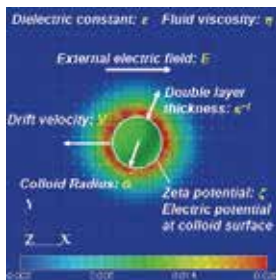


フィラー充填系コンポジットシミュレータ (拡張KAPSEL)

シミュレータ概要

- ▶ 本シミュレータは、京都大学 山本量一教授グループにより開発、公開(2006～)されている、コロイド・微粒子分散系シミュレータ KAPSEL(Kyoto Advanced Particle Simulator for ELectro-hydrodynamics) (<http://kapsel-dns.com/>)をベースに、フィラー充填系ポリマーコンポジットを取り扱うための拡張を行ったものです。

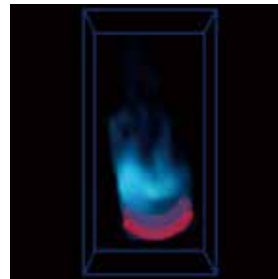
KAPSELの機能



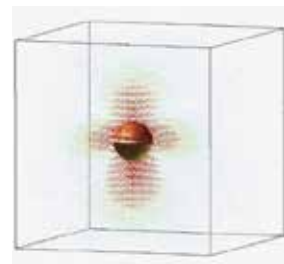
電気泳動



任意形状の剛体



高レイノルズ数での
物体の沈降



マイクロスイマー

<http://kapsel-dns.com/>

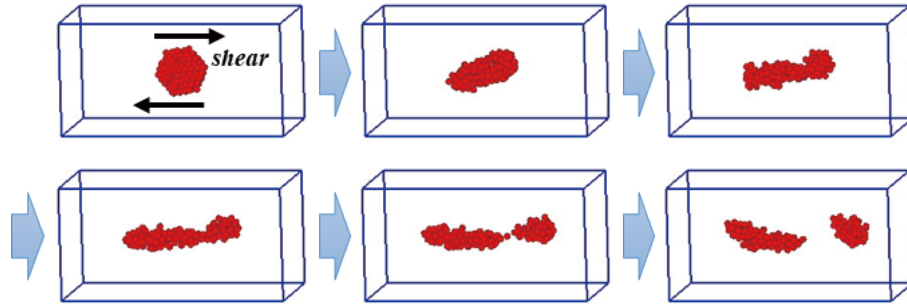
拡張機能

- ▶ 粒子間の相互作用ポテンシャルにフィラー粒子用van der Waalsポテンシャルを追加
- ▶ 粒子存在下における液液相分離を扱うために、粘性流体+相分離の基礎式(Model H)の実装
- ▶ 液液の混合自由エネルギーとして、LandauタイプとFlory-Hugginsタイプを実装
- ▶ mpiによるノード間並列化実装

想定用途

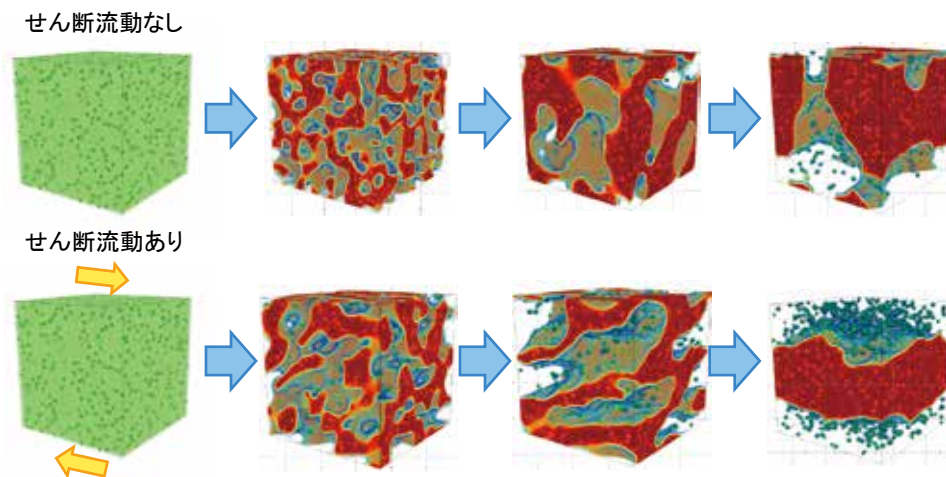
- ▶ ポリマーコンポジット混練時におけるフィラー解砕・凝集挙動解析
- ▶ フィラー存在下のポリマー相分離構造およびフィラーの偏析挙動予測

せん断流動下におけるフィラー解砕シミュレーション



Ref. 齋藤ら、粉体工学会2018年度秋季研究発表会

フィラー存在下でのポリマー相分離



動作環境

- ▶ ソースコードおよびWindows版、Linux版の実行ファイルを提供

ライセンス・配布方式

- ▶ KAPSEL公開サイト(<http://kapsel-dns.com/>、ソースコードのみ)および、OCTA公開サイト(<http://octa.jp>、ソースコードと実行ファイルを拡張OCTAに同梱)より公開中
- ▶ 利用規約はLicense agreement of KAPSELに準拠する

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により開発されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04