

汎用
多相構造ダイナミクスシミュレータ

MUFFIN

- MUltiFarious FIeld simulator for Non-equilibrium system -

山上達也

(財)化学技術戦略推進機構、土井プロジェクト

MUFFIN開発者 – 土井プロジェクトWG3 –

名古屋大学

- 谷口貴志

JCII, 土井プロジェクト

- 山上達也 (日本総合研究所)

- 佐々木誠 (日本総合研究所)

- 小林直樹 (三井化学)

- 野田昌宏 (JSR)

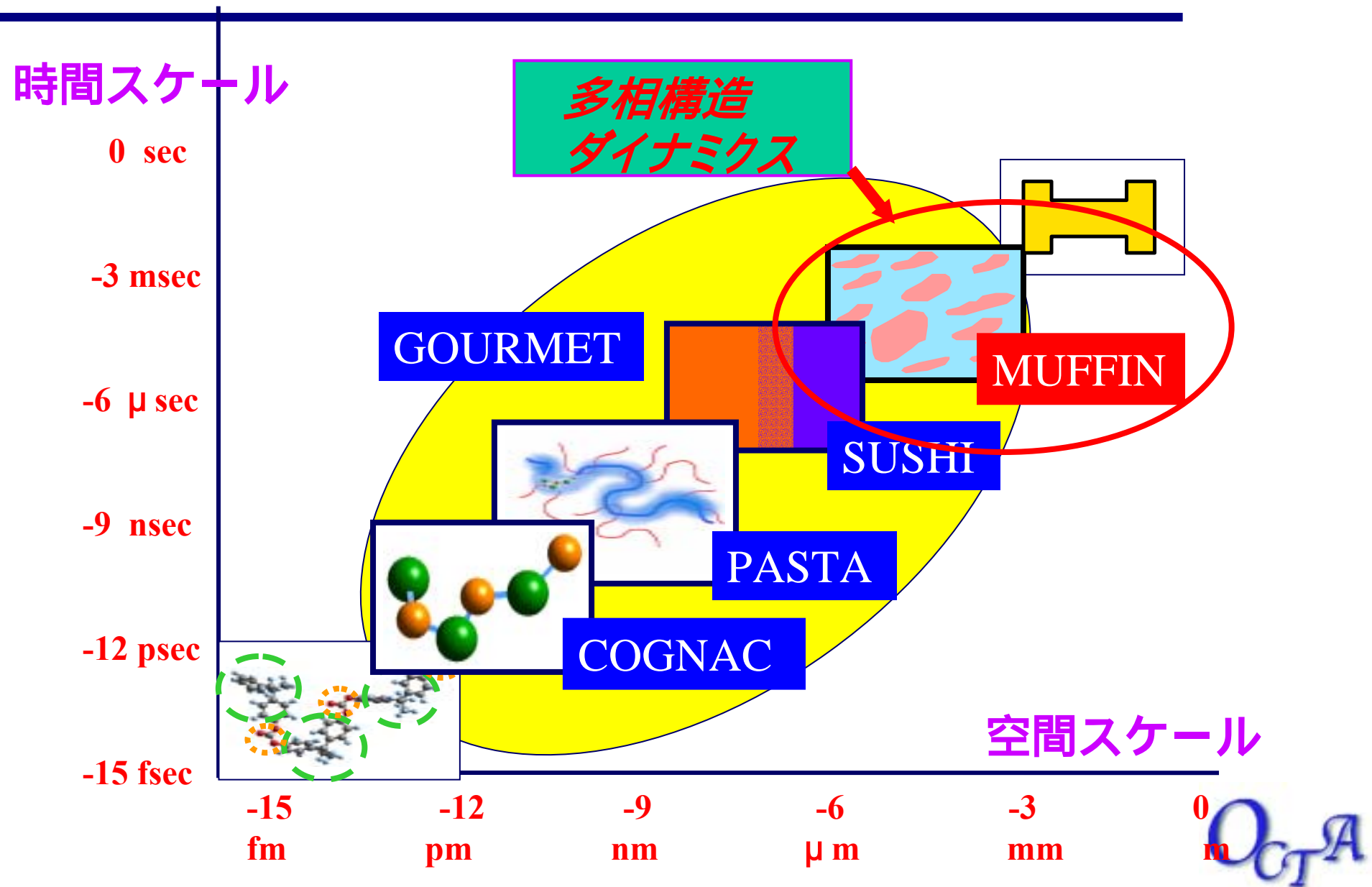
山形大学

- 黒田明義

広島大学

- 奥園透

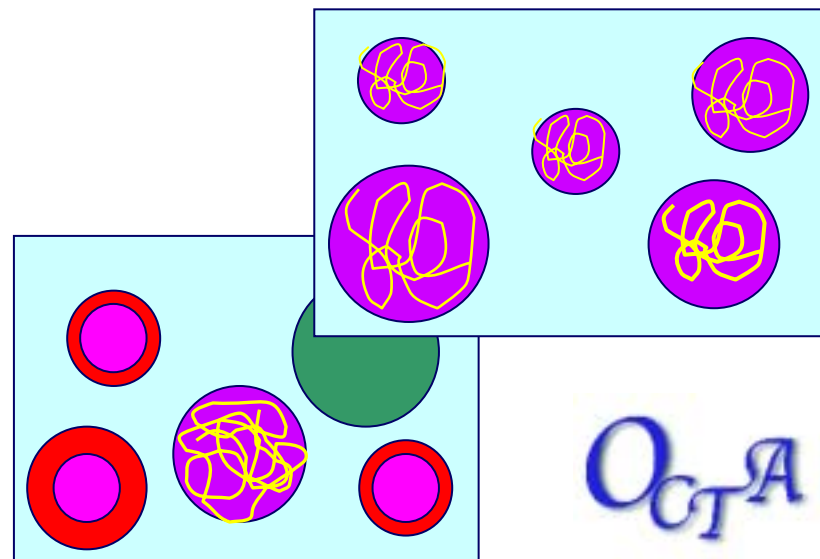
MUFFINのカバーする時間と空間のスケール



MUFFINのターゲット

複合高分子材料の多相構造のデザインと加工制御

- ◆ 液滴分散構造
 - 液滴の合体と分裂
 - 濡れ性など、表面修飾の効果
- ◆ 圧力、せん断、電場などによるマイクロ加工プロセスの制御
 - 薄膜やマイクロチャネルのマイクロファブリケーション
- ◆ モルフォロジーと剛性、靱性との相関
 - 弾性体の変形挙動
- ◆ メゾシミュレータとの連携(ズームング)
- ◆ 電極近傍での電解質流体の挙動
- ◆ マイクロチャネルでの化学反応
- ◆ ゲルの膨潤と収縮



MUFFINの特徴

さまざまな連続体モデル

さまざまな計算手法

- 有限差分法 (FDM) : オイラー描像
- 有限要素法 (FEM) : オイラー描像、ラグランジュ描像

さまざまなメッシュ

- 構造格子
- 非構造格子 (2D/3D). (デローネ分割 2D/3D)

さまざまなソルバ群 (場 + 偏微分方程式 or 関数)

- 自由エネルギー : フローリー-ハギンズ, 電気化学, 弾性, ゲル,
- 速度場 : Navier-Stokes, Stokes, Oseen, 2流体,
- 濃度場 : 移流拡散,
- 電場ポテンシャル : ポアソン, ポアソン-ボルツマン,
- 圧力.....
- 応力.....
-

MUFFINのアーキテクチャ

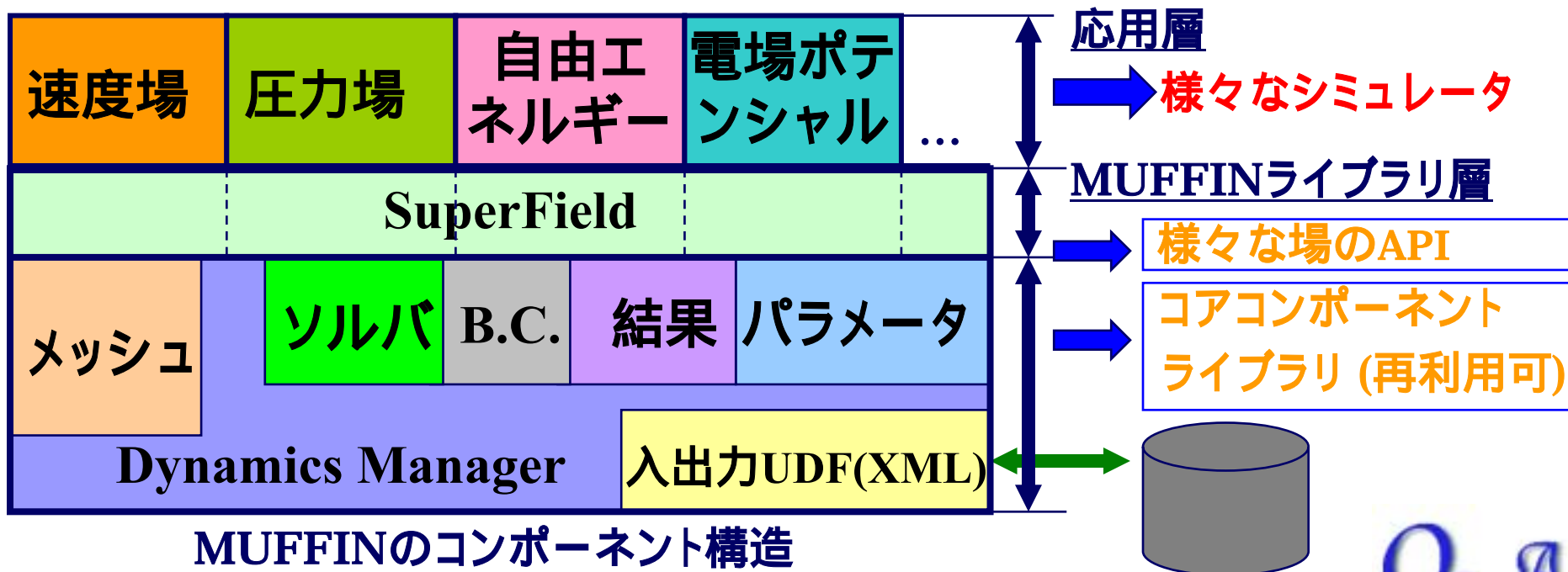
オブジェクト指向設計による汎用マルチスケール連続場シミュレー

◆ SuperField. (場の基本型)

- 場のためのさまざまなソルバのひな形、異なる場との連携インターフェースを持つ。

◆ DynamicsManager.

- 入出力の制御、シミュレーションのダイナミクスを構築し、与えられたスケジュールを実行する。



MUFFINのコンポーネント構造

- “MUFFIN” とは、シミュレータの名前ではなく、アーキテクチャの名前である -

MUFFINの入出力データ構造

UDF Path: parameter.physical_parameter[]

- GraphSheet[]
 - parameter
 - mesh_parameter
 - solver_parameter[]
 - common_physical_parameter[]
 - physical_parameter[]
 - mesh_coordinate
 - mesh_element
 - partial_region[]
 - field
 - scalar_field[]
 - vector_field[]
 - tensor_field[]
 - region_condition[]
 - \mathcal{K} name
 - sel name_of_region
 - sel name_of_target
 - \mathcal{S} name_of_condition
 - \mathcal{S} values[]
 - \mathcal{S} unit
 - dynamics_manager
 - registered_field[]
 - procedures_table_for_initialization
 - procedures_table_for_evolution
 - schedule_of_simulation
 - result[]
 - unit_parameter
 - \mathcal{S} name_of_units
 - set_of_units[]
 - \mathcal{S} name
 - \mathcal{S} system
 - \mathcal{S} mass
 - \mathcal{S} length
 - \mathcal{S} time
 - unit[]

パラメータ

メッシュ

部分領域

場

部分領域(境界)条件

境界層の単位系

ダイナクスマネージャ

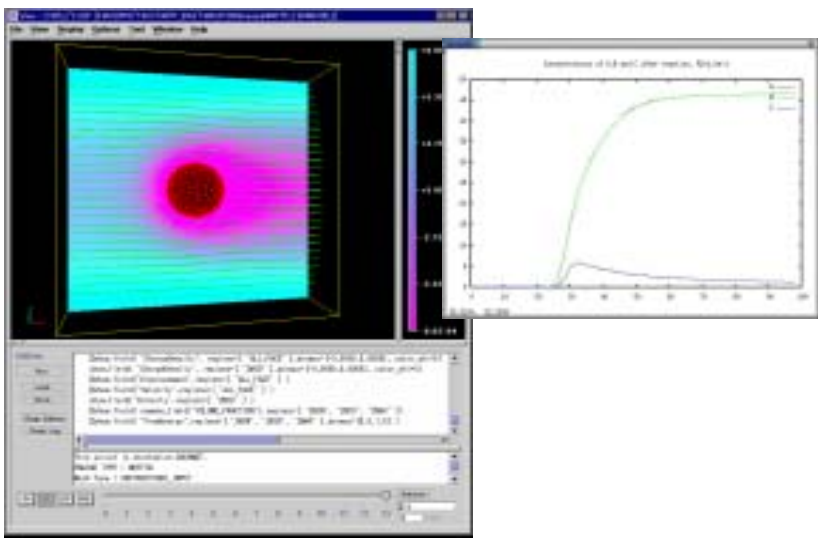
結果

様々な単位系と
原系の単位系

-異種のシミュレータの連携
-マルチスケールシミュレータのフロントエンドの1提案

描画

プロット



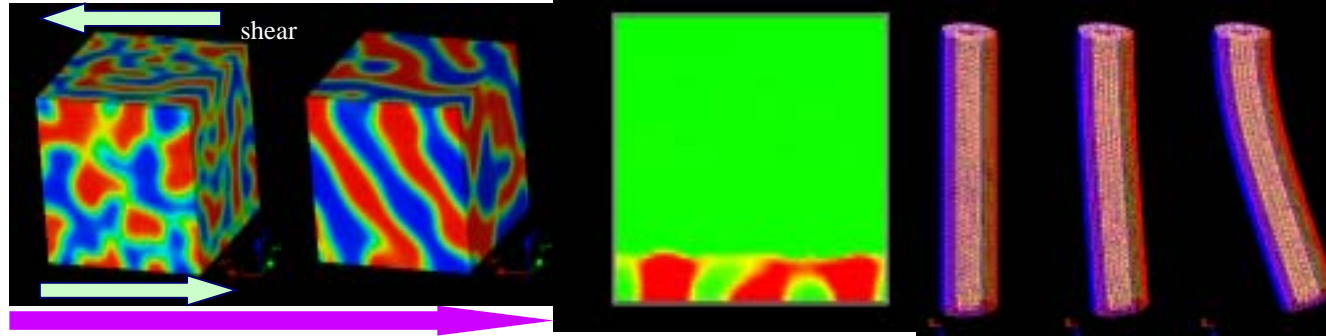
cf) XSIL (XML Scientific Interchange)
Prof. R. Williams, CACR, Caltech.
(Center for Advanced Computing Research)



MUFFINのシミュレーションパッケージ

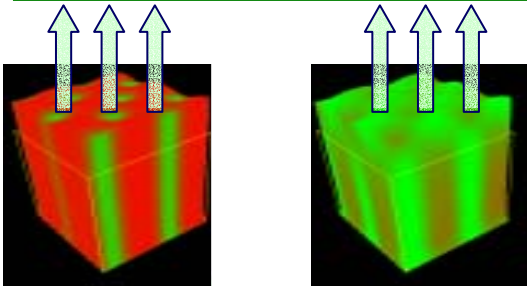
6つのシミュレーションパッケージ
(3つの流体系、2つの固体系、1つの光学系) をリリース

- ◆ PhaseSeparation
- ◆ Electrolyte
- ◆ MEMFluid
- ◆ Elastica
- ◆ GelDyna
- ◆ TURBAN

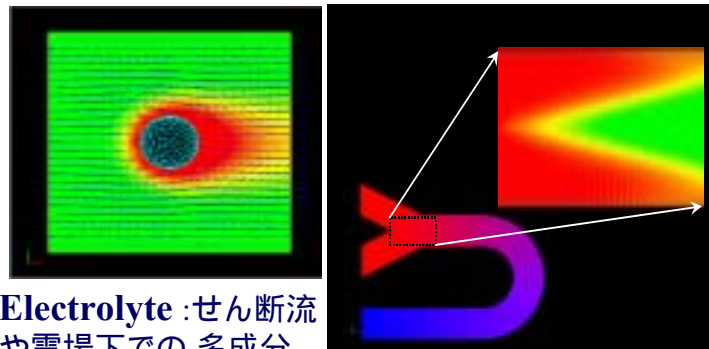


PhaseSeparation : せん断流や電場下での高分子溶液やブレンドの流体力学効果を含む相分離のシミュレータ(図: ずり流動の形成する構造(左)および高分子薄膜の蒸発による構造(右))

GelDyna : 温度変化、溶媒変化の刺激や表面力や体積力など外力印可に伴う多相高分子ゲルの膨潤、収縮過程の大変形ダイナミクスシミュレータ



Elastica : 多相線形弾性体シミュレータ。等方および非等方弾性体をサポート。(図: ミクロ相分離構造の弾性率の計算)



Electrolyte : せん断流や電場下での多成分電解質流体シミュレータ(図: 球状の荷電粒子の電気泳動の計算。静止流体中を荷電粒子が動くときのイオン分布)

MEMFluid : マイクロ電気化学チップ流体シミュレータ(図: マイクロリアクタ中の化学反応シミュレーション)

TURBAN : 光透過性シミュレータ



多相高分子流体シミュレータ

“Phase Separation”

Phase Separationの基礎方程式

基本モデル:

$$\frac{\partial \psi^\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\psi^\alpha \mathbf{v}) + \nabla \cdot (L_\alpha \nabla \mu_\alpha)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla \left[\eta \left\{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \right\} \right] + \mathbf{K}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

流れ: 非圧縮性, ゆっくりとした流れ (Stokes flow $\nu / t = 0$)
 化学ポテンシャル μ , 自由エネルギー汎関数より導かれる
 体積力 \mathbf{K} . L は輸送係数。

自由エネルギー汎関数の例

フローリー=ハギンズ

$$F^{(FH)} = \frac{k_B T}{v_0} \int dV \left[\sum_{\alpha=0}^{M-1} \frac{\psi_\alpha}{N_\alpha} \ln \psi_\alpha + \sum_{\alpha < \alpha'}^{M-1} \chi_{\alpha\alpha'} \psi_\alpha \psi_{\alpha'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha < \alpha'}^{M-1} C_{\alpha\alpha'}(\psi_\alpha, \psi_{\alpha'}) [\nabla(\psi_\alpha - \psi_{\alpha'})]^2 \right]$$

電場下での誘電率の異なる多成分系の自由エネルギー

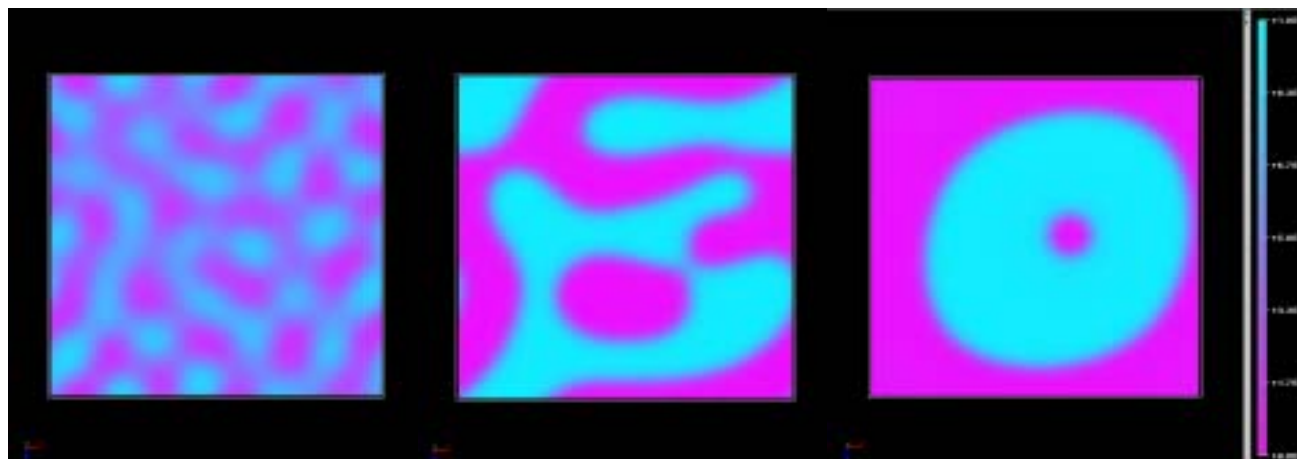
$$F = F_{\text{mix}} + \int dV \left[-\frac{1}{2} \epsilon(\{\psi_\alpha\}, T) \mathbf{E}^2 + \frac{1}{2} \rho_\epsilon(\{\psi_\alpha\}) \Phi \right]$$

$$\mu_\alpha^{(X)} = \mu_{\alpha \text{mix}}^{(X)} - \frac{1}{2} (\epsilon_\alpha - \epsilon_0) \mathbf{E}^2 + (\rho_{\epsilon\alpha} - \rho_{\epsilon 0}) \Phi$$

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

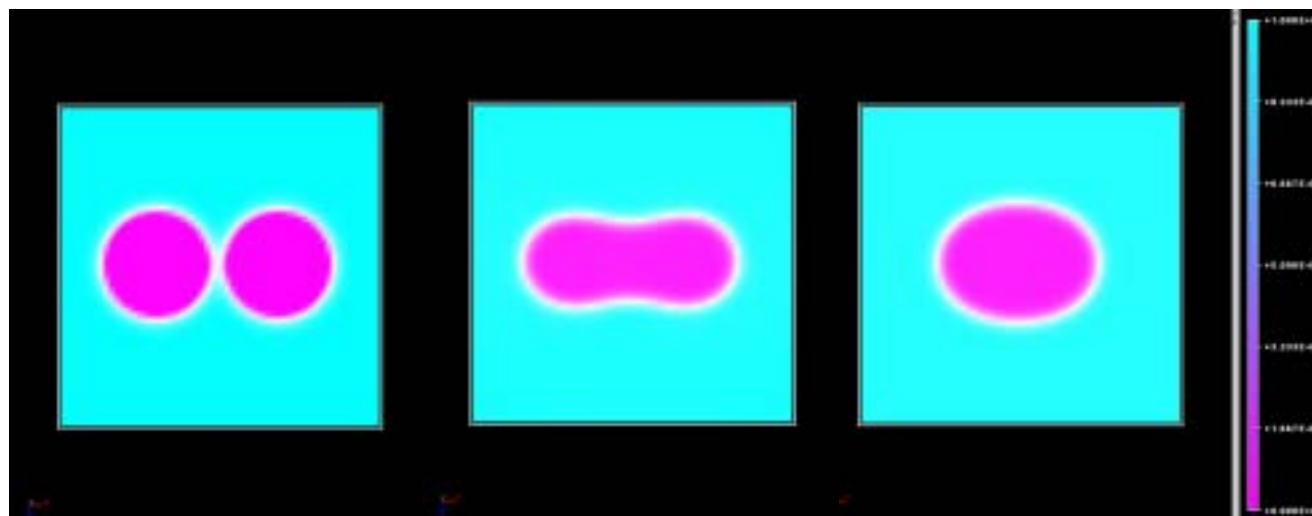
$$\nabla \cdot \left[\epsilon(\mathbf{r}) \nabla \Phi \right] = -\rho_\epsilon(\mathbf{r})$$

“PhaseSeparation FDM”の応用例

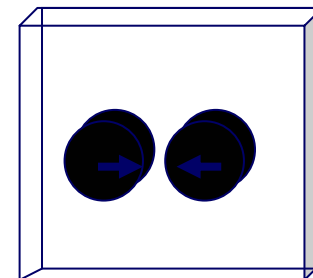
 $t=1$ $t=4$ $t=20$

流体力学効果を含む
相分離

- Flory-Huggins
- 2次元
- 周期境界条件

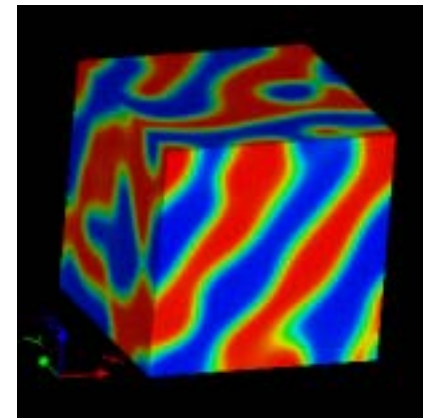
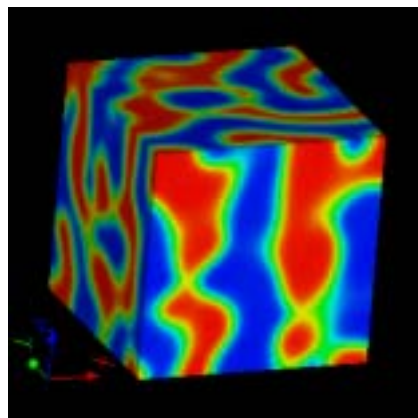
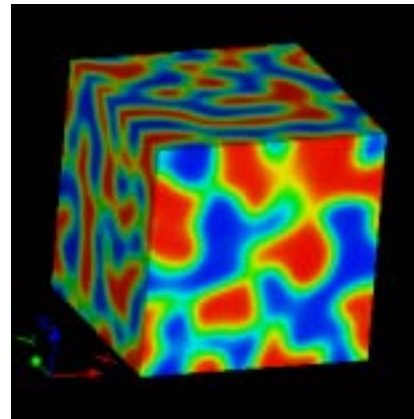
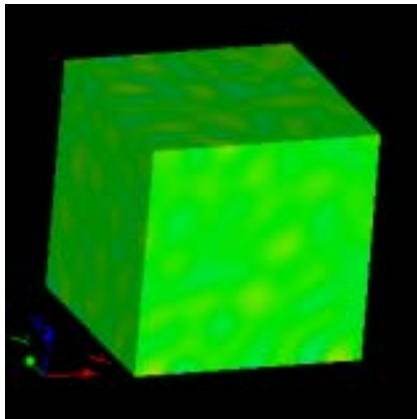
 $t=0$ $t=2$ $t=10$

2つの液滴の合体
2次元



“PhaseSeparation FDM”の応用例

せん断場下での高分子ブレンドの相分離



スピコーティングシミュレーション (“PhaseSeparation FDM”の応用例)

◆ スピコーティングの問題

- 表面荒れ
- 薄膜内の相分離構造

◆ 実験側からのアプローチ

- 溶媒の選択性
- 基盤の選択性
- 粘度

◆ 提案されているモデル

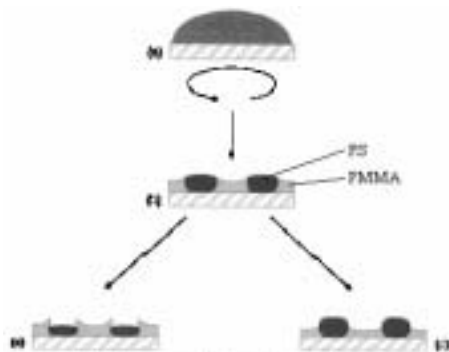


Figure 3. Schematic model describing the formation of the topographic structure during the spin coating process.

Macromolecules, 30, 4995 (1997)

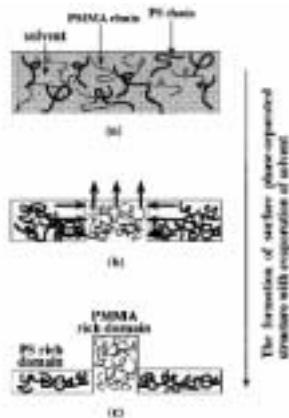


Figure 4. Schematic representation of the formation process of the surface phase-separated structure of the PS/PMMA thin film.

Macromolecules, 29, 3232 (1996)

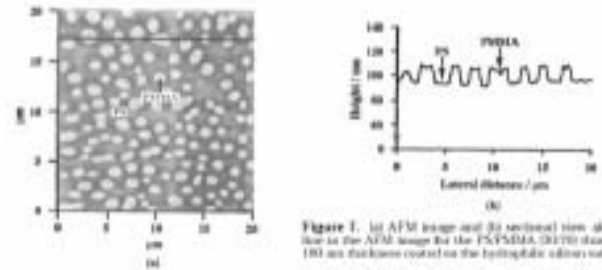


Figure 5. (a) AFM image and (b) cross-sectional view along the line in the AFM image for the PS/PMMA (30/70) thin film of 180 nm thickness coated on the hydrophilic silicon substrate.

Macromolecules, 29, 3232 (1996)

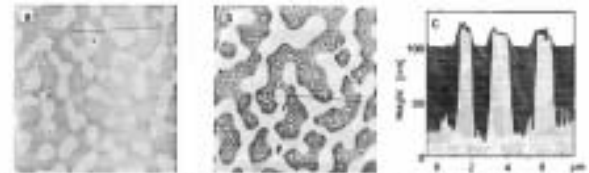


Figure 6. Solvent dependence of the PS/PMMA domain structure spin-coated from TBE: (a-c) on SiO₂; (d-f) on CGM. The AFM pictures have lateral dimensions of 14 μm × 14 μm. (a, d) are spin-coated (b) after immersion in chloroform to remove PS; (e) after immersion in acetic acid to remove the PMMA-rich phase. The cross-sections in (a), (b), (d), (e) reveal the vertical distribution of the PS (dark gray) and PMMA (light gray) phases. The error bar in (c) indicates the accuracy of the superposition procedure. PMMA preferentially collects on the more polar SiO₂ surface to form a homogeneous layer next to the substrate. On the CGM a PS/PMMA bilayer is observed, with PS next to the substrate. The PMMA layer (bright) is punctured by holes that are partially filled by the PS-rich phase (dark).

Macromolecules, 30, 4995 (1997)

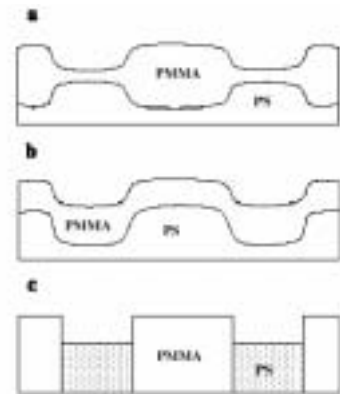


Fig. 7. Structural models of PS/PMMA blends: (a) surface pits correspond to defects in PS-PMMA interface; (b) surface pits correspond to pits in PS-PMMA interface; and (c) complete dewetting of the PS underlayer from model (a). See text for discussion.

Polymer, 42, 1121 (2001)

スピコーティングシミュレーション

- ◆ 溶媒蒸発
 - 蒸発速度

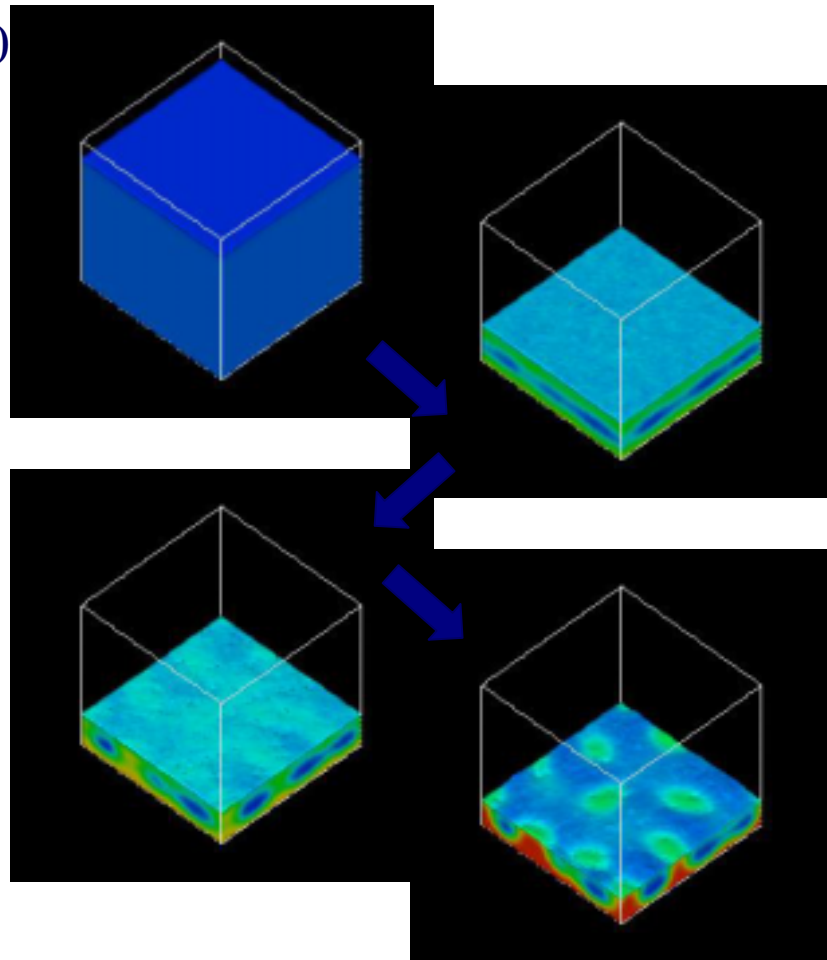
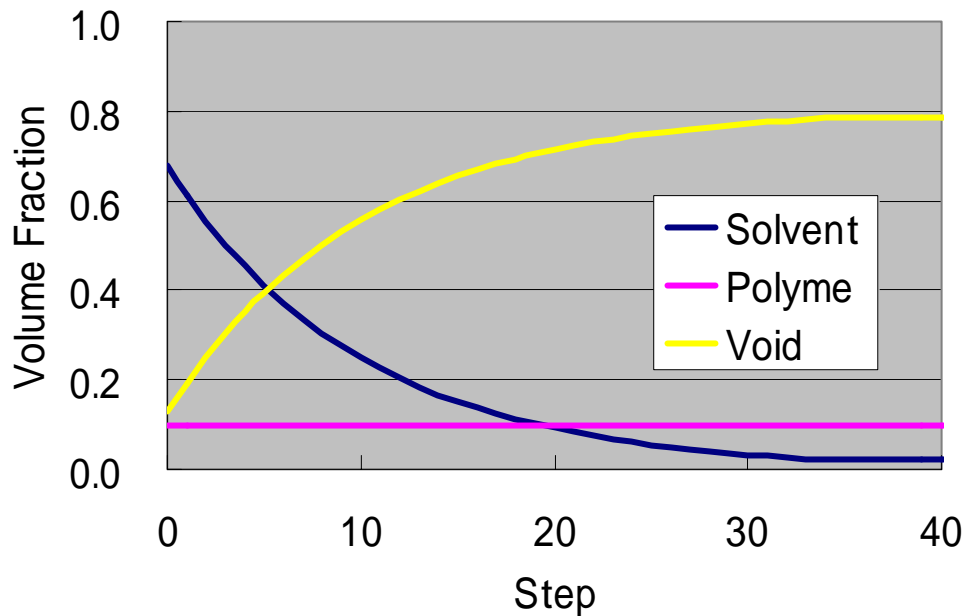
J. Electrochem. Soc., 138, 317 (1991)

$$E = \kappa(x_{I}^0 - x_{I\infty})$$

κ : 質量輸送係数

x_{I}^0 : 初期の表面での溶媒の体積分率

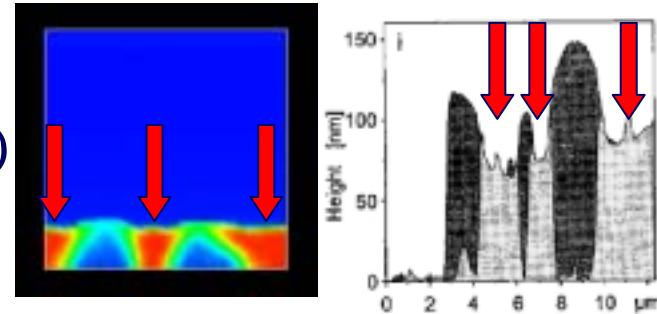
x_{I} : 平衡での溶媒の体積分率



スピコーティングシミュレーション

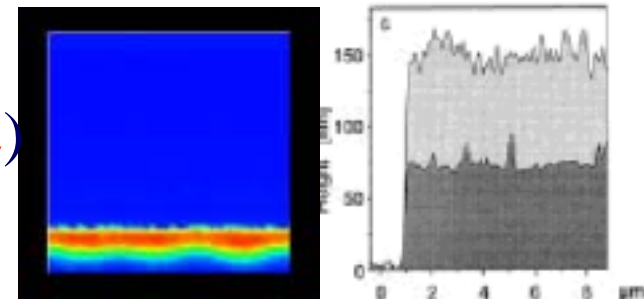
溶媒の選択性 (csolv-poly)

- Poly1 / Poly2 / solvent (Poly1が親溶媒)
- PMMA / PS / MEK (PMMAは親溶媒)



基盤からの剥がれ (gS)

- Poly1 / Poly2 /substrate (better for Poly2)
- PMMA / PS / ODM (better for PS)



蒸発速度 (E)

- スピンの速度と関係

粘度 (h)

- 流体力学的流れの効果

電解質流体シミュレータ

“*Electrolyte*”

電解質溶液の流動挙動をシミュレーション

3次元のFDMとFEMのシミュレータ

電気浸透効果や電気泳動などの界面動電現象をターゲットとする。

Electrolyteの方程式系

イオン濃度の時間発展

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (v C_\alpha) - \nabla \cdot J_\alpha.$$

$$J_\alpha \equiv -L_\alpha \left[k_B T \nabla C_\alpha + e Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi \right].$$

流れ場

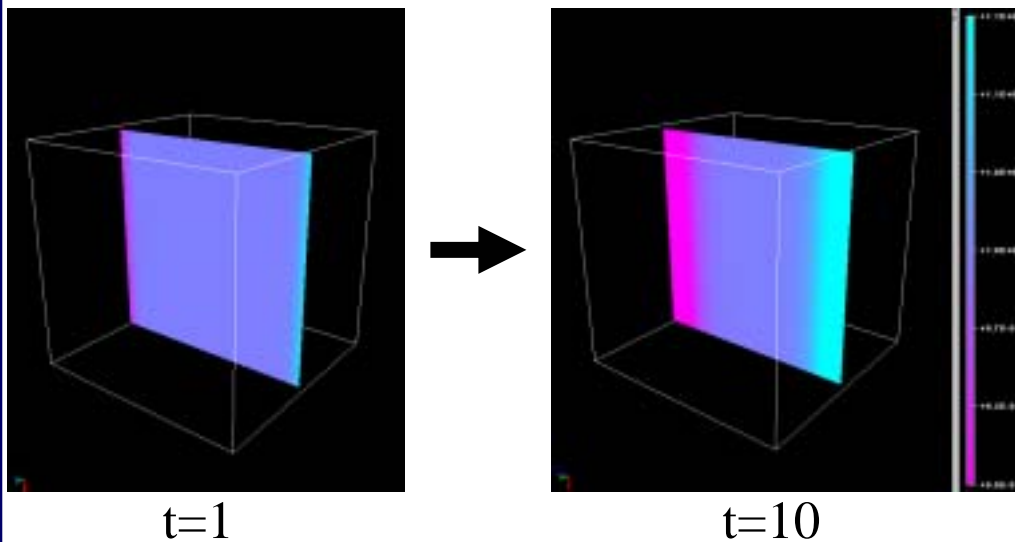
$$K = - \sum_{\alpha=0}^{N_c-1} \left[k_B T \nabla C_\alpha + e Z_\alpha C_\alpha \nabla \Phi \right].$$

$$-\nabla p + \eta_w \Delta v + K = 0$$

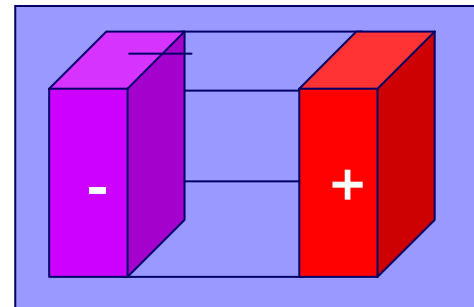
電場

$$\Delta \Phi = -\frac{1}{\epsilon_o \epsilon_r} \sum_{\alpha} e Z_\alpha C_\alpha.$$

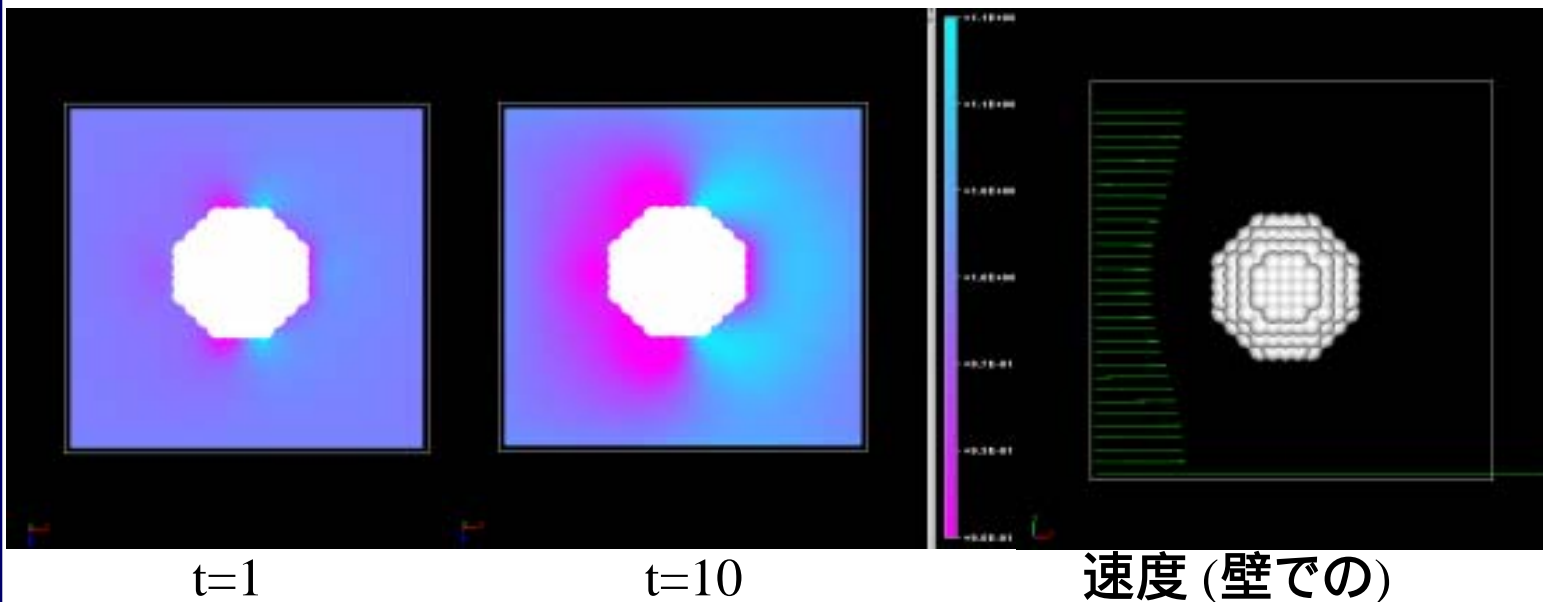
“Electrolyte FDM”の応用例



イオン濃度分布



電場下での電極間の
イオン濃度分布

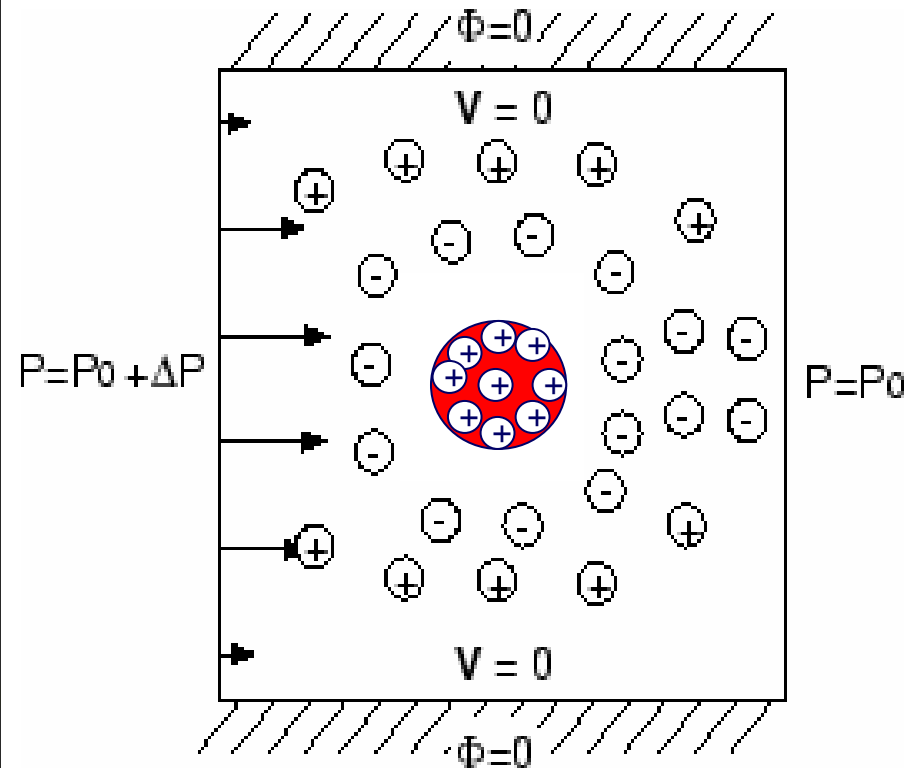
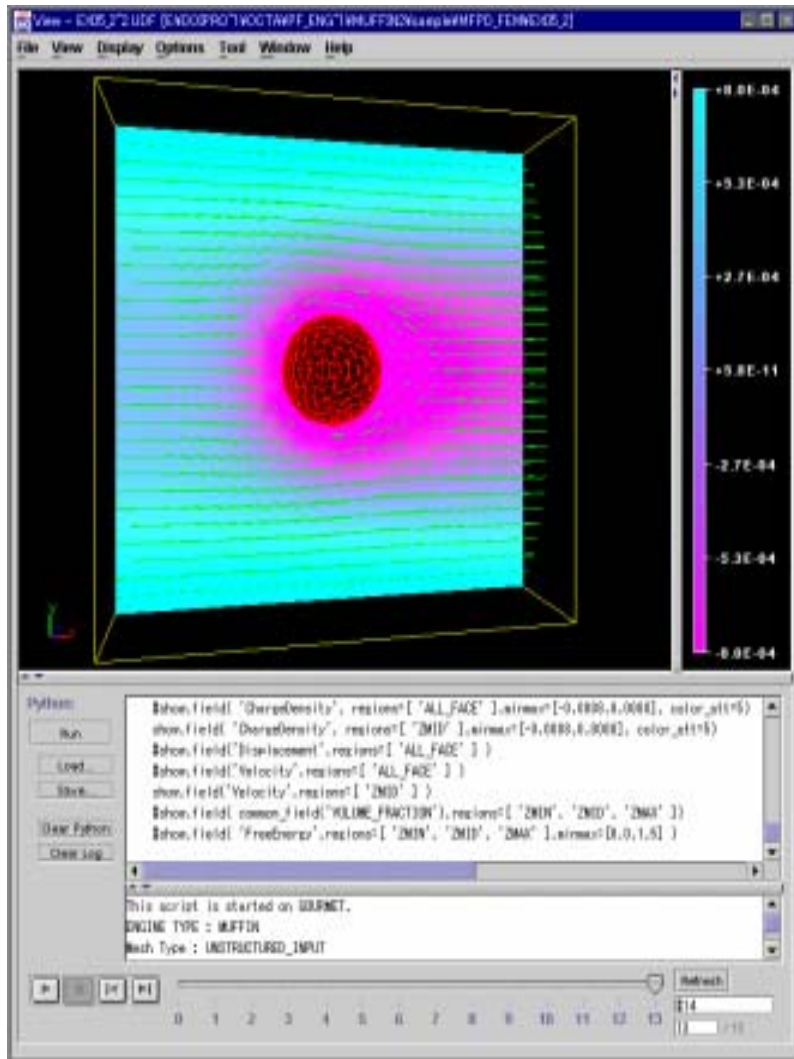


荷電体周りの
電解質
流体の流れ

速度 (壁での)

“Electrolyte FEM”の応用例

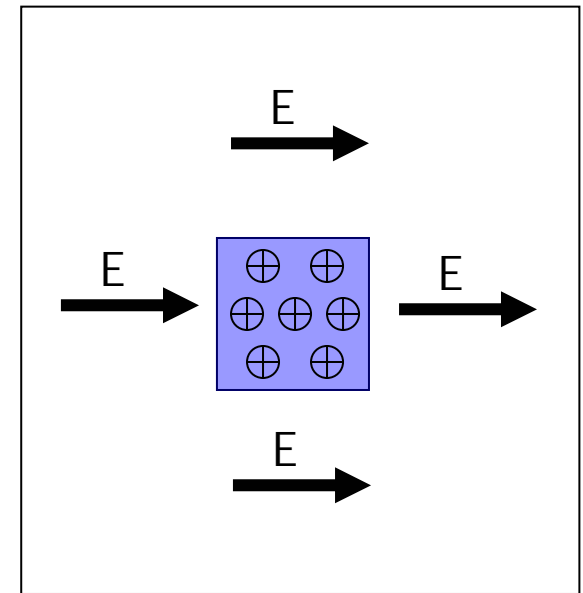
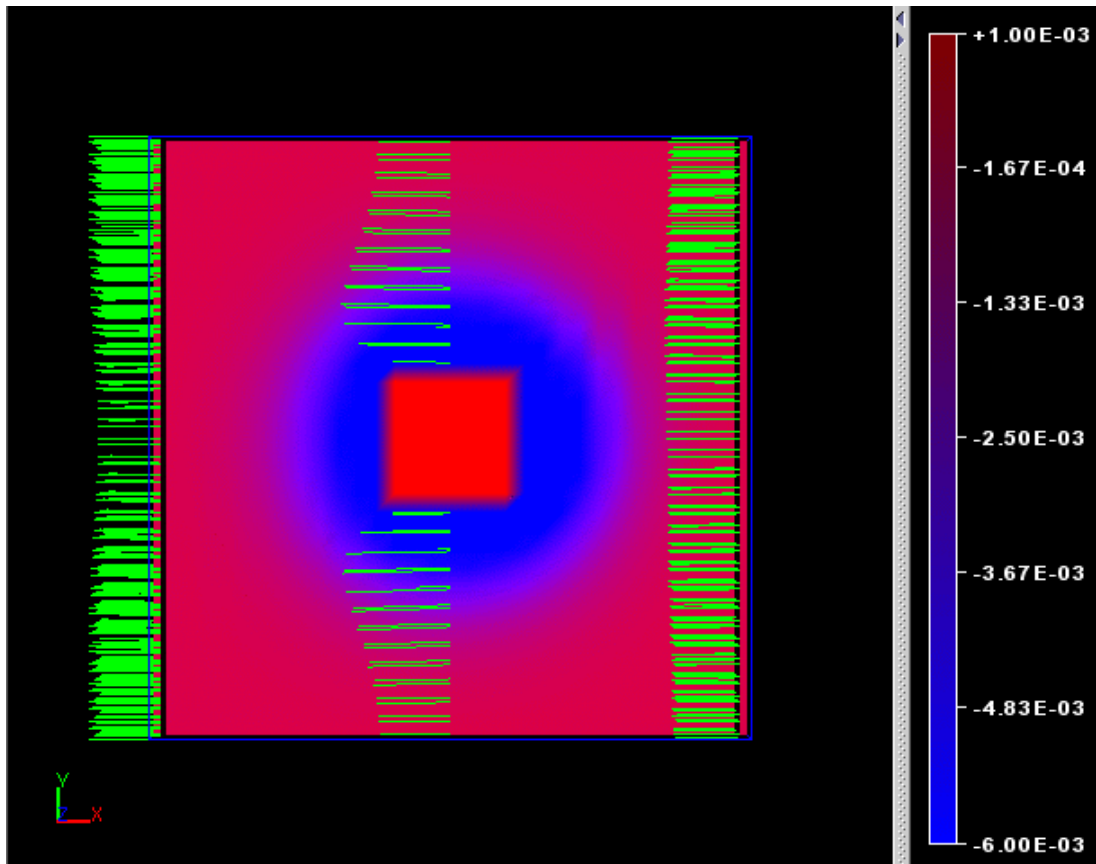
電解質流体中を移動する球状荷電粒子の
周りの電気二重層の生成



(3次元デローネ分割メッシュ)

“Electrolyte FEM”の応用例： 電気浸透と電気泳動

電場下での荷電体周りに誘起される流れ
(電気浸透、電気泳動のシミュレーション)



“MEMFluid”

運動方程式

イオン濃度： (反応拡散)
$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v}C_\alpha) - \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + \sum_\beta R1_{\alpha\beta} C_\beta + \sum_{\beta,\gamma} R2_{\alpha\beta\gamma} C_\beta C_\gamma$$

イオンの流束：
$$\mathbf{j}_\alpha = -L_\alpha [k_B T \{ \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta \} + eZ_\alpha C_\alpha (\nabla\Phi - \mathbf{E}_0)]$$

Oseen方程式： (層流)
$$0 = -\nabla p + \nabla \left[\eta_w \left\{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^t \right\} \right] + \mathbf{K} \quad (\nabla \cdot \mathbf{v} = 0)$$

体積力：
$$\mathbf{K} = -\sum_\alpha k_B T \left\{ \nabla C_\alpha + \sum_\beta \chi_{\alpha\beta} C_\alpha \nabla C_\beta \right\}$$

Laplace方程式：
$$\nabla^2 \Phi = 0$$

} バルクで
(電気的中性条件)

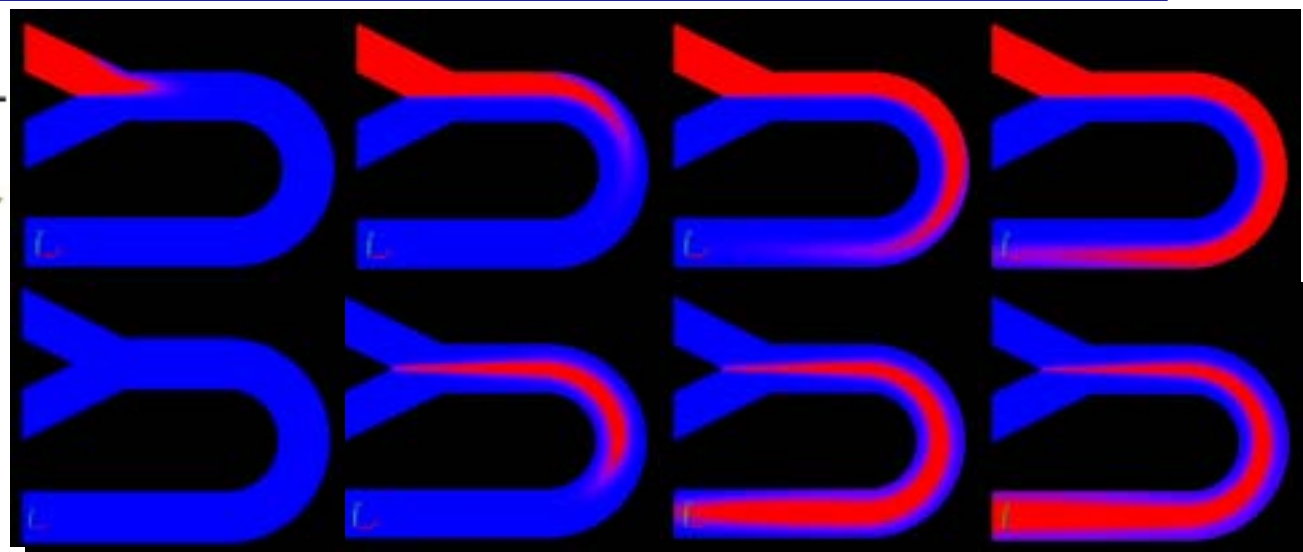
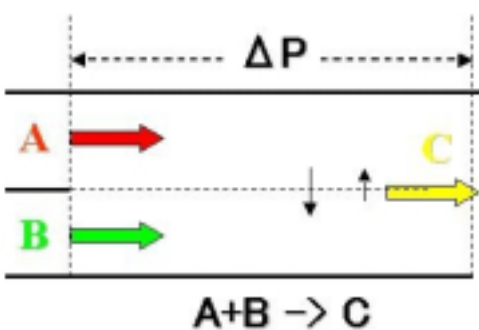
C_α : 種イオン濃度 \mathbf{j}_α : 種イオンの流束密度 L_α : 種イオンの移動度
 Z_α : 種イオンの電荷 $\chi_{\alpha\beta}$: 種イオンと 種イオンの間の相互作用パラメータ
 Φ : 電場ポテンシャル \mathbf{E}_0 : 外部印可電場

適用可能な問題

- ◆ MEMS (Micro Electro Mechanical System), Lab-on-a chip.
- ◆ Micro reactor, μ TAS (Total Analysis System), Bio chips.



“MEMFluid”のY型マイクロリアクタへの適用



A

C

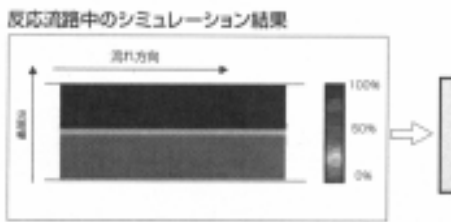
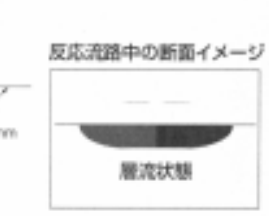
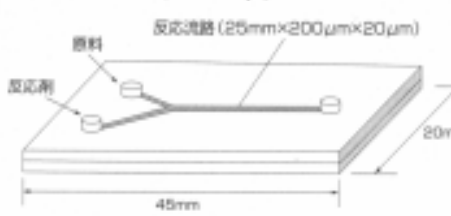
40sec

60sec

80sec

100sec

■ Y字型チップ (Y-Chip)

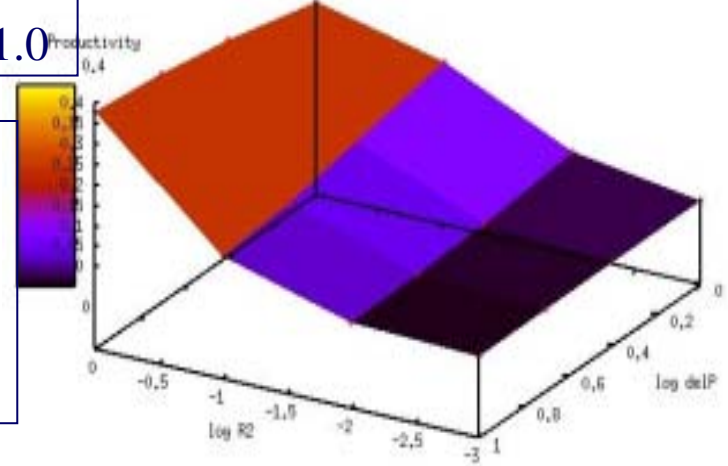


微細流路中では、レイノルズ数が小さいことから流れは層流となる。
原料と反応剤との接触面積が小さいことから合成収率が低いことが予想される。

16cases:
 $P=1.0, 2.5, 5.0, 10.0$
 $R2=1e-3, 1e-2, 1e-1, 1.0$

Results:
 For increase P_c .
 $R2 > 0.4: P \rightarrow 10.0$
 $R2 < 0.4: P \rightarrow 1.0$

Productivity (P_c) of C-ion vs $\log R2$ and $\log P$



“MEMFluid”の電気化学チップへの適用

界面動電現象により境界での電気浸透効果の速度場を決定する

◆ 境界での速度場：

$$\mathbf{v}_{eo} = \frac{\varepsilon}{\eta_w} \zeta \mathbf{E}$$

Helmholtz-Smoluchowski eq.

◆ 境界での電気二重層電位 -potentialの計算法:

- 1次元 Poisson-Boltzmann eq. (1-1 electrolyte)

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

シミュレーション結果:

P=10.0, R2=1.0

- コンデンサモデル (線形近似)

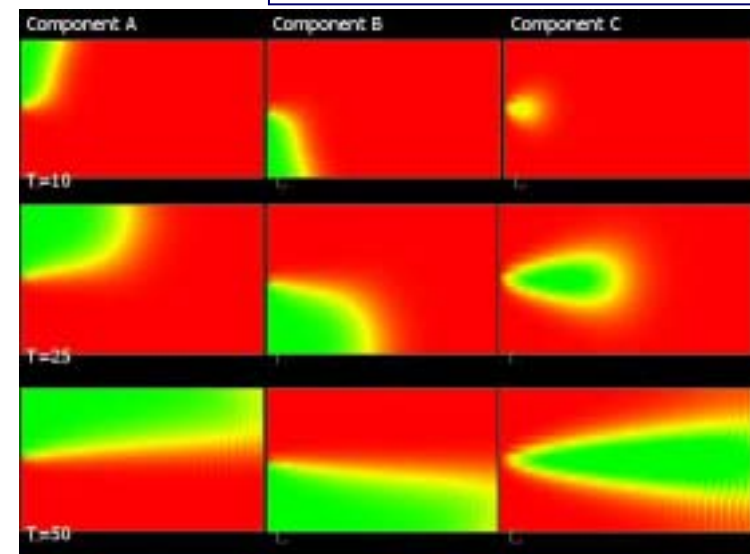
有効範囲

$$Ze |\zeta| / k_B T \ll 1 \quad \zeta \leq 25 (mV)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \zeta = \frac{\sigma}{\varepsilon \kappa} \\ \kappa = \left(\frac{\alpha}{\varepsilon k_B T} \right)^{1/2} \end{array} \right.$$

スケーリング因子: ビヨルン長/システムサイズ:

$$\frac{l_b}{l} = \frac{e^2}{(k_B T \varepsilon l)} \approx 10^{-3} - 10^{-2}$$



多相線形弾性体シミュレータ

“*Elastica*”

基本モデル: 線形弾性体, 3次元FEM

$$F\{u_i(\mathbf{x})\} = \int_V d^d x \{f\} - \int_V d^d x \rho(\mathbf{x}) g_i u_i(\mathbf{x}) - \int_{S_t} d^{d-1} x T_i u_i(\mathbf{x})$$

等方弾性体

$$f = G(\mathbf{x}) \left(e_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} e_{ll} \right)^2 + \frac{K(\mathbf{x})}{2} (e_{ll})^2$$

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

非等方弾性体 (軸対称)

$$f = D_1 (e_{ii})^2 + D_2 (n_i n_j e_{ij})^2 + D_3 (e_{ll} \cdot n_i n_j e_{ij}) + D_4 n_l e_{il} \cdot n_k e_{ik} + D_5 e_{ij} e_{ij}$$

等方、非等方成分の任意の混合系やモルフォロジ、任意の異方性軸分布

非等方弾性の剛性マトリックス (1軸対称異方性)

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & l & l & 0 & 0 & 0 \\ l & k+m & k-m & 0 & 0 & 0 \\ l & k-m & k+m & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{xx} \\ e_{yy} \\ e_{zz} \\ e_{yz} \\ e_{zx} \\ e_{xy} \end{bmatrix}$$

$$f = D_1 (e_{ii})^2 + D_2 (n_i n_j e_{ij})^2 + D_3 (e_{ll} \cdot n_i n_j e_{ij}) + D_4 n_l e_{il} \cdot n_k e_{ik} + D_5 e_{ij} e_{ij}$$

$$\begin{cases} D_1 = (k-m)/2 \\ D_2 = (n+k-m)/2 - l - \mu \\ D_3 = l - k + m \\ D_4 = \mu - m \\ D_5 = m \end{cases}$$

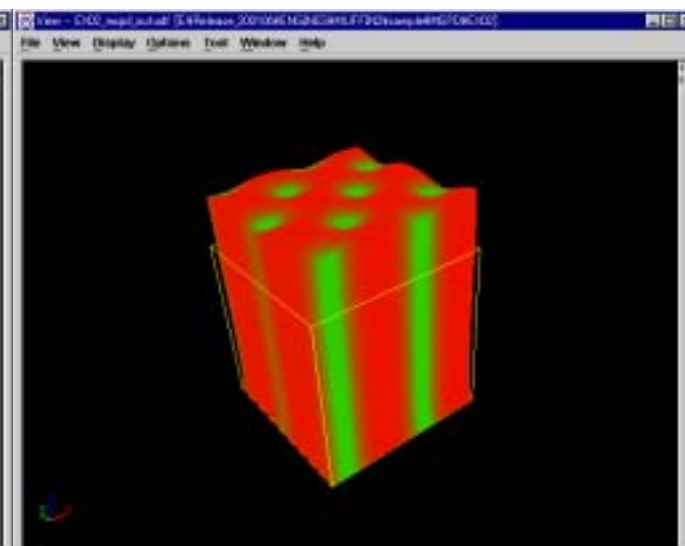
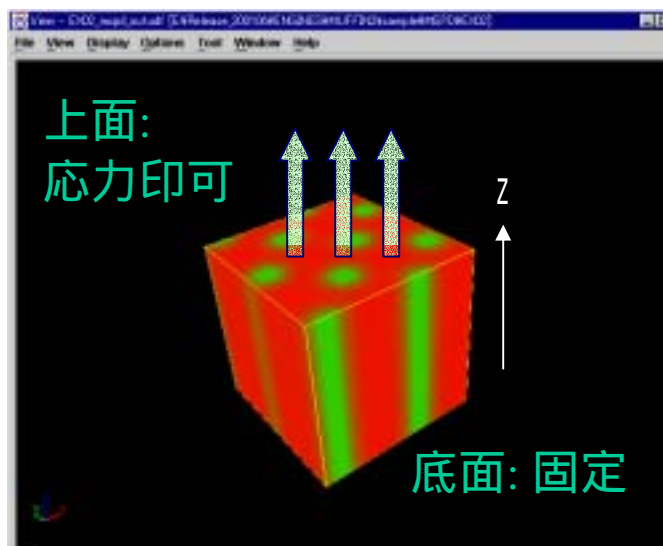
“Elastica”の応用例： SUSHIで得られたミクロ相分離構造の弾性率

【変形前】

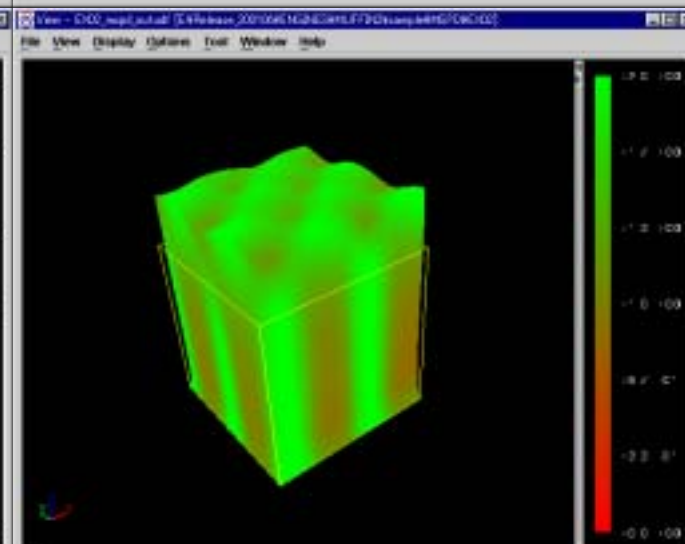
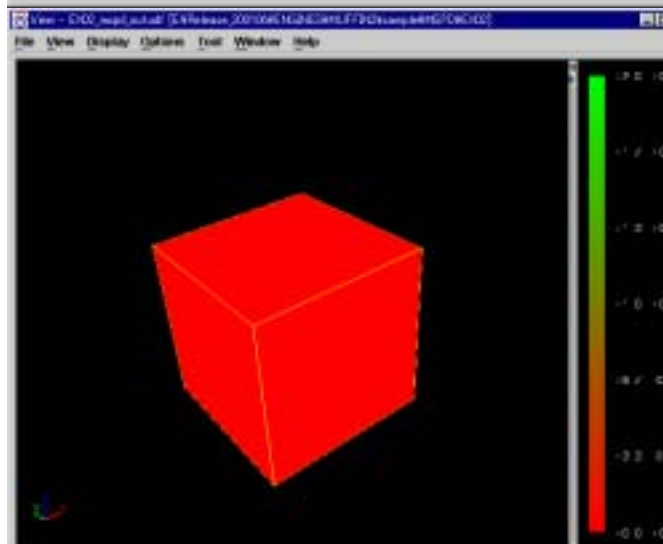
【変形後】

【体積分率】

- ・成分1(緑)
- z: 固, x,y: 軟
- ・成分2(赤)
- x,y: 固, z: 軟



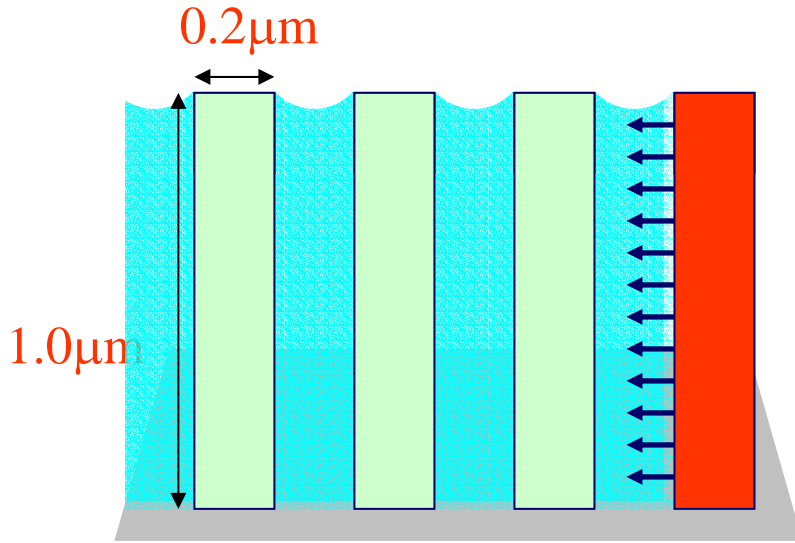
【歪みエネルギー】



“Elastica”の応用例:

野田、佐々木

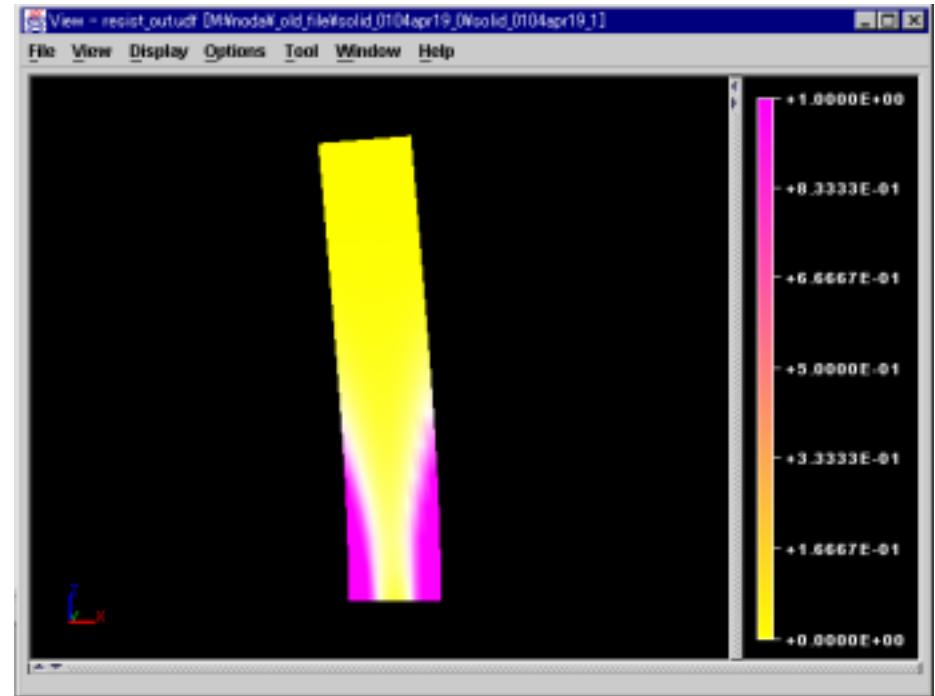
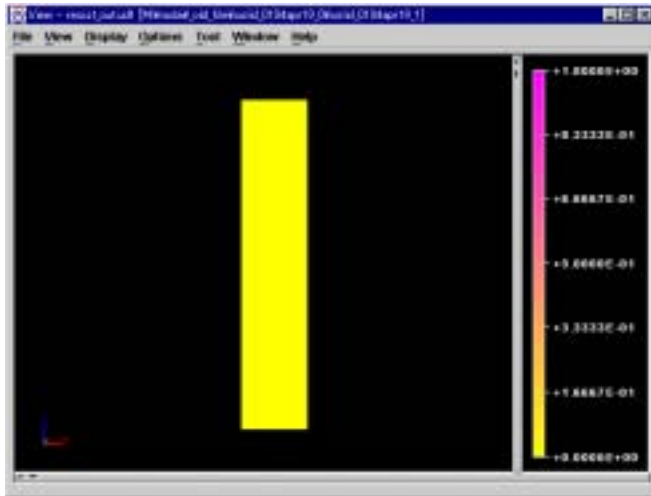
フォトレジストパターンのキャピラリカによる変形



キャピラリカによる負圧

【変形後】 歪みエネルギー

【変形前】



“Elastica”の応用例:

2成分系のさまざまなモルフォロジーに対する有効弾性率

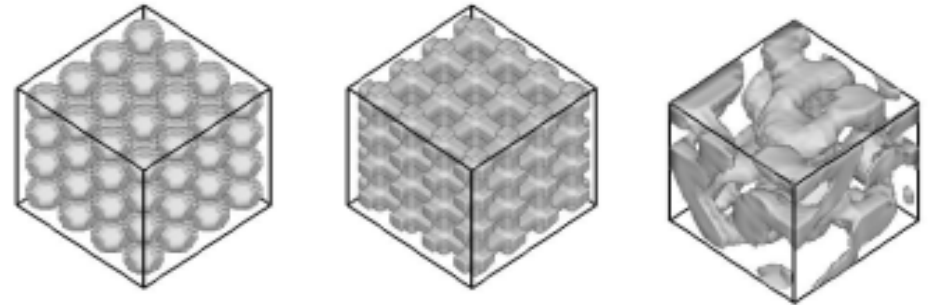
全自由エネルギーと有効弾性率

$$F = \bar{G} \sum \left\{ \left(e_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} e_{ll} \right)^2 \right\} + \bar{K} \sum \left(\frac{1}{2} e_{kk}^2 \right)$$

有効弾性率は幾つかの異なるモードの変形データにより求まる。

$$\bar{K} = - \frac{\sum \left\{ \left(e_{ij} - \frac{1}{d} \delta_{ij} e_{ll} \right)^2 \right\}}{\sum \left(\frac{1}{2} e_{kk}^2 \right)} \bar{G} + \frac{F}{\sum \left(\frac{1}{2} e_{kk}^2 \right)}$$

Morphology (PP + Elastomer)



(a)dispersed (b)bi-continuous (C) by SUSHI

結果の有効Young率

modulus	\bar{E}	analytic-model
sphere	3.753	series
bi-continuous	34.67	Davies
sushi1	91.84	
sushi2	50.99	

sushi2: volume fraction is reset to 0 and 1 using a threshold value.

ゲル、弾性体ダイナミクスシミュレータ

“GelDyna”

運動方程式 (ゲルの応力拡散カップリングモデル)

$$\text{高分子の速度: } \zeta (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_s) = -\phi \nabla \cdot p + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$$

$$\text{溶媒の速度: } \zeta (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_p) = -(1 - \phi) \nabla \cdot p$$

$$\text{非圧縮条件: } \nabla \cdot [\phi \mathbf{v}_p + (1 - \phi) \mathbf{v}_s] = 0$$

\mathbf{v}_p : 高分子の速度

\mathbf{v}_s : 溶媒の速度

ϕ : 高分子体積分率

p : 圧力

ζ : 摩擦係数

$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}$: 高分子のコーシー応力テンソル

ゲルの自由エネルギー

$$F = \frac{k_B T}{v_1} \int d^d x [(1 - \phi) \ln(1 - \phi) + \chi \phi (1 - \phi) + \frac{1}{2} v_0 \frac{\phi}{\phi_0} (\text{tr} \underline{\underline{\mathbf{W}}} + 2 \ln \frac{\phi}{\phi_0})]$$

高分子ネットワークの応力

$$\sigma_{ij} = -[\phi f_m'(\phi) - f_m(\phi)] \delta_{ij} + v_0 \frac{\phi}{\phi_0} (W_{ij} - \delta_{ij})$$

混合自由エネルギー (Flory-Huggins) $f_m(\phi) = (1 - \phi) \ln(1 - \phi) + \chi \phi (1 - \phi)$

W_{ij} : フィンガーテンソル

ϕ_0 : 基準系での高分子体積分率

χ : 高分子と溶媒の相互作用パラメータ

v_0 : 基準系での架橋点密度

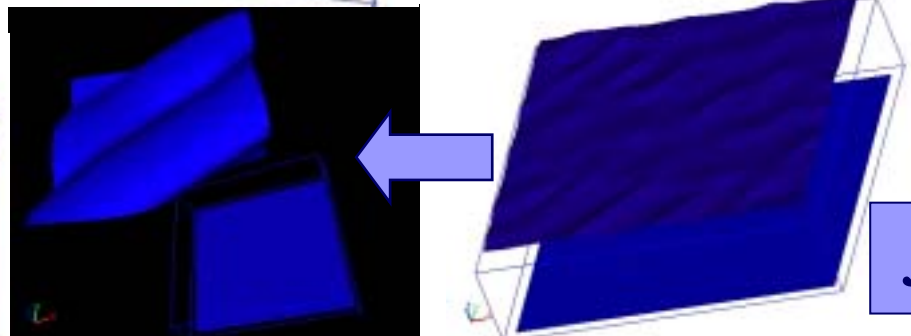
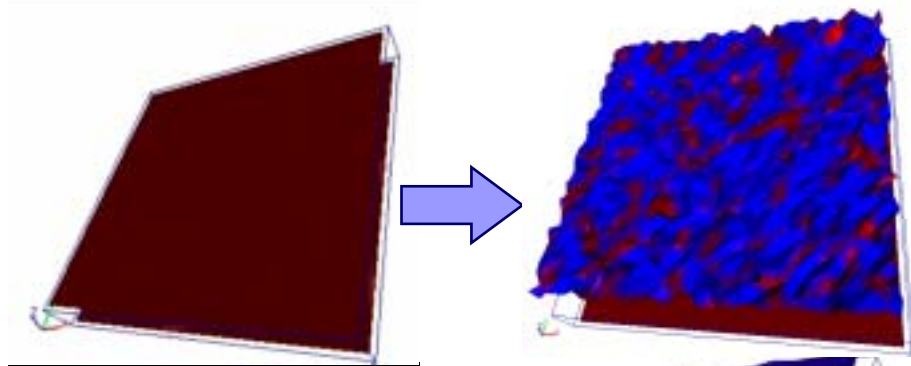
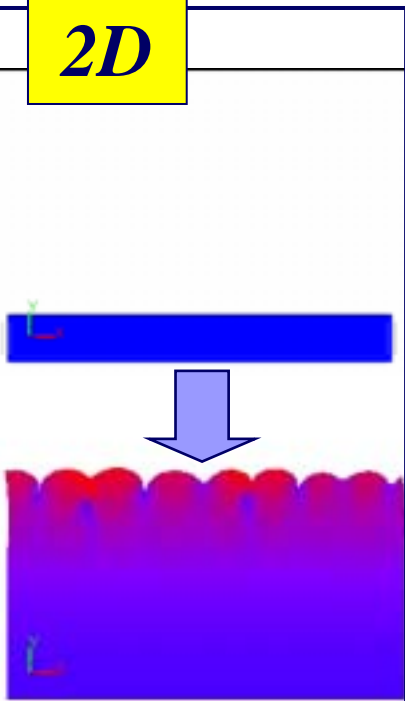
“GelDyna”の応用例

応用例

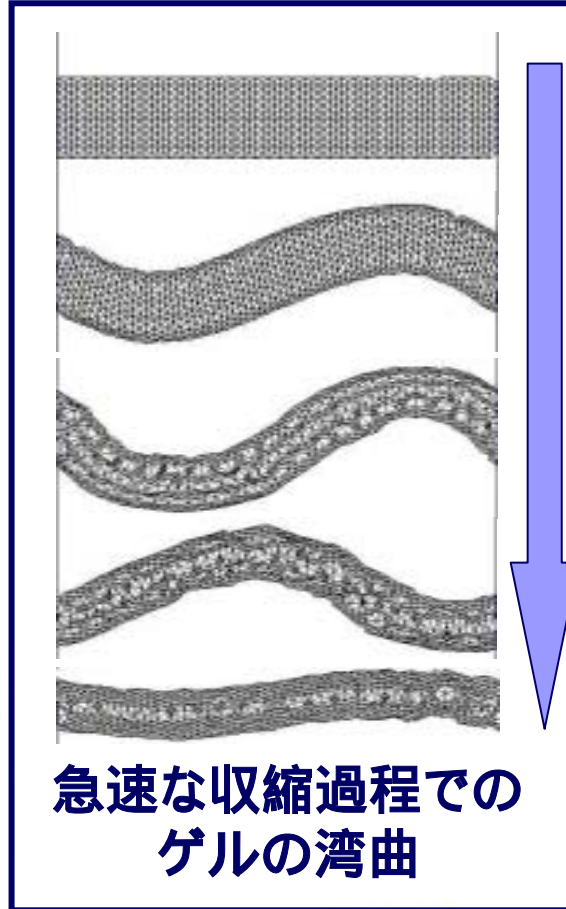
- ◆ 超吸収性ゲル
- ◆ 温度感受性ゲル
- ◆ 薬剤放出制御 (DDS)
- ◆ アクチュエータ、センサー、ソフトデバイス

NIPAゲルの膨潤への適用

2D



3D



急速な収縮過程でのゲルの湾曲

光透過性シミュレータ

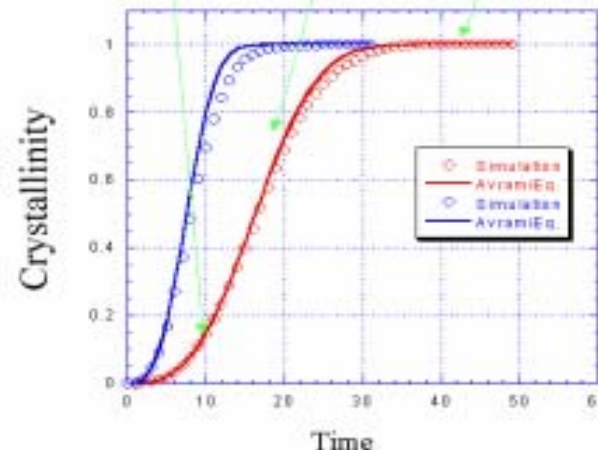
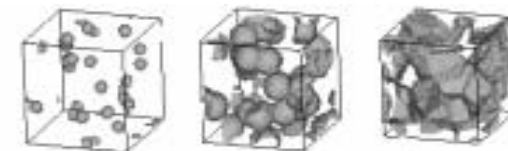
“TURBAN”

=TURBidity ANalyzer

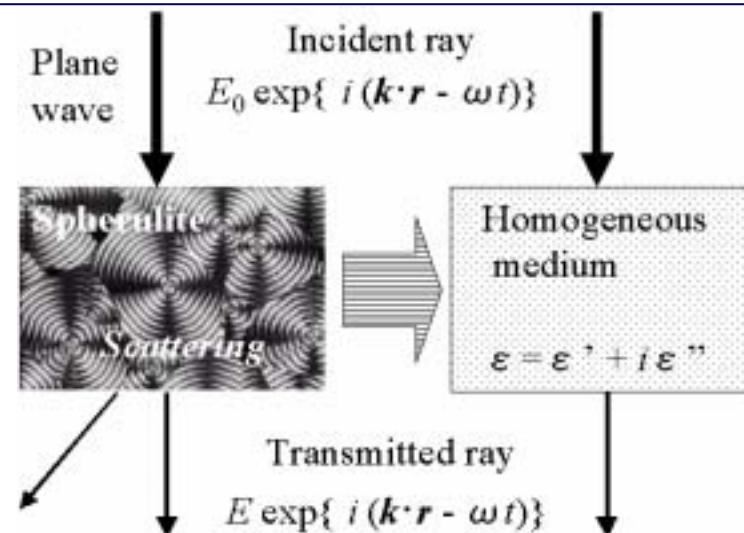
“TURBAN”は球晶構造を持つ
高分子材料の透明性を予測する
シミュレータである。

“TURBAN”は以下の2つの部分
で構成される:

- (i) アブラミモデルによる球晶成長と球晶構造の予測。
- (ii) Maxwell方程式により、光透過性を予測。



球晶成長シミュレータのイメージ



球晶構造を透過する光のイメージ

“TURBAN” 計算例

PEフィルムの光透過性の予測

シミュレーション条件:

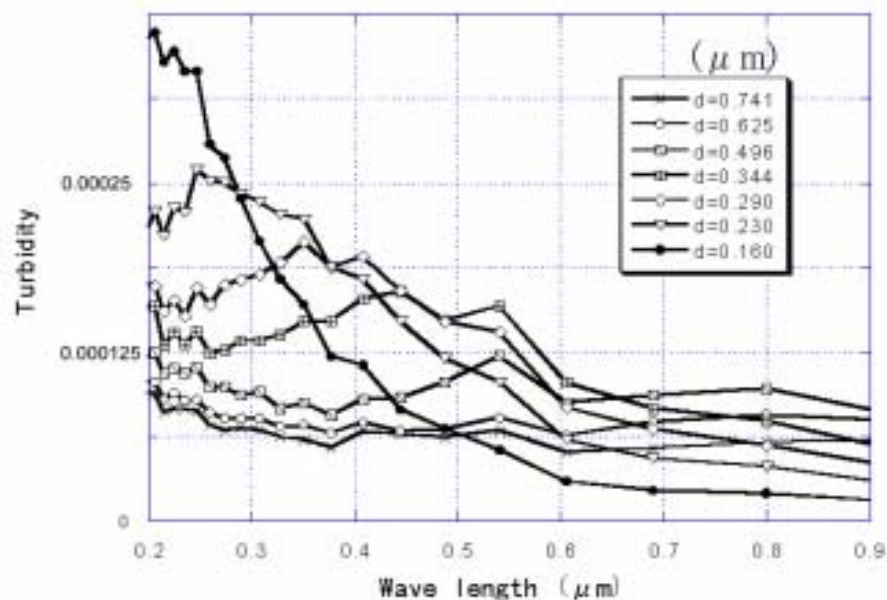
- 128^3 の立方セル
- 可視光の波長は = 400-700nm
- 不均一核生成
- PEブラウンフィルムの特性を利用

結果:

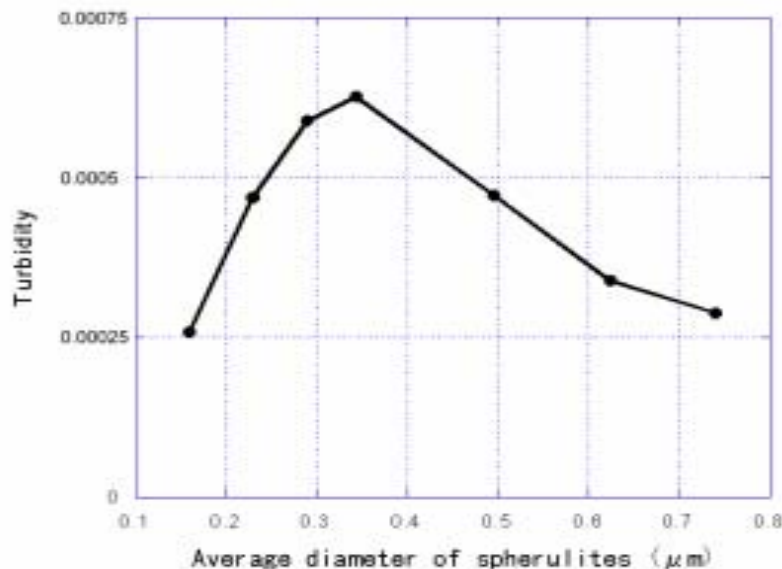
濁り度のピークは、平均球晶半径に近い波長に出る。

濁り度のピークは、可視光の低レンジ側に出る。

これらの結果は、実験をうまく一致している。



さまざまな平均半径を持つ球晶系についての濁り度スペクトル



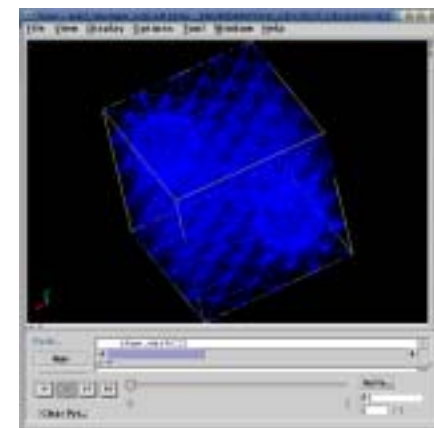
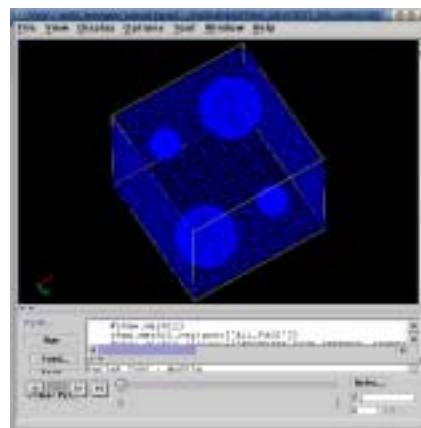
各々の球晶半径についての可視光の濁り度

MUFFINの補助ツール

”プリプロセッサ”

◆ “MILK” (メッシュジェネレータ)

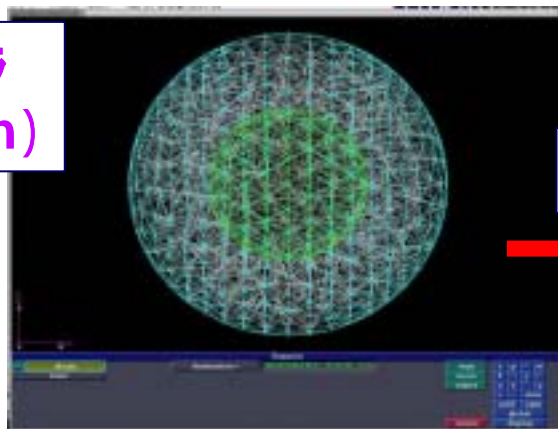
- デローネ3D/2D自動分割
- 四面体と三角形
- 内部構造



◆ “NASTRAN BULK FILTER”

- NASTRAN BULK形式のメッシュデータをUDF形式に変換

有限要素モデラ
(例. HyperMesh)



UDF変換

GOURMET



◆ “MeshFieldConvertor (IMPORT/EXPORT_...)”

- SUSHIの場(モルフォロジー)のデータとの相互変換

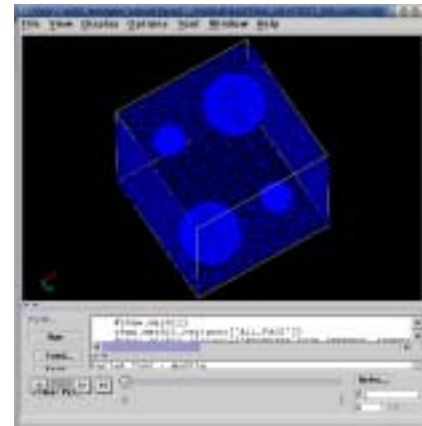
MUFFINの補助ツール

山上、谷口、佐々木

”ポストプロセッサ”

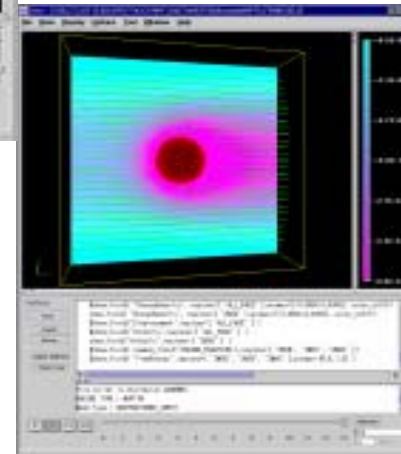
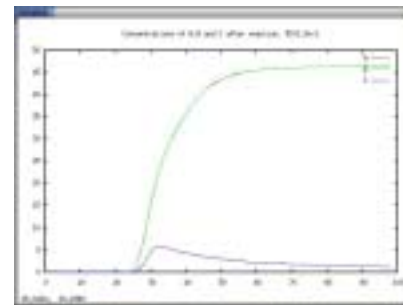
◆ “MeshFieldShow (SHOW_...)”

- メッシュと場の描画
- 構造データ、非構造データ
- 任意の断面や部分領域の描画



◆ “MeshFieldPlot (PLOT_...)”

- 場のデータのプロット(gnuplot利用).
- 構造データ、非構造データ
- 任意の断面や部分領域の描画

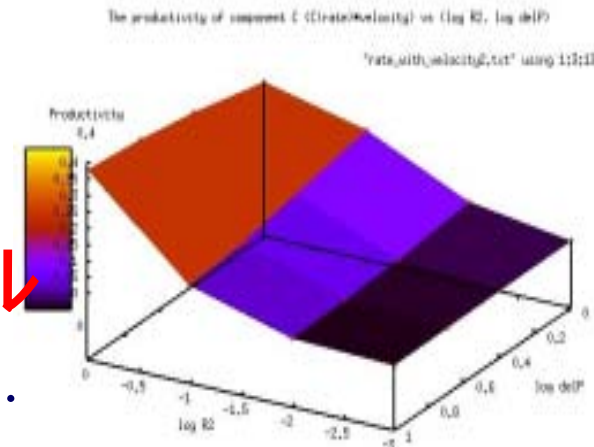


◆ “udf2avs”

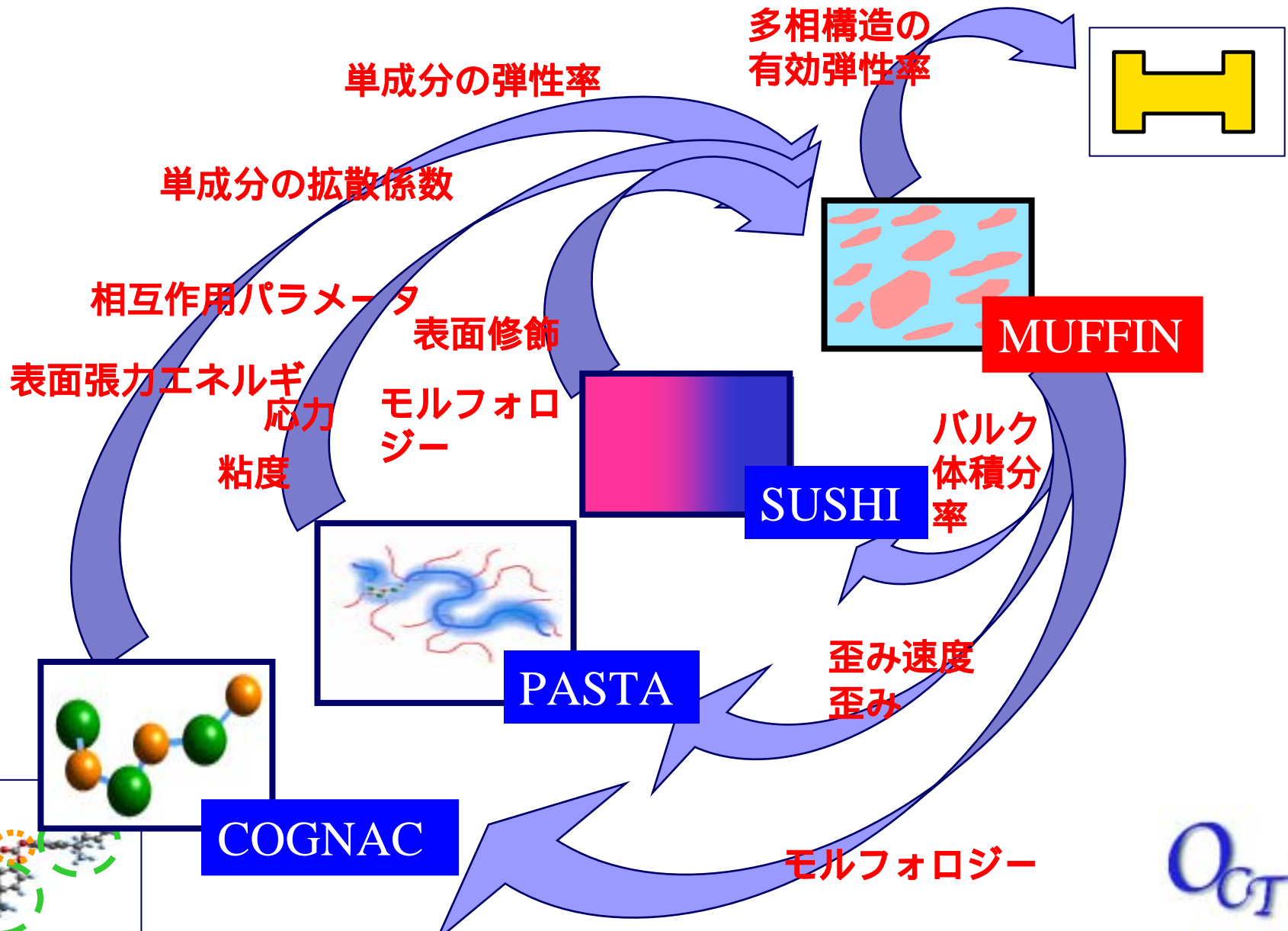
- UDF形式の場をAVS形式の場に変換
- 構造データ、非構造データ

◆ 各々のパッケージに依存した補助ツール

- “ModelingSupporter”, “analyze_reactor”,



MUFFIN : 他のスケールとの連携



結論

- ◆ MUFFIN (MultiFarious Field simulator for Non-equilibrium system) は、高分子複合材料の多相構造の時間空間挙動($\sim 0.1 \mu\text{m}$ から 1mm , $\sim \text{sec}$)のシミュレータのためのアーキテクチャである。
- ◆ 6つのシミュレーションエンジン、“PhaseSeparation”, “Electrolyte”, “MEMFluid”, “Elastica”, “GelDyna”, “TURBAN”をリリースする。
- ◆ MUFFINは、オブジェクト指向設計により、様々な再利用可能なコンポーネントライブラリの集合体となっている。例えば、構造格子、非構造格子、メッシュ要素、場の基本クラス、入出力ルーチン、行列ソルバ、有限要素ソルバ、および、“ダイナミクスマネージャ”などである。
- ◆ MUFFINのコンポーネントライブラリを連続場シミュレータの研究開発にご利用頂けると幸いです。