

OCTA

ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ

多相構造シミュレータ

Muffin

version 4.1

ユーザーズマニュアル

- 第3分冊 -

電解質流体シミュレータ

Electrolyte

OCTA ユーザーズグループ

March 03 2005

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 4.1 リリース

プログラム、マニュアル修正 山上達也

謝辞

本プログラム開発は、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 ©2000-2005 OCTA Licensing Committee All rights reserved.

目次

第 1 章 Electrolyte の理論背景	1
1.1 Electrolyte の基本方程式	1
1.1.1 パラメータの記号と変数定義	1
1.1.2 電解質溶液系を記述する方程式	1
1.1.3 時間単位と空間単位	2
1.1.4 方程式の無次元化と無次元化されたパラメータ	3
1.2 Poisson-Boltzmann 方程式と Debye 長	4
1.3 粒子の表面での境界条件	5
1.3.1 入力に必要な実パラメータと無次元化パラメータのまとめ	6
1.4 有限差分法を用いた FDM Electrolyte_FDM	7
1.4.1 電解質溶液中におかれた Obstacle 表面での境界条件	7
1.4.2 各場に対する壁面での境界条件	8
1.5 有限要素法を用いた電解質シミュレータ Electrolyte_FEM	12
1.5.1 計算モデル	12
1.5.2 外部電場の取扱い	12
1.5.3 ゼロ電流境界条件	13
1.5.4 Electrolyte_FEM での場に対する境界条件	14
第 2 章 Electrolyte の応用操作	19
2.1 有限差分法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FDM の応用操作	19
2.1.1 応用例 1: 電極間の電解質	19
2.1.2 応用例 2: 平面電荷にともなう電気拡散層の形成	21
2.1.3 応用例 3: 電解質流体の障害物周りの流れ (1)	23
2.1.4 応用例 4: 電解質流体の障害物周りの流れ (2)	25
2.2 有限要素法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FEM の応用操作	28
2.2.1 応用例 1: 電極間の電解質	28
2.2.2 応用例 2: 平面電荷にともなう電気拡散層の形成	29
2.2.3 応用例 3: 平面電荷に対する電気泳動 (電気浸透) 効果	30
2.2.4 応用例 4: 電荷を持った物体の回りの電解質の流れ (1)	31
2.2.5 応用例 5: 電荷を持った物体の回りの電解質の流れ (2)	34
第 3 章 Electrolyte リファレンス	37
3.1 有限差分法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FDM の場のコマンドとパラメータ	37
3.1.1 Electrolyte_FDM の入力パラメーター一覧	37
3.1.2 Electrolyte_FDM の利用可能な場の一覧	40
3.1.3 Electrolyte_FDM の場のコマンド一覧	40
3.2 有限要素法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FEM の場のコマンドとパラメータ	55
3.2.1 Electrolyte_FEM の入力パラメーター一覧	55
3.2.2 Electrolyte_FEM の利用可能な場の一覧	56

3.2.3	Electrolyte_FEM の場のコマンド一覧	56
	References	67

目 次

1.1	2 つの Obstacles	17
2.1	Electrolyte_FEM: 電解質の流れ場中の荷電粒子	31
2.2	Electrolyte_FEM: 球状の荷電粒子回りの電解質流れ中の電荷密度分布。	36

第1章 Electrolyteの理論背景

MUFFIN の”Electrolyte” シミュレータは電解質系のシミュレーションに特化している。第??章の理論背景において電解質系について若干触れられているが、ここでは電解質シミュレータで用いられる方程式をさらに詳しく説明する。

1.1 Electrolyteの基本方程式

1.1.1 パラメータの記号と変数定義

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

パラメータの記号	意味
e	電荷の単位 ($= -1.602 \times 10^{-19}$ C(oulomb))
ϵ_o	真空の誘電率 ($= 8.854 \times 10^{-12}$ C ² N ⁻¹ m ⁻²)
ϵ_r	相対誘電率 ($\epsilon_r = 78.2$)
η_w	水の粘度 ($= 0.89 \times 10^{-3}$ Pa · sec $= 0.89 \times 10^{-2}$ Poise)
N_c	イオンの成分数
Z_α	α 種イオンの荷数 (Valency)
$k_B T$	熱エネルギー ($1 k_B T = 4.12 \times 10^{-21}$ J at $T = 298 K (25^\circ C)$)
D_α	α 種イオンの拡散係数 .
変数の記号	変数の意味
$C_\alpha(\mathbf{r})$	α 種イオンの濃度
$\mathbf{v}(\mathbf{r})$	速度場
$p(\mathbf{r})$	圧力場
$\Phi(\mathbf{r})$	ポテンシャル場
$\rho_e(\mathbf{r})$	電荷密度
$\mathbf{K}_\alpha(\mathbf{r})$	ストークス方程式のソース場

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

1.1.2 電解質溶液系を記述する方程式

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

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha. \quad (1.1)$$

である。上記の方程式 (1.1) での、 \mathbf{J}_α はイオン流束密度で次のように定義される

$$\mathbf{J}_\alpha = C_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}) \quad (1.2)$$

ここで \mathbf{v}_α はイオン α の流速である。

摩擦力と電気化学的ポテンシャルの釣合を仮定すると、

$$-\xi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}) - \nabla\mu_\alpha = 0, \quad (1.3)$$

$$\mu_\alpha \equiv k_B T \log C_\alpha + eZ_\alpha \Phi, \quad (1.4)$$

ここで ξ_α はイオン α と溶媒の間の摩擦係数である。これから以下のような式が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_\alpha &= -\frac{C_\alpha}{\xi_\alpha} \nabla\mu_\alpha \equiv L_\alpha \mathbf{K}_\alpha, \\ \mathbf{K}_\alpha &\equiv -C_\alpha \nabla\mu_\alpha \\ &= -(k_B T \nabla C_\alpha + eZ_\alpha C_\alpha \nabla\Phi), \end{aligned} \quad (1.5)$$

ここで $L_\alpha \equiv 1/\xi_\alpha$ はオンサガーの輸送係数である。速度場に対する方程式は次のように書かれる。

$$-\nabla p + \eta_w \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{K} = 0, \quad (1.6)$$

ここで \mathbf{K} は Stokes 方程式のソース項で、イオン流束と溶媒の摩擦力から生ずる体積力として計算される。

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} C_\alpha \xi_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}) = - \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} C_\alpha \nabla\mu_\alpha = \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} \mathbf{K}_\alpha \\ &= - \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} [k_B T \nabla C_\alpha + eZ_\alpha C_\alpha \nabla\Phi]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

$$\mathbf{K} = - \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} [k_B T \nabla C_\alpha + eZ_\alpha C_\alpha \nabla\Phi]. \quad (1.8)$$

静電ポテンシャルは Poisson 方程式に従う。

$$\Delta\Phi = -\frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \sum_{\alpha} eZ_\alpha C_\alpha. \quad (1.9)$$

1.1.3 時間単位と空間単位

以下では単位系として MKSA 単位系を用いる。長さの単位としてビヨルン長 (Bjerrum length) ξ_B を用いて表される長さ l を用いることとする。

$$l = 4\pi\xi_B = \frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \frac{e^2}{k_B T}. \quad (1.10)$$

時間の単位は、電解質系によく現われる典型的なイオンの水中での拡散定数 D^* によって決定することにする。この代表的な拡散定数の値として $D^* = 1.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2$ を用いる。この拡散定数を持つイオンが長さ l だけ拡散するのにかかる時間を τ とすると

$$\tau = l^2 / D^*. \quad (1.11)$$

となる。この時間を時間の単位として採用する。拡散定数 D^* をもつ典型的な電解質溶液系の温度 $T = 298\text{K}$ (25°C) での空間単位と時間単位を見積もると

$$l = 8.96 \text{ nm} \quad (1.12)$$

$$\tau = 0.803 \times 10^{-7} \text{ sec} = 0.08 \text{ } \mu\text{sec} \quad (1.13)$$

となる。上記 2 つの単位から導かれる典型的な速度の大きさは以下になる。

$$v = \frac{l}{\tau} = 1.116 \times 10^{-1} \text{ m/sec}. \quad (1.14)$$

1.1.4 方程式の無次元化と無次元化されたパラメータ

以下において無次元化されたものにはチルダ記号を付けることとする。時間と長さの単位として l と τ を用いることとする。その結果、座標 x_i は $\tilde{x}_i \equiv x_i/l$ ($i = 1, 2, 3$) のように、時間は $\tilde{t} \equiv t/\tau$ のようにスケールされる。濃度場 C_α は濃度 $C^* = 10^{-3}$ モル/リットル $= 6.023 \times 10^{23}$ ions/m³ を単位としてスケールし、速度場 \mathbf{v} は時間単位 τ と空間単位 l で作られる速度 $v^* (\equiv l/\tau)$ を単位としてスケールされる。拡散定数は水溶液中でのイオンの典型的な拡散定数の値 D^* , を用いて $\tilde{D}_\alpha = D_\alpha/D^*$ のようにスケールされる。よって、 α 種のイオンの濃度場の時間発展方程式は次のように無次元化される。

$$\frac{\partial \tilde{C}_\alpha}{\partial \tilde{t}} = -\tilde{\nabla} \cdot (\tilde{\mathbf{v}} \tilde{C}_\alpha) - \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{J}}_\alpha. \quad (1.15)$$

上記の方程式において $\tilde{\mathbf{J}}_\alpha$ は次のように定義される。

$$\tilde{\mathbf{J}}_\alpha \equiv -\tilde{D}_\alpha \left[\tilde{\nabla} \tilde{C}_\alpha + \tilde{R} Z_\alpha \tilde{C}_\alpha \tilde{\nabla} \tilde{\Phi} \right]. \quad (1.16)$$

ここで、新たに無次元化パラメータ \tilde{R} が導入されている。この無次元化パラメータ \tilde{R} は

$$\tilde{R} = \frac{e\Phi_o}{k_B T}. \quad (1.17)$$

で表される量で、静電エネルギーと熱エネルギーの比を表している。静電ポテンシャルに対するマクスウェル方程式は次のように無次元化される。

$$\tilde{\Delta} \tilde{\Phi} = -\frac{\tilde{M}}{\tilde{R}} \sum_\alpha Z_\alpha \tilde{C}_\alpha. \quad (1.18)$$

ここで、 \tilde{M} は $\tilde{M} \equiv C^* l^3$ (モル) であり、あるイオンの濃度が C^* の場合に単位体積 l^3 中に含まれるイオンのモル数を表している。速度場に対する無次元化された方程式は

$$-\tilde{\nabla} \tilde{p} + \tilde{\Delta} \tilde{\mathbf{v}} + \tilde{M} \tilde{D} \tilde{\mathbf{K}} = 0. \quad (1.19)$$

であり、ここで無次元化された体積力 $\tilde{\mathbf{K}}$ は

$$\tilde{\mathbf{K}} \equiv - \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} \left[\tilde{\nabla} \tilde{C}_\alpha + \tilde{R} Z_\alpha \tilde{C}_\alpha \tilde{\nabla} \tilde{\Phi} \right]. \quad (1.20)$$

また、 \tilde{D} は

$$\tilde{D} = D^{(l)}/D^* \quad \text{and} \quad D^{(l)} = \frac{k_B T}{6\pi\eta_w(l/6\pi)}. \quad (1.21)$$

で定義されている。

各変数の無次元化をまとめると以下のようなになる。

$$\tilde{p} = p/(\eta_w/\tau) \quad \tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{v}/(l/\tau) \quad \tilde{\phi} = \phi/1 \text{ mV} \quad \tilde{C}_\alpha = C_\alpha/(1\text{mmol/liter}) \quad (1.22)$$

今後、方程式を見やすくするために特に問題がない限り無次元化された変数に付けているチルダを取り除くことにする。最終的に無次元化された方程式は次のようになる。

無次元化された電解質溶液系の方程式

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha \quad (1.23)$$

$$\mathbf{J}_\alpha \equiv -D_\alpha \left[\nabla C_\alpha + R Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi \right]. \quad (1.24)$$

$$\Delta \Phi = -\frac{M}{R} \sum_\alpha Z_\alpha C_\alpha. \quad (1.25)$$

$$-\nabla p + \Delta \mathbf{v} + M D \mathbf{K} = 0 \quad (1.26)$$

$$\mathbf{K} \equiv -\sum_{\alpha=0}^{N_c-1} \left[\nabla C_\alpha + R Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi \right]. \quad (1.27)$$

上記の方程式 (1.23)-(1.27) に現われるパラメータは

$$D_\alpha, \quad Z_\alpha, \quad R, \quad M \quad \text{and} \quad D. \quad (1.28)$$

である。

温度 $T = 298\text{K}$ において、長さの単位は $l = 8.96 \times 10^{-9}\text{m} = 8.89\text{ nm}$ となる。この l の値を用いると M は $M = C^* l^3 = 4.33 \times 10^{-1}$ (ions) であり、 $D_l = 5.17 \times 10^{-6}\text{ cm}^2/\text{sec}$ となる。この見積もりでは静電ポテンシャルの単位として $\Phi_o = 1\text{mV}$ を用いた。これらを用いて最終的に次のような無次元化のためのパラメータの値を得る。

$$R = 3.89 \times 10^{-2}, \quad M = 4.33 \times 10^{-1} \quad \text{and} \quad D = 0.517. \quad (1.29)$$

1.2 Poisson-Boltzmann 方程式と Debye 長

平衡状態にある電解質系では電気化学ポテンシャルは空間的に一様になっている。

$$\begin{aligned} \nabla \mu_\alpha &= \nabla [k_B T \log C_\alpha + e Z_\alpha \Phi] \\ &= k_B T \frac{\nabla C_\alpha}{C_\alpha} + e Z_\alpha \nabla \Phi = 0. \end{aligned} \quad (1.30)$$

境界条件 $\Phi|_{\mathbf{r}=\infty} = 0$ および $C_\alpha|_{\mathbf{r}=\infty} = C_\alpha^\infty$, のもとでこの方程式は以下のようなになる、

$$C_\alpha(\mathbf{r}) = C_\alpha^\infty \exp\left(-\frac{e Z_\alpha \Phi(\mathbf{r})}{k_B T}\right). \quad (1.31)$$

この式を式 (1.9) に代入すると、以下のような Poisson-Boltzmann 方程式が得られる:

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \sum_\alpha e Z_\alpha C_\alpha^\infty \exp\left(-\frac{e Z_\alpha \Phi(\mathbf{r})}{k_B T}\right). \quad (1.32)$$

Debye-Hückel 近似 $e Z_\alpha \Phi / k_B T \ll 1$ を適用すると以下の式が得られる:

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \sum_\alpha e Z_\alpha C_\alpha^\infty + \frac{\sum_\alpha (e Z_\alpha)^2 C_\alpha^\infty}{\epsilon_o \epsilon_r k_B T} \Phi. \quad (1.33)$$

右辺の第一項は電荷の中性の要請によりゼロとなる。一次元の系に対しては以下のような解が得られる:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \kappa^2\Phi, \quad (1.34)$$

$$\frac{1}{\kappa} \equiv \sqrt{\frac{\epsilon_o\epsilon_r k_B T}{\sum_{\alpha} (eZ_{\alpha})^2 C_{\alpha}^{\infty}}}. \quad (1.35)$$

長さの次元をもつパラメータ $1/\kappa$ は「Debye 長」と呼ばれるものである。この近似では電場ポテンシャルは $\Phi(x) = \Phi_0 \exp(-\kappa x)$ の形になり、これは電荷による電場が反対符号のイオンによって Debye 長程度の距離で「遮蔽」されていることを示している。

1.1.4 で考察した無次元化された方程式系に従うと Debye 長は以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla} \tilde{C}_{\alpha} + \tilde{R} Z_{\alpha} \tilde{C}_{\alpha} \tilde{\nabla} \tilde{\Phi} &= 0 \\ \rightarrow \tilde{C}_{\alpha} &= \tilde{C}_{\alpha}^{\infty} \exp\left(-\tilde{R} Z_{\alpha} \tilde{\Phi}\right) \\ \rightarrow \tilde{\nabla}^2 \tilde{\Phi} &= -\frac{\tilde{M}}{\tilde{R}} \sum_{\alpha} Z_{\alpha} \tilde{C}_{\alpha}^{\infty} \exp\left(-\tilde{R} Z_{\alpha} \tilde{\Phi}\right) \approx \left(\tilde{M} \sum_{\alpha} Z_{\alpha}^2 \tilde{C}_{\alpha}^{\infty}\right) \tilde{\Phi}. \end{aligned}$$

これより無次元化された Debye 長は以下のようになる。

$$\frac{1}{\tilde{\kappa}} \equiv \sqrt{\frac{1}{\tilde{M} \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} Z_{\alpha}^2 \tilde{C}_{\alpha}^{\infty}}}. \quad (1.36)$$

各パラメータの値に $\tilde{M} = 4.33 \times 10^{-1}$, $\tilde{C}_{\alpha}^{\infty} = 1.0$, $Z_{\alpha} = \pm 1$ を用い、 $N_c = 2$ とすると、 $\frac{1}{\tilde{\kappa}} = 1.075 \times l$ となる。

1.3 粒子の表面での境界条件

粒子表面での電場ポテンシャルの境界条件

表面電荷密度 σ を持つ粒子の表面での電場ポテンシャル Φ の境界条件は以下の Neumann 型境界条件で表される。

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi)|_S = -\sigma / \epsilon_r \epsilon_o \quad (1.37)$$

ここで添字 $|_S$ は、Obstacle 表面での値を意味する。また、 \mathbf{n} は Obstacle 表面に垂直な単位ベクトルである。長さの単位 l と静電ポテンシャルの単位 Φ_o を用いて、境界条件 (1.37) は次のように無次元化される。

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi)|_S = -\frac{q}{\tilde{R}}, \quad (1.38)$$

$$q \equiv \frac{\sigma l^2}{e}. \quad (1.39)$$

ここで、 q は表面での単位面積 (l^2) 中に含まれる荷数 $Z = 1$ の解離基の有効数を表している。

粒子表面での速度場、圧力場、濃度場の境界条件

速度場、圧力場と濃度場に対する Obstacle 表面での境界条件は

$$\mathbf{v}|_S = 0 \quad (1.40)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla P)|_S = (\mathbf{n} \cdot \Delta \mathbf{v})|_S \quad (1.41)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_{\alpha})|_S = 0 \quad (1.42)$$

である。

1.3.1 入力に必要な実パラメータと無次元化パラメータのまとめ

[基本パラメータ (単位付きの実際の値)]

記号	記号の意味
N_c	成分数
\bar{C}_α	各成分の仕込み濃度 ($\alpha = 0, \dots, M-1$)
D_α	各成分の拡散定数
Z_α	各成分の荷数
T	温度

[空間単位と時間単位]

意味	記号	表式
空間単位	l	$l = 4\pi\xi_B = \frac{1}{\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2}{k_B T}$
時間単位	τ	$\tau = l^2/D^*$

[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{R}	静電エネルギーと熱エネルギーの比	$R = e\Phi_0/k_B T$	R
\tilde{D}	式 (1.1.4) 参照		D
\tilde{M}	式 (1.1.4) 参照		M
\tilde{D}_α	無次元化した拡散定数	$D = D_\alpha/D^*$	DIFFUSION_COEFFICIENT
$\tilde{\sigma}$	荷電粒子表面の電荷密度	$q = \sigma l^2/e$	SURFACE_CHARGE_ON_OBSTACLE

1.4 有限差分法を用いた FDM Electrolyte_FDM

Electrolyte_FDM は MUFFIN 電解質シミュレータを有限差分法により実装したものである。

選択可能な場

選択可能な場	記号
イオン濃度場	C_α
イオン流束場 (流体力学効果は含まない)	\mathbf{J}_α
速度場	$V_i \quad (i = x, y \text{ or } z)$
圧力場	P
スカラーポテンシャル場	Φ

ここで、 α はイオン種類を表すインデッ

クスで $\alpha = 0, \dots, N_c - 1$ の値をとる (N_c : イオン種類数)。

1.4.1 電解質溶液中におかれた Obstacle 表面での境界条件

FDM 電解質シミュレータでは電解質溶液中に表面電荷をもった立体障害物 (Obstacle) を固定し、その周りのイオンの分布、流れ場を計算することができる。この Obstacle 表面での各場の境界条件をここでは説明する。

静電ポテンシャルに対する境界条件

表面電荷密度 σ をもった Obstacle 表面での静電ポテンシャルの境界条件は次のノイマン境界条件で記述される。

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi)|_S = -\sigma / \epsilon_r \epsilon_o \quad (1.43)$$

ここで添字 $|_S$ は、Obstacle 表面での値を意味する。また、 \mathbf{n} は Obstacle 表面 に垂直な単位ベクトルである。長さの単位 l と静電ポテンシャルの単位 Φ_o を用いて、境界条件 (1.43) は次のように無次元化される。

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi)|_S = -\frac{q}{R}, \quad (1.44)$$

$$q \equiv \frac{\sigma l^2}{e}. \quad (1.45)$$

ここで、 q は表面での単位面積 (l^2) 中に含まれる荷数 $Z = 1$ の解離基の有効数を表している。

Obstacle 表面での速度場、圧力場、濃度場の境界条件

速度場、圧力場と濃度場に対する Obstacle 表面での境界条件は

$$\mathbf{v}|_S = 0 \quad (1.46)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla P)|_S = (\mathbf{n} \cdot \Delta \mathbf{v})|_S \quad (1.47)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_\alpha)|_S = 0 \quad (1.48)$$

である。Electrolyte_FDM では、Obstacle が存在したら、自動的にこの境界条件が設定される。

1.4.2 各場に対する壁面での境界条件

PhaseSeparation_FDM の境界条件のところで既に述べたように有限差分法バージョンの電荷質シミュレータは、系が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 (図??参照)。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。

濃度場 C_α に対する境界条件

濃度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- 周期境界条件

x 方向に周期境界条件を課した場合、次の式が課される。

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

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

- 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

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

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、以下の式で表させれる。

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

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。

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

流束場 J_α 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。

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

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

- 壁面境界条件

流束の値が壁面上でゼロとする。式で表すと

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

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。

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

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

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

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、 δP は振幅、 ω は振動数、 t は時間である。

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 σ を与える (Neumann 境界条件)

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

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

ある。無次元化すると

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

であり、記号の定義は式 (1.44), (1.45) 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、 ϕ_o は平均電位、 $\delta\phi$ は電位の振幅 ω は振動数、 t は時間である。

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 (1.22) によって決定される。

1.5 有限要素法を用いた電解質シミュレータ Electrolyte_FEM

The Electrolyte_FEM シミュレータは MUFFIN 電解質シミュレータ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。

- 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 Electrolyte_FDM 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

List of selectable fields

組み換え可能な場	使われる記号
イオン濃度場	$C_\alpha \quad (\alpha = 0, 1, \dots, N_c - 1)$
電荷密度場	$\rho_e(\mathbf{r})$
誘電率場	$\epsilon(\mathbf{r})$
イオン流束場 (流体力学効果は含まない)	\mathbf{J}_α
速度場	\mathbf{V}
圧力場	P
電場スカラーポテンシャル場	Φ

ここで、 α はイオン種類を表すインデックスで $\alpha = 0, \dots, N_c - 1$ の値をとる (N_c : イオン種類数)。

1.5.1 計算モデル

Electrolyte_FEM の電解質の基本モデルとしては Electrolyte_FDM と同様のものを用いている。また有限要素法による取扱いは PhaseSeparation_FEM と同様である (??節を参照)。

1.5.2 外部電場の取扱い

Electrolyte_FEM シミュレーターでは計算体系全体に一様にかかる外部電場を取り扱うことができる。そのような場合には電場ポテンシャル場は以下のように表現される。

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi'(\mathbf{r}) - \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} \quad (1.49)$$

ここで \mathbf{E}_0 は外部電場の強さである。 $\nabla^2(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r}) = 0$ なので外部電場 \mathbf{E}_0 を含む項からは電荷は生じない。そのため右辺の第一項 $\phi'(\mathbf{r})$ が電解質溶液内部に存在するイオンや物体上の電荷の効果を含むことになる。

Electrolyte_FEM での計算手続き上では \mathbf{E}_0 は流体方程式の体積力項に $\mathbf{K} + \rho_e \mathbf{E}_0$ のように加えられるが、これは流束場 K.Field の手続きになる

(“GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL_WITH_EXTERNAL_FIELD”)。そして電場ポテンシャルについては $\phi'(\mathbf{r})$ を外部電場のない系の $\phi(\mathbf{r})$ と同様に計算することになる。

このような手法を用いる理由の一つとして Electrolyte_FEM シミュレータが FDM シミュレータでは可能であった “biased periodic” をサポートしていないことがある。しかし、より重要な理由は外部電場は計算体系内に一様にかかっているものであり、内部の現象には影響されないはずのものであるということである。そのため、上記のように電場ポテンシャルを2つの項に分解することには重要な物理的意味があることになる。

1.5.3 ゼロ電流境界条件

電解質のシミュレーションにおいては、ある境界面上での電流の積分値がゼロになるという条件を仮定することが役に立つことがある。たとえば「流動電位」の計算の場合 [1] この条件が非常に重要である。

無次元化した表式での電流は以下のように書ける。

$$\mathbf{j} = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} C_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} (\mathbf{v} C_{\alpha} + \mathbf{J}_{\alpha}), \quad (1.50)$$

ここで \mathbf{v}_{α} はイオン α の平均的流速であり、 \mathbf{J}_{α} はイオンの流束で以下のように書ける、

$$\mathbf{J}_{\alpha} \equiv -D_{\alpha} [\nabla C_{\alpha} - R Z_{\alpha} C_{\alpha} \nabla \Phi]. \quad (1.51)$$

ゼロ電流条件は流動電位として生ずる外部電場により満たされるもので、それを境界面での電場 $\mathbf{E}_0 = (\nabla \phi)_S$ として定義するとき、ゼロ電流条件は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \int dS \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} &= \sum_{\alpha} \int dS Z_{\alpha} C_{\alpha} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \\ &\quad - \sum_{\alpha} \int dS D_{\alpha} Z_{\alpha} \mathbf{n} \cdot \nabla C_{\alpha}, \\ &\quad - \sum_{\alpha} \int dS D_{\alpha} R Z_{\alpha}^2 C_{\alpha} [-\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{n}] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (1.52)$$

この式から境界における電場ポテンシャルの勾配を以下のように計算することができる。

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi|_S = -\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{n} = \frac{\sum_{\alpha} \int dS Z_{\alpha} C_{\alpha} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \sum_{\alpha} \int dS D_{\alpha} Z_{\alpha} \mathbf{n} \cdot \nabla C_{\alpha}}{\sum_{\alpha} \int dS D_{\alpha} R Z_{\alpha}^2 C_{\alpha}} \quad (1.53)$$

ここでは簡単化のために境界で $\sum_{\alpha} \int dS D_{\alpha} Z_{\alpha} \mathbf{n} \cdot \nabla C_{\alpha} = 0$ としている。

この条件は電場ポテンシャルの Neumann 条件として適用される (“N_ZERO_ELECTRIC_CURRENT”)。

1.5.4 Electrolyte_FEM での場に対する境界条件

Electrolyte_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。??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。

イオン濃度場 C_α に対する境界条件

イオン濃度場に対して設定可能な境界条件は以下の通りである。

- 周期境界条件

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

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

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

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

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。

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

である。

流束場/体積力場 K_α 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

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 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。

$$v(x, y, z)|_{wall} = v_o$$

ここで記号 $|_{wall}$ は壁面上での値を意味する。また $V_o \perp n$ 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 σ を与える (Neumann 境界条件)**

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

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

ある。無次元化すると

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

であり、記号の定義は式 (1.38), (1.39) 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。

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

- **境界上でのゼロ電流条件 (Neumann condition)**

境界面上での電流の積分値がゼロであるという条件を課し、この条件から計算される電場ポテンシャル勾配を Neumann 条件として使用する。詳細は 1.5.3 節を参照。

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??節の「方程式の無次元化」でなされた無次元化に従う。

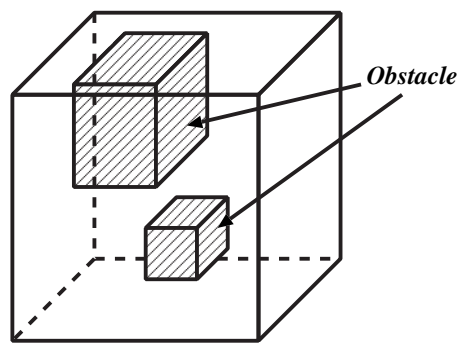


図 1.1: 2 つの Obstacles

第2章 Electrolyte の応用操作

2.1 有限差分法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FDM の応用操作

この節では有限差分法による電解質シミュレータ Electrolyte_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 MUFFIN3 の配布版のディレクトリ MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FDM 以下に問題別のディレクトリ MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FDM/EX01, EX02, ... 等として納められている。

2.1.1 応用例 1: 電極間の電解質

Z 軸境界に 2 枚の電極が置かれ、その間に存在する電解中のイオン濃度分布と電場を 1 次元問題として計算する。

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]	0.0
[0]	[2]	0.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	32.0
[2]	[2]	64.0

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
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e6
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	100
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.8

3. 共通物理定数の入力：DT=1.0e-2, FINAL_STEP=20001, INTERVAL_OF_MONITORING=100, INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT=2000 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
LEES_EDWARDS_BC	0
Number_of_Components	2
Average_Of_Concentration	0.1, 0.1
Diffusion_Coefficient	1.0, 1.0
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
Electric_Potential_at_XY_plane_ZM	-1.0
Electric_Potential_at_XY_plane_ZP	1.0
POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_Plane	1

5. region_condition[]:

各場毎に以下のように境界条件を指定する。

ElectricPotential に対する “XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP” で電極間の電位差を指定する。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Concentration	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Concentration	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Concentration	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
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

6. 場の登録：以下のように場を登録する。

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

7. procedures_table_for_initiallization[]:

場 Concentration に対して初期条件 “UNIFORM” を適用する。

8. procedured_table_for_evolution[]:

ElectricPotential に ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER を、

Concentration に SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITHOUT_FLOW を、

K_Field に GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL をそれぞれ適用する。

9. 計算実行

2.1.2 応用例 2: 平面電荷にともなう電気拡散層の形成

この計算では電荷を帯びた平面 (-Z 境界) 付近の電解質中のイオン濃度分布を計算する。+Z 境界は電気的中性条件が成り立ったバルク領域になっているものとする (正イオンと負イオンの濃度が同一になっている)。電荷を帯びた平面近くの電場ポテンシャルは Debye 長のオーダーで指数関数的に減衰する。

1. メッシュの作成:

parameter.mesh_parameter.type は "SIMPLERECTANGULAR" とする。

parameter.mesh_parameter.axes[] は以下のように入力する。

axes[]	values[]	input
[0]	[0]	0.0
[0]	[1]	0.0
[0]	[2]	0.0
[1]	[0]	0.0
[1]	[1]	0.0
[1]	[2]	0.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	32.0
[2]	[2]	64.0

2. Solver parameter: 電場ポテンシャルソルバーのために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
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e6
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.8
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	100
LEES_EDWARDS_BC	0

3. 共通物理定数の入力:

DT=5.0e-2、FINAL_STEP=10001、INTERVAL_OF_MONITORING=100 をそれぞれ入力する。

INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT は 2000 とするが、ステップ 1 までは 1 に、ステップ 2 以降は 2000 にスケジューリングを行なっている。

4. 物理定数の入力: 以下に掲げる物理定数を入力する。

Parameter	input
Number_of_Components	2
Average_Of_Concentration	0.1,0.1
Diffusion_Coefficient	1.0, 1.0
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
GRADIENT_OF_E-POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM	-1.0
Electric_Potential_at_XY_plane_ZP	0
POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_Plane	1

5. region_condition[]:

各場毎に以下のように境界条件を指定する。各場に指定する “*_PLANE_ZM_AND_ZP” がこの場合重要である。

name_of_region	name_of_target	name_of_condition
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	Concentration	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Concentration	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Concentration	ZM_WALL__ZP_BULK
YZ_BOUNDARY_PLANE_XM_AND_XP	ElectricPotential	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	ElectricPotential	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	ElectricPotential	ZM_NEUMANN__ ZP_DIRICHLET
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_BULK

6. Field[]: 以下のように場を登録する。

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

7. procedures_table_for_initialization[]:

場 Concentration に対して初期条件 “UNIFORM” を適用する。

8. procedures_table_for_evolution[]:

ElectricPotential に “ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER” を、
Concentration に “SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITHOUT_FLOW” を、
K_Field に “GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL” をそれぞれ適用する。

2.1.3 応用例 3: 電解質流体の障害物周りの流れ (1)

電場を持った壁に挟まれた 3 次元メッシュ (32x32x32) における電解質流体の流路上にある障害物 (Obstacle) による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 32 分割の三次元であるため、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]	31.0
[1]	[2]	31.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	31.0
[2]	[2]	31.0

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
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e6
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	100
Max_Iteration_For_Pressure_Solver	1.0e6
Convergence_Criterion_For_Pressure_Solver	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
Max_Iteration_For_Velocity_Solver	1.0e6
Convergence_Criterion_For_Velocity_Solver	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	1
LEES_EDWARDS_BC	0

3. 共通物理定数の入力：`DT=1.0e-2`, `FINAL_STEP=1000`, `INTERVAL_OF_MONITORING=1`, `INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT=100` 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
Average_Of_Concentration	0.1, 0.1
Diffusion_Coefficient	1.0, 1.0
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
Seed_of_Random_Number	1966715
Deviation_From_Average_Concentration	0.01
Electric_Potential_at_XY_plane_ZM	0
Electric_Potential_at_XY_plane_ZP	0
Pressure_Gradient	-0.01
SURFACE_CHARGE_ON_OBSTACLE	1.0
Position_Y_of_Cutting_ZX_plane	1
OBSTACLE_DATA_FILE	Obstacle.input

5. region_condition[]:

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	Concentration	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Concentration	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Concentration	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
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	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

6. 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
Concentration	Scalar	ALL_VERTEX	\$(Number_of_Components)	1
ElectricPotential	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Pressure	Scalar	ALL_VERTEX	1	1
Velocity	Vector	ALL_EDGE	3	1
K_Field	Vector	ALL_EDGE	\$(Number_of_Components) \$(*)\$(3)	0
Obstacle	Scalar	ALL_VERTEX	1	1

7. procedures_table_for_initialization[]:

Obstacle に対して READ_OBSTACLE_DATA を、Concentration に対して UNIFORM_WITH_NOISE と SET_BOUNDARY_CONDITION を行うようにする。

8. procedured_table_for_evolution[]:

ElectricPotential に ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER:OBSTACLE を、K_Field に GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL:OBSTACLE を、Velocity に SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE:OBSTACLE を、Concentration に SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITHOUT_FLOW をそれぞれ割り当てる。

2.1.4 応用例 4: 電解質流体の障害物周りの流れ (2)

電荷を帯びた障害物に開けられた穴を通して流れる電解質のシミュレーション。流れは X 方向の圧力勾配によって駆動される。

- メッシュの作成: parameter.mesh_parameter.type は SIMPLERECTANGULAR とする。
parameter.mesh_parameter.axes[] は 64x8x32 分割の三次元であり、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]	7.0
[1]	[2]	7.0
[2]	[0]	0.0
[2]	[1]	31.0
[2]	[2]	31.0

- ソルバーパラメータの入力: 電場ポテンシャルと速度場の計算のために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
MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER	1.0e6
CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER	100
Max_Iteration_For_Pressure_Solver	1.0e6
Convergence_Criterion_For_Pressure_Solver	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER	100
Max_Iteration_For_Velocity_Solver	1.0e6
Convergence_Criterion_For_Velocity_Solver	1.0e-4
ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER	1.5
MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER	100
SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION	1

3. 共通物理定数の入力:DT=1.0e-2, FINAL_STEP=10000, INTERVAL_OF_MONITORING=10, 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
LEES_EDWARDS_BC	0
N_Write_DATA	10
Number_of_Components	2
Average_Of_Concentration	0.1, 0.1
Diffusion_Coefficient	1.0, 1.0
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
Seed_of_Random_Number	1966715
Deviation_From_Average_Concentration	0.01
Electric_Potential_at_XY_plane_ZM	0
Electric_Potential_at_XY_plane_ZP	1
Pressure_Gradient	-0.01
SURFACE_CHARGE_ON_OBSTACLE	1.0
Position_Y_of_Cutting_ZX_plane	1
OBSTACLE_DATA_FILE	Obstacle.input

5. region_condition[]: 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	Concentration	PERIODIC
ZX_BOUNDARY_PLANE_YM_AND_YP	Concentration	PERIODIC
XY_BOUNDARY_PLANE_ZM_AND_ZP	Concentration	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
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	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

6. 場の登録：以下のように場を登録する。

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

7. `procedures.table_for_initiallization[]`: Obstacle に対して `READ_OBSTACLE_DATA` を、Concentration に対して `UNIFORM_WITH_NOISE` と `SET_BOUNDARY_CONDITION` を初期条件として適用する。
8. `procedures.table_for_evolution[]`: ElectricPotential に `ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER:OBSTACLE` を、K_Field に `GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL:OBSTACLE` を、Velocity に `SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE:OBSTACLE` をそれぞれ適用する。

2.2 有限要素法電解質流体シミュレータ Electrolyte_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 Electrolyte_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 MUFFIN3 の配布版のディレクトリ MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM 以下に問題別のディレクトリ MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX01, EX02, ... 等として納められている。

2.2.1 応用例 1: 電極間の電解質

Z 軸境界に 2 枚の電極が置かれ、その間に存在する電解中のイオン濃度分布と電場を 1 次元問題として計算する。計算条件は Electrolyte_FEM の応用例 1 と同様である。

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX01/EX01_in.udf

[入力 UDF 解説]

- parameter.mesh-parameter:
形状タイプは “UNSTRUCTURED_RECT”、2x2x64 分割。
- parameter.physical-parameter[] :
パラメータ “R”, “M” および “D” の値は理論解説での記述の通りである。パラメータ “DIELECTRIC_CONSTANT” は DielectricConstant 場の値の設定に使用される (第 0 成分の値のみ使用)。ユーザ定義パラメータ “C_infinity” を平均濃度の設定に使用している。
- region.condition[]
Z 方向境界の ElectricPotential 場の値を境界条件として ± 1 に設定している。
- dynamics_manager.registered_field[]
場 Concentration, K_Field, ChargeDensity, DielectricConst および ElectricPotential fields を登録している。場 Velocity, Pressure はこの例では登録する必要はない。
- dynamics_manager.procedures.table_for_initialization[]
DielectricConstant 場は “DIELECTRIC_CONSTANT_SETTING” で初期化されるが、parameter.physical-parameter[] で定義されたパラメータ “DIELECTRIC_CONSTANT” を使用する。Concentration 場は “UNIFORM_CONCENTRATION” で初期化されパラメータ “AVERAGED_ION_CONCENTRATION” を使用する。
- dynamics_manager.procedures.table_for_evolution[]
ChargeDensityField は
“CHARGE_DENSITY_DEPENDING_ON_ION_CONCENTRATION” によって Concentration 場とパラメータ “Z” から計算される。ElectricPotential は ChargeDensity から計算される。K_Field は “GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL” で計算される。Concentration が “SOLVE_ELECTROLYTE_WITHOUT_FLOW” により最後に計算される。

2.2.2 応用例 2: 平面電荷にともなう電気拡散層の形成

この計算では電荷を帯びた平面 (-Z 境界) 付近の電解質中のイオン濃度分布を計算する。+Z 境界は電気的中性条件が成り立ったバルク領域になっているものとする (正イオンと負イオンの濃度が同一になっている)。電荷を帯びた平面近くの電場ポテンシャルは Debye 長のオーダーで指数関数的に減衰する。計算条件は Electrolyte.FDM の応用例 2 と同様である。

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX02/EX02_in.udf

[入力 UDF 解説]

- parameter.mesh_parameter:
形状タイプは “UNSTRUCTURED_RECT”、2x2x64 分割。
- parameter.physical_parameter[] :
パラメータ “R”, “M” および “D” の値は理論解説での記述の通りである。パラメータ “DIELECTRIC_CONSTANT” は DielectricConstant 場の値の設定に使用される (第 0 成分の値のみ使用)。ユーザ定義パラメータ “C_infinity” を平均濃度の設定に使用している。もうひとつのユーザ定義パラメータ “e_dPhi_n” は Concentration 場と ElectricPotential 場の境界条件に使用される。
- region.condition[]
Concentration 場の Z 方向境界 “ZMAX” の値は各イオン成分に対して定数値に設定される。
ElectricPotential 場の “ZMIN” 境界には Neumann 条件を適用し (パラメータ “e_dPhi_n” を使用して電場ポテンシャル勾配を -1 にする) “ZMAX” 境界では値を 0 とする。ElectricPotential 場の “ZMIN” 境界の値は ζ 電位を与える。
- dynamics_manager.registered_field[]
場 Concentration, K_Field, ChargeDensity, DielectricConst および ElectricPotential fields を登録している。場 Velocity, Pressure はこの例では登録する必要はない。
- dynamics_manager.procedures.table_for_initialization[]
DielectricConstant 場は “DIELECTRIC_CONSTANT_SETTING” で初期化されるが、parameter.physical_parameter[] で定義されたパラメータ “DIELECTRIC_CONSTANT” を使用する。
Concentration 場は “UNIFORM_CONCENTRATION” で初期化されパラメータ “AVERAGED_ION_CONCENTRATION” を使用する。
- dynamics_manager.procedures.table_for_evolution[]
ChargeDensityField は
“CHARGE_DENSITY_DEPENDING_ON_ION_CONCENTRATION” によって Concentration 場とパラメータ “Z” から計算される。ElectricPotential は ChargeDensity から計算される。
K_Field は “GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL” で計算される。Concentration が “SOLVE_ELECTROLYTE_WITHOUT_FLOW” により最後に計算される。

2.2.3 応用例 3: 平面電荷に対する電気泳動 (電気浸透) 効果

まず応用例 2 の計算と同様に Z 方向のイオン濃度分布を計算し、次に X 軸方向に一定の強さの電場をかけることによって電解質中に流れ場を発生させる。この計算は電気泳動のシミュレーションであり、以下の Smoluchowsky の式で表される。[1]:

$$u_0 = \frac{\epsilon\epsilon_0\zeta}{\eta} E_0 \quad (2.1)$$

ここで u_0 は電気泳動速度、 $\epsilon\epsilon_0$ は誘電率、 ζ は ζ -電位、 η は粘性係数で、 E_0 は電場の大きさである。

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX03/EX03_in.udf

[入力 UDF 解説]

- parameter.mesh_parameter:

形状タイプは “UNSTRUCTURED_RECT” で 3x2x64 分割。X 軸方向に周期的である。

- parameter.solver_parameter:

パラメータ “DT_FOR_V”、“MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER”、および “CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER” を Stokes 流計算のために設定する。

- parameter.common_physical_parameter:

DT=5.0e-2, FINAL_STEP=40000, and INTERVAL_OF_MONITORING=1 を入力する。

INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT は 4000 に設定するが、その値はステップ 1 までは 1、ステップ 2 から 500、ステップ 2000 からは 10、ステップ 2050 からは 4000 のようにスケジューリングされている。

- parameter.physical_parameter[] :

パラメータ名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	0.1, 0.1
EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD	100.0,0.0,0.0

- region.condition[]

Concentration 場の Z 方向境界 “ZMAX” の値は各イオン成分に対して定数値に設定される。

ElectricPotential 場の “ZMIN” 境界には Neumann 条件を適用し (パラメータ “e_dPhi_n” を使用して電場ポテンシャル勾配を-1 にする) “ZMAX” 境界では値を 0 とする。

Velocity 場は “ZMIN” 境界でゼロに設定する。Velocity 場の Y- および Z- 成分の “ZMAX” 境界の値もゼロとするが、X-成分は設定しないので、速度の X-成分の “ZMAX” の値が電気泳動速度を与えることになる。

- `dynamics_manager.registered_field[]`

このシミュレータで利用できるすべての場を登録している (Concentration, K_Field, ChargeDensity, DielectricConst, ElectricPotenatial, Velocity and Pressure)。

- `dynamics_manager.procedures_table_for_initialization[]`

DielectricConstant 場は “DIELECTRIC_CONSTANT_SETTING” で初期化されるが、
`parameter.physical_parameter[]` で定義されたパラメータ “DIELECTRIC_CONSTANT” を使用する。
 Concentration 場は “UNIFORM_CONCENTRATION” で初期化されパラメータ
 “AVERAGED_ION_CONCENTRATION” を使用する。

- `dynamics_manager.procedures_table_for_evolution[].command_list[]`

2つの時間発展プロシージャ “Solver A” と “Solver B” を登録している。プロシージャ “Solver A” は流れのない状態でのイオン拡散を解く。プロシージャ “Solver B” はパラメータ “EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD” で与えられる一定外部電場のもとでの電解質の流れを計算する。 “Solver B” では、K_Field にコマンド “GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL_WITH_EXTERNAL_FIELD” を適用し Velocity 場は Stokes 流として計算される。計算は “Solver A” から開始され、ステップ 2000 から “Solver B” となる。

2.2.4 応用例 4: 電荷を持った物体の回りの電解質の流れ (1)

電荷をもった「粒子」 (Obstacle) が、圧力勾配で引き起こされた電解質の流れ場中に置かれている。「ゼロ電流条件」を境界条件として使用することにより流れ方向に流動電位が発生する。

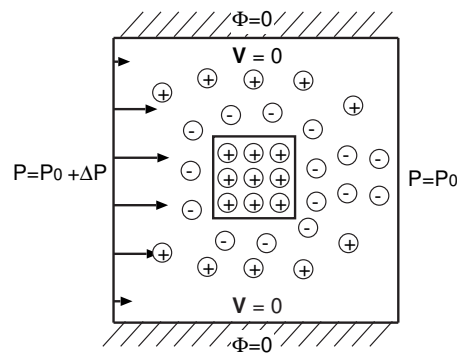


図 2.1: Electrolyte_FEM: 電解質の流れ場中の荷電粒子

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX04/EX04_in.udf

[入力 UDF 解説]

- `parameter.mesh_parameter:`

形状タイプは “UNSTRUCTURED_RECT” で 32x32x2 分割。

- `parameter.solver_parameter:`

パラメータ “DT_FOR_V”、“MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER”、および “CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER” を Stokes 流計算のために設定する。

- parameter.common_physical_parameter[]:

DT=0.1e-1, FINAL_STEP=600, INTERVAL_OF_MONITORING=1,
および INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT=100 を入力する。

- parameter.physical_parameter[] :

パラメータ名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
DIELECTRIC_CONSTANT	\$(R)\$(/)\$ (M), 1
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	0.1, 0.1
PARTICLE1_CHARGE	1.0
D_PRESSURE	3.0

- DIELECTRIC_CONSTANT の第 0 成分を無次元パラメータ R と M から求めている。すなわち無次元化した静電場ポテンシャルの式;

$$\Delta\Phi = -\frac{M}{R} \sum_{\alpha} Z_{\alpha} C_{\alpha}$$

が Electrolyte_FEM の静電場ポテンシャルの式

$$\Delta\Phi = -\frac{1}{\epsilon} \rho_e$$

に対応するように誘電率を決めることになる。

DIELECTRIC_CONSTANT の第 0 成分は DielectricConst 場の値を初期化コマンド
CONSTANT_DIELECTRIC_CONSTANT で設定するときを使用される。第 1 成分の値 1 はこの
場合利用されないことになる。

- D_PRESSURE および PARTICLE1_CHARGE は利用者定義パラメータであり、それぞれ
region.condition[] での圧力場境界条件、粒子の電荷の指定で引用される。

- mesh.partial_region[]

ここでは 2 つの部分領域 (partial region) ”particle_1” および ”particle_1_cells” が入力データとして明示的に与えられている。”particle_1” は電解質溶液中におかれた粒子の部分に対応する有限要素節点 (vertex) の ID で指定し、 ”particle_1_cells” は要素 (cell) の ID で指定している。

- region.condition[]

速度場 (Velocity) に関する条件はここでは省略されているが PhaseSeparation_FDM の応用例 2 の Poiseuille 流の場合と同様である。

name	partial region	field	condition name	value
particle_1_vx	particle_1	Velocity	D_VX	0
particle_1_vy	particle_1	Velocity	D_VY	0
particle_1_vz	particle_1	Velocity	D_VZ	0
XMIN_P	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	Pressure	D	3.0
XMAX_P	BOUNDARY _VERTEX_XMAX	Pressure	D	0
particle_1_rho_e	particle_1	ChargeDensity	D	0.1
C.infinity_0	BOUNDARY _VERTEX_YMIN	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	0,0.1
C.infinity_1	BOUNDARY _VERTEX_YMIN	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	1,0.1
C.infinity_0	BOUNDARY _VERTEX_YMAX	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	0,0.1
C.infinity_1	BOUNDARY _VERTEX_YMAX	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	1,0.1
C.infinity_0	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	0,0.1
C.infinity_1	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	Concentration	D.CONSTANT.VALUE _FOR_A.COMPONENT	1,0.1
XMIN_phi	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	ElectricPotential	D	0
XMAX_phi	BOUNDARY _FACE_XMAX	ElectricPotential	N_ZERO.ELECTRIC _CURRENT	0
Particle_attr	particle_1_cells	Obstacle	D.CONSTANT _VALUE_FOR _AN_INDEX	1

- particle_1_vx、particle_1_vy、particle_1_vz は部分領域 particle_1 で指定される節点 (vertex) 上での速度をゼロに設定する Dirichlet 「境界」条件である。このようにすることによって流れに対して「動かない」障害物として粒子を設定することができる。
- particle_1_rho_e は部分領域 particle_1 で指定される節点 (vertex) 上に電荷をおくことを指定している。
- Particle_attr は障害物場 Obstacle の値を部分領域 particle_1_cells で指定される要素 (cell) 上でゼロでない値 1 に設定する。これは電解質用の時間進行コマンドで場 K.Field および場 VolumeFraction (ここではイオン濃度場を意味する) の時間進行コマンドで Obstacle 場の値がゼロでない要素の処理を行わないようになっていることに対応する。
- Concentration 場の X および Y 方向境界の値は “XMAX” を除いてすべて一定値にされる (バルク境界条件)。境界面 “XMAX” では、ElectricPotential 場に対して境界条件 “N_ZERO.ELECTRIC_CURRENT” を適用することで「流動電位」による電場を計算して Neumann 条件に使用している。

- dynamics_manager.registered_field[]

このシミュレータで利用できるすべての場を登録している (Concentration, K_Field, ChargeDensity, DielectricConst, ElectricPotential, Velocity and Pressure)。

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

場	初期化コマンド
Pressure	SET_ZERO
Velocity	SET_ZERO
ChargeDensity	INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION
DielectricConst	CONSTANT_DIELECTRIC_CONSTANT
Concentration	UNIFORM_CONCENTRATION
Obstacle	SET_ZERO
Obstacle	APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION

- ChargeDensity は部分境界条件で初期化している。これによって部分領域 `particle_1` に部分領域条件 `particle_1_rho_e` が適用されて電荷が与えられる。
- Obstacle 場はコマンド SET_ZERO でいったんはゼロに初期化されたあとコマンド APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION により 部分領域条件 Particle_attr が適用されて部分領域 `particle_1_cells` を占める「障害物」として設定される。

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

場	コマンド
ChargeDensity	CHARGE_DENSITY_DEPENDING_ON_ION_CONCENTRATION
ChargeDensity	APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION
ElectricPotential	ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER
K_Field	GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL
Velocity	SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE
Concentration	SOLVE_ELECTROLYTE_WITH_FLOW

- まず ChargeDensity 場がイオン濃度場から計算され、次に部分領域条件 “particle_1_rho_e” が適用され部分領域 “particle_1” の電荷が一定値に保たれる。

2.2.5 応用例 5: 電荷を持った物体の回りの電解質の流れ (2)

電荷をもった球状の粒子 (表面電荷境界条件を持った球形の空洞領域) が、圧力勾配で引き起こされた電解質の流れ場中に置かれている。

[入力 UDF ファイル]

MUFFIN3/sample/ELECTROLYTE_FEM/EX05/EX05_in.udf

[入力 UDF 解説]

- `parameter.mesh_parameter:`

形状タイプは “UNSTRUCTURED_INPUT” である。メッシュのデータはメッシュ生成ツール MILK3 で作られたものである (MILK の入力データ `meshg_inp.udf` は同じディレクトリにある)

- parameter.solver_parameter:

パラメータ “DT_FOR_V”、“MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER”、
および “CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER” を Stokes 流計算のために設定する。

- parameter.common_physical_parameter[]:

DT=0.4e-2, FINAL_STEP=4000, INTERVAL_OF_MONITORING=1,
および INTERVAL_OF_UDF_OUTPUT=500 を入力する。

- parameter.physical_parameter[] :

パラメータ名 (KEY)	値
NUMBER_OF_COMPONENTS	2
Z	1, -1
R	3.89e-2
M	4.33e-1
D	0.517
DIFFUSION_COEFFICIENT	1.0, 1.0
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	0.1, 0.1
PARTICLE1_CHARGE	1.0
PRESSURE_DIFFERENCE	5.0

- mesh.coordinate, mesh.element, partial_region[]:

MILK3 で生成されたメッシュデータ。

- region.condition[]

速度場 (Velocity) に関する条件はここでは省略されているが PhaseSeparation_FDM の応用例 2 の Poiseuille 流の場合と同様である。

name	partial region	field	condition name	value
particle.1_vx	BOUNDARY_VERTEX _INTERNAL_SPHERE_0	Velocity	D_VX	0
particle.1_vy	BOUNDARY_VERTEX _INTERNAL_SPHERE_0	Velocity	D_VY	0
particle.1_vz	BOUNDARY_VERTEX _INTERNAL_SPHERE_0	Velocity	D_VZ	0
XMIN_P	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	Pressure	D	5.0
XMAX_P	BOUNDARY _VERTEX_XMAX	Pressure	D	0
XMIN_phi	BOUNDARY _VERTEX_XMIN	ElectricPotential	D	0
XMAX_phi	BOUNDARY _VERTEX_XMAX	ElectricPotential	D	0
particle.1_rho_s	BOUNDARY_FACE _INTERNAL_SPHERE_0	ElectricPotential	N	1.0

- “particle_1_vx”、“particle_1_vy”、“particle_1_vz” は空洞の球状領域との境界節点上での速度をゼロに設定する。
- “particle_1_rho_s” は空洞の球状領域の表面の電荷を設定する。

Result of calculation

図 2.2.5 に UDF に出力された最終ステップの ChargeDensity 場の計算値を示す。この図は GOURMET の Viewer ウィンドウ上に Python スクリプト MeshfieldShow.py を使用して描画されている。

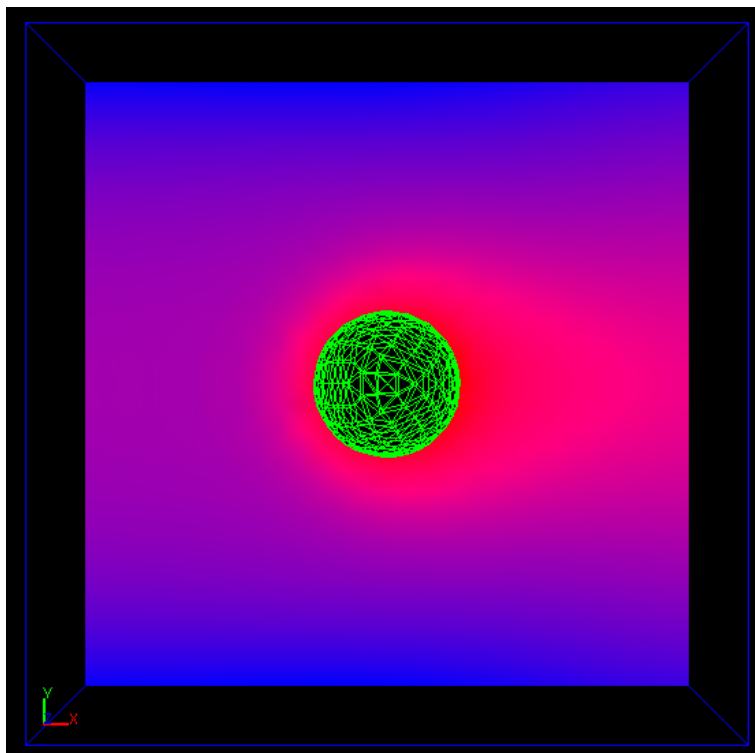


図 2.2: Electrolyte_FEM: 球状の荷電粒子回りの電解質流れ中の電荷密度分布。

第3章 Electrolyte リファレンス

3.1 有限差分法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FDM の場のコマンドとパラメータ

3.1.1 Electrolyte_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	イオン成分数
AVERAGE_OF_CONCENTRATION	各成分の初期濃度の平均値 $C_{\alpha 0}$
DEVIATION_FROM_AVERAGE_CONCENTRATION	初期値に与えるノイズの大きさ (C_{α})
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	初期値に与えるノイズのための乱数の種
CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_X	濃度場 C_{α} の X 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配
CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Y	濃度場 C_{α} の Y 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配
CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Z	濃度場 C_{α} の Z 方向 Biased Periodic Condition で適用する勾配
AVS_DATA_FILE_NAME	AVS 形式データから濃度場初期値を入力するときのファイル名
BULK_CONCENTRATION	濃度場 C_{α} のバルク境界条件での各成分境界値
POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_PLANE	場の値を gnuplot 対応形式でファイル出力する時 XZ 断面の Y 座標インデックス
DIFFUSION_COEFFICIENT	各成分の拡散係数 D_{α}
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	電場ポテンシャル境界定値 (ZX 面の $-Y$ 側)

_AT_ZX_PLANE_YM	
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 _ELECTRIC.POTENTIAL _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動電位条件 $\phi(x, y, z) _{Boundary} = \phi_o + \delta\phi \cdot \sin(\omega t)$ での ϕ_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 ω (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)
SURFACE_CHARGE_ON_OBSTACLE	障害物 (粒子) の表面電荷
Z	各イオン成分の電荷数 Z_α
R	静電エネルギーと熱エネルギーの比 $R = e\Phi_0/k_B T$
M	\tilde{M} (式 (1.18))
D	\tilde{D} (式 (1.21))
OBSTACLE_DATA_FILE	障害物 (粒子) 位置情報を入力するファイル名
NUMBER_OF_COMPONENTS	成分数
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
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	境界振動圧力条件 $P(x, y, z) _{Boundary} = P_o + \delta P \cdot \sin(\omega t)$ での P (YZ 面の +X 側)
AMPLITUDE_OF_P _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動圧力条件の P (YZ 面の +X 側)
FREQUENCY_OF_P _OSCILLATION_AT_YZ_PLANE_XP	境界振動圧力条件の ω (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)
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

3.1.2 Electrolyte_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
Concentration	濃度場 C_α
ElectricPotential	電場ポテンシャル場 Φ
K_Field	流束場 J_α
Pressure	圧力場 P
Velocity	速度場 v
Obstacle	障害物場

3.1.3 Electrolyte_FDM の場のコマンド一覧

Concentration : 濃度場 コマンド一覧

Concentration	名称
初期化	"READ_AVS_DATA"
初期化	"ADD_NOISE"
初期化	"UNIFORM"
初期化	"UNIFORM_WITH_NOISE"
初期化	"LINEAR_ALONG_X_Direction"
初期化	"LINEAR_ALONG_Y_Direction"
初期化	"LINEAR_ALONG_Z_Direction"
時間発展	"SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITH_FLOW"
時間発展	"SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITHOUT_FLOW"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"
評価関数	"TRUE_AT_A_CONSTANT_INTERVAL_TIME"

1. Concentration 初期化 詳細

名称	"READ_AVS_DATA"
機能	AVS 形式データから濃度場初期値を入力する。
依存パラメータ	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。
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DEVIATION_FROM_AVERAGE_CONCENTRATION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER

名称	"UNIFORM"
機能	各成分の濃度を空間的に一定の値に初期化する。
依存パラメータ	AVERAGE_OF_CONCENTRATION

名称	"UNIFORM_WITH_NOISE"
機能	各成分の濃度を空間的に一定の値に初期化してからノイズを加える。
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DEVIATION_FROM_AVERAGE_CONCENTRATION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER
依存パラメータ	AVERAGE_OF_CONCENTRATION

名称	"LINEAR_ALONG_X_Direction"
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	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ	AVERAGE_OF_CONCENTRATION

名称	"LINEAR_ALONG_Y_Direction"
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	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ	AVERAGE_OF_CONCENTRATION

名称	"LINEAR_ALONG_Z_Direction"
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	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ	AVERAGE_OF_CONCENTRATION

2. Concentration 時間発展コマンド 詳細

名称	"SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITH_FLOW"
機能	イオン濃度場の流れ効果を含む拡散方程式を解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$
依存している場	Velocity
依存している場	K_Field
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ	BULK_CONCENTRATION

名称	"SOLVE_DIFFUSION_EQUATION_WITHOUT_FLOW"
機能	イオン濃度場の流れ効果を含まない拡散方程式を解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha$
依存している場	K_Field
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_X
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Y
依存パラメータ	CONCENTRATION_GRADIENT_ALONG_Z
依存パラメータ	BULK_CONCENTRATION

3. Concentration 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. Concentration 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果をファイル出力する。
名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
機能	gnuplot で表示できる形式で計算結果をファイル出力する。
依存パラメータ	POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_PLANE

5. Concentration 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_INTERVAL_TIME"
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	FINAL_STEP
依存パラメータ	DIVISION_NUM1

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"
時間発展	"ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER:OBSTACLE"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT:E-FIELD"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_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	静電ポテンシャル Φ を Maxwell 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	ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_GRADIENT
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	CONSTANT_TERM_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	AMPLITUDE_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	FREQUENCY_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_XY_PLANE_ZP

名称	”ELECTRIC_POTENTIAL_SOLVER:OBSTACLE”
機能	<p>静電ポテンシャル Φ を Maxwell 方程式に基づき求める。</p> <p>Obstacle(障害物) 場の値がゼロでない部分は計算対象とせず、その表面での表面電荷分布を境界条件とすることができる。</p>
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_E-POTENTIAL
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_E-POTENTIAL_SOLVER
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_GRADIENT
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	ELECTRIC_POTENTIAL_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	CONSTANT_TERM_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	AMPLITUDE_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	FREQUENCY_OF_ELECTRIC_POTENTIAL_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	GRADIENT_OF_E-Potential_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	SURFACE_CHARGE_ON_OBSTACLE

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。
依存している場	Obstacle

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT:E-FIELD"
機能	電場ベクトル $E = -\nabla\phi$ を AVS 形式 (field-data) で出力する。

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
機能	gnuplot で表示できる形式で計算結果をファイル出力する。
依存パラメータ	POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_PLANE

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	"SET_ZERO"
時間発展	"GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL"
時間発展	"GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL:OBSTACLE"

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_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL"
機能	各イオンの流束場を計算する。 $\nabla C_\alpha + R Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi$
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	R

名称	"GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL:OBSTACLE"
機能	各イオンの流束場を計算する。Obstacle(障害物) 場の値がゼロでない部分は計算対象とせず、その表面で $\mathbf{n} \cdot \mathbf{K}_\alpha = 0$ となるようにする。
依存している場	Obstacle
依存している場	ElectricPotential
依存パラメータ	R

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

Obstacle : 障害物場 コマンド一覧

Obstacle	名称
初期化	"READ_OBSTACLE_DATA"

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

Pressure : 圧力場 コマンド一覧

Pressure	名称
初期化	"SET_ZERO"
時間発展	"SOLVE_PRESSURE"
時間発展	"CALCULATE_SOURCE_FIELD"
時間発展	"ONE_ITERATION"
時間発展	"SOLVE_PRESSURE_WITH_PARTICLES"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
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	Velocity
依存している場	K.Field
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	VISCOSITY
依存パラメータ	PRESSURE_GRADIENT
依存パラメータ	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	PRESSURE_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	PRESSURE_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	CONSTANT_TERM_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	AMPLITUDE_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	FREQUENCY_OF_PRESSURE_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP

名称	"CALCULATE_SOURCE_FIELD"
機能	圧力場 Poisson 方程式のソース項の計算
依存している場	Velocity
依存している場	K_Field
依存パラメータ	CA

名称	"ONE_ITERATION"
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	ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER

名称	"SOLVE_PRESSURE_WITH_PARTICLES"
機能	圧力場 Poisson 方程式を Obstacle(障害物) 場がゼロでない部分について解く。
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	PRESSURE_GRADIENT
依存パラメータ	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	PRESSURE_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	CONSTANT_TERM_OF_P_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	AMPLITUDE_OF_P_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	FREQUENCY_OF_P_OSCILLATION _AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_PRESSURE_SOLVER
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_PRESSURE_SOLVER

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>−X 境界 +X 境界で ψ 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 −X 境界で壁面境界条件、+X 境界で速度値設定 −X 境界で圧力値設定、+X 境界で壁面境界条件 −X 境界 +X 境界で圧力値設定 −X 境界で圧力値設定 +X 境界で速度値設定 −X 境界で速度値設定、+X 境界で壁面境界条件 −X 境界で速度値設定 +X 境界で圧力値設定 −X 境界 +X 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>−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 −Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界で速度値設定 −Y 境界で圧力値設定、+Y 境界で壁面境界条件 −Y 境界 +Y 境界で圧力値設定 −Y 境界で圧力値設定 +Y 境界で速度値設定 −Y 境界で速度値設定、+Y 境界で壁面境界条件 −Y 境界で速度値設定 +Y 境界で圧力値設定 −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 −Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界で速度値設定 −Z 境界で圧力値設定、+Z 境界で壁面境界条件 −Z 境界 +Z 境界で圧力値設定 −Z 境界で圧力値設定 +Z 境界で速度値設定 −Z 境界で速度値設定、+Z 境界で壁面境界条件 −Z 境界で速度値設定 +Z 境界で圧力値設定 −Z 境界 +Z 境界で速度値設定</p>

4. Pressure 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
機能	gnuplot で表示可能な形式でファイル出力する。
依存パラメータ	POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_PLANE

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS

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	"SET_ZERO"
初期化	"READ_VELOCITY_RAWDATA"
時間発展	"SOLVE_STOKES_EQUATION"
時間発展	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE"
時間発展	"SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE:OBSTACLE"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_RAW_FORMAT"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
評価関数	"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	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	Pressure
依存パラメータ	SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YP

依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	SHEAR_RATE_XZ
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER

名称	”SOLVE_STOKES_EQUATION”
機能	Stokes 流を解くための速度場の SOR 法繰り返しを一回分だけ行う。
依存している場	Pressure
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_VELOCITY_SOLVER

名称	”SOLVE_STOKES_EQUATION_AND_PRESSURE:OBSTACLE”
機能	Stokes 流の方程式を速度場と圧力場に対して解く。 Obstacle(障害物) 場の値がゼロでない部分は計算せず、その表面で $V = 0$ とする。
依存している場	Pressure
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	SKIP_INTERVAL_VELOCITY_CALCULATION
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XM
依存パラメータ	VX_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VY_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VZ_AT_YZ_PLANE_XP
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YM
依存パラメータ	VX_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VY_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VZ_AT_ZX_PLANE_YP
依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZM
依存パラメータ	VX_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VY_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	VZ_AT_XY_PLANE_ZP
依存パラメータ	ACCELERATION_VALUE_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	CONVERGENCE_CRITERION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	MAX_ITERATION_FOR_VELOCITY_SOLVER
依存パラメータ	MONITORING_INTERVAL_OF_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	−X 境界 +X 境界で ψ 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)
XM.WALL_XP.PRESSURE.SET	−X 境界で壁面境界条件、+X 境界で圧力値設定
XM.WALL_XP.VELOCITY.SET	−X 境界で壁面境界条件、+X 境界で速度値設定
XM.PRESSURE.SET_XP.WALL	−X 境界で圧力値設定、+X 境界で壁面境界条件
XM.PRESSURE.SET_XP.PRESSURE.SET	−X 境界 +X 境界で圧力値設定
XM.PRESSURE.SET_XP.VELOCITY.SET	−X 境界で圧力値設定 +X 境界で速度値設定
XM.VELOCITY.SET_XP.WALL	−X 境界で速度値設定、+X 境界で壁面境界条件
XM.VELOCITY.SET_XP.PRESSURE.SET	−X 境界で速度値設定 +X 境界で圧力値設定
XM.VELOCITY.SET_XP.VELOCITY.SET	−X 境界 +X 境界で速度値設定
YM.WALL_YP.WALL	−Y 境界 +Y 境界で壁面境界条件
YM.WALL_YP.PRESSURE.SET	−Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界で圧力値設定
YM.WALL_YP.VELOCITY.SET	−Y 境界で壁面境界条件、+Y 境界で速度値設定
YM.PRESSURE.SET_YP.WALL	−Y 境界で圧力値設定、+Y 境界で壁面境界条件
YM.PRESSURE.SET_YP.PRESSURE.SET	−Y 境界 +Y 境界で圧力値設定
YM.PRESSURE.SET_YP.VELOCITY.SET	−Y 境界で圧力値設定 +Y 境界で速度値設定
YM.VELOCITY.SET_YP.WALL	−Y 境界で速度値設定、+Y 境界で壁面境界条件
YM.VELOCITY.SET_YP.PRESSURE.SET	−Y 境界で速度値設定 +Y 境界で圧力値設定
YM.VELOCITY.SET_YP.VELOCITY.SET	−Y 境界 +Y 境界で速度値設定
ZM.WALL_ZP.WALL	−Z 境界 +Z 境界で壁面境界条件
ZM.WALL_ZP.PRESSURE.SET	−Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界で圧力値設定
ZM.WALL_ZP.VELOCITY.SET	−Z 境界で壁面境界条件、+Z 境界で速度値設定
ZM.PRESSURE.SET_ZP.WALL	−Z 境界で圧力値設定、+Z 境界で壁面境界条件
ZM.PRESSURE.SET_ZP.PRESSURE.SET	−Z 境界 +Z 境界で圧力値設定
ZM.PRESSURE.SET_ZP.VELOCITY.SET	−Z 境界で圧力値設定 +Z 境界で速度値設定
ZM.VELOCITY.SET_ZP.WALL	−Z 境界で速度値設定、+Z 境界で壁面境界条件
ZM.VELOCITY.SET_ZP.PRESSURE.SET	−Z 境界で速度値設定 +Z 境界で圧力値設定
ZM.VELOCITY.SET_ZP.VELOCITY.SET	−Z 境界 +Z 境界で速度値設定

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。
名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (field-data) で計算結果を出力する。
名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_GNP_FORMAT"
機能	gnuplot で表示可能な形式でファイルに出力する。
依存パラメータ	POSITION_Y_OF_CUTTING_ZX_PLANE

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

3.2 有限要素法電解質流体シミュレータ Electrolyte_FEM の場合のコマンドとパラメータ

3.2.1 Electrolyte_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_α
Z	各イオン成分の電荷数 Z_α
R	静電エネルギーと熱エネルギーの比 $R = e\Phi_0/k_B T$
M	\tilde{M} (式 (1.18))
D	\tilde{D} (式 (1.21))
DIELECTRIC_CONSTANT	比誘電率 ϵ_α 。成分毎に配列として与える。
PENALTY_NUMBER	Dirichlet 境界条件に使用するペナルティ数
MATRIX_SOLVER _FOR_ELECTRIC_FIELD	電場ポテンシャル計算での一次方程式の解法 ("ICCG"(デフォルト)または"CG")
MATRIX_SOLVER	圧力場計算での一次方程式の解法 ("ICCG"(デフォルト)または"CG")
GRAVITY_X	流体場に与える一定外力の X 成分
GRAVITY_Y	流体場に与える一定外力の Y 成分
GRAVITY_Z	流体場に与える一定外力の Z 成分
EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD	一様外部電場ベクトル
DT_FOR_V	Stokes 流計算に使用する時間刻み
REYNOLDS	Reynolds 数
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 η_α
SKIP_INTERVAL _VELOCITY_CALCULATION	速度場計算を行なう時間ステップ間隔
AVERAGED_ION_CONCENTRATION	各イオンの初期濃度の平均値 $C_{\alpha 0}$
NUMBER_OF_DROPLETS	イオン濃度場初期設定でつくる液滴数
RADIUS_OF_DROPLET	イオン濃度初期設定でつくる各液滴の半径
X_COORDINATE_OF_DROPLET	イオン濃度初期設定でつくる各液滴の X 座標
Y_COORDINATE_OF_DROPLET	イオン濃度初期設定でつくる各液滴の Y 座標
Z_COORDINATE_OF_DROPLET	イオン濃度初期設定でつくる各液滴の Z 座標
DEVIATION_FROM_AVERAGED _ION_CONCENTRATION	イオン濃度初期値に与えるノイズの大きさ
SEED_OF_RANDOM_NUMBER	イオン濃度初期値に与えるノイズの乱数の種
DIFFUSION_COEFFICIENT	各成分の拡散係数 L_α
UNIFORM_CHARGE_DENSITY	一定の電荷密度を設定するときの値

3.2.2 Electrolyte_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
ChargeDensity	電荷密度場 ρ_e
Concentration	イオン濃度場 C_α
DielectricConst	誘電率場 ϵ
ElectricPotential	電場ポテンシャル場 Φ
K_Field	流束場 $J_\alpha(K)$
Obstacle	障害物場 (CELL 上で定義される)
Pressure	圧力場 P
Velocity	速度場 v

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。

3.2.3 Electrolyte_FEM の場のコマンド一覧

ChargeDensity : 電荷密度場コマンド一覧

ChargeDensity	名称
初期化	"INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
初期化	"UNIFORM_CHARGE_DENSITY"
時間発展	"SET_ZERO"
時間発展	"CHARGE_DENSITY_DEPENDING_ON_ION_CONCENTRATION"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

1. ChargeDensity 初期化 詳細

名称	"INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	電荷密度場の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
名称	"UNIFORM_CHARGE_DENSITY"
機能	電荷密度場の値をすべての点で一定値に設定する
依存パラメータ	UNIFORM_CHARGE_DENSITY

2. ChargeDensity 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	"CHARGE_DENSITY_DEPENDING_ON_ION_CONCENTRATION"
機能	イオン濃度場から電荷密度を計算する $\rho_e = \sum_{\alpha} eZ_{\alpha}C_{\alpha}$
依存している場	Concentration
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	VALENCY (または Z)

名称	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	電荷密度場の部分領域条件を適用する。

3. ChargeDensity 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 または D.CONSTANT.VALUE	常に一定の値に設定 (Dirichlet 条件)

4. ChargeDensity 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。
依存している場	ChargeDensity

5. ChargeDensity 評価コマンド 詳細

名称	"RETURN_TRUE_FUNC"
機能	常に真の値を返す。

DielectricConst : 誘電率場コマンド一覧

DielectricConst	名称
時間発展	"CONSTANT_DIELECTRIC_CONSTANT"
時間発展	"DIELECTRIC_CONSTANT_SETTING"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

1. DielectricConst 時間発展コマンド 詳細

名称	"CONSTANT_DIELECTRIC_CONSTANT"
機能	空間的に一定の比誘電率値 ϵ_0 (第 0 成分の誘電率) を設定する。
依存パラメータ	DIELECTRIC_CONSTANT
名称	"DIELECTRIC_CONSTANT_SETTING"
機能	空間的に一様な誘電率を設定する; $\epsilon = M/R$
依存している場	Concentration
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	M
依存パラメータ	R
名称	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分境界条件を適用する。

2. DielectricConst 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
D または D_CONSTANT_VALUE	常に一定の値に設定 (Dirichlet 条件)

3. DielectricConst 解析コマンド 詳細

名称	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
機能	AVS 形式 (ucd data) で場の値を出力する。

4. DielectricConst 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	DielectricConst
依存している場	ChargeDensity
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
L_CONSTANT_VALUE	一定の値に初期化
D	一定の値に設定 (Dirichlet 条件)
N	$\mathbf{n} \epsilon \cdot \nabla \Phi = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}$ (Neumann 条件, \mathbf{D} : 電束密度を与える)
N_ZERO_ELECTRIC_CURRENT	$\mathbf{n} \cdot \nabla \Phi$ を 境界面でのゼロ電流条件から計算する

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_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL"
時間発展	"GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL _WITH_EXTERNAL_FIELD"
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_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL"
機能	各イオンの流束場を計算する。 $J_\alpha = \nabla C_\alpha + R Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi$ Obstacle(障害物) 場がゼロでない要素の表面で $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_\alpha = 0$ になる。
依存している場	Concentration
依存している場	ElectricPotential
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	VALENCY または Z
依存パラメータ	Z
依存パラメータ	R

名称	"GRADIENT_ELECTRO_CHEMICAL_POTENTIAL _WITH_EXTERNAL_FIELD"
機能	各イオンの流束場を外部電場の効果をを採り入れて計算する。 $J_\alpha = \nabla C_\alpha + R Z_\alpha C_\alpha (\nabla \Phi - \mathbf{E}_0)$ Obstacle(障害物) 場がゼロでない要素の表面で $\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}_\alpha = 0$ になる。
依存している場	VolumeFraction
依存している場	ElectricPotential
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	EXTERNAL_ELECTRIC_FIELD
依存パラメータ	VALENCY または Z
依存パラメータ	R

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	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 α 、 $J_{\alpha x}$ 、 $J_{\alpha y}$ 、 $J_{\alpha z}$ 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。

Obstacle : 障害物場コマンド一覧

Obstacle	名称
初期化	"SET_ZERO"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

1. Obstacle 初期化 詳細

名称	"SET_ZERO"
機能	値をゼロに設定する。

2. Obstacle 時間発展コマンド 詳細

名称	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
機能	部分領域条件を適用する。

3. Obstacle 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
D または D_CONSTANT_VALUE	一定の値に設定 (Dirichlet 条件)

4. Obstacle 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	Pressure
依存している場	Velocity
依存パラメータ	DT_FOR_V
依存パラメータ	DIMENSION_OF_SPACE
依存パラメータ	PENALTY_NUMBER
依存パラメータ	MATRIX_SOLVER

3. Pressure 部分領域条件 (境界条件) 詳細

部分領域条件	処理
L_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。 $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla(\eta\{\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t\}) + C_a^{-1} \mathbf{K}$
依存している場	Pressure
依存している場	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	M
依存パラメータ	D

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	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	M
依存パラメータ	D

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。

Concentration : 体積分率またはイオン濃度場 コマンド一覧

Concentration	名称
初期化	"INITIALIZE_BY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
初期化	"UNIFORM_CONCENTRATION"
初期化	"ADD_NOISE"
初期化	"SET_DROPLETS"
時間発展	"APPLY_PARTIAL_REGION_CONDITION"
時間発展	"SOLVE_ELECTROLYTE_WITH_FLOW"
時間発展	"SOLVE_ELECTROLYTE_WITHOUT_FLOW"
解析	"OUTPUT_SNAPSHOT_IN_AVS_FORMAT"
評価関数	"RETURN_TRUE_FUNC"

1. Concentration 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	NUMBER_OF_COMPONENTS

名称	"CONSTANT_ION_CONCENTRATION"
機能	各イオン成分の濃度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_ION_CONCENTRATION

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_ION_CONCENTRATION
依存パラメータ	SEED_OF_RANDOM_NUMBER

名称	"UNIFORM_CONCENTRATION"
機能	電解質シミュレーションで各イオン成分の濃度を空間的に一定の値に初期化する。
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	AVERAGED_ION_CONCENTRATION

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. Concentration 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_ELECTROLYTE_WITH_FLOW"
機能	イオン濃度場の流れ効果を含む拡散方程式を解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (v C_\alpha) - \nabla \cdot J_\alpha$
依存している場	K_Field
依存している場	Velocity
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT

名称	"SOLVE_ELECTROLYTE_WITHOUT_FLOW"
機能	イオン濃度場の流れ効果を含まない拡散方程式を解く $\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot J_\alpha$
依存している場	K_Field
依存している場	Obstacle
依存パラメータ	DT
依存パラメータ	NUMBER_OF_COMPONENTS
依存パラメータ	DIFFUSION_COEFFICIENT

3. Concentration 部分領域条件 (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 ψ_α を一定の値に初期化 成分番号 α 、 ψ_α をデータとして与える
D.CONSTANT.VALUE.FOR.A.COMPONENT	指定した成分の ψ_α を一定の値に設定 (Dirichlet 条件) 成分番号 α 、 ψ_α をデータとして与える

4. Concentration 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. Concentration 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) W.B.Russel, D. and W.R.Schowalter, : *Colloidal Dispersions*, Cambridge University Press (1989).