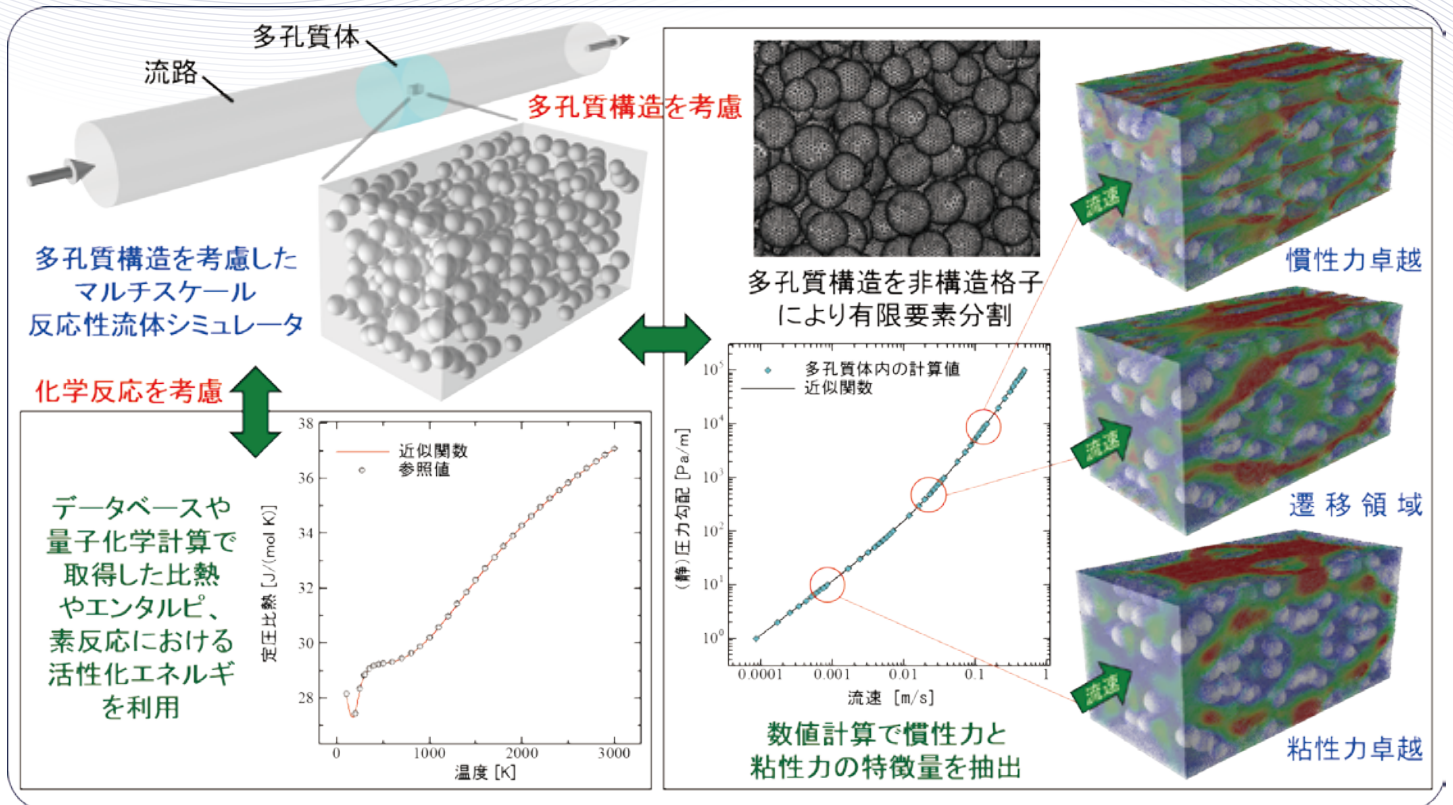


反応性流体シミュレータ

シミュレータ概要

- ▶ 熱と化学反応を伴う現象や多孔質(ミクロ)構造を考慮した連続体モデルの流体シミュレーションでは、実用的な時間で計算を実施するためにマルチスケール解析が必要になります。本プロジェクトでは、有限要素法による反応機構(複数の素反応と化学種)を考慮した複雑形状に適用できる反応性流体シミュレータを開発しました。
- ▶ データベースや量子化学計算によって得られる化学反応式や活性化エネルギーなどの素反応に関する化学反応モデルを用い、熱流体における複雑な多孔質構造内の流れ計算により流動特性(慣性力と粘性力)に関する特徴量をコンピュータ上で抽出し、マルチスケール解析を導入した反応性流体の並列計算を行うことが出来ます。

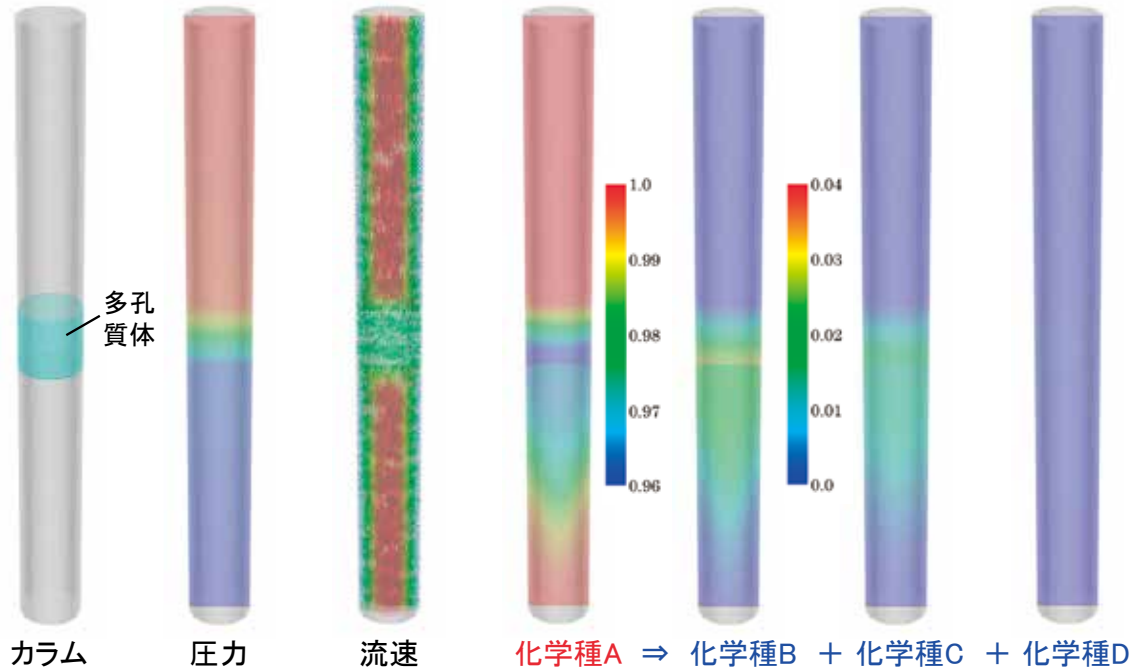


主な機能

- ▶ 有限要素法を用いた圧縮性粘性流体シミュレーション
- ▶ 複数の素反応と化学種を考慮可能
- ▶ 多孔質構造を考慮したマルチスケール解析
- ▶ 非構造格子(四面体要素)による複雑形状への適用
- ▶ MPIによる並列計算

想定用途

- ▶ 触媒塊および触媒反応を考慮した熱流体シミュレーション(スケール: $1\mu\text{m}$ ~)
- ▶ 浄化用フィルタ内の流体シミュレーション(スケール: 1mm ~)
- ▶ 地中内の流れシミュレーション(スケール: 1km ~)
- ▶ 反応性流体における多孔質体を含めた流入流量や流路形状などの性能評価



多孔質構造と化学反応を考慮した熱流体シミュレーション

動作環境

- ▶ Windows 10 64bit版(並列計算対応)
- ▶ Linux 64bit版(並列計算対応)
- ▶ コンパイラ: GNU、INTEL、PGIなど
- ▶ 並列環境: MS-MPI、Open MPI、INTEL MPIなど

ライセンス・配布方式

- ▶ Windows 64bit版: 実行ファイルを無償公開中(1ノード内でコア数無制限)
- ▶ Linux 64bit版: 実行ファイルを有償公開中
- ▶ ソースコード: 有償公開中
- ▶ 公開に関する詳細は問い合わせ窓口にご連絡ください

—謝辞—

本シミュレータの一部は、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