|\Delta \chi|} \quad B \equiv \frac{\epsilon_{max} E_o^2 v_o}{k_B T} \cdot \frac{1}{|\Delta \chi|} \quad (1.59)$$

で表される。ここで、係数  $B$  は誘電率  $\epsilon_{max}$  を持った微小体積要素  $v_o$  に  $E_o$  の大きさの電場が存在する時に、この体積要素内に蓄えられている電磁エネルギーと、モノマー間に働く相互作用自由エネルギーとの比であり、 $B$  が大きい程、電磁気的な効果が支配的となる。また、 $\tilde{\rho}_{e\alpha}$  は Coulomb エネルギーとモノマー間に働く相互作用自由エネルギーとの比を表しており、この値が大きいほどクーロン相互作用の方が支配的となる。

### 1.3.3 Maxwell 方程式の無次元化

誘電率を最大の誘電率、電場を  $E_o$ 、でスケールし式 (1.18)(1.23) を用いると無次元化された Maxwell 方程式は

$$\tilde{\nabla} \cdot [\tilde{\epsilon}(\tilde{\mathbf{r}}) \tilde{\nabla} \tilde{\Phi}(\tilde{\mathbf{r}})] = - \sum_{\alpha=0}^{M-1} \tilde{\rho}_{e\alpha} B^{-1} \psi_\alpha(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (1.60)$$

のように表されることが分かる。

## 1.3.4 入力に必要な実パラメータと無次元化パラメータ

無次元化したパラメータの値を求めるにはまず次の基本パラメータ (単位付きの実際の値) を入力しなければならない。

[基本パラメータ (単位付きの実際の値)]

$M$	成分数
$a$	モノマーサイズ
$N_\alpha$	モノマーを単位とした各成分の重合度 ( $\alpha = 0, \dots, M-1$ )
$\chi_{\alpha\alpha'}$	$\chi$ -パラメータ ( ${}_M C_2$ 通りの組合せ)
$\eta_\alpha$	各成分の粘度
$D_\alpha$	各成分の拡散定数
$T$	温度
$\psi_\alpha$	各成分の仕込み体積分率 ( $\alpha = 0, \dots, M-1$ ) <sup>6</sup>

この入力情報から空間単位  $\xi$  と時間単位  $\tau$  などが求まる。

[空間単位と時間単位]

空間単位	$\xi$	$\xi = \text{Min}_{\langle \alpha, \alpha' \rangle} \sqrt{\frac{1}{\Delta\chi_{\alpha\alpha'}} \cdot \frac{a^2}{9\bar{\psi}_\alpha\bar{\psi}_{\alpha'}}}$ $\Delta\chi_{\alpha\alpha'} \equiv \chi_{\alpha\alpha'} - \chi_{\alpha\alpha'}^{(c)}$ $\chi_{\alpha\alpha'}^{(c)} \equiv \frac{(\sqrt{N_\alpha} + \sqrt{N_{\alpha'}})^2}{2N_\alpha N_{\alpha'}} : \text{臨界値}$
時間単位	$\tau$	$\tau = \frac{a^2 \xi \eta_{min}}{\sqrt{2} k_B T} \frac{\chi_c^2 \sqrt{N_\beta N_{\beta'}} \bar{\psi}_\beta \bar{\psi}_{\beta'}}{(\Delta\chi)^{3/2}}$ <p><math>\Delta\chi</math> は <math>\xi</math> を与える組合せを <math>(\beta, \beta')</math> とすると、その組合せでの <math>\Delta\chi_{\alpha\alpha'}</math> の値</p>

<sup>6</sup> ドロップレットを配置する場合には半径から計算した概算値でよい



[単位付きの実際のパラメータから無次元化パラメータへの変換]

無次元化パラメータ	意味	入力変数と計算式	MUFFIN 入力パラメータ名
$\tilde{\eta}_\alpha$	各成分無次元粘度	$\tilde{\eta}_\alpha = \eta_\alpha / \eta_{max}$ $\eta_{max} \equiv \text{Max}_\alpha \eta_\alpha$	VISCOSITY
$\tilde{D}_\alpha$	無次元化した拡散定数	$\tilde{D}_\alpha = D_\alpha  \Delta\chi  \frac{\tau}{\xi^2}$	DIFFUSION_COEFFICIENT
$\tilde{\dot{\gamma}}$	無次元化した シアレート	$\tilde{\dot{\gamma}} = \dot{\gamma} \tau$	SHEAR_RATE
$\tilde{R}_i$	無次元化したドロップ レット半径	$\tilde{R}_i = R_i / \xi$	RADIUS_OF_DROPLET
$\tilde{\rho}_{e\alpha}$	無次元化した電荷密度	$\tilde{\rho}_{e\alpha} = \frac{\rho_{e\alpha} a^3 E_o \xi}{k_B T} \cdot \frac{1}{ \Delta\chi }$ $E_o \equiv 1.0 \text{ kV/mm}$	CHARGE_DENSITY
$B$	無次元化した 電気エネルギー	$B = \frac{a^3 \epsilon_{max} E_o^2}{k_B T} \cdot \frac{1}{ \Delta\chi }$	B
$\tilde{\epsilon}_\alpha$	$\alpha$ 成分の比誘電率	$\tilde{\epsilon}_\alpha = \epsilon_\alpha / \epsilon_{max}$ $\epsilon_{max} \equiv \text{Max}_\alpha \epsilon_\alpha$	DIELECTRIC_CONSTANT
Ca	キャピラリー数	$\text{Ca} = \frac{k_B T}{v_o} \frac{\Delta\chi \xi}{\eta_{max} U_o}$	CA

## [Simulation 前フローチャート]

1. Simulation したい系の基本入力変数の値を調査
2. 基本入力変数を入力し、これから実行するシミュレーションの空間単位、時間単位を無次元変数変換ツールを用いて求める。
3. 基本入力変数の値から  $Re$  を計算ツールを用いて見積もり流体の慣性項が重要な系か、慣性が必要ない系かを調べておく。これは、後で、流体に用いるモジュールに慣性項があるものを用いるか、慣性項無しのモジュールを用いるかを判断する指針となる。
4. システムの境界条件を決定する。  
システムサイズ  
周期的、擬周期的  
壁の有無、  
Lees-Edwards 境界
5. 用いたい場を確定する
6. 各場に対して用いたい、初期化モジュールを決める
7. 各場に対して用いたい、境界条件設定モジュールを決めるこのとき、4 で設定した境界条件と矛盾しないかどうかをきめる。
8. 各場に対して用いたい、時間発展モジュールを決定する。
9. 各場に対して用いたい、解析モジュールを決定する。つぎに、解析を行う時間間隔を設定する。
10. 必要なパラメータの一覧が出力される。これらを、無次元パラメータ作成ツール MuffinMujigen.py に渡し、無次元パラメータを確定する。

## 1.4 有限差分法を用いた多相流体シミュレータ PhaseSeparation\_FDM

有限差分法シミュレータ PhaseSeparation\_FDM は MUFFIN 多相流体シミュレータを有限差分法により実装したもの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 描像の有限差分法を用いる。
- 流体流れ場として遅い流れ (Stokes 流) を対象とする。
- 解くことのできる系として、各成分の体積分率を変数とする多成分高分子流体を想定する。  
(電解質溶液に対するシミュレータは後述する電解質シミュレータとして独立した)
- 場の量に対する境界条件は次節で詳細に説明するが、系の形状が直方体であるとして、その 6 つの境界平面上で全ての場に対して境界条件を指定する。

選択可能な場

選択可能な場	記号
体積分率場	$\psi_\alpha$
化学ポテンシャル場	$\mu_\alpha$
流束場 (流体力学効果は含まない)	$J_{i\alpha} \quad (i = x, y \text{ or } z)$
速度場	$V_i \quad (i = x, y \text{ or } z)$
圧力場	$P$
電場スカラーポテンシャル場	$\Phi$

ここで、 $N_c$  は組成数で  $\alpha$  は組成を表すインデックスで  $\alpha = 0, \dots, N_c - 1$  の値をとる。

### 1.4.1 計算モデル

FDM シミュレータの多成分流体の基本モデルとしては以下の方程式系を用いる。

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad (1.61)$$

$$\mathbf{J}_\alpha = -L_\alpha \psi_\alpha \nabla \mu_\alpha \quad (1.62)$$

$$-\nabla p + \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + \mathbf{K} = 0 \quad (1.63)$$

$$\mathbf{K} = -\sum_{\alpha} \psi_\alpha \nabla \mu_\alpha \quad (1.64)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.65)$$

ここで  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  は成分  $\alpha$  の体積分率であり  $L_\alpha$  は Onsager 係数、 $\mu_\alpha$  は化学ポテンシャルである。 $\mathbf{v}$  は流体速度場、 $p$  は圧力場、 $\eta$  は粘性係数、 $\mathbf{K}$  は流体場の駆動力となる体積力である。流体速度場の方程式には Stokes 方程式を用いる。

### 1.4.2 各場に対する壁面での境界条件

有限差分法バージョンの多相流体シミュレータでは系は直方体の中にあるとしている。よって各場に対して境界条件を与えなくてはならない面は次の6つである。

この6つの境界面上で境界条件を各場に対して与えなければならない。

#### 体積分率場 $\psi_\alpha$ に対する境界条件

体積分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

$x$  方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

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

$y$  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。 $\alpha$  は成分を表すインデックス。

- Biased Periodic 境界条件

$x, y, z$  の方向に対して

ギャップを持った周期境界条件が設定可能である。例えば、 $x$  方向に、この境界条件を課した場合

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

となる。ここで  $A_x$  は  $x$  方向のギャップ値である。

- 壁面境界条件

6つの境界面、それぞれに対して境界を壁面と想定して次のような境界条件を設定することが可能である。壁面上で拡散流束が発生しないように、壁面に垂直方向の勾配をゼロとし、以下の式で表される。

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

ここで記号  $|_{wall}$  は壁面上での値を意味する。

- バルク境界条件

6つの境界面に対して、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。

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

である。

#### 化学ポテンシャル場に対する境界条件

化学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

$x$  方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

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

$y$  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。 $\alpha$  は成分を表すインデックス。

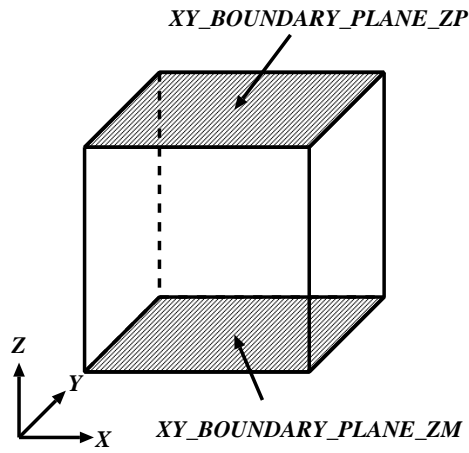


図 1.2:  $Z$  方向の 2 つの  $XY$  平面の境界  
 $YZ\_BOUNDARY\_PLANE\_XM$

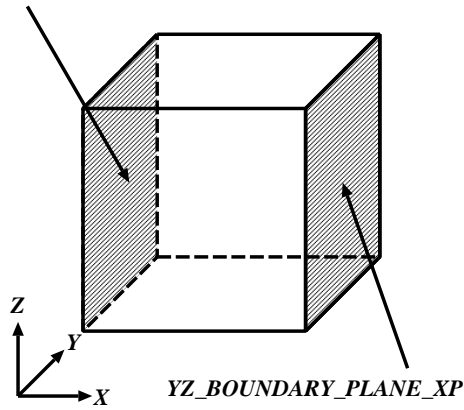


図 1.3:  $X$  方向の 2 つの  $YZ$  平面の境界

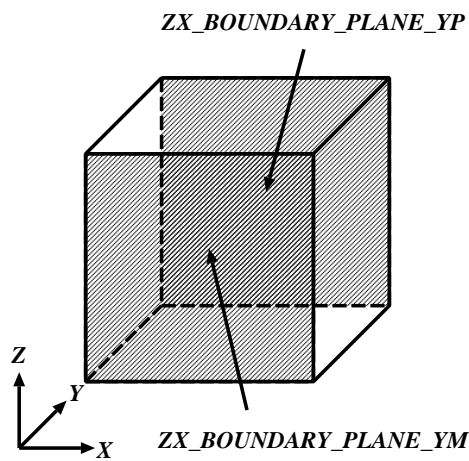


図 1.4:  $Y$  方向の 2 つの  $ZX$  平面の境界

- 壁面境界条件

6つの境界面、それぞれに対して境界を壁面と想定して次のような境界条件を設定することが可能である。壁面上で拡散流束が発生しないように、壁面に垂直方向の勾配をゼロとし、以下の式で表される。

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

ここで記号  $|_{wall}$  は壁面上での値を意味する。

- Lees Edwards 境界条件

$z$  方向のみシアストレインに対応して Lees Edwards 境界条件が設定できる

#### 流束場 $K_\alpha$ に対する境界条件

流束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

$x$  方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

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

$y$  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

流束の値が壁面上でゼロとする。式で表すと

$$K_\alpha(x, y, z)|_{wall} = 0$$

ここで記号  $|_{wall}$  は壁面上での値を意味する。

- バルク境界条件

流束の境界面上での勾配がゼロ 6つの境界面に対して、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体積分率はある値 (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。

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

- Lees Edwards 境界条件

$z$  方向のみシアストレインに対応して Lees Edwards 境界条件が設定できる

#### 速度場 $\mathbf{v}$ に対する境界条件

流束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

$x$  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与える 6 つの境界面、それぞれに対して壁面がある速度  $\mathbf{v}_o$  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。

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

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

- 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

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

- Lees Edwards 境界条件

$z$  方向のみシアストレインに対応して Lees Edwards 境界条件が設定できる

### 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

$x$  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。

- Biased Periodic 境界条件

$x, y, z$  の方向に対して以下のようなギャップを持った周期境界条件が設定可能である。例えば、 $x$  方向に、この境界条件を課した場合

$$P(x, y, z) = P(x + L_x, y, z) + A_x$$

となる。ここで  $B_x$  は  $x$  方向のギャップ値である。

- 境界上で速度場の値を設定した場合

圧力勾配がゼロ

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

- 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。

$$P(x, y, z)|_{Boundary} = P_o$$

- 境界上で振動する圧力値を設定

ある境界面で振動する圧力値を与える。

$$P(x, y, z)|_{Boundary} = P_o + \delta P \cdot \sin(\omega t)$$

ここで、 $P_o$  は圧力の平均値で、 $\delta P$  は振幅、 $\omega$  は振動数、 $t$  は時間である。

- Lees Edwards 境界条件

$z$  方向のみシアストレインに対応して Lees Edwards 境界条件が設定できる

### 静電ポテンシャル場に対する境界条件

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

$x$  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。

- Biased Periodic 境界条件

$x, y, z$  の方向に対して以下のようなギャップを持った周期境界条件が設定可能である。例えば、 $x$  方向に、この境界条件を課した場合

$$\phi(x, y, z) = \phi(x + L_x, y, z) + A_x$$

となる。ここで  $A_x$  は  $x$  方向のギャップ値である。

- 境界上で表面電荷密度  $\sigma$  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

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

であり、記号の定義は式 (??), (??) と同じである。

- 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。

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

- 境界上で振動する電位を設定

$x$  軸方向に垂直な境界面のみ境界面の電位を振動させることが可能である。

$$\phi(x, y, z)|_{Boundary} = \phi_o + \delta\phi \cdot \sin(\omega t)$$

ここで、 $\phi_o$  は平均電位、 $\delta\phi$  は電位の振幅  $\omega$  は振動数、 $t$  は時間である。

- Lees Edwards 境界条件

$z$  方向のみシアストレインに対応して Lees Edwards 境界条件が設定できる。

#### 注意

以上の境界条件を設定する際に必要となる無次元化されたパラメータの数値は 1.3 の「方程式の無次元化」でなされた無次元化に従う。



## 1.5 有限要素法を用いた多相流体シミュレータ PhaseSeparation\_FEM

MUFFIN 多相流体シミュレータ FEM 版は高分子混合系の流動や相分離挙動のシミュレーションを有限要素法により実装したものであり以下のような仕様となっている。

- 解くことのできる多成分系として、成分の構成要素の体積分率を変数とする多成分高分子流体を想定する。
- 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する。
- 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。
- 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。

三次元有限要素法を用いることにより有限差分法を用いたシミュレータと比較して形状表現の自由度が増し、また境界条件の扱いが容易になるという特徴がある。その反面、有限差分法シミュレータと比較して一般的には計算時間、必要な記憶容量は多くなることに注意する必要がある。

選択可能な場は以下のようにになっている。

### 選択可能な場

組み換え可能な場	使われる記号
体積分率場	$\psi_\alpha$
化学ポテンシャル場	$\mu_\alpha$
流束場 (流体力学効果は含まない)	$J_{i\alpha} \quad (i = x, y \text{ or } z)$
速度場	$V_i \quad (i = x, y \text{ or } z)$
圧力場	$P$
静電ポテンシャル場	$\Phi$

である。ここで、 $N_c$  は組成数で  $\alpha$  は組成を表すインデックスで  $\alpha = 0, \dots, N_c - 1$  の値をとる ( $N_c$  : 成分の数)。

### 1.5.1 計算モデル

FEM シミュレータの多成分流体の基本モデルとしては有限差分法と同様に以下の方程式系を用いる。

$$\frac{\partial \psi_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} \psi_\alpha) - \nabla \cdot L_\alpha \mathbf{K}_\alpha \quad (1.66)$$

$$\mathbf{K}_\alpha = -\psi_\alpha \nabla \mu_\alpha \quad (1.67)$$

$$Re\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + \mathbf{K} \quad (1.68)$$

$$\mathbf{K} = \sum_{\alpha} \mathbf{K}_\alpha \quad (1.69)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.70)$$

ここで  $\psi_\alpha(\mathbf{r})$  は成分  $\alpha$  の体積分率もしくはイオン濃度場であり  $L_\alpha$  は Onsager 係数、 $\mu_\alpha$  は化学ポテンシャルである。 $\mathbf{v}$  は流体速度場、 $p$  は圧力場、 $\eta$  は粘性係数、 $\mathbf{K}$  は流体場の駆動力となる体積力である。流体速度場の方程式は移流項を考慮しない Navier Stokes 方程式であり、本シミュレータではさらに慣性項  $\partial \mathbf{v} / \partial t$  を無視した Stokes 近似を適用することもできる。

方程式系の物理的意味の詳細については1章に詳述されている。また個々の応用体系の方程式やパラメータの無次元化の詳細については有限差分法によるシミュレータ (PhaseSeparation\_FDM, 1.4 節)、と同一であるのでおのおのの対応する節を参照されたい。

### 1.5.2 有限要素シミュレータでの流体速度場の計算手法

有限要素法による流体速度場の計算に用いる解法には様々なものが開発されてきている [1, 2]。本シミュレータではそれらの中から大規模な三次元問題に適用することを考慮して多段階解法の一種である「流速修正法」を採用している。この方法ではまず Navier-Stokes 方程式を時間に関して離散化する ( $\rho = 1$  で無次元化)。

$$\frac{\mathbf{v}^{(n+1)} - \mathbf{v}^{(n)}}{\Delta t / Re} = -\nabla p^{(n+1)} + \nabla \eta (\nabla \mathbf{v}^{(n)} + (\nabla \mathbf{v}^{(n)})^t) + \mathbf{K}^{(n+1)} \quad (1.71)$$

ここで  $(n)$  がついている変数は現在の時間ステップの値で既知の量であり、 $(n+1)$  がついている変数は次の時間ステップの値である。またこれ以降は  $\Delta t / Re$  を  $\Delta t$  と記述する。

この式の両辺の発散をとり、非圧縮の条件  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  を適用すると圧力場に対する Poisson 型方程式が得られる。

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^{(n)} + \Delta t \left\{ \nabla \eta (\nabla \mathbf{v}^{(n)} + (\nabla \mathbf{v}^{(n)})^t) + \mathbf{K}^{(n+1)} \right\} \quad (1.72)$$

$$\nabla^2 p^{(n+1)} = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^* \quad (1.73)$$

$\mathbf{v}^*$  は体積力と粘性応力による速度変化をとり入れた「中間流速」と考えることができる。中間流速から圧力場を計算し、それを式 (1.71) に代入すれば次の時間ステップの速度場を計算することができる。

$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \mathbf{v}^* - \Delta t \nabla p^{(n+1)} \quad (1.74)$$

式 (1.74) が中間流速を圧力場の勾配で補正する形になるため「流速修正法」と呼ばれる。

式 (1.72) (1.73) (1.74) に対して「重み付き残差法」を適用することによって有限要素差分化を行う。速度場、圧力場および外力場は要素を構成する節点  $I$  で値 1 をもつ補間関数  $L_I(\mathbf{r})$  の線形結合による試行関数で現わす；

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \sum_I L_I(\mathbf{r}) \mathbf{v}_I \quad (1.75)$$

$$p(\mathbf{r}) = \sum_I L_I(\mathbf{r}) p_I \quad (1.76)$$

$$\mathbf{K}(\mathbf{r}) = \sum_I L_I(\mathbf{r}) \mathbf{K}_I \quad (1.77)$$

この手法では中間流速の計算 (1.72) と流速の修正 (1.74) については接点での集中質量マトリックスを用いることで陽的に処理でき、陰的に解く必要があるのは式 (1.73) の圧力場の Poisson 方程式のみである。

流体速度場の解法には速度場と圧力場の連成方程式を同時に陰的に解く「直接法」と呼ばれる手法もあるが、その場合には連立一次方程式の未知数が接点数のすくなくとも 4 倍となる。実際には圧力場について速度場より高い次数の補間関数を適用する必要があり、圧力場の自由度を多くとることになるため未知数の数はさらに増加する。流速修正法では陰的に解かれるものはスカラー量である圧力場のみであるため、接点数の多い大規模な問題に対しては直接法よりメモリ、計算時間に関して有利になる。

ただし圧力場の計算以外は陽的に計算することになるため、計算のための時間きざみ  $\Delta t$  がある値以上に大きくなると計算が不安定になる。一般に流体力学計算において時間きざみに課される条件として CFL (Courant, Friedrich, Levy) 条件がある

$$\Delta t \leq \frac{h}{3U} \quad (1.78)$$

ここで  $h$  は計算における最小メッシュ幅、 $U$  は流速の絶対値でこの条件を全ての要素位置でみたす必要がある。ただし、この条件は移流項が支配的な場合に必要となる条件であり、本シミュレータでは移流項を無視する近似を行っているため、この条件よりも粘性係数で定まる速度場の運動量の拡散 (粘性応力) に関連する以下の条件の方が一般により重要となることが多い。

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{9\eta} \quad (1.79)$$

### 1.5.3 Stokes 流の計算

流れ場を Stokes 流として計算する場合には  $\partial \mathbf{v} / \partial t$  をゼロとする。Stokes 流を計算する場合には定常状態になるまで時間発展ステップを繰り返す方式をとる。この場合には時間きざみ  $\Delta t$  は定常状態に至るための繰り返しのために必要な仮想的な時間であり、実際の物理的時間とは区別しなければならない。MUFFIN の FEM 流体シミュレータでは、Stokes 流計算のための時間ステップ間隔値は入力パラメータ "DT\_FOR\_V" で与えられ、一方、速度場と圧力以外の場の計算には実際の物理的時間ステップ間隔に対応した値が入力パラメータ "DT" で与えられる。

### 1.5.4 有限要素法での離散化手法と境界条件の関連

本シミュレータでは多成分高分子系や電解質系を有限要素法により扱っているが、有限要素法では境界条件、特に境界における物理量  $f$  の勾配の境界面法線方向成分  $\mathbf{n} \cdot \nabla f$  を与える Neumann 条件の扱い方に特色があるここで  $\mathbf{n}$  は境界面の外向き法線ベクトルである。

重要なのは、

————— Neumann 条件 —————

$\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$  の形の Neumann 条件 (自然境界条件) は明示的に与える必要はない。

ということである。

たとえば流速修正法による流れ場計算における圧力や、電場ポテンシャルの方程式として現れる Poisson 方程式を考える。

$$\nabla^2 f = \sigma \quad (1.80)$$

本シミュレータで採用している重みつき残差法による離散化では、任意の重み関数  $W(\mathbf{r})$  で積分された方程式の残差がゼロになる条件を課す (弱形式による解)。

$$\int d\mathbf{r} (\nabla^2 f(\mathbf{r}) - \sigma(\mathbf{r})) W(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.81)$$

Galerkin-Ritz 法による重みつき残差法による有限要素化では、物理量  $f(\mathbf{r})$  の空間補間関数  $L_I(\mathbf{r})$  と同一の補間関数を用いて重み関数  $W(\mathbf{r})$  を離散化する。

$$f(\mathbf{r}) = \sum_I L_I(\mathbf{r}) f_I \quad (1.82)$$

$$W(\mathbf{r}) = \sum_I L_I(\mathbf{r}) W_I \quad (1.83)$$

式 1.81 のラプラシアンが適用される  $f$  の項は部分積分によって微分次数の一つ低い体積積分と表面積分に分解される;

$$\int d\mathbf{r}(\nabla^2 f(\mathbf{r}) - \sigma(\mathbf{r}))W(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r} \nabla f \nabla W - \int d\mathbf{r} \sigma(\mathbf{r})W(\mathbf{r}) + \int dS W(\mathbf{n} \cdot \nabla f) = 0 \quad (1.84)$$

$f$  を含む項を各要素  $e$  における補間式で表すと;

$$\int_e d\mathbf{r}(\nabla^2 f(\mathbf{r}))W(\mathbf{r}) = - \int_e d\mathbf{r} \left( \sum_J f_J \nabla L_J \right) \left( \sum_I W_I \nabla L_I \right) + \int_e dS \left( \sum_I L_I(\mathbf{r}) W_I \right) (\mathbf{n} \cdot \nabla f) \quad (1.85)$$

ただし重み関数  $W$  の連続性のため隣り合う要素間の表面積分は式 (1.84) において相互に打ち消しあうため、式 (1.85) における表面積分は計算体系の外部境界でのみ考慮すればよい。

節点  $I$  の  $W_I$  の任意の値に対して式 (1.85) が成立するという条件を課すことにより各要素の  $f_I$  に対して解くべき式が決定される。

$$\sum_J f_J \left[ \int_e d\mathbf{r} \nabla L_J \nabla L_I \right] = - \int_e d\mathbf{r} \sigma L_I + \int_e dS L_I (\mathbf{n} \cdot \nabla f) \quad (1.86)$$

最終的な連立一次方程式は節点  $I$  を含むすべての要素に関する  $f_I$  の条件式 (1.86) を足し合わせることで得られる。

ここまでの説明でわかるように、Poisson 方程式の有限要素離散化で現れる表面積分の項の計算が Neumann 条件の処理となる。従って  $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$  の場合にはこの表面積分項を計算する必要がなくなることになる。また現状では  $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$  のみ指定可能である場の量もあるが、その場合には表面での境界条件は明示的に与えることはできないことに注意する必要がある。

Poisson 方程式以外の形式についても同様の取り扱いとなるが、詳しい境界条件の取り扱いについては以下の各々の場の説明で個々に触れるのでそれを参照されたい。

### 1.5.5 Partial region condition による境界条件の指定

FEM シミュレータでは MUFFIN の入力 UDF で定義された部分領域条件を用いて境界条件を指定する (partial region condition。UDF データパス名は region\_condition[])。FEM シミュレーターでは計算体系形状については有限要素メッシュで与えることのできる任意の形状を取り扱うことができる。そのためメッシュタイプが UNSTRUCTURED\_RECT 以外の場合には、有限差分法シミュレータのようにあらかじめ決められた X、Y、Z 方向の境界とそれらの上の境界条件の組を与えるという方式をとることはかならずしも可能ではない。

Partial region condition は空間の特定部分を表す partial region とその上で定義された場の量の組み合わせで与えられる。たとえば流れの計算において Y 軸に垂直な壁面上で速度を X 方向に速さ 1.0 の流れに固定する条件を与えるとすると、以下のようなデータの組み合わせによる partial region condition となる;

- 部分領域名: BOUNDARY\_VERTEX\_YMAX
- 場の名前: Velocity
- 境界条件シンボル: D\_VX (ベクトルの X 成分を固定値にする Dirichlet 条件)
- 境界条件にともなう数値データ等のならび: ここでは数値。

UDF データは以下のようなものになる;

```
{ "YMAX_Vx" "BOUNDARY_VERTEX_YMAX" "Velocity" "D_VX" [ "1.0" ] }
{ "YMAX_Vy" "BOUNDARY_VERTEX_YMAX" "Velocity" "D_VY" [ "0" ] }
{ "YMAX_Vz" "BOUNDARY_VERTEX_YMAX" "Velocity" "D_VZ" [ "0" ] }
```

”YMAX\_Vx”等は partial region condition に与える名前 (KEY) でデータ作成者が任意に指定して良いものである。

“BOUNDARY\_VERTEX\_YMAX”はメッシュ形状タイプ (UDF データパス名は `parameter.mesh.parameter.type`) が “UNSTRUCTURED\_RECT” (非構造型矩形領域メッシュ) の場合に MUFFIN 内部で自動的に生成される partial region 名であり、Y 軸に垂直な方向の 2 つの外部境界のうち Y 座標成分値の大きなものを示している。このような自動的に生成される partial region 以外にデータ作成者が任意に作成した部分領域 (UDF データパス名は `mesh.partial_region[]`) を指定することもできる。

“Velocity”は速度場を示す名前である。

“D\_VX”、“D\_VY”、“D\_VZ”はベクトル場の各成分に対する Dirichelet 条件 (固定値) を partial region 上の節点に課すことを示している。PhaseSeparation.FEM では一般的にはこの条件シンボルの先頭が “D” である場合には Dirichlet 条件、“N” である場合には Neumann 条件という規則を設けている。

最後の項目 “[1.0]”、“[0]”はベクトル場の各成分に対する Dirichelet 条件値として数値 1.0 または 0 を与えることを意味する。条件によってはこの文字ならびに複数の数値や付加的条件を表す文字列を指定する必要があるものもある。

ここで速度場の X,Y,Z 成分別に境界条件を与えるようになっていることに注意する必要がある。一個の partial region condition でベクトル値として速度ベクトルの境界を与えるようになっていないのは、壁面に垂直な速度成分のみをゼロとして、他の成分は拘束なしとすることで「すべり」のある流れを指定するといったことが可能になるようにするためである。上記の境界部分領域で”YMAX”境界でのすべり条件を指定するなら以下の条件のみを指定し、X,Z 成分については何も境界条件を指定しないようにする:

```
{ "YMAX_Vy" "BOUNDARY_VERTEX_YMAX" "Velocity" "D_VY" [ "0" ] }
```

### 1.5.6 境界条件指定以外への partial region condition の応用

Partial region condition の主な用途は前項で記述したような境界面への境界条件の指定であるが、「指定した空間領域に指定した条件を設定する」という操作を行う、ということが本来の目的であり、これを利用して境界条件設定以外に以下のような処理に用いていることができる。

#### 部分的に初期値を設定する

部分領域として指定された一部の節点上に他の部分とは異なる初期値を指定したい場合に用いる partial region condition がある。たとえば体積分率場 VolumeFraction には “I\_CONSTANT\_VALUE\_FOR\_A\_COMPONENT” という partial region condition を指定することができる。これは以下のような UDF データとして入力される;

```
{ "phi1" "partial_region_A" "VolumeFraction"
  "I_CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT" [ "1" "0.65" ] }
```

この partial region condition 指定では “partial\_region\_A” という KEY 値の partial region 上で場”VolumeFraction”の指定した成分の値を指定した数値に初期化を行う。“[1] 0.65”において多成分計算の成分 1 に値 0.65 を設定することを示す。

一般的に “I” で始まる条件名は場の量の初期化に用いる partial region condition であり、初期化プロシージャ内で用いるコマンドでのみ処理されるようになっている。VolumeFraction 場の場合はコマンド “INITIALIZE\_BY\_PARTIAL\_REGION\_CONDITION” がそれである。

### 部分的に常に値を固定する

境界条件における Dirichlet 境界条件は指定した境界における値を時間進行の過程で常に一定に保つことを意味する。

しかし境界ではなく内部にある節点でも値を時間に関係なく一定にする条件を課すことも可能である。“D”で始まる条件名の partial region condition に内部節点を含む部分領域を指定すればよい。このような処理を適用する例として、流れ場の中に「障害物」があるような体系を計算するために、障害物のある部分を partial region として設定し、その部分の速度ベクトルを常にゼロにする partial region condition を指定する場合がある。

### 1.5.7 PhaseSeparation.FEM での場に対する境界条件

PhaseSeparation.FEM 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。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。1.5.4 で解説したように境界面法線方向成分がゼロである場合には明示的に UDF 内で指定する必要がある。何も条件が指定されない境界面にたいして自動的にこの条件が適用されることになる場合もある。

なお FDM シミュレータのいくつかの場でサポートされている Biased Periodic 境界条件および Lees Edwards 境界条件は現在の PhaseSeparation.FEM ではサポートしていない。

#### 体積分率場 $\psi_\alpha$ に対する境界条件

体積分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。

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

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。ここで  $\alpha$  は成分を表すインデックス。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。

- 壁面境界条件 (Neumann 条件)

境界面上で拡散流束が発生しないように、壁面に垂直方向の勾配をゼロとし、以下の式で表させれる。

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

ここで記号  $|_{wall}$  は壁面上での値を意味する。周期境界でない境界に何の境界条件も指定されていない場合には自動的にこの条件が課されたことになる。

- 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。

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

### 化学ポテンシャル場に対する境界条件

化学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 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

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

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。ここで  $\alpha$  は成分を表すインデックス。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。

### 流束場/体積力場 $K_{\alpha}$ に対する境界条件

流束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。

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

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。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。

- 壁面境界条件 (Dirichlet 条件)

流束の値が壁面上でゼロとする。式で表すと

$$K_{\alpha}(x, y, z)|_{wall} = 0$$

ここで記号  $|_{wall}$  は壁面上での値を意味する。周期境界でない境界に何の境界条件も指定されていない場合には自動的にこの条件が課されたことになる。

### 速度場 $v$ 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。

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

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。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。



- 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  $\mathbf{v}_o$  で動くとする境界条件を課することができ、以下の式で表わされる。

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

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

### 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。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。

- 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。

$$P(x, y, z)|_{Boundary} = P_o$$

### 静電ポテンシャル場に対する境界条件

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。FEM シミュレータでは幾何学的に周期境界を扱っているため、周期境界では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。

- 境界上で表面電荷密度  $\sigma$  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

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

であり、記号の定義は式 (??), (??) と同じである。

- 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。

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

**注意**

以上の境界条件を設定する際に必要となる無次元化されたパラメータの数値は 1.3 節の「方程式の無次元化」でなされた無次元化に従う。



## 第2章 PhaseSeparation の応用操作

### 2.1 有限差分法相分離シミュレータ PhaseSeparation\_FDM の応用操作

この節では有限差分法による多相流体シミュレータ PhaseSeparation\_FDM 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に問題別のディレクトリとして納められている。

#### 2.1.1 応用例 0: Flory-Huggins の相分離 (1)

まず初めに 32x32 の 2 次元メッシュ(xz 平面) における単純な Flory-Huggins の式による液体の相分離のシミュレーションである。流体効果のない静的な相分離を想定する。全方向に周期境界条件あり。

- 1. メッシュの作成 : FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 32 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	31.0
[0]	[2]	31.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	31.0
[2]	[2]	31.0

- 2. 周期境界条件 : FDM の場合メッシュデータでは周期境界条件は指定しないので、  
parameter.mesh\_parameter.periodic[] はすべて 0 と入力し、後で登録する場合毎に周期境界条件を明示する。
- 3. 構造格子 : 有限差分法で構造格子を用いるため parameter.mesh\_parameter.index\_rule[] にそれぞれ、2, 1, 0 を入力する。
- 4. ソルバーパラメータの入力 : 特に編集しない。
- 5. 共通物理定数の入力 : DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=100000, INTERVAL\_OF\_MONITORING=10, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=5000 をそれぞれ入力する。
- 6. 物理定数の入力 : 以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.01
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	715
CA	1
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
CHI_01	3.0

7. 境界条件の入力：特に編集しない。

8. Field：特に編集しない。

9. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	PERIODIC
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	PERIODIC
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	PERIODIC

10. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	0
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	0
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	0

11. procedures\_table\_for\_initialization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION\_WITH\_NOISE を行うようにする。

12. procedured\_table\_for\_evolution に PHASE\_SEPARATION\_01 という名前を登録し、ChemicalPotential には FLORY\_HUGGINS を、K\_Field には GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL を、VolumeFraction には SOLVE\_EQUATION\_OF\_CONTINUITY\_WITHOUT\_FLOW をそれぞれ割り当てる。

13. 計算実行

14. 出力 UDF を GOURMET に読み込み、VolumeFraction を表示させて、相分離が時間と共に進行するか確かめてみましょう。物理定数を変化させて相分離の様子が変わることを確認しましょう。

### 2.1.2 応用例 1: Flory-Huggins の相分離 (2)

この例は Ex.00 と同様の条件において、Z 方向に壁があり、X 方向に周期境界条件ある場合の相分離の系である。

1. メッシュの作成 : Ex.00 と同様である。
2. 周期境界条件 : Ex.00 と同様に `parameter.mesh_parameter.periodic[]` はすべて 0 とする。
3. 構造格子 : Ex.00 と同様。
4. ソルバーパラメータの入力 : Ex.00 と同様。
5. 共通物理定数の入力 : Ex.00 と同様。
6. 物理定数の入力 : Ex.00 と同様。
7. 境界条件の入力 : Ex.00 と同様。
8. Field : Ex.00 と同様。
9. `region_condition` の登録 : 各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	ZM_WALL_ZP_WALL

10. 場の登録 : EX.00 と同様。
11. `procedures.table_for_initiallization` と `procedures.table_for_evolution` を Ex.00 と同様に設定する。
12. 計算実行
13. 出力 UDF を GOURMET に読み込み、VolumeFraction を表示させて、Ex.00 の結果と比較してみよう。

### 2.1.3 応用例 2: Flory-Huggins の相分離 (3)

この例は Ex.01 と同様の条件において、Z 方向の壁との間に濡れ性を考慮した系である。

1. メッシュの作成 : Ex.00 と同様である。
2. 周期境界条件 : Ex.00 と同様に `parameter.mesh_parameter.periodic[]` はすべて 0 とする。
3. 構造格子 : Ex.00 と同様。
4. ソルバーパラメータの入力 : Ex.00 と同様。

5. 共通物理定数の入力 : Ex.00 と同様。
6. 物理定数の入力 : 以下に掲げる物理定数を入力する。“GAMMA\_S” が壁への濡れ性を表すパラメータである。

Parameter	input value
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.01
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	715
CA	1
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
CHI_01	3.0
GAMMA_S	1.0, 0.0

7. 境界条件の入力 : Ex.00 と同様。
8. Field : Ex.00 と同様。
9. region\_condition の登録 : Ex.01 と同様
10. 場の登録 : Ex.00 と同様。
11. procedures\_table\_for\_initialization を Ex.00 と同様に設定する。
12. procedured\_table\_for\_evolution に ChemicalPotential を一つ追加し、name\_of\_func に ADD\_EFFECT\_OF\_WETTING\_FOR\_UNIFORM\_Z\_WALL と入力する。
13. 計算実行
14. 出力 UDF を GOURMET に読み込み、VolumeFraction を表示させて、Ex.00, Ex.01 の結果と比較してみましょう。

### 2.1.4 応用例 3: 一様な電場

64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面)における一様な電場のシミュレーション。

1. メッシュの作成 : FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. 構造格子：有限差分法で構造格子を用いるため parameter.mesh\_parameter.index\_rule[] にそれぞれ、2, 1, 0 を入力する。

3. ソルバーパラメータの入力：電場を求めるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.8
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e5
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-6
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	1000

4. 共通物理定数の入力：1 ステップのみの計算なので、DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=1, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=1 をそれぞれ入力する。

5. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
Ca	1
CHARGE_DENSITY	0.0, 0.0
DIELECTRIC_CONSTANT	1.0, 1.0
B	1.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM	0.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP	1.0

6. 境界条件の入力：特に編集しない。

7. Field：特に編集しない。

8. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ElectricPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ElectricPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ElectricPotential	ZM_DIRICHLET_ ZP_DIRICHLET

9. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of.Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of.Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of.Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	0
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	0



10. procedures.table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION を行うようにする。
11. procedured.table\_for\_evolution に TEST\_03 という名前を登録し、ElectricPotential に ELECTRIC\_POTENTIAL\_SOLVER を割り当てる。
12. 計算実行

### 2.1.5 応用例 4: 誘電率揺らぎによる電場の変化 (1)

128x128 の 2 次元メッシュ(xz 平面) における誘電率の空間的な番による電場の変化のシミュレーション。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 128 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	127.0
[0]	[2]	127.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	127.0
[2]	[2]	127.0

2. ソルバーパラメータの入力：電場を求めるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.8
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e5
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-5
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	1000

3. 共通物理定数の入力：1 ステップのみの計算なので、DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=1, INTERVAL\_OF\_MONITORING=1, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=1 をそれぞれ入力する。
4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
CHARGE_DENSITY	0.0, 0.0
DIELECTRIC_CONSTANT	1.0, 2.0
B	1.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM	0.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP	1.0
NUMBER_OF_DROPLETS	1
RADIUS_OF_DROPLETS	20.0
X_COORDINATE_OF_DROPLET	64
Y_COORDINATE_OF_DROPLET	1
Z_COORDINATE_OF_DROPLET	64

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ElectricPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ElectricPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ElectricPotential	ZM_DIRICHLET_ZP_DIRICHLET

8. 場の登録：EX.03 と同様。

9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して SET\_DROPLETS を行うようにする。

10. procedured\_table\_for\_evolution に TEST\_04 という名前を登録し、ElectricPotential に ELECTRIC\_POTENTIAL\_SOLVER を割り当てる。

11. 計算実行

### 2.1.6 応用例 5: 誘電率揺らぎによる電場の変化 (2)

EX.04 と同様の系（メッシュサイズは 64x64）において、ドロップレットの体積分率を時間発展させた時のシミュレーション。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：EX.04 と同様。
3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=10, INTERVAL\_OF\_MONITORING=10, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=5 をそれぞれ入力する。
4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
CA	1
CHARGE_DENSITY	0.0, 0.0
DIELECTRIC_CONSTANT	1.0, 2.0
B	1.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM	0.0
ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP	1.0
NUMBER_OF_DROPLETS	1
RADIUS_OF_DROPLETS	10.0
X_COORDINATE_OF_DROPLET	32
Y_COORDINATE_OF_DROPLET	1
Z_COORDINATE_OF_DROPLET	32

5. 境界条件の入力：特に編集しない。
6. Field：特に編集しない。
7. region\_condition の登録：EX.04 と同様。
8. 場の登録：EX.03 と同様。
9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して SET\_DROPLETS を行うようにする。
10. procedured.table\_for\_evolution に TEST\_05 という名前を登録し、ElectricPotential に ELECTRIC\_POTENTIAL\_SOLVER を、ChemicalPotential に FLORY\_HUGGINS と ADD\_ELECTRIC\_EFFECT\_OF\_DIELECTRIC\_MEDIUM を、VolumeFraction に SOLVE\_EQUATION\_OF\_CONTINUITY\_WITHOUT\_FLOW をそれぞれ割り当てる。
11. 計算実行

### 2.1.7 応用例 6: Poiseuille 流れ

壁に挟まれた 64x64 の 2 次元メッシュ (xz 平面) における圧力ギャップを用いた Poiseuille 流れのシミュレーション。

1. メッシュの作成 : FDM のため `parameter.mesh_parameter.type` は `SIMPLERECTANGULAR` とする。  
`parameter.mesh_parameter.axes[]` は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力 : 圧力ギャップを用いるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	1

3. 共通物理定数の入力 : `DT=1.0e-3`, `FINAL_STEP=10`, `INTERVAL_OF_MONITORING=10`, `INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT=5` をそれぞれ入力する。
4. 物理定数の入力 : 以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
Ca	1
PRESSURE_GRADIENT	-0.01
VISCOSITY	1, 1

5. 境界条件の入力 : 特に編集しない。
6. Field : 特に編集しない。
7. `region_condition` の登録 : 各場合毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ.BOUNDARY_PLANE.XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE.YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE.ZM_AND_ZP	K_Field	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE.XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE.YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE.ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE.XM_AND_XP	Pressure	BIASED.PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE.YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE.ZM_AND_ZP	Pressure	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE.XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE.YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE.ZM_AND_ZP	Velocity	ZM.WALL_ZP.WALL

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures.table.for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION を行うようにする。
10. procedured.table.for\_evolution に POISEUILLE\_FLOW という名前を登録し、Velocity に SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE を割り当てる。
11. 計算実行

### 2.1.8 応用例 7: ずり流れ (1)

壁に挟まれた 64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面)において、壁に速度を与えて印加されたずりによる速度場のシミュレーション。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：圧力ギャップを用いるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
LEES_EDWARDS_BC	0
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	1

3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=10, INTERVAL\_OF\_MONITORING=1, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=5 をそれぞれ入力する。

4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
Ca	1
VISCOSITY	1, 1
VX_AT_XY_PLANE_ZM	-1
VX_AT_XY_PLANE_ZP	1
VY_AT_XY_PLANE_ZM	0
VY_AT_XY_PLANE_ZP	0
VZ_AT_XY_PLANE_ZM	0
VZ_AT_XY_PLANE_ZP	0

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Pressure	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Pressure	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Velocity	ZM.VELOCITY_SET_ZP.VELOCITY_SET

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION を行うようにする。

10. procedured.table\_for\_evolution に SHEAR\_FLOW という名前を登録し、Velocity に SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE を割り当てる。

11. 計算実行

### 2.1.9 応用例 8: ずり流れ (2)

64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面)において、Lees Edwards 境界条件を用いたずりによる速度場のシミュレーション。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：圧力ギャップを用いるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
LEES_EDWARDS_BC	1
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	1

3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=10, INTERVAL\_OF\_MONITORING=1, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=5 をそれぞれ入力する。

4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
Ca	1
VISCOSITY	1, 1
SHEAR_RATE_XZ	0.1

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。



name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	ZM.WALL_ZP.WALL
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM.WALL_ZP.WALL
		ZP.DIRICHLET
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Pressure	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Pressure	LEES_EDWARDS_BC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Velocity	LEES_EDWARDS_BC

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	0
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION を行うようにする。

10. procedured.table\_for\_evolution に SHEAR\_FLOW という名前を登録し、Velocity に SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE を割り当てる。

11. 計算実行

### 2.1.10 応用例 9: 流れの中のドロップレット

壁に挟まれた 64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面)における圧力ギャップを用いた Poiseuille 流れの中に粘度が大きく異なるドロップレットが存在する場合のシミュレーション。

- メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：圧力ギャップを用いるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
LEES_EDWARDS_BC	0
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	100

3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=10000, INTERVAL\_OF\_MONITORING=1, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=1000 をそれぞれ入力する。

4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
Chi.01	3.0
Ca	1
PRESSURE_GRADIENT	-1.0e-3
VISCOSITY	1.0, 0.1
NUMBER_OF_DROPLET	1
RADIUS_OF_DROPLET	10.0
X_COORDINATE_DROPLET	32
Y_COORDINATE_DROPLET	1
Z_COORDINATE_DROPLET	32

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Pressure	BIASED_PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Pressure	ZM_WALL_ZP_WALL
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Velocity	ZM_WALL_ZP_WALL

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures\_table\_for\_initialization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して SET\_DROPLET を、ChemicalPotential には FLORY\_HUGGINS を、K\_Field には GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL をそれぞれ行うようにする。

10. procedured\_table\_for\_evolution に POISEUILLE\_FLOW という名前を登録し、ChemicalPotential に FLORY\_HUGGINS を、K\_Field に GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL を、VolumeFraction に SOLVE\_EQUATION\_OF\_CONTINUITY\_WITH\_FLOW を、Velocity に SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE をそれぞれ割り当てる。

11. 計算実行

### 2.1.11 応用例 10: Flory-Huggins の相分離 (4)

64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面) における Flory-Huggins の式による液体の相分離のシミュレーション。流体効果を取り入れた相分離を想定する。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	100

3. 共通物理定数の入力：DT=5.0e-3, FINAL\_STEP=100000, INTERVAL\_OF\_MONITORING=10, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=5000 をそれぞれ入力する。

4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.01
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	715
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
Chi_01	3.0
Ca	1
VISCOSITY	1, 1

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Pressure	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Pressure	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Velocity	PERIODIC

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION\_WITH\_NOISE を、ChemicalPotential に対して FLORY\_HUGGINS を、K\_Field に対して GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL を行うようにする。
10. procedured.table\_for\_evolution に TEST\_MODEL\_H という名前を登録し、ChemicalPotential には FLORY\_HUGGINS を、K\_Field には GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL を、VolumeFraction には SOLVE\_EQUATION\_OF\_CONTINUITY\_WITH\_FLOW を、Velocity には SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE をそれぞれ割り当てる。
11. 計算実行：計算時間がかなりかかるので注意。

### 2.1.12 応用例 11: ドロップレットの合体

64x64 の 2 次元メッシュ(xz 平面)において、二つのドロップレットを接触させた場合の合体ダイナミクスのシミュレーション。流体効果を考慮。

1. メッシュの作成：FDM のため parameter.mesh\_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。  
parameter.mesh\_parameter.axes[] は 64 分割の二次元であるため、以下のように入力する。

axes[]	values[]	入力するデータ
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	63.0
[0]	[2]	63.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	63.0
[2]	[2]	63.0

2. ソルバーパラメータの入力：圧力ギャップを用いるため以下のパラメータを入力する。

ソルバーパラメータ名	入力する値
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Pressure.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Pressure.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
Max.Iteration.For.Velocity.Solver	1.0e6
Convergence.Criterion.For.Velocity.Solver	1.0e-4
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	100

3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-3, FINAL\_STEP=100000, INTERVAL\_OF\_MONITORING=100, INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=10000 をそれぞれ入力する。

4. 物理定数の入力：以下に掲げる物理定数を入力する。

パラメータ名	入力する値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
Chi_01	3.0
Ca	1
VISCOSITY	1.0, 1.0
NUMBER_OF_DROPLET	2
RADIUS_OF_DROPLET	10.0, 10.0
X_COORDINATE_DROPLET	20, 44
Y_COORDINATE_DROPLET	0, 0
Z_COORDINATE_DROPLET	32, 32

5. 境界条件の入力：特に編集しない。

6. Field：特に編集しない。

7. region\_condition の登録：各場毎に以下のように境界条件を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	K_Field	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	K_Field	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	K_Field	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	VolumeFraction	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	VolumeFraction	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	VolumeFraction	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ChemicalPotential	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ChemicalPotential	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ChemicalPotential	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Pressure	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Pressure	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Pressure	PERIODIC
YZ.BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Velocity	PERIODIC
ZX.BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Velocity	PERIODIC
XY.BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Velocity	PERIODIC

8. 場の登録：以下のようにフィールドを登録する。

registered_field	type	name_of_region	num_of_component	io_flag
VolumeFraction	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of.Components)	1
ChemicalPotential	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of.Components)	0
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of.Components) \$(*)\$(3)	0
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1

9. procedures\_table\_for\_initiallization に SINGLE\_PHASE という名前を登録し、VolumeFraction に対して SET\_DROPLET を、ChemicalPotential には FLORY\_HUGGINS を、K\_Field には GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL をそれぞれ行うようにする。
10. procedured\_table\_for\_evolution に POISEUILLE\_FLOW という名前を登録し、ChemicalPotential に FLORY\_HUGGINS を、K\_Field に GRADIENT\_CHEMICAL\_POTENTIAL を、VolumeFraction に SOLVE\_EQUATION\_OF\_CONTINUITY\_WITH\_FLOW を、Velocity に SOLVE\_STOKES\_EQUATION\_AND\_PRESSURE をそれぞれ割り当てる。
11. 計算実行

## 2.2 有限要素法相分離シミュレータ PhaseSeparation\_FEM の応用操作

この節では有限要素法による多相流体シミュレータ PhaseSeparation\_FEM 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に問題別のディレクトリとして納められている。

### 2.2.1 応用例 1: 平板内のシアー流れ (Couette 流)

流れ場のみを計算する例で、平行な無限平板の上端 ( $Y$  方向上端) が一定速度で移動し、下端で速度がゼロになる境界条件を課している。

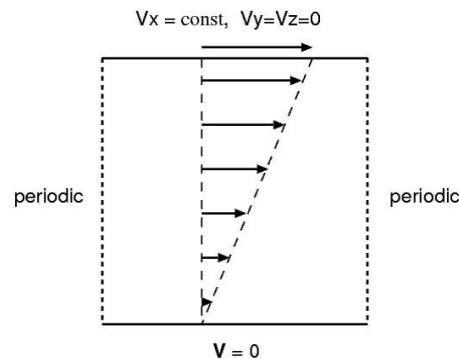


図 2.1: PhaseSeparation\_FEM 適用例: 平板内のシアー流れ (Couette 流) の設定

#### [入力 UDF ファイル]

MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX01/EX01\_in.udf

#### [入力 UDF 解説]

- parameter.mesh\_parameter:  
形状タイプ UNSTRUCTURED\_RECT、 $8 \times 8 \times 3$  分割。X 方向には周期境界条件。
- parameter.physical\_parameter[] :  
粘性係数 (“VISCOSITY”) を 20 に設定している。
- region.condition[]  
境界条件を以下のように部分領域条件として与えている。



名前	部分領域	場	条件名	値
YMIN_P	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Pressure	D	1
YMIN_Vx	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VX	0
YMIN_Vy	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VY	0
YMIN_Vz	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VZ	0
YMAX_Vx	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VX	\$(YMAX\_Vx)\$
YMAX_Vy	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VY	0
YMAX_Vz	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VZ	0
ZMIN_Vz	BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Velocity	D_VZ	0
ZMAX_Vz	BOUNDARY_VERTEX_ZMAX	Velocity	D_VZ	0

- $Y$  方向底面 (BOUNDARY\_VERTEX\_YMIN) で圧力を 1 としている。
- $Y$  方向底面の速度ベクトル成分はすべてゼロ。
- $Y$  方向の上面の速度  $X$  成分の値が physical\_parameter の中の利用者定義パラメータ<sup>1</sup> YMAX\_Vx を引用して設定されている。
- $Z$  軸に垂直な境界面 (BOUNDARY\_VERTEX\_ZMIN、BOUNDARY\_VERTEX\_ZMAX) で速度の  $Z$  方向成分のみをゼロに設定することで  $XY$  面内の 2 次元的流れをつくることのできる。

- dynamics\_manager.registered\_field[]

Velocity、Pressure、Viscosity の 3 つの場のみを登録している。

### 2.2.2 応用例 2: 平行平板壁内の流れ (Poiseuille 流)

流れ場のみを計算する例で、平行な壁に挟まれた部分に圧力差を加えて生じる流れである。

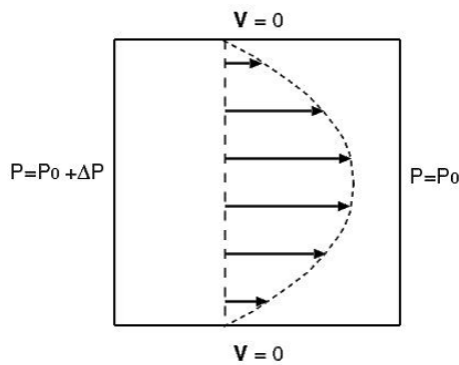


図 2.2: PhaseSeparation\_FEM 適用例: 平行な壁の間の流れ (Poiseuille 流) の設定

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX02/EX02\_in.udf

<sup>1</sup>physical\_parameter にはマニュアルに記載されていない任意の名前のパラメータを利用者が定義して入力することができる。このようなパラメータはここでの例のように部分領域条件の値として引用したり、他のパラメータの値として引用することができる。

## [入力 UDF 解説]

- parameter.mesh\_parameter:  
形状タイプ UNSTRUCTURED\_RECT、16x16x3 分割。
- parameter.physical\_parameter[] :  
粘性係数 (“VISCOSITY”) を 10 に設定している。
- region.condition[]  
境界条件を以下のように部分領域条件として与えている。

名前	部分領域	場	条件名	値
XMIN_p	BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Pressure	D	1
XMAX_p	BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Pressure	D	0
XMIN_Vy	BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VY	0
XMIN_Vz	BOUNDARY_VERTEX_XMIN	Velocity	D_VZ	0
XMAX_Vy	BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VY	0
XMAX_Vz	BOUNDARY_VERTEX_XMAX	Velocity	D_VZ	0
YMIN_Vx	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VX	0
YMIN_Vy	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VY	0
YMIN_Vz	BOUNDARY_VERTEX_YMIN	Velocity	D_VZ	0
YMAX_Vx	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VX	0
YMAX_Vy	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VY	0
YMAX_Vz	BOUNDARY_VERTEX_YMAX	Velocity	D_VZ	0
ZMIN_Vz	BOUNDARY_VERTEX_ZMIN	Velocity	D_VZ	0
ZMAX_Vz	BOUNDARY_VERTEX_ZMAX	Velocity	D_VZ	0

- $X$  に垂直な 2 つの境界 (BOUNDARY\_VERTEX\_XMIN、BOUNDARY\_VERTEX\_XMAX) での圧力差が 1 になるようにする。
  - $X$  に垂直な 2 つの境界 (BOUNDARY\_VERTEX\_XMIN で速度の  $Y$  成分と  $Z$  成分がゼロになるようにする。
  - $Y$  方向に垂直な壁面 (BOUNDARY\_VERTEX\_YMIN、BOUNDARY\_VERTEX\_YMAX) の速度ベクトル成分はすべてゼロ。
  - $Z$  軸に垂直な境界面 (BOUNDARY\_VERTEX\_ZMIN、BOUNDARY\_VERTEX\_ZMAX) で速度の  $Z$  方向成分のみをゼロに設定することで  $XY$  面内の 2 次元の流れをつくることができる。
- dynamics\_manager.registered\_field[]  
Velocity、Pressure、Viscosity の 3 つの場のみを登録している。

## [特記事項]

FEM シミュレータには PhaseSeparation\_FDM にある Biased Periodic 境界条件を指定することができない。そこで  $X$  方向境界を周期境界とする代わりに、速度の  $Y$  成分と  $Z$  成分がゼロになる条件を与えて Poiseuille 流を実現している。

## 2.2.3 応用例 3: 2 成分系 Flory-Huggins 自由エネルギーでの相分離

流れ場のない 2 成分系の相分離のシミュレーション。自由エネルギーには Flory-Huggins モデルを使用する。

## [入力 UDF ファイル]

MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX03/EX03\_in.udf

## [入力 UDF 解説]

- parameter.mesh\_parameter:  
形状タイプ UNSTRUCTURED\_RECT、32x32x4 分割。X,Y,Z いずれの方向にも周期境界条件。

- parameter.physical\_parameter[] :

Parameter 名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.01
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	1
Ca	1.0
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0
Chi_01	3.0
MODE_COUPLING_CONSTANT_G0	1.0

- region.condition[]  
すべての方向に周期境界条件なので境界条件は特に与える必要はない。
- dynamics\_manager.registered\_field[]  
VolumeFraction、ChemicalPotential、K\_Field の 3 つの場のみを登録している。
- dynamics\_manager.procedures.table\_for\_initialization[].command\_list[]  
VolumeFraction 場を一様な分布に揺らぎを加えるコマンド  
CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION\_WITH\_NOISE で初期化している。
- dynamics\_manager.procedures.table\_for\_evolution[].command\_list[]  
時間進行手続きを以下のように構成している。

場の名前	コマンド
ChemicalPotential	FLORY_HUGGINS
K_Field	GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL
VolumeFraction	SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITHOUT_FLOW

## 2.2.4 応用例 4: 2 成分系 Flory-Huggins 自由エネルギーでの相分離 – 流れ場あり

前の例と同様の 2 成分系の相分離を Flory-Huggins 自由エネルギーを用いて計算しているが、この例では流れ場の効果も取り入れている。

## [入力 UDF ファイル]

MUFFIN5/sample/muffin5ebeta/PhaseSeparation/EX04/EX04\_in.udf

## [入力 UDF 解説]

- parameter.mesh\_parameter:

形状タイプ UNSTRUCTURED\_RECT、32x32x3 分割。X,Y,Z いずれの方向にも周期境界条件。

- parameter.solver\_parameter[] :

速度と圧力を Stokes 流として計算するために以下のパラメータを指定する。

Parameter name(KEY)	value
MATRIX_SOLVER	ICCG
DT_FOR_V	0.05
MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER	500
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER	\$(DT_FOR_V)\$*(0.01)
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	50

- DT\_FOR\_V は Stokes 流計算のための時間ステップ幅である。これは繰り返し計算によって速度場を計算するときの仮想的時間であり、実際の物理的時間とは異なるものである。この時間ステップ値は 1.5.2 節の式 (1.79) の条件を満たすように決める。
  - CONVERGENCE\_CRITERION\_FOR\_VELOCITY\_SOLVER はパラメータ DT\_FOR\_V を用いて計算され、ステップ間の相対的速度変化が 0.01 以下となることが収束条件となるようにしている。
  - SKIP\_INTERVAL\_VELOCITY\_CALCULATION=50 は速度と圧力計算が時間ステップ 50 回に一回の割合で行なわれることを示している。これは速度場計算を適当にスキップすることで計算時間を短縮するためであり、速度場の変化が時間ステップ毎に小さいことを仮定している。
- parameter.common\_physical\_parameter: 以下のように入力する。DT=1.0e-2, FINAL\_STEP=2000, INTERVAL\_OF\_MONITORING=1, および INTERVAL\_OF\_UDF\_OUTPUT=500.

- parameter.physical\_parameter[] :

Parameter 名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
POLYMERIZATION_INDEX_N	1, 1
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.5, 0.5
DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION	0.01
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	1
Ca	1.0
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0
VISCOSITY	1.0
Chi_01	3.0

- region.condition[]

すべての方向に周期境界条件なので境界条件は特に与える必要はない。

- dynamics\_manager.registered\_field[]

VolumeFraction、ChemicalPotential、K\_Fieldに加えて速度場の処理のための Velocity、Viscosity、Pressure を登録している。

- `dynamics_manager.procedures.table_for_initialization[].command_list[]`

VolumeFraction 場を一様な分布に揺らぎを加えるコマンド

”CONSTANT\_VOLUME\_FRACTION\_WITH\_NOISE” で初期化している。

- `dynamics_manager.procedures.table_for_evolution[].command_list[]`

時間進行手続きを以下のように構成している。

場の名前	コマンド
ChemicalPotential	FLORY_HUGGINS
K_Field	GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL
VolumeFraction	SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITH_FLOW
Velocity	SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE

## 第3章 PhaseSeparation リファレンス

### 3.1 有限差分法相分離シミュレータ PhaseSeparation\_FDM の場のコマンドとパラメータ

#### 3.1.1 PhaseSeparation\_FDM の入力パラメーター一覧

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
B	無次元化した電気エネルギー $B$
DIELECTRIC_CONSTANT	比誘電率 $\epsilon_\alpha$ 。成分毎に配列として与える。
CHARGE_DENSITY	成分毎の電荷 $\rho_\alpha$
GAMMA_S	壁の濡れ性を表わす各成分の界面エネルギー $\gamma_{s\alpha}$
GAMMA_S_REGION	壁の濡れ性を表わす各成分の界面エネルギー $\gamma_{s\alpha}$ 矩形領域として与えることができる。 以下の8つの値を半角空白で区切って指定する。 component-id potential xmin ymin zmin xmax ymax zmax
ACCELERATION_VALUE _FOR_E-POTENTIAL	電場ポテンシャル計算のための加速因子
MAX_ITERATION _FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	電場ポテンシャル計算のための最大繰り返し数
CONVERGENCE_CRITERION_FOR _E-POTENTIAL	電場ポテンシャル計算の収束判定値
MONITORING_INTERVAL_OF _E-POTENTIAL_SOLVER	電場ポテンシャル計算の収束状況モニター間隔
ELECTRIC_POTENTIAL_GRADIENT	電場ポテンシャル勾配の初期設定値
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_YZ_PLANE_XM	電場ポテンシャル境界値 (YZ 面の $-X$ 側)
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_YZ_PLANE_XP	電場ポテンシャル境界値 (YZ 面の $+X$ 側)
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_ZX_PLANE_YM	電場ポテンシャル境界値 (ZX 面の $-Y$ 側)
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_ZX_PLANE_YP	電場ポテンシャル境界値 (ZX 面の $+Y$ 側)
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_XY_PLANE_ZM	電場ポテンシャル境界値 (XY 面の $-Z$ 側)
ELECTRIC_POTENTIAL _AT_XY_PLANE_ZP	電場ポテンシャル境界値 (XY 面の $+Z$ 側)
CONSTANT_TERM_OF	境界振動電位条件

_ELECTRIC_POTENTIAL _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	$\phi(x, y, z) _{Boundary} = \phi_o + \delta\phi \cdot \sin(\omega t)$ での $\phi_o$ (YZ 面の +X 側)
AMPLITUDE_OF_ELECTRIC_POTENTIAL _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動電位条件の $\delta\phi$ (YZ 面の +X 側)
FREQUENCY_OF_ELECTRIC_POTENTIAL _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動電位条件の $\omega$ (YZ 面の +X 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_YZ_PLANE_XM	電場ポテンシャル勾配の境界値 (YZ 面の -X 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_YZ_PLANE_XP	電場ポテンシャル勾配の境界値 (YZ 面の +X 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_ZX_PLANE_YM	電場ポテンシャル勾配の境界値 (ZX 面の -Y 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_ZX_PLANE_YP	電場ポテンシャル勾配の境界値 (ZX 面の +Y 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_XY_PLANE_ZM	電場ポテンシャル勾配の境界値 (XY 面の -Z 側)
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL _AT_XY_PLANE_ZP	電場ポテンシャル勾配の境界値 (XY 面の +Z 側)
SEED_OF_RANDOM_CURRENT	物質流速場 $K(J)$ の初期値をランダムに与える ときの乱数初期値
STRENGTH_OF_NOISE	物質流速場 $K(J)$ の初期値をランダムに与える ときの大きさ
CA	キャピラリ一数
MONITORING_INTERVAL_OF _PRESSURE_SOLVER	圧力場計算の収束状況モニター間隔
ACCELERATION_VALUE_FOR _PRESSURE_SOLVER	圧力場計算の加速因子
MAX_ITERATION_FOR _PRESSURE_SOLVER	圧力場計算の最大繰り返し数
CONVERGENCE_CRITERION _FOR_PRESSURE_SOLVER	圧力場計算の収束判定値
VISCOSITY	成分毎の粘性係数 $\eta_\alpha$
PRESSURE_GRADIENT	圧力場に Biased Periodic Condition を適用するときの 境界圧力の差
PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XM	圧力場の境界値 (YZ 面の -X 側)
PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XP	圧力場の境界値 (YZ 面の +X 側)
PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YM	圧力場の境界値 (ZX 面の -Y 側)
PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YP	圧力場の境界値 (ZX 面の +Y 側)
PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZM	圧力場の境界値 (XY 面の -Z 側)
PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZP	圧力場の境界値 (XY 面の +Z 側)
CONSTANT_VALUE_OF_P _OSCILLATION_AT _YZ_PLANE_XP	境界振動電位条件 $P(x, y, z) _{Boundary} = P_o + \delta P \cdot \sin(\omega t)$ での $P$ (YZ 面の +X 側)
AMPLITUDE_OF_P	境界振動圧力条件の $P$ (YZ 面の +X 側)

_OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	
FREQUENCY_OF_P _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動圧力条件の $\omega$ (YZ 面の +X 側)
VELOCITY_RAW_DATA.FILE	速度をファイル入力で初期化するときの入力ファイル名
SKIP_INTERVAL _VELOCITY_CALCULATION	速度場計算はこの時間ステップ毎に行う
VX_AT_YZ_PLANE_XM	速度 X 成分の境界値 (YZ 面の -X 側)
VY_AT_YZ_PLANE_XM	速度 Y 成分の境界値 (YZ 面の -X 側)
VZ_AT_YZ_PLANE_XM	速度 Z 成分の境界値 (YZ 面の -X 側)
VX_AT_YZ_PLANE_XP	速度 X 成分の境界値 (YZ 面の +X 側)
VY_AT_YZ_PLANE_XP	速度 Y 成分の境界値 (YZ 面の +X 側)
VZ_AT_YZ_PLANE_XP	速度 Z 成分の境界値 (YZ 面の +X 側)
VX_AT_ZX_PLANE_YM	速度 X 成分の境界値 (ZX 面の -Y 側)
VY_AT_ZX_PLANE_YM	速度 Y 成分の境界値 (ZX 面の -Y 側)
VZ_AT_ZX_PLANE_YM	速度 Z 成分の境界値 (ZX 面の -Y 側)
VX_AT_ZX_PLANE_YP	速度 X 成分の境界値 (ZX 面の +Y 側)
VY_AT_ZX_PLANE_YP	速度 Y 成分の境界値 (ZX 面の +Y 側)
VZ_AT_ZX_PLANE_YP	速度 Z 成分の境界値 (ZX 面の +Y 側)
VX_AT_XY_PLANE_ZM	速度 X 成分の境界値 (XY 面の -Z 側)
VY_AT_XY_PLANE_ZM	速度 Y 成分の境界値 (XY 面の -Z 側)
VZ_AT_XY_PLANE_ZM	速度 Z 成分の境界値 (XY 面の -Z 側)
VX_AT_XY_PLANE_ZP	速度 X 成分の境界値 (XY 面の +Z 側)
VY_AT_XY_PLANE_ZP	速度 Y 成分の境界値 (XY 面の +Z 側)
VZ_AT_XY_PLANE_ZP	速度 Z 成分の境界値 (XY 面の +Z 側)
SHEAR_RATE_XZ	Lees Edwards 境界条件の shear rate (XZ 方向)
MONITORING_INTERVAL_OF _VELOCITY_SOLVER	速度場計算の収束状況モニター間隔
ACCELERATION_VALUE_FOR _VELOCITY_SOLVER	速度場計算の加速因子
CONVERGENCE_CRITERION_FOR _VELOCITY_SOLVER	速度場計算の収束判定値
MAX_ITERATION_FOR _VELOCITY_SOLVER	速度場計算の最大繰り返し数
CHI <sub>mn</sub>	成分 $n, m$ の $\chi$ -パラメータ ( $m < n$ のみ与える)
POLYMERIZATION_INDEX_N	各成分の重合度 $N_\alpha$ を配列として与える
AVS_DATA_FILE_NAME	AVS 形式データから体積分率場初期値を入力するときのファイル名
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	各成分の初期体積分率の平均値 $\psi_{\alpha 0}$
DEVIATION_FROM _AVERAGED_VOLUME_FRACTION	体積分率初期値に与えるノイズの大きさ
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	体積分率初期値に与えるノイズの乱数の種
VOLUME_FRACTION_GRADIENT _ALONG_X	体積分率場 $\psi_\alpha$ の X 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配



VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y	体積分率場 $\psi_\alpha$ の Y 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配
VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z	体積分率場 $\psi_\alpha$ の Z 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配
BULK_VOLUME_FRACTION	体積分率場 $\psi_\alpha$ のバルク境界条件での各成分境界値
REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT	境界から溶媒を取り除く割合
INITIAL_SHEAR_STRAIN_ZX	体積分率場に Affine 変換で初期値設定するときの初期ひずみ
NUMBER_OF_DROPLETS	体積分率場初期設定でつくる液滴数
RADIUS_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の半径
X_COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の X 座標
Y_COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の Y 座標
Z_COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の Z 座標
NUMBER_OF_LAMELLAE	体積分率場初期設定でつくるラメラ数
DIRECTION_OF_LAMELLAE	体積分率場初期設定のラメラ方向 (“X” ”Y” ”Z”)
PHASE_OF_LAMELLAE	体積分率場初期設定のラメラの位相 (“0” ”1”)
DIFFUSION_COEFFICIENT	各成分の拡散係数 $L_\alpha$ 相分離構造上での拡散計算の場合には各領域上での拡散係数
ALPHA_OHTA_KAWASAKI	Ohta-Kawasaki モデルの係数 $\alpha$
XI_OHTA_KAWASAKI	Ohta-Kawasaki モデルの係数 $\xi$
G_OHTA_KAWASAKI	Ohta-Kawasaki モデルの係数 $g$
OBSTACLE_DATA_FILE	Obstacle(障害物) 位置情報を入力するファイル名
INITIAL_DIFFUSION_FIELD	相分離構造上での拡散計算における領域全体の初期値
DF_AT_YZ_PLANE_XM	相分離構造上での拡散計算：境界値 (YZ 面の $-X$ 側)
DF_AT_YZ_PLANE_XP	相分離構造上での拡散計算：境界値 (YZ 面の $+X$ 側)
DF_AT_ZX_PLANE_YM	相分離構造上での拡散計算：境界値 (ZX 面の $-Y$ 側)
DF_AT_ZX_PLANE_YP	相分離構造上での拡散計算：境界値 (ZX 面の $+Y$ 側)
DF_AT_XY_PLANE_ZM	相分離構造上での拡散計算：境界値 (XY 面の $-Z$ 側)
DF_AT_XY_PLANE_ZP	相分離構造上での拡散計算：境界値 (XY 面の $+Z$ 側)

### 3.1.2 PhaseSeparation\_FDM 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
ChemicalPotential	化学ポテンシャル場 $\mu_\alpha$
ElectricPotential	電場ポテンシャル場 $\Phi$
K_Field	流束場 $\mathbf{J}_\alpha(\mathbf{K})$
Pressure	圧力場 $P$
Velocity	速度場 $\mathbf{v}$
VolumeFraction	体積分率場 $\psi_\alpha$
Obstacle	障害物場
Diffusion_Field	相分離構造上での拡散場
Diffusion_Flux	相分離構造上での拡散流束

流束場 K\_Field の  $\alpha = 0$  成分は流体方程式の体積分率場  $\mathbf{K}$  を格納するために使用されることがある。

## 3.1.3 PhaseSeparation\_FDM の場のコマンド一覧

## ChemicalPotential : 化学ポテンシャル場 コマンド一覧

ChemicalPotential	名称
時間発展 0	"SET_ZERO"
時間発展 1	"SYMMETRIC_GL"
時間発展 2	"FLORY_HUGGINS"
時間発展 3	"OHTA_KAWASAKI_2"
時間発展 4	"ADD_ELECTRIC_EFFECT_OF_DIELECTRIC_MEDIUM"
時間発展 5	"ADD_ELECTROSTATIC_EFFECT_USING_CHARGE_DENSITY"
時間発展 6	"ADD_EFFECT_OF_WETTING_FOR_UNIFORM_Z_WALL"
時間発展 7	"ADD_EFFECT_OF_WETTING_REGION"
評価関数 0	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. ChemicalPotential 時間発展コマンド 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。
名称	"SYMMETRIC_GL"
機能	2 成分系 Ginzburg-Landau モデル $\mu = -\psi + \psi^3 - \Delta\psi (\psi \equiv \psi_1 - \psi_0)$
依存している場 0	VolumeFraction
名称	"FLORY_HUGGINS"
機能	Flory-Huggins の自由エネルギーを用いて化学ポテンシャルを計算する。
依存パラメータ 0	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ 1	CHL <sub>mn</sub>
依存パラメータ 2	POLYMERIZATION_INDEX_N
名称	"OHTA_KAWASAKI_2"
機能	2 成分系 Ohta-Kawasaki モデル (Proc. of SPIE, 8680, 86801I (2013)) $\mu = -\frac{1}{\xi^2}\eta + g\eta^3 - \nabla^2\eta$ , where $\eta = 2\psi_0 - 1$ K_Field のコマンドには "GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL_ORDER_PARAMETER", VolumeFraction のコマンドには"SOLVE_OHTA_KAWASAKI_2"を用いること。 長さは $R_g (= a\sqrt{N/2})$ でスケールされている ( $a$ は Kuhn 長)。 $\frac{1}{\xi^2} = 2f(1-f)(2\chi N - \frac{s(f)}{2f^2(1-f)^2})$ の関係があり、 $f$ はジブロックコポリマーのブロック長比、 $N$ は鎖長、 $\chi$ は相互作用パラメータ。 $s(f)$ は経験的に求まり、例えば $f = 0.5$ のとき $s(f) = 0.9$ 。
依存している場 0	VolumeFraction
依存パラメータ 0	XI_OHTA_KAWASAKI
依存パラメータ 1	G_OHTA_KAWASAKI

名称	"ADD_ELECTRIC_EFFECT_OF_DIELECTRIC_MEDIUM"
機能	体積分率場に依存する誘電率場と静電ポテンシャル場 $\Phi$ を用いて、電場下での誘電性流体としての効果を化学ポテンシャルに取り入れる。
依存している場 0	ElectricPotential
依存パラメータ 0	B
依存パラメータ 1	DIELECTRIC_CONSTANT

名称	"ADD_ELECTROSTATIC_EFFECT_USING_CHARGE_DENSITY"
機能	電荷の空間分布と静電ポテンシャルからの寄与を現在の化学ポテンシャルに加算する $(\partial\rho_e/\partial\psi)\Phi$
依存している場 0	ElectricPotential
依存パラメータ 0	CHARGE_DENSITY

名称	"ADD_EFFECT_OF_WETTING_FOR_UNIFORM_Z_WALL"
機能	壁面での濡れ性の効果を現在の化学ポテンシャルに追加する。 この寄与は $Z = 0$ , $Z = L_z$ に壁面が存在する場合においてのみ、存在する。そのため、境界が無い場合は、このコマンドの実行が設定されていても系に何ら影響を及ぼさない。
依存パラメータ 0	GAMMA_S

名称	"ADD_EFFECT_OF_WETTING_REGION"
機能	領域を指定して、濡れ性の効果を現在の化学ポテンシャルに追加する。
依存パラメータ 0	GAMMA_S_REGION

## 2. ChemicalPotential 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
XM_WALL_XP_WALL	$-X$ 、 $+X$ がともに壁面境界条件 $\mathbf{n} \cdot \nabla \mu_\alpha = 0$
YM_WALL_YP_WALL	$-Y$ 、 $+Y$ がともに壁面境界条件 $\mathbf{n} \cdot \nabla \mu_\alpha = 0$
ZM_WALL_ZP_WALL	$-Z$ 、 $+Z$ がともに壁面境界条件 $\mathbf{n} \cdot \nabla \mu_\alpha = 0$
LEES_EDWARDS_BC	Lees-Edwards 境界条件

## 3. ChemicalPotential 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。このコマンドは一定時間間隔で解析を実行したい場合に用いられる

## ElectricPotential : 電場ポテンシャル場 コマンド一覧

ElectricPotential	名称
時間発展 0	"ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER"
解析 0	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数 0	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. ElectricPotential 時間発展コマンド 詳細

名称	"ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER"
機能	静電ポテンシャル $\Phi$ を Poisson 方程式に基づき求める。 解法には繰り返し法 (SOR) を用いる
依存パラメータ 0	ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ 1	MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ 2	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ 3	B
依存パラメータ 4	MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ 5	ELECTRIC_POTENTIAL_GRADIENT
依存パラメータ 6	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 7	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 8	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 9	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 10	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 11	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ 12	CONSTANT_TERM_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 13	AMPLITUDE_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 14	FREQUENCY_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 15	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 16	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 17	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 18	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 19	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 20	GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP

## 2. ElectricPotential 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
BIASED_PERIODIC	Biased Periodic 境界条件
XM_NEUMANN_XP_NEUMANN	−X 境界 +X 境界とともに Neumann 条件
XM_NEUMANN_XP_DIRICHLET	−X 境界で Neumann 条件、+X 境界で Dirichlet 条件
XM_DIRICHLET_XP_NEUMANN	−X 境界で Dirichlet 条件、+X 境界で Neumann 条件
XM_DIRICHLET_XP_DIRICHLET	−X 境界 +X 境界とともに Dirichlet 条件
OSCILLATORY	振動電位境界条件 $\phi(x, y, z) _{Boundary} = \phi_o + \delta\phi \cdot \sin(\omega t)$
YM_NEUMANN_YP_NEUMANN	−Y 境界 +Y 境界とともに Neumann 条件
YM_NEUMANN_YP_DIRICHLET	−Y 境界で Neumann 条件、+Y 境界で Dirichlet 条件
YM_DIRICHLET_YP_NEUMANN	−Y 境界で Dirichlet 条件、+Y 境界で Neumann 条件
YM_DIRICHLET_YP_DIRICHLET	−Y 境界 +Y 境界とともに Dirichlet 条件
ZM_NEUMANN_ZP_NEUMANN	−Z 境界 +Z 境界とともに Neumann 条件
ZM_NEUMANN_ZP_DIRICHLET	−Z 境界で Neumann 条件、+Z 境界で Dirichlet 条件
ZM_DIRICHLET_ZP_NEUMANN	−Z 境界で Dirichlet 条件、+Z 境界で Neumann 条件
ZM_DIRICHLET_ZP_DIRICHLET	−Z 境界 +Z 境界とともに Dirichlet 条件

### 3. ElectricPotential 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。

### 4. ElectricPotential 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。この関数は一定時間間隔で解析を実行したい場合に用いられる

## K\_Field : 流束場 コマンド一覧

K_Field	名称
初期化 0	"SET_ZERO"
時間発展 0	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL"
時間発展 1	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL_ORDER_PARAMETER"
時間発展 2	"ADD_RANDOM_CURRENT"

#### 1. K\_Field 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。

#### 2. K\_Field 時間発展コマンド 詳細

名称	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL"
機能	体積分率場と化学ポテンシャル勾配から流束場を計算 $K_{\alpha} = -\psi_{\alpha} \nabla \mu_{\alpha}$

名称	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL_ORDER_PARAMETER"
機能	化学ポテンシャルを OHTA_KAWASAKI.2 で計算する場合、このコマンドを用いる。化学ポテンシャル勾配から流束場を計算。 $K = -\nabla\mu$
名称	"ADD_RANDOM_CURRENT"
機能	流束場にランダムなノイズを加える。
依存パラメータ 0	SEED_OF_RANDOM_CURRENT
依存パラメータ 1	STRENGTH_OF_NOISE

### 3. K\_Field 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
XM.WALL_XP.WALL	-X 境界 +X 境界とともに壁面境界条件
XM.WALL_XP.BULK	-X 境界で壁面境界条件、+X 境界でバルク境界条件
XM.BULK_XP.WALL	-X 境界でバルク境界条件、+X 境界で壁面境界条件
XM.BULK_XP.BULK	-X 境界 +X 境界とともにバルク境界条件
YM.WALL_YP.WALL	-Y 境界 +Y 境界とともに壁面境界条件
YM.WALL_YP.BULK	-Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界でバルク境界条件
YM.BULK_YP.WALL	-Y 境界でバルク境界条件、+Y 境界で壁面境界条件
YM.BULK_YP.BULK	-Y 境界 +Y 境界とともにバルク境界条件
Z.WALL_ZP.WALL	-Z 境界 +Z 境界とともに壁面境界条件
ZM.WALL_ZP.BULK	-Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界でバルク境界条件
ZM.BULK_ZP.WALL	-Z 境界でバルク境界条件、+Z 境界で壁面境界条件
ZM.BULK_ZP.BULK	-Z 境界 +Z 境界とともにバルク境界条件

## Pressure : 圧力場 コマンド一覧

Pressure	名称
初期化 0	"SET_ZERO"
時間発展 0	"SOLVE_PRESSURE"
時間発展 1	"CALCULATION_OF_SOURCE_FIELD"
時間発展 2	"ONE_ITERATION"
時間発展 3	"CALCULATION_OF_VISCOSITY"
解析 0	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数 0	"RETURN_TRUE_FUNC"

### 1. Pressure 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。

### 2. Pressure 時間発展コマンド 詳細

名称	<b>"SOLVE_PRESSURE"</b>
機能	圧力場を Poisson 方程式の繰り返し解法で計算する。 $\nabla^2 p = \nabla \cdot [\nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\})] + \nabla \cdot \mathbf{K}$
依存している場 0	Velocity
依存している場 1	K_Field
依存パラメータ 0	ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 1	MAX_ITERATION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 2	CONVERGENCE_CRITERION_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 3	MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 4	VISCOSITY
依存パラメータ 5	PRESSURE_GRADIENT
依存パラメータ 6	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 7	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 8	PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 9	PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 10	PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 11	PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ 12	CONSTANT_TERM_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 13	AMPLITUDE_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 14	FREQUENCY_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP

名称	<b>"CALCULATION_OF_SOURCE_FIELD"</b>
機能	圧力場 Poisson 方程式のソース項の計算
依存している場 0	Velocity
依存している場 1	K_Field
依存パラメータ 0	CA

名称	<b>"ONE_ITERATION"</b>
機能	圧力場 Poisson 方程式の繰り返し解法での繰り返し一回分の計算。
依存パラメータ 0	MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 1	ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 2	MAX_ITERATION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ 3	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_PRESSURE_SOLVER

名称	<b>"CALCULATION_OF_VISCOSITY"</b>
機能	粘度の計算 $\eta = \sum_{\alpha} \eta_{\alpha} \psi_{\alpha}$
依存している場 0	VolumeFraction
依存パラメータ 0	VISCOSITY

### 3. Pressure 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
BIASED_PERIODIC	Biased Periodic 境界条件
XM.WALL__XP.WALL  XM.WALL__XP.PRESSURE.SET XM.WALL__XP.VELOCITY.SET XM.PRESSURE.SET__XP.WALL XM.PRESSURE.SET__XP.PRESSURE.SET XM.PRESSURE.SET__XP.VELOCITY.SET XM.VELOCITY.SET__XP.WALL XM.VELOCITY.SET__XP.PRESSURE.SET XM.VELOCITY.SET__XP.VELOCITY.SET	<p>−<math>X</math> 境界 +<math>X</math> 境界で <math>\psi</math> 場の壁面境界条件を満たすように圧力を設定 (以下これを「壁面境界条件」と記述)</p> <p>−<math>X</math> 境界で壁面境界条件、+<math>X</math> 境界で圧力値設定          −<math>X</math> 境界で壁面境界条件、+<math>X</math> 境界で速度値設定          −<math>X</math> 境界で圧力値設定、+<math>X</math> 境界で壁面境界条件          −<math>X</math> 境界 +<math>X</math> 境界で圧力値設定          −<math>X</math> 境界で圧力値設定 +<math>X</math> 境界で速度値設定          −<math>X</math> 境界で速度値設定、+<math>X</math> 境界で壁面境界条件          −<math>X</math> 境界で速度値設定 +<math>X</math> 境界で圧力値設定          −<math>X</math> 境界 +<math>X</math> 境界で速度値設定</p>
OSCILLATORY_BIASED_PERIODIC	+ $X$ 境界で振動圧力境界条件、− $X$ 境界では $P = 0$
YM.WALL__YP.WALL YM.WALL__YP.PRESSURE.SET YM.WALL__YP.VELOCITY.SET YM.PRESSURE.SET__YP.WALL YM.PRESSURE.SET__YP.PRESSURE.SET YM.PRESSURE.SET__YP.VELOCITY.SET YM.VELOCITY.SET__YP.WALL YM.VELOCITY.SET__YP.PRESSURE.SET YM.VELOCITY.SET__YP.VELOCITY.SET	<p>−<math>Y</math> 境界 +<math>Y</math> 境界で壁面境界条件</p> <p>−<math>Y</math> 境界で壁面境界条件、+<math>Y</math> 境界で圧力値設定          −<math>Y</math> 境界で壁面境界条件、+<math>Y</math> 境界で速度値設定          −<math>Y</math> 境界で圧力値設定、+<math>Y</math> 境界で壁面境界条件          −<math>Y</math> 境界 +<math>Y</math> 境界で圧力値設定          −<math>Y</math> 境界で圧力値設定 +<math>Y</math> 境界で速度値設定          −<math>Y</math> 境界で速度値設定、+<math>Y</math> 境界で壁面境界条件          −<math>Y</math> 境界で速度値設定 +<math>Y</math> 境界で圧力値設定          −<math>Y</math> 境界 +<math>Y</math> 境界で速度値設定</p>
ZM.WALL__ZP.WALL ZM.WALL__ZP.PRESSURE.SET ZM.WALL__ZP.VELOCITY.SET ZM.PRESSURE.SET__ZP.WALL ZM.PRESSURE.SET__ZP.PRESSURE.SET ZM.PRESSURE.SET__ZP.VELOCITY.SET ZM.VELOCITY.SET__ZP.WALL ZM.VELOCITY.SET__ZP.PRESSURE.SET ZM.VELOCITY.SET__ZP.VELOCITY.SET	<p>−<math>Z</math> 境界 +<math>Z</math> 境界で壁面境界条件</p> <p>−<math>Z</math> 境界で壁面境界条件、+<math>Z</math> 境界で圧力値設定          −<math>Z</math> 境界で壁面境界条件、+<math>Z</math> 境界で速度値設定          −<math>Z</math> 境界で圧力値設定、+<math>Z</math> 境界で壁面境界条件          −<math>Z</math> 境界 +<math>Z</math> 境界で圧力値設定          −<math>Z</math> 境界で圧力値設定 +<math>Z</math> 境界で速度値設定          −<math>Z</math> 境界で速度値設定、+<math>Z</math> 境界で壁面境界条件          −<math>Z</math> 境界で速度値設定 +<math>Z</math> 境界で圧力値設定          −<math>Z</math> 境界 +<math>Z</math> 境界で速度値設定</p>
LEES_EDWARDS_BC	Lees-Edwards 境界条件

## 4. Pressure 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。

## 5. Pressure 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。この関数は一定時間間隔で解析を実行したい場合に用いられる



Velocity : 速度場 コマンド一覧

Velocity	名称
初期化 0	"SET_ZERO"
初期化 1	"READ_VELOCITY_RAWDATA"
時間発展 0	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
解析 0	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_RAW_FORMAT"
解析 1	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数 0	"RETURN_TRUE_FUNC"

1. Velocity 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	速度ベクトルをゼロに設定する。

名称	"READ_VELOCITY_RAWDATA"
機能	速度場の初期値をファイルから入力する ("OUTPUT_SNAPSHOT_IN_RAW_FORMAT"で出力される形式)
依存パラメータ 0	VELOCITY_RAW_DATA_FILE

2. Velocity 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
機能	Stokes 流の方程式 $-\nabla p + \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + \mathbf{K} = 0$ を速度場と圧力場に対して解く。
依存している場 0	Pressure
依存パラメータ 0	SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION
依存パラメータ 1	VX_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 2	VY_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 3	VZ_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ 4	VX_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 5	VY_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 6	VZ_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ 7	VX_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 8	VY_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 9	VZ_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ 10	VX_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 11	VY_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 12	VZ_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ 13	VX_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 14	VY_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 15	VZ_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ 16	VX_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ 17	VY_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ 18	VZ_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ 19	SHEAR_RATE_XZ
依存パラメータ 20	MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ 21	ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ 22	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ 23	MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER

### 3. Velocity 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
XM_WALL__XP_WALL  XM_WALL__XP_PRESSURE_SET XM_WALL__XP_VELOCITY_SET XM_PRESSURE_SET__XP_WALL XM_PRESSURE_SET__XP_PRESSURE_SET XM_PRESSURE_SET__XP_VELOCITY_SET XM_VELOCITY_SET__XP_WALL XM_VELOCITY_SET__XP_PRESSURE_SET XM_VELOCITY_SET__XP_VELOCITY_SET	<p>−X 境界 +X 境界で <math>\psi</math> 場の壁面境界条件を満たすように圧力を設定 (以下これを「壁面境界条件」と記述)</p> <p>−X 境界で壁面境界条件、+X 境界で圧力値設定</p> <p>−X 境界で壁面境界条件、+X 境界で速度値設定</p> <p>−X 境界で圧力値設定、+X 境界で壁面境界条件</p> <p>−X 境界 +X 境界で圧力値設定</p> <p>−X 境界で圧力値設定 +X 境界で速度値設定</p> <p>−X 境界で速度値設定、+X 境界で壁面境界条件</p> <p>−X 境界で速度値設定 +X 境界で圧力値設定</p> <p>−X 境界 +X 境界で速度値設定</p>
YM_WALL__YP_WALL YM_WALL__YP_PRESSURE_SET YM_WALL__YP_VELOCITY_SET YM_PRESSURE_SET__YP_WALL YM_PRESSURE_SET__YP_PRESSURE_SET YM_PRESSURE_SET__YP_VELOCITY_SET YM_VELOCITY_SET__YP_WALL YM_VELOCITY_SET__YP_PRESSURE_SET YM_VELOCITY_SET__YP_VELOCITY_SET	<p>−Y 境界 +Y 境界で壁面境界条件</p> <p>−Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界で圧力値設定</p> <p>−Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界で速度値設定</p> <p>−Y 境界で圧力値設定、+Y 境界で壁面境界条件</p> <p>−Y 境界 +Y 境界で圧力値設定</p> <p>−Y 境界で圧力値設定 +Y 境界で速度値設定</p> <p>−Y 境界で速度値設定、+Y 境界で壁面境界条件</p> <p>−Y 境界で速度値設定 +Y 境界で圧力値設定</p> <p>−Y 境界 +Y 境界で速度値設定</p>
ZM_WALL__ZP_WALL ZM_WALL__ZP_PRESSURE_SET ZM_WALL__ZP_VELOCITY_SET ZM_PRESSURE_SET__ZP_WALL ZM_PRESSURE_SET__ZP_PRESSURE_SET ZM_PRESSURE_SET__ZP_VELOCITY_SET ZM_VELOCITY_SET__ZP_WALL ZM_VELOCITY_SET__ZP_PRESSURE_SET ZM_VELOCITY_SET__ZP_VELOCITY_SET	<p>−Z 境界 +Z 境界で壁面境界条件</p> <p>−Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界で圧力値設定</p> <p>−Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界で速度値設定</p> <p>−Z 境界で圧力値設定、+Z 境界で壁面境界条件</p> <p>−Z 境界 +Z 境界で圧力値設定</p> <p>−Z 境界で圧力値設定 +Z 境界で速度値設定</p> <p>−Z 境界で速度値設定、+Z 境界で壁面境界条件</p> <p>−Z 境界で速度値設定 +Z 境界で圧力値設定</p> <p>−Z 境界 +Z 境界で速度値設定</p>
LEES_EDWARDS_BC	Lees-Edwards 境界条件

#### 4. Velocity 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_RAW_FORMAT"
機能	速度場の計算値をファイルに出力する。
依存パラメータ 0	VELOCITY_RAW_DATA_FILE

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。

#### 5. Velocity 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。この関数は一定時間間隔で解析を実行したい場合に用いられる

## VolumeFraction : 体積分率場 コマンド一覧

VolumeFraction	名称
初期化 0	"READ_AVS_DATA"
初期化 1	"ADD_NOISE"
初期化 2	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION"
初期化 3	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION_WITH_NOISE"
初期化 4	"LINEAR_ALONG_X_DIRECTION"
初期化 5	"LINEAR_ALONG_Y_DIRECTION"
初期化 6	"LINEAR_ALONG_Z_DIRECTION"
初期化 7	"SET_DROPLETS"
初期化 8	"ADD_AFFINE_DEFORMATION:SHEAR"
初期化 9	"SET_LAMELLAE"
時間発展 0	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITH_FLOW"
時間発展 1	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITHOUT_FLOW"
時間発展 2	"SOLVE_OHTA_KAWASAKI_2"
解析 0	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数 0	"RETURN_TRUE_FUNC"
評価関数 1	"TRUE_AT_A_CONSTANT_TIME_INTERVAL"

## 1. VolumeFraction 初期化 詳細

名称	"READ_AVS_DATA"
機能	AVS 形式データから体積分率場初期値を入力する。
依存パラメータ 0	AVS_DATA_FILE_NAME

名称	"ADD_NOISE"
機能	各成分にランダムなノイズを加える。
依存パラメータ 0	DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 1	SEED_OF_RANDOM_NUMBER

名称	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION"
機能	各成分の体積分率を空間的に一定の値に初期化する。 ただし境界値は境界条件に従って設定する。
依存パラメータ 0	AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 1	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 2	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ 3	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 4	BULK_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 5	REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT

名称	<b>"CONSTANT_VOLUME_FRACTION_WITH_NOISE"</b>
機能	各成分の体積分率を空間的に一定の値に初期化してからノイズを加える。 ただし境界値は境界条件に従って設定する。
依存パラメータ 0	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 1	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ 2	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 3	BULK_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 4	REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT
依存パラメータ 5	DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 6	SEED_OF_RANDOM_NUMBER
依存パラメータ 7	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

名称	<b>"LINEAR_ALONG_X_DIRECTION"</b>
機能	X 軸方向に一定の勾配をもつ分布に初期化する。
依存パラメータ 0	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 1	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

名称	<b>"LINEAR_ALONG_Y_DIRECTION"</b>
機能	Y 軸方向に一定の勾配をもつ分布に初期化する。
依存パラメータ 0	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 1	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

名称	<b>"LINEAR_ALONG_Z_DIRECTION"</b>
機能	Z 軸方向に一定の勾配をもつ分布に初期化する。
依存パラメータ 0	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 1	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

名称	<b>"SET_DROPLETS"</b>
機能	2 成分系で指定した位置に指定した半径のドロップレットを配置する。 複数個のドロップレットを配置することが可能。
依存パラメータ 0	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ 1	NUMBER_OF_DROPLETS
依存パラメータ 2	RADIUS_OF_DROPLET
依存パラメータ 3	X_COORDINATE_OF_DROPLET
依存パラメータ 4	Y_COORDINATE_OF_DROPLET
依存パラメータ 5	Z_COORDINATE_OF_DROPLET

名称	<b>"ADD_AFFINE_DEFORMATION:SHEAR"</b>
機能	現在の状態をシア変形して初期状態を設定する $xy$ 平面を $x$ 方向にシア変形させて作成する。 ただし境界値は境界条件に従って設定する。
依存パラメータ 0	INITIAL_SHEAR_STRAIN_ZX
依存パラメータ 1	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 2	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ 3	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 4	BULK_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 5	REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT

名称	"SET_LAMELLAE"
機能	2成分系でラメラ構造の初期値を設定する。
依存パラメータ 0	NUMBER_OF_LAMELLAE
依存パラメータ 1	DIRECTION_OF_LAMELLAE
依存パラメータ 2	PHASE_OF_LAMELLAE

## 2. VolumeFraction 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITH_FLOW"
機能	体積分率場の時間発展方程式 $\partial\psi_\alpha/\partial t = -g_0\nabla \cdot (\psi_\alpha \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$ を時間積分する
依存している場 0	Velocity
依存している場 1	K_Field
依存パラメータ 0	DT
依存パラメータ 1	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 2	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ 3	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 4	BULK_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 5	REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT

名称	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITHOUT_FLOW"
機能	$\partial\psi_\alpha/\partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$ を時間積分する
依存している場 0	K_Field
依存パラメータ 0	DT
依存パラメータ 1	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ 2	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ 3	VOLUME_FRACTION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ 4	BULK_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ 5	REMOVE_FRACTION_OF_SOLVENT

名称	"SOLVE_OHTA_KAWASAKI_2"
機能	2成分系 Ohta-Kawasaki モデル (Proc. of SPIE, 8680, 86801I (2013)) $\partial\eta/\partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J} - \alpha\eta$ , where $\eta = 2\psi_0 - 1$ を時間積分する。 K_Field のコマンドには "GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL_ORDER_PARAMETER"、 ChemicalPotential のコマンドには"OHTA_KAWASAKI_2"を用いること。 時間刻みパラメータ DT の定義は $L\Delta t$ となっており、拡散係数 $L$ はパラメータとしては指定しない。 $\alpha = \frac{3}{f(1-f)}$ の関係があり、 $f$ はジブロックコポリマーのブロック長比。
依存している場 0	VolumeFraction
依存している場 1	K_Field
依存パラメータ 0	DT
依存パラメータ 1	ALPHA_OHTA_KAWASAKI

## 3. VolumeFraction 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
BIASED_PERIODIC	Biased Periodic 境界条件
XM_WALL_XP_WALL	-X 境界 +X 境界とともに壁面境界条件
XM_WALL_XP_BULK	-X 境界で壁面境界条件、+X 境界でバルク境界条件
XM_BULK_XP_WALL	-X 境界でバルク境界条件、+X 境界で壁面境界条件
XM_BULK_XP_BULK	-X 境界 +X 境界とともにバルク境界条件
YM_WALL_YP_WALL	-Y 境界 +Y 境界とともに壁面境界条件
YM_WALL_YP_BULK	-Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界でバルク境界条件
YM_BULK_YP_WALL	-Y 境界でバルク境界条件、+Y 境界で壁面境界条件
YM_BULK_YP_BULK	-Y 境界 +Y 境界とともにバルク境界条件
Z_WALL_ZP_WALL	-Z 境界 +Z 境界とともに壁面境界条件
ZM_WALL_ZP_BULK	-Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界でバルク境界条件
ZM_BULK_ZP_WALL	-Z 境界でバルク境界条件、+Z 境界で壁面境界条件
ZM_BULK_ZP_BULK	-Z 境界 +Z 境界とともにバルク境界条件

#### 4. VolumeFraction 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。

#### 5. VolumeFraction 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。 この関数は一定時間間隔で解析を実行したい場合に用いられる。

名称	"TRUE_AT_A_CONSTANT_TIME_INTERVAL"
機能	一定時間ステップごとに真の値を返す。
依存パラメータ 0	FINAL_STEP
依存パラメータ 1	DIVISION_NUM1

### Obstacle : 障害物場 コマンド一覧

Obstacle	名称
初期化 0	"READ_OBSTACLE_DATA"
初期化 1	"SET_BOUNDARY_CONDITION"

#### 1. Obstacle 初期化 詳細

名称	"READ_OBSTACLE_DATA"
機能	Obstacle(障害物) 場の値をファイルから読み込んで初期化する。
依存パラメータ	OBSTACLE_DATA_FILE
名称	"SET_BOUNDARY_CONDITION"
機能	Obstacle(障害物) 場に周期境界条件を設定する。周期境界上に Obstacle の表面が設置された場合に用いる。初期化の際に一度実行すればよい。

## 2. Obstacle 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件

## Diffuion\_Flux : 相分離構造上での拡散流束場 コマンド一覧

Action の import 機能を用いて読み込まれた相分離構造上での熱や物質の拡散計算で用いられる。相分離構造は固定されており、パラメータ DIFFUSION\_COEFFICIENT は熱や物質の拡散係数を意味する。

Diffusion_Flux	名称
時間発展 0	"GRADIENT_DIFFUSION_FIELD"

## 1. Diffusion\_Flux 時間発展コマンド 詳細

名称	"GRADIENT_DIFFUSION_FIELD"
機能	拡散場の勾配から拡散流束場を計算 温度場の場合、 $\mathbf{J} = -D\nabla T$ , where $D$ is the local diffusion coefficient.
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT 計算開始時に、自動的に、設定された濃度場を用いて局所的な拡散係数が決定される。 $D(x) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) D_{\alpha}$

## 2. Diffusion\_Flux 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
XM.WALL_XP.WALL	$-X$ 境界 $+X$ 境界とともに壁面境界条件
YM.WALL_YP.WALL	$-Y$ 境界 $+Y$ 境界とともに壁面境界条件
ZM.WALL_ZP.WALL	$-Z$ 境界 $+Z$ 境界とともに壁面境界条件

## Diffuion\_Field : 相分離構造上での拡散場 コマンド一覧

Action の import 機能を用いて読み込まれた相分離構造上での熱や物質の拡散計算で用いられる。相分離構造は固定されており、パラメータ DIFFUSION\_COEFFICIENT は熱や物質の拡散係数を意味する。

Diffusion_Field	名称
初期化 0	"CONSTANT_DIFFUSION_FIELD"
時間発展 0	"SOLVE_DIFFUSION"

## 1. Diffusion\_Field 初期化 詳細

名称	"CONSTANT_DIFFUSION_FIELD"
機能	指定した値で領域全体を初期化する
依存パラメータ 0	INITIAL_DIFFUSION_FIELD



## 2. Diffusion\_Field 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_DIFFUSION"
機能	あらかじめ計算しておいた拡散流束から拡散場の時間発展を計算 温度場の場合、 $\partial T / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}$

## 3. Diffusion\_Field 境界条件 (部分領域条件) 詳細

部分領域条件	処理
PERIODIC	周期境界条件
XM_WALL__XP_WALL	$-X$ 境界 $+X$ 境界とともに壁面境界条件
YM_WALL__YP_WALL	$-Y$ 境界 $+Y$ 境界とともに壁面境界条件
ZM_WALL__ZP_WALL	$-Z$ 境界 $+Z$ 境界とともに壁面境界条件

## 3.2 有限要素法相分離シミュレータ PhaseSeparation\_FEM の場のコマンドとパラメータ

### 3.2.1 PhaseSeparation\_FEM の入力パラメーター一覧

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
VALENCY	各イオン成分の電荷数 $Z_\alpha$
Z	各イオン成分の電荷数 $Z_\alpha$
POLYMERIZATION_INDEX_N	各成分の重合度 $N_\alpha$ を配列として与える
CHI <sub>mn</sub>	成分 $n, m$ の $\chi$ -パラメータ ( $m < n$ のみ与える)
DIELECTRIC_CONSTANT	比誘電率 $\epsilon_\alpha$ 。成分毎に配列として与える。
B	無次元化した電気エネルギー $B$
CHARGE_DENSITY	成分毎の電荷 $\rho_\alpha$
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")
PENALTY_NUMBER_FOR_DIRICHLET_BC	Dirichlet 境界条件に使用するペナルティ数 (大きな数値)。デフォルトは $10^{13}$ 。
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
DIMENSIONLESS_GRAVITY	重力加速度 $g$ 。
DIMENSIONLESS_DENSITY	各成分の質量密度 $\rho_\alpha$ 。
DT_FOR_V	Stokes 流計算に使用する時間刻み
CA	キャピラリー数
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: $1.0^{-3}$ )
VISCOSITY	成分毎の粘性係数 $\eta_\alpha$
SKIP_INTERVAL _VELOCITY_CALCULATION	速度場計算を行なう時間ステップ間隔
AVERAGED_VOLUME_FRACTION	各成分の初期体積分率の平均値 $\psi_{\alpha 0}$
DEVIATION_FROM_AVERAGED _VOLUME_FRACTION	体積分率初期値に与えるノイズの大きさ
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	体積分率初期値に与えるノイズの乱数の種
NUMBER_OF_DROPLETS	体積分率場初期設定でつくる液滴数
RADIUS_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の半径
X.COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の $X$ 座標
Y.COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の $Y$ 座標
Z.COORDINATE_OF_DROPLET	体積分率場初期設定でつくる各液滴の $Z$ 座標

DIFFUSION_COEFFICIENT	各成分の拡散係数 $L_\alpha$
-----------------------	---------------------

### 3.2.2 PhaseSeparation\_FEM 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
VolumeFraction	体積分率またはイオン濃度場 $\psi_\alpha, C_\alpha$
ChemicalPotential	化学ポテンシャル場 $\mu_\alpha$
Velocity	速度場 $\mathbf{v}$
K_Field	流束場 $\mathbf{J}_\alpha(\mathbf{K})$
Viscosity	粘度場 $\eta$
Pressure	圧力場 $P$
ElectricPotential	電場ポテンシャル場 $\Phi$
Obstacle	障害物場 (CELL 上で定義される)

障害物場だけは有限要素セル (Cell) 内に定義される場である。他の場はすべて要素節点 (Vertex) 上で定義される。

流束場 K.Field の  $\alpha = 0$  成分は流体方程式の体積分力場  $\mathbf{K}$  を格納するために使用されることがある。

### 3.2.3 PhaseSeparation\_FEM の場のコマンド一覧

#### ChemicalPotential : 化学ポテンシャル場コマンド一覧

ChemicalPotential	名称
初期化	"CHI_PARAMETER_SET"
時間発展	"SET_ZERO"
時間発展	"SYMMETRIC_GL"
時間発展	"FLORY_HUGGINS"
時間発展	"ADD_ELECTRIC_EFFECT_OF_DIELECTRIC_MEDIUM"
時間発展	"ADD_ELECTROSTATIC_EFFECT_USING_CHARGE_DENSITY"
時間発展	"ADD_EFFECT_OF_GRAVITY"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

#### 1. ChemicalPotential 時間発展コマンド 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
名称	"SYMMETRIC_GL"
機能	2 成分系 Ginzburg-Landau モデル $\mu = -\psi + \psi^3 - \Delta\psi (\psi \equiv \psi_1 - \psi_0)$
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"FLORY_HUGGINS"
機能	Flory-Huggins の自由エネルギーを用いて化学ポテンシャルを計算する。
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CHI <sub>mn</sub>
依存パラメータ	POLYMERIZATION_INDEX_N

名称	"ADD_ELECTRIC_EFFECT_OF_DIELECTRIC_MEDIUM"
機能	体積分率場に依存する誘電率場と静電ポテンシャル場 $\Phi$ を用いて、電場下での誘電性流体としての効果を化学ポテンシャルに取り入れる。
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIELECTRIC_CONSTANT
依存パラメータ	B

名称	"ADD_ELECTROSTATIC_EFFECT_USING_CHARGE_DENSITY"
機能	電荷の空間分布と静電ポテンシャルからの寄与を現在の化学ポテンシャルに計算する $(\partial \rho_e / \partial \psi) \Phi$
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CHARGE_DENSITY

名称	"ADD_EFFECT_OF_GRAVITY"
機能	重力の寄与を現在の化学ポテンシャルに追加する。 $g(\rho_\alpha - \rho_0)z$
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIMENSIONLESS_GRAVITY
依存パラメータ	DIMENSIONLESS_DENSITY

## 2. ChemicalPotential 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 3. ChemicalPotential 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

## ElectricPotential : 電場ポテンシャル場コマンド一覧

ElectricPotential	名称
時間発展	"ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. ElectricPotential 時間発展コマンド 詳細

名称	"ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER"
機能	電場ポテンシャルの Poisson 方程式 $\nabla \cdot (\epsilon \nabla \Phi) = -\rho_e$ を解く。
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	CHARGE_DENSITY
依存パラメータ	DIELECTRIC_CONSTANT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
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

## 2. ElectricPotential 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
I_CONSTANT_VALUE	一定の値に初期化
D	一定の値に設定 (Dirichlet 条件)
N	$\mathbf{n} \cdot (\epsilon \nabla \Phi) = \bar{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n}$ : 表面電束密度 (Neumann 条件)

## 3. ElectricPotential 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 4. ElectricPotential 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

## K\_Field : 流束場コマンド一覧

K_Field	名称
初期化	"SET_ZERO"
初期化	"SET_CONSTANT_FORCE"
時間発展	"SET_ZERO"
時間発展	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. K\_Field 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"SET_CONSTANT_FORCE"
機能	一定の外力を (成分 0 に) 加える。
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE
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 時間発展コマンド 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"GRADIENT_CHEMICAL_POTENTIAL"
機能	体積分率場と化学ポテンシャル勾配から流速場を計算 $\mathbf{K}_\alpha = -\psi_\alpha \nabla \mu_\alpha$
依存している場	VolumeFraction
依存している場	ChemicalPotential
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する。
依存パラメータ 0	NUMBER_OF_COMPONENTS

## 3. K\_Field 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
D_CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	指定した成分の流束を一定値に設定 (Dirichlet 条件) 成分番号 $\alpha$ 、 $\mathbf{J}_{\alpha x}$ 、 $\mathbf{J}_{\alpha y}$ 、 $\mathbf{J}_{\alpha z}$ をデータとして与える

## 4. K\_Field 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 5. K\_Field 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

Pressure : 圧力場コマンド一覧

Pressure	名称
初期化	"SET_ZERO"
時間発展	"SOLVE_PRESSURE"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. Pressure 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。

## 2. Pressure 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_PRESSURE"
機能	圧力場の Poisson 方程式を解く $\nabla^2 p = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{v}^*$
依存している場 0	Pressure
依存している場 1	Velocity
依存パラメータ 0	DT_FOR_V
依存パラメータ 1	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ 2	PENALTY_NUMBER
依存パラメータ 3	MATRIX_SOLVER

## 3. Pressure 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
I_CONSTANT_VALUE	一定の値に初期化
D	一定の値に設定 (Dirichlet 条件)
N	$\mathbf{n} \cdot \nabla P = \bar{P}_n$ (Neumann 条件)

## 4. Pressure 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 5. Pressure 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

Velocity : 速度場コマンド一覧

Velocity	名称
初期化	"SET_ZERO"
初期化	"SET_DIRICHLET_CONDITION"
時間発展	"SOLVE_VELOCITY_AND_PRESSURE"
時間発展	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
境界条件設定	"SET_DIRICHLET_CONDITION"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. Velocity 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。
名称	"SET_DIRICHLET_CONDITION"
機能	速度場の部分領域条件のうち Dirichlet 条件のみを適用して初期化。
依存している場	Velocity

## 2. Velocity 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_VELOCITY_AND_PRESSURE"
機能	速度場の Navier Stokes 方程式 (移流項を無視) を 1 時間ステップ進行する。 $Re \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + C_a^{-1} \mathbf{K}$ $Re$ のデフォルト値は 1.0。
依存している場	Pressure
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	REYNOLDS
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CA
名称	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
機能	速度場と圧力場の Stokes 方程式を解く。 $\nabla p = \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + C_a^{-1} \mathbf{K}$
依存している場	Pressure
依存している場	Velocity
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	SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION
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	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	CA



## 3. Velocity 境界条件 詳細

名称	"SET_DIRICHLET_CONDITION"
機能	速度場の部分領域条件のうち Dirichlet 条件のみを適用する。

## 4. Velocity 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
D_VX	$v_x$ を一定の値に設定 (Dirichlet 条件)
D_VY	$v_y$ を一定の値に設定 (Dirichlet 条件)
D_VZ	$v_z$ を一定の値に設定 (Dirichlet 条件)

## 5. Velocity 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 6. Velocity 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

## Viscosity : 粘度場コマンド一覧

Viscosity	名称
時間発展	"CONSTANT_VISCOSITY"
時間発展	"VISCOSITY_DEPENDING_ON_VOLUME_FRACTION"

## 1. Viscosity 初期化 詳細

## 2. Viscosity 時間発展コマンド 詳細

名称	"CONSTANT_VISCOSITY"
機能	一定の粘度値 $\eta_0$ (成分 0 の粘度) で初期化。
依存パラメータ	VISCOSITY
名称	"VISCOSITY_DEPENDING_ON_VOLUME_FRACTION"
機能	各成分の粘度と体積分率から粘度を計算 $\eta = \sum_{\alpha} \eta_{\alpha} \psi_{\alpha}$
依存している場	VolumeFraction
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	VISCOSITY

## VolumeFraction : 体積分率場 コマンド一覧

VolumeFraction	名称
初期化	"INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
初期化	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION"
初期化	"ADD_NOISE"
初期化	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION_WITH_NOISE"
初期化	"UNIFORM_CONCENTRATION"
初期化	"SET_DROPLETS"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
時間発展	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITH_FLOW"
時間発展	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITHOUT_FLOW"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

## 1. VolumeFraction 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件のうち初期化条件を使って場を初期化する
依存パラメータ 0	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION"
機能	各成分の体積分率を空間的に一定の値で初期化する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AVERAGED_VOLUME_FRACTION

名称	"ADD_NOISE"
機能	各成分にランダムなノイズを加える。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER

名称	"CONSTANT_VOLUME_FRACTION_WITH_NOISE"
機能	各成分の体積分率を空間的に一定の値に初期化してからノイズを加える。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ	DEVIATION_FROM_AVERAGED_VOLUME_FRACTION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER

名称	"SET_DROPLETS"
機能	2 成分系で指定した位置に指定した半径のドロップレットを配置する。 複数個のドロップレットを配置することが可能。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	NUMBER_OF_DROPLETS
依存パラメータ	RADIUS_OF_DROPLET
依存パラメータ	X_COORDINATE_OF_DROPLET
依存パラメータ	Y_COORDINATE_OF_DROPLET
依存パラメータ	Z_COORDINATE_OF_DROPLET

## 2. VolumeFraction 時間発展コマンド 詳細

名称	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分境界条件を適用する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITH_FLOW"
機能	体積分率場の時間発展方程式 $\partial\psi_\alpha/\partial t = -g_0\nabla \cdot (\psi_\alpha \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$ を時間積分する
依存している場 0	K_Field
依存している場 1	Velocity
依存パラメータ 0	DT
依存パラメータ 1	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ 2	DIFFUSION_COEFFICIENT

名称	"SOLVE_EQUATION_OF_CONTINUITY_WITHOUT_FLOW"
機能	流れ場の効果を含まない体積分率場の時間発展方程式 $\partial\psi_\alpha/\partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$ を時間積分する
依存している場 0	K_Field
依存パラメータ 0	DT
依存パラメータ 1	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ 2	DIFFUSION_COEFFICIENT

## 3. VolumeFraction 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
I_CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	指定した成分の $\psi_\alpha$ を一定の値に初期化 成分番号 $\alpha$ 、 $\psi_\alpha$ をデータとして与える
D_CONSTANT_VALUE_FOR_A_COMPONENT	指定した成分の $\psi_\alpha$ を一定の値に設定 (Dirichlet 条件) 成分番号 $\alpha$ 、 $\psi_\alpha$ をデータとして与える

## 4. VolumeFraction 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で計算結果を出力する。

## 5. VolumeFraction 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

## 参考文献

- 1) 数値流体力学編集委員会（編）：非圧縮性流体解析 (数値流体力学シリーズ 1), 東京大学出版会 (1995).
- 2) 日本数値流体力学会有限要素法研究委員会（編）：有限要素法による流れのシミュレーション, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1998).