

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F
TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100
URL: <http://www.aasri.jp/>

[シミュレータ名]

AA&S 反応速度解析ソルバー

[背景]

多成分系の反応過程、例えば、

- 種々の化学反応
- 固体中の格子欠陥
- 光励起と発光過程
- プラズマ中のイオン化・再結合反応

などは、多くの理工学的問題（特に、製造プロセスや材料の性能評価など）において重要な役割を果たします。

したがって、これらの反応過程の精度良いシミュレーションによって、大きなアドバンテージを得ることができます。

しかしながら、各反応種の濃度などの振る舞いを知りたい場合、反応速度論という確立された理論が存在するものの、

- 入力すべき反応過程が多彩で複雑である
- 数値的に不安定になりやすい

という難点がございます。

本ソルバーにおきまして、すでにこれらの難点を克服することに成功しておりますので、ここにご紹介いたします。また、より高度な機能の追加について、ご提案いたします。

[ご紹介・ご提案]

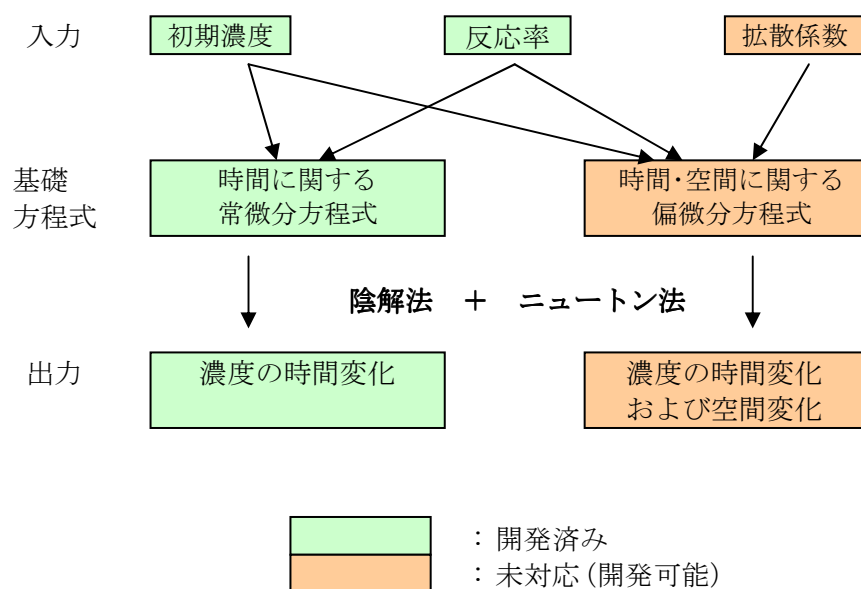
お客様のニーズに合わせて、必要となる反応過程を調査し、ソルバーに組み込むことができます。

（以下でご紹介致します照射欠陥の例では、数十種類の反応種を考慮しております。）

また、反応速度論の基本方程式における数値的な不安定性を回避するため、陰解法を用います。

（照射欠陥の例では、陰的（後退）オイラー法を用いております。）

さらに、お客様のご要望にお応えして、空間依存性を考慮し、拡散項を付け加えるなど、より高度な機能を追加することができます。



[実績例：照射損傷過程]

現実の固体は、理想的な完全結晶とは異なり、様々な格子欠陥を含みます。例えば、点欠陥や転位などであり、これらはさらに細かく分類されます。

固体中の欠陥が工学的に重要である理由は、それらが、力学的な応答（壊れやすさなど）を支配することにあります。また、非自明な非線形現象の宝庫としても、興味を持たれています。

高エネルギー粒子の照射下にある固体の損傷過程は、このような問題の1つとして、材料科学（および、それを利用する分野）における重要なトピックとなっています。

本計算では、この照射損傷過程について、その素過程を固体結晶中の欠陥生成過程としてモデル化（反応項を実装）し、反応速度論の基礎方程式に基づくシミュレーションにより、様々な点欠陥濃度の時間変化を求めております。

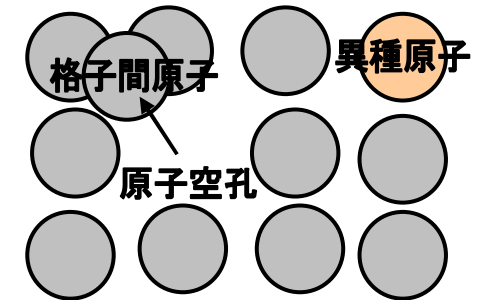
特に、単純な点欠陥だけではなく、それらの集合状態までを対象として、生成消滅過程を組み込んでおります。

反応速度論の基礎方程式は多くの場合（幅広いタイムスケールが関わる場合）、いわゆる「硬い方程式」となり、陽的な解法では数値解が不安定化します。そこで、本計算では、陰的（後退）オイラー法を用いて、この問題を回避しております。

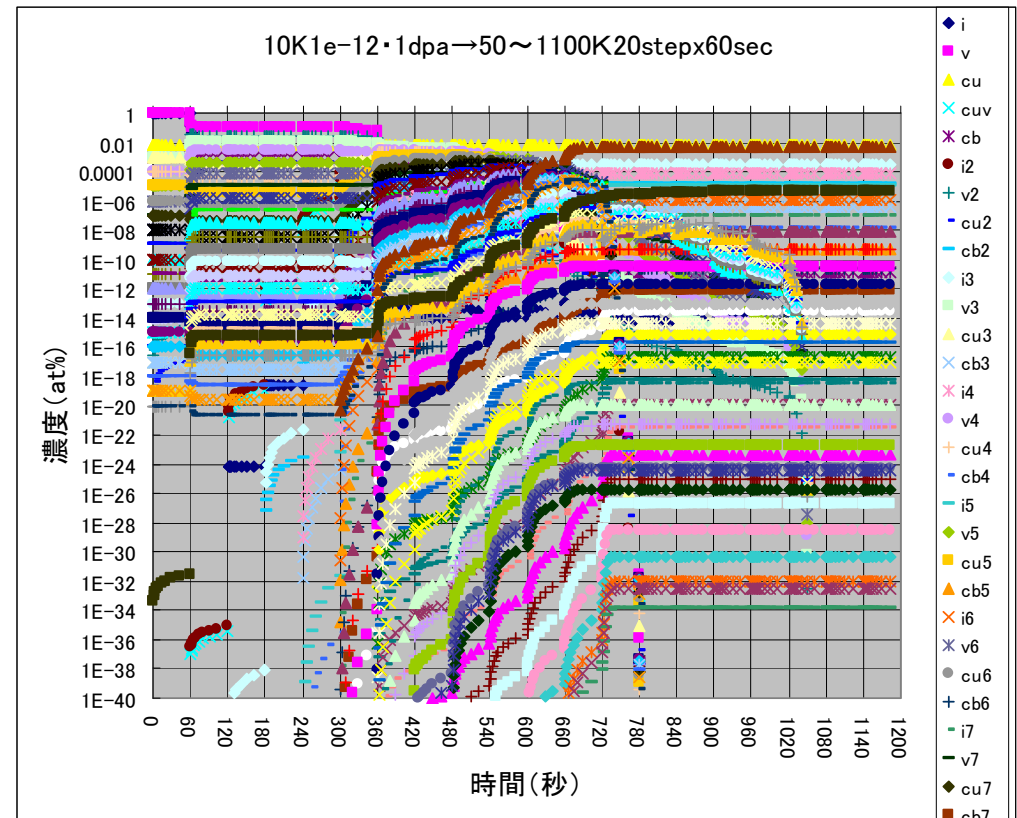
また、このように陰解法を採用した場合、大規模な非線形代数方程式を解くこととなりますが、これはニュートン法により行なっております。

格子欠陥の種類

i	格子間原子
v	原子空孔
cu	銅
cb	炭素
(これらの集合体)	



計算例



時間とともに集合体の欠陥が増加していること、最終的にほぼ定常状態に落ち着いていること、などがわかります

[入出力]

入力：各成分の初期濃度
各成分の生成率と反応率（温度の関数として）
計算の終了条件（収束条件もしくは最大経過時間）

出力：各タイムステップでの各成分の濃度
その他の（濃度から求まる）物理量 *

* 本ソルバーは非常に広範囲の問題に適用可能であるため、出力可能な物理量は、問題によって異なりますので、別途お問い合わせ・ご相談ください。

[ソフトの状態]

[言語] FORTRAN

[処理状況]

- ① FORTRAN コンパイラを用いてコンパイル
- ② 生成された実行ファイルを実行 (CUI)
- ③ 計算に必要なパラメーターをCUI 上で入力
- ④ 入力終了後に計算開始
- ⑤ 結果を出力して終了

GUI による入力、出力結果の可視化など、カスタマイズ可能ですので、お気軽にご相談ください。

[HP内容]

本カタログでは、計算例のごく一部をお見せ致しましたが、弊社ホームページでは、そのほかの計算例についても載せておりますので、ぜひご覧ください。

計算例URL

<http://www.aasri.jp/pub/demo/demo/reaction/hannou.html>

提案書URL

<http://www.aasri.jp/pub/demo/proposal/Reaction.pdf>