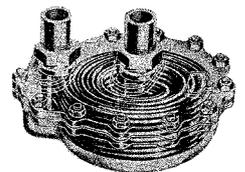


アドバンスソフト技術セミナー 原子力における流体解析の現状と当社の取組み

2009
10/23

セミナー資料



開催案内

1. 日時	2009年10月23日(金) 13:30~16:00
2. 会場	トスラブ山王(山王健保会館2F) A+B会議室
3. テーマ	原子力における流体解析の現状と当社の取組み
4. 定員	80名
5. 参加費	無料

プログラム

13:30~13:35	主催者あいさつ アドバンスソフト株式会社 常務取締役 三橋 利玄
13:35~14:00	アドバンス株式会社における原子力分野の流体解析への取組み アドバンスソフト株式会社 常務取締役 三橋 利玄
14:00~14:25	原子炉熱流動解析 アドバンスソフト株式会社 技術第1部 主任研究員 浜野 明千宏
14:25~14:50	RELAP5による蒸発器と凝縮器解析 アドバンスソフト株式会社 技術第4部 主任研究員 吉岡 逸夫
14:50~15:00	休憩
15:00~15:25	配管破断時の超音速二相流解析 アドバンスソフト株式会社 第2事業部 主管研究員 湊 明彦
15:25~15:50	中性子による物質の構造解析 アドバンスソフト株式会社 技術第4部 主事研究員 森田 秀利
15:50~16:00	質疑応答

お問い合わせ:

アドバンスソフト株式会社 営業担当

Tel: 03-5570-1689 E-mail: office@advancesoft.jp URL: <http://www.advancesoft.jp>



アドバンスソフト技術セミナー
原子力における流体解析の現状と当社の取組み

原子炉熱流動解析

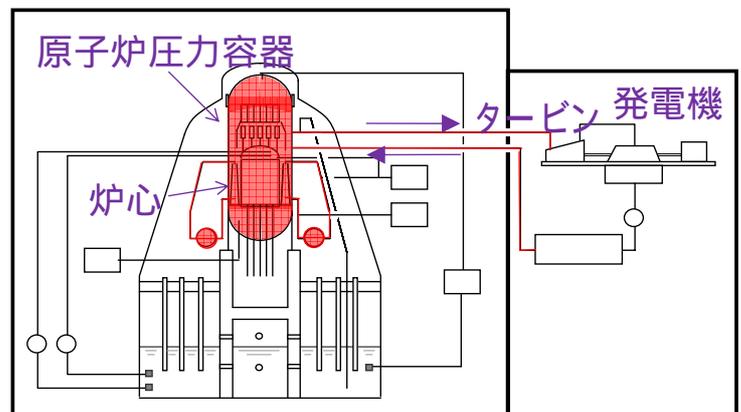
アドバンスソフト株式会社
技術第1部 主任研究員
浜野 明千宏

2.

原子炉熱流動解析

商業用原子炉の主流を占めている軽水炉は、燃料棒の核分裂エネルギーで軽水(水)を加熱して高温高压の水蒸気に変え、これでタービンを駆動させて発電している。

原子炉の健全性にとって、燃料棒の冷却性能が重要。原子炉の安全解析において、この軽水の熱的な流動の計算が重要。



冷却材喪失事故(LOCA^{*})

^{*} : Loss of Coolant Accident

- ・事故想定し、ECCS^{**}等の安全設備より健全性を確保

主な事象

- ・冷却材放出による減圧、炉内量減少
- ・炉心への注水(低圧炉心スプレイLPCS、低圧炉心注入系LPCI、高圧炉心スプレイHPCS)
- ・自動減圧系ADS、逃し安全弁SRV 減圧
- ・再循環ポンプトリップRPT 駆動停止
- ・原子炉スクラム 熱出力の停止
- ・燃料棒の出力(核分裂反応)は、ボイド率・温度等により変動

^{**} : Emergency Core Cooling System (非常用炉心冷却系)



3

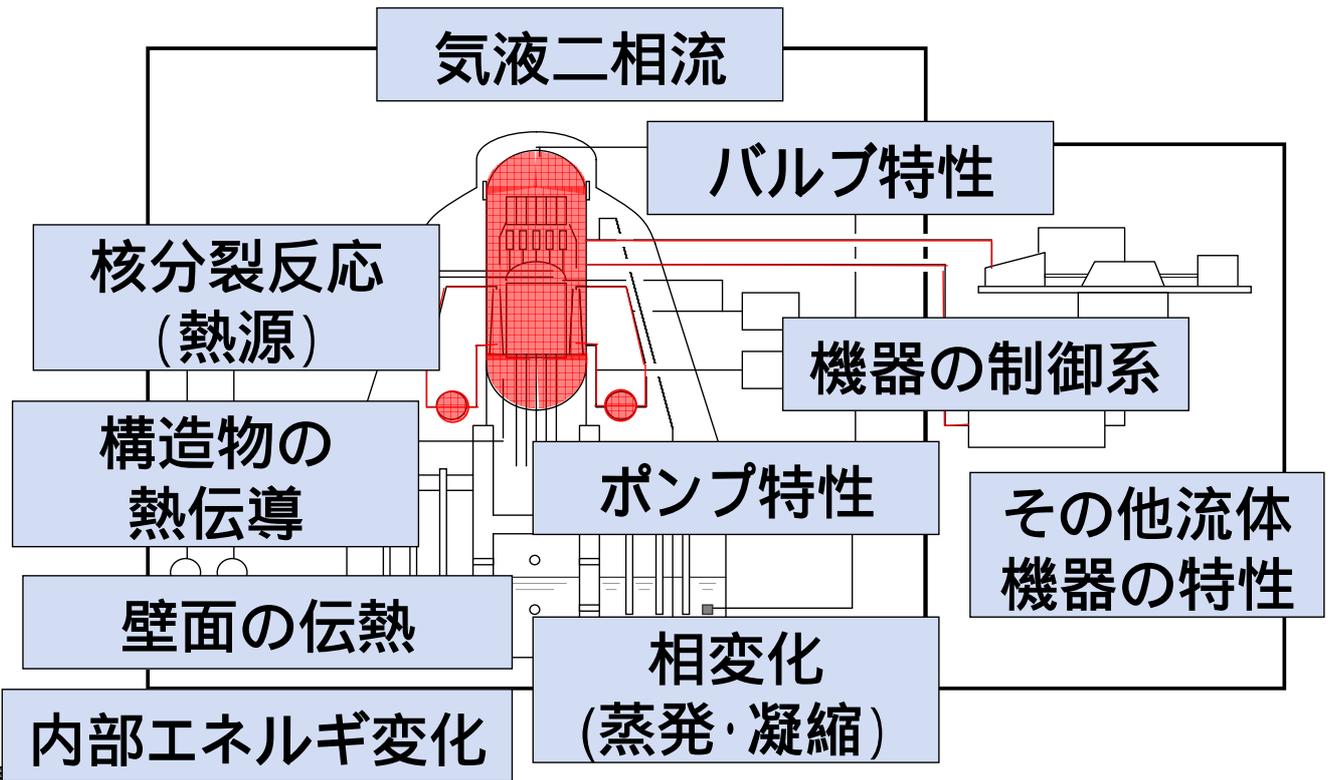
冷却材喪失事故(LOCA)

- ・出力アップ等の設計変更に対して、設計基準事故の安全評価項目として重要
- ・米国ではLOCA 時のECCS 性能評価に最適評価コードを使用した統計手法の使用が既に認められている。
- ・従来、大破断LOCA は保守性の高い条件で解析してきたが、過度な保守性を排除した条件で、プラント設計の安全余裕を定量的に評価することが重要になっている。



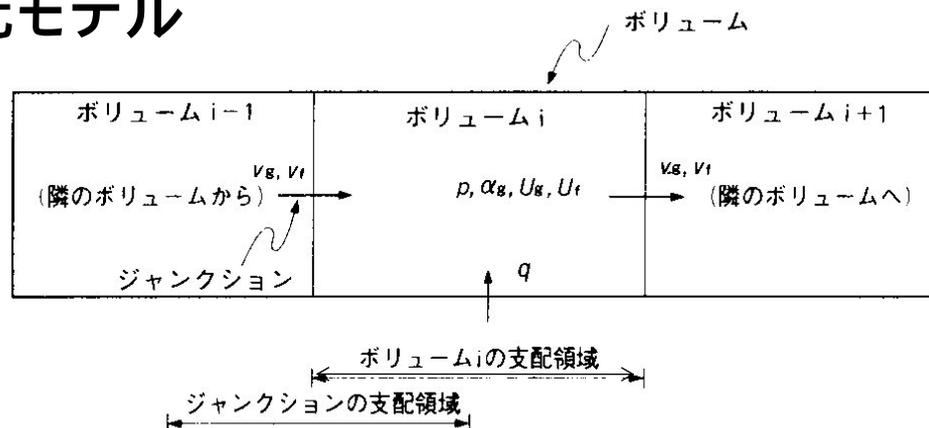
4

原子炉熱流動解析の主要要件



RELAP5

- BWR 及びPWR プラントの過渡・事故解析
- 開発元:INEL (アイダホ国立工学研究所)
- 二流体解析コード (気相と液相、相変化)
- 一次元モデル



RELAP5

RELAP5/MOD1 (1977)

- 基礎方程式(2V1.5T)
:2質量保存 + 2運動量保存 + 1エネルギー保存
- 非均質非平衡(二相部は片方飽和)
- 構成方程式:熱伝達式、流動様式を考慮した相関摩擦式、壁面摩擦式、相変化モデル

RELAP5/MOD2 (1983)

- 基礎方程式(2V2T)
:2質量保存 + 2運動量保存 + 2エネルギー保存
- 非均質非平衡
- 再冠水熱伝達、数値解法、ギャップコンダクタンスモデル、新たなコンポーネントモデル等

RELAP5/MOD3 (1995)

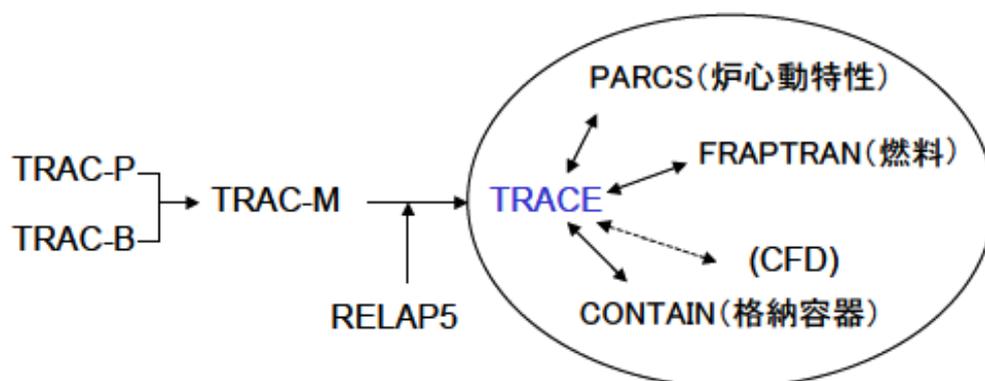
- 基礎方程式はMOD2 と同じ
- 解法はMOD2 より改良され、適用範囲が拡大されている(LOCA ~ 過渡事象)。



TRACE

米国NRCが開発したTRACコードとRELAPコードの機能を統合して作成した熱流動最適評価コード

TRACE; TRAC/RELAP Advanced Computational Engine



Version 4.00 ⇒ 4.05 ⇒ 4.160 [-----> 5.000]
1st release Present
Version ('05/5)



TRACEのモデル

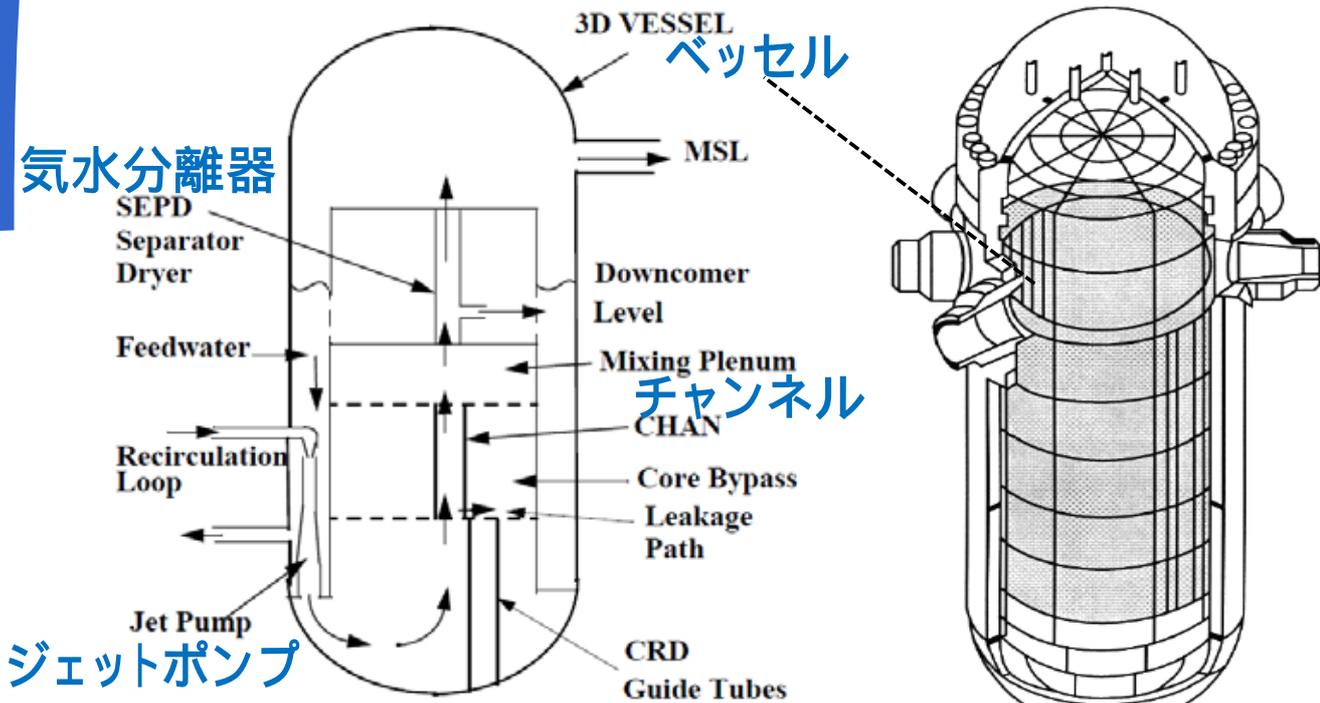


Figure. 1C "TRACE V5.0 THEORY MANUAL; Field Equations, Solution Methods, and Physical Models", 米NRC₁₁

業務実績例 1

1. プラントシステム解析

BWR冷却材喪失事故解析(RELAP5, TRACE)

PWR冷却材喪失事故解析(RELAP5, TRACE)

BWR燃料集合体燃料温度挙動解析(RELAP5)

OECD/ROSA試験解析(RELAP5, TRACE)

BWR : Boiling Water Reactor (沸騰水型原子炉)

PWR : Pressurized Water Reactor (加圧水型原子炉)



RELAP5によるBWR実機の解析例

初期条件

- ・ 原子炉出力 : 4,005MW (定格の102%)
- ・ 炉心流量 : 47,000t/h (定格流量の90%)
- ・ 原子炉压力容器ドーム部圧力 : 7.27MPa
- ・ 燃料棒最大線出力密度 : 44.0kW/m



13

RELAP5によるBWR実機の解析例

外部電源喪失 (想定の原因事象) (給水停止)
(負荷の喪失)

蒸気加減弁急速閉止 (圧力上昇)

タービンバイパス弁急開

インターナルポンプ全台トリップ (炉心への流量減少)

原子炉スクラム (燃料表面熱流束減少)

(圧力に応じ) 逃がし安全弁開、閉



14

解析結果

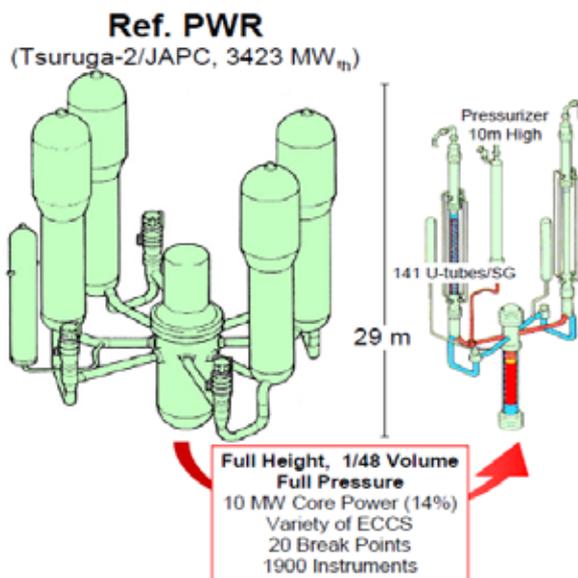
当日のセミナーにてご紹介いたします。



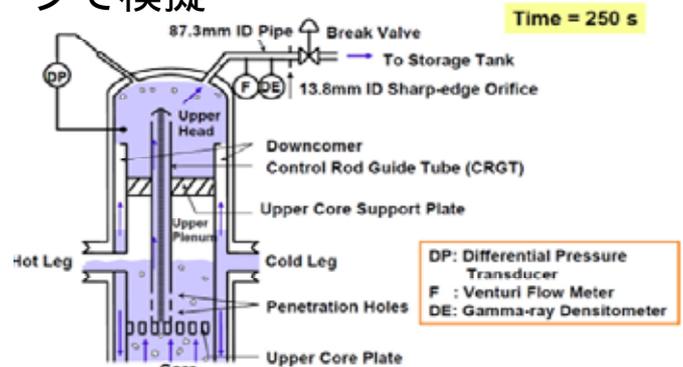
15

RELAP5による原子炉破断時の熱流動挙動 試験解析(OECD/ROSA試験)

JAEAのROSA 計画における大型非定常試験装置 (LSTF)



ウエスチングハウス社型の1100 MW 級
4ループPWR、同一の高さ、体積比 1 / 48、
2 ループで模擬



頂部破断試験の概要

ROSA/LSTF 試験装置の概要

原子炉頂部破断LOCA試験を
RELAP5/MOD3を用いて解析



出典: 「OECD/ROSA試験の解析評価 = 炉容器頂部破断LOCA試験解析 = 」 成果報告書, (独)原子力安全基盤機構

16

解析結果

当日のセミナーにてご紹介いたします。



17

業務実績例 2(三次元熱流動解析)

ECCS注入時温度成層流解析

ROSA/LSTFのECCS注入時温度成層化試験を対象に、
三次元熱流体解析コードFLUENTの検証解析を実施

原子炉発電施設火災伝播解析

三次元火災伝播解析コードFDSとネットワーク火災伝播解析コード
CFASTを統合し、検証解析を実施

発熱性溶液漏えい等の異常時再処理施設熱流動解析

再処理施設において崩壊熱による発熱放射性溶液がセル内に漏えいし
た事象の温度上昇過程の解析評価(三次元熱流体解析コード
PHOENICSを使用)

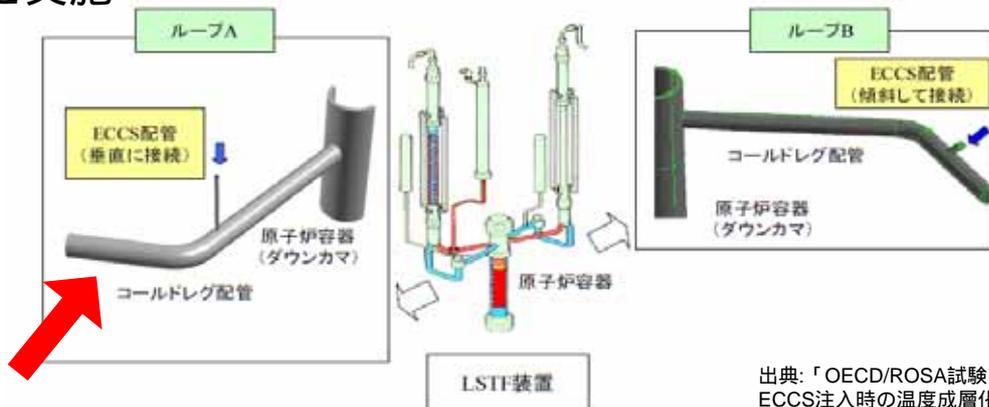


18

FLUENTによるECCS注入時温度成層流解析

JAEA（旧原研）のROSA 計画における大型非定常試験装置（LSTF）では、ECCS注入時の温度成層化試験を通して、高経年劣化対策の主要課題のひとつであるPTS(加圧衝撃)等の複雑現象を予測するための検証データを提供している。

ROSA/LSTFのECCS注入時温度成層化試験をFLUENTを用いて検証解析を実施



出典: 「OECD/ROSA試験の解析評価 = ECCS注入時の温度成層化試験解析 =」
成果報告書 (独) 原子力安全基盤機構殿



ROSA/LSTF 試験装置の概要

デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト

19

解析結果

当日のセミナーにてご紹介いたします。

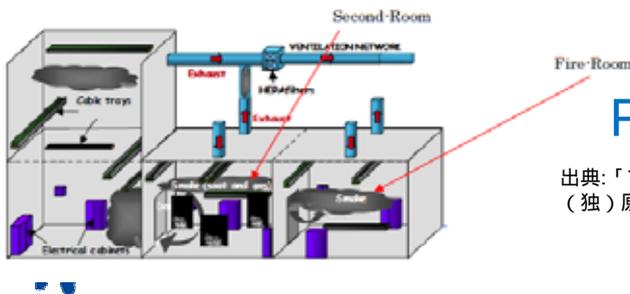
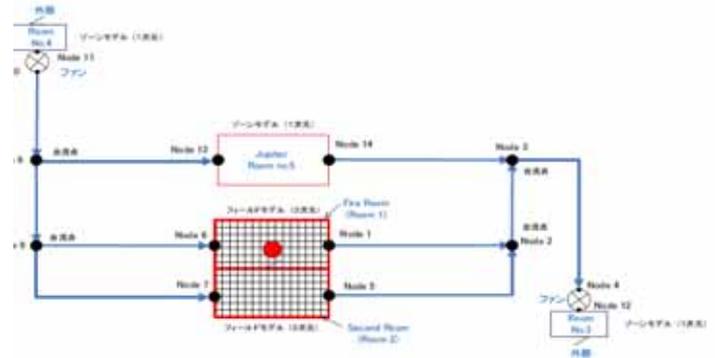
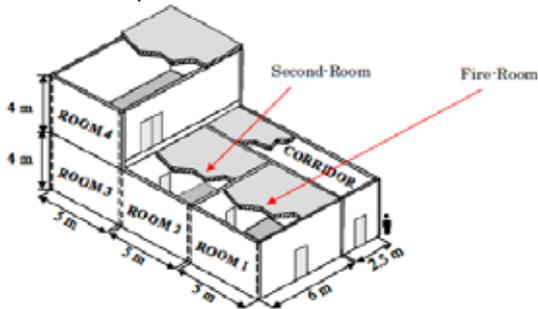


20

原子炉発電施設マルチルーム火災伝播解析

OECD/PRISME試験：複数の部屋からなる試験施設において、壁材質、換気風量、換気位置などを実プラントに近い条件にて火災と煙の伝播試験を実施。

$C_{12}H_{26}$ のプール火災時の火災伝播試験について、
三次元火災伝播解析コードFDS + ネットワーク/ゾーンモデル火災伝播解析コードCFAST(FDSをCFASTのサブルーチン化)により、検証解析を実施



PRISME 試験と解析モデル

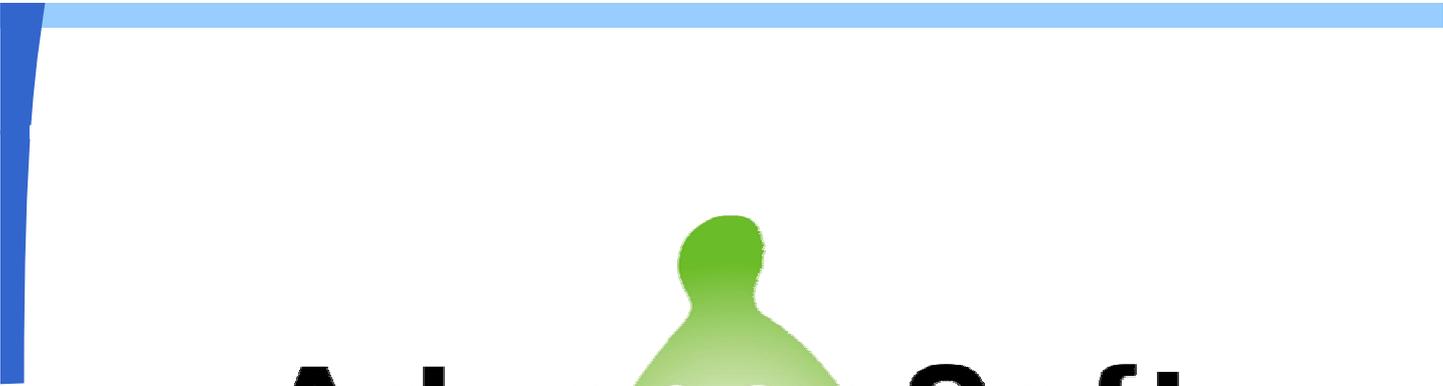
出典:「マルチルーム体系における火災伝播解析手法の整備」成果報告書
(独)原子力安全基盤機構殿

デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト

21

解析結果

当日のセミナーにてご紹介いたします。



Advance Soft



「デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト」





アドバンスソフト技術セミナー 原子力における流体解析の現状と当社の取組み

RELAP5コードによる蒸発器と凝縮器解析

アドバンスソフト株式会社
技術第4部 主任研究員
吉岡 逸夫

3.

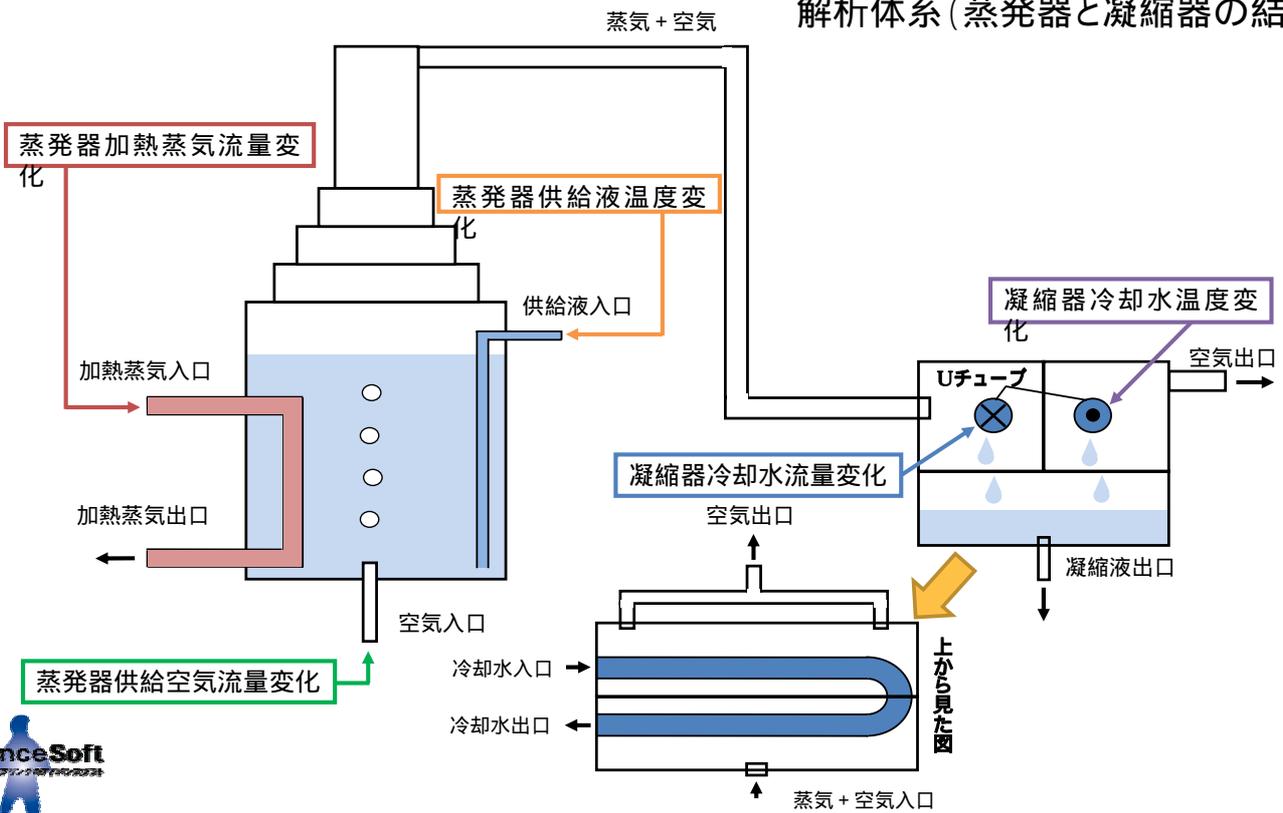
解析の概要

- 蒸発器と凝縮器のそれぞれ単体モデルを作成し、想定した運転条件で適切な解析結果が得られることを確認した。
- 各単体モデルを結合し、定常解析を行い適切な静定値が得られることを確認した。次に、この定常状態から、蒸発器加熱蒸気流量等のパラメータを変化させるかと解析を行い、妥当な応答が得られるか検討した。
- 解析は、常圧系と減圧系について行い、両者の結果を比較した。



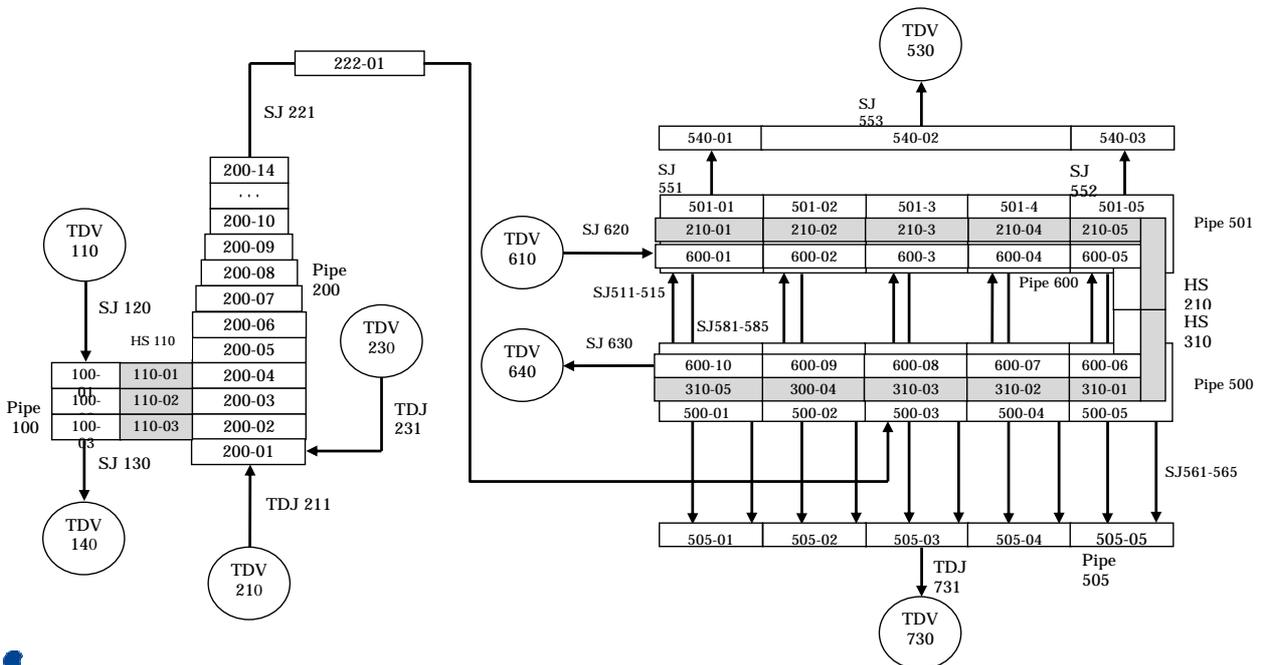
解析対象

解析体系 (蒸発器と凝縮器の結合)



解析モデル

RELAP5用ノード分割 (蒸発器と凝縮器の結合モデル)



解析条件：蒸発器に関して

分類	項目		仕様、条件
形状・寸法 運転条件	蒸発器シェル	形状	縦型円筒
		下部寸法	3.2m × 3.2mh
		上部寸法	1.9m × 6.0mh
	蒸発器 加熱蒸気管	配管外径	2.72m
		配管長さ	7.0m
		伝熱面積	59.8m ²
		材質	SUS304
	蒸発器内の条件 (定格運転)	圧力	101kPa (常圧系) 12.5kPa(減圧系)
		温度	100 (常圧系) 50 (減圧系)
		液位	2.74m
流入媒体の入口条件 (定格運転)	供給液	圧力	101kPa
		温度	40
		流量	3 m ³ /h
	空気	圧力	1.0MPa
		温度	50
		流量	2.8 Nm ³ /h
	加熱蒸気	温度	130



5

解析条件：凝縮器に関して

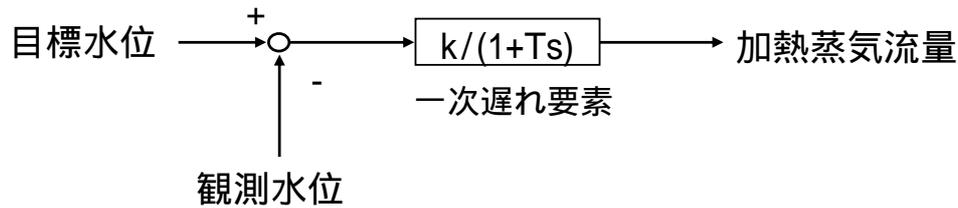
分類	項目		仕様、条件
形状・寸法 運転条件	凝縮器シェル	形状	横置き円筒形状
		円筒部寸法	1.5m × 6.0m!
	凝縮器 冷却水管	形状	横置きU字管
		配管外径	8.16m
		配管長さ	有効長 6.0m+6.0m
		伝熱面積	307.6m ²
	凝縮器内の条件 (定格運転)	圧力	101kPa (常圧系) 12.5kPa(減圧系)
			温度
		凝縮器からのオフガス	圧力
	流入媒体の 入口条件(定格運転)	温度	100 (常圧系) 12.5kPa(減圧系)
蒸気流量			3m ³ /h
空気流量		2.8 Nm ³ /h	
凝縮器への冷却水		圧力	1.0MPa
	温度	30	



6

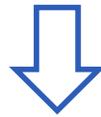
その他の解析条件

■ 蒸発器の液位制御



■ 制御変数

	ゲイン k	時定数 T
常圧系	50.0	30.0
減圧系	4.0	0.0



一次遅れ要素を導入することで水位の振動を抑制



Copyright © 2009 AdvanceSoft Corporation All Rights Reserved.

7

解析結果

当日のセミナーにてご紹介いたします。



8

結 論

- 軽水炉で実績のあるRELAP5コードを用いて、蒸発器、凝縮器及びその連性したプロセスを対象とした、熱流動解析を行い、その適用性を確認した。
- 蒸発器の加熱蒸気流量、凝縮器流入空気流量、蒸発器供給液温度、凝縮器冷却水流量、凝縮器冷却水温度に関するパラメータ解析を行い、定性的に妥当な結果が得られることを確認した。
- 対象となる機器は常圧運転、減圧運転の2パターンの解析を行い、減圧系では常圧系よりも振動的な結果となるものの、プロセスの全体挙動は解析可能であるといえる。



Advance Soft

「デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト」



配管破断時の超音速二相流解析*

湊 明彦
アドバンスソフト株式会社
第2事業部 主管研究員

*H. Utsuno, M. Akamatsu and T. Morii, H. Okada, A. Minato, "Application of Compressible Two-Fluid Model Code to Supersonic Two-Phase Jet Flow Analysis", The 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13), Paper#N13P1368, Kanazawa City, Ishikawa Prefecture, Japan, September 27-October 2, 2009.

背景:

軽水型原子炉冷却系の配管破断事故時に高温・高圧の冷却材が破断口から放出される。構造物へのジェット荷重の評価には、熱力学的な仮定とジェット形状の観察結果から導出された半経験式であるANSI/ANSモデルが用いられている。

本研究の内容:

機構論的な評価を目的とし、圧縮性二流体モデル解析コードを適用した。解析結果の妥当性は、ベンチマーク問題の解析と実験データとの比較で検証した。実機条件におけるジェット荷重の解析結果をANSI/ANSモデル及び原子力機構の実験式の評価値と比較した。

Basic Field Equations of Compressible Two-Fluid Model

- Mass conservation
$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k = \Gamma_{k',k} - \Gamma_{k,k'}$$
- Momentum conservation
$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k + \alpha_k \nabla P = \mathbf{F}_{ik} + \mathbf{F}_{vk} + \mathbf{F}_{wk} + \nabla \varepsilon_k \alpha_k \rho_k \nabla \cdot \mathbf{u}_k + \Gamma_{k',k} \mathbf{u}_{k'} - \Gamma_{k,k'} \mathbf{u}_k$$
- Energy conservation
$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k \left(e_k + \frac{u_k^2}{2} \right) + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k \left(h_k + \frac{u_k^2}{2} \right) \mathbf{u}_k = \Gamma_{k',k} \left(h_{k'} + \frac{u_{k'}^2}{2} \right) - \Gamma_{k,k'} \left(h_k + \frac{u_k^2}{2} \right)$$

t: Time(s) , *u*: Velocity(m/s) , *P*: Pressure(Pa) , *F*: Force per unit volume (N/m³) ,
e: energy (J/kg) , *h*: Enthalpy (J/kg) , *α*: Volumetric fraction , *ρ*: Density(kg/m³) ,
ε: Momentum diffusivity(m²/s) , *Γ*: Phase change rate (kg/m³s)
(suffix) *k*: phase(gas/liquid) , *i*: interface , *v*: added mass , *w*: wall friction

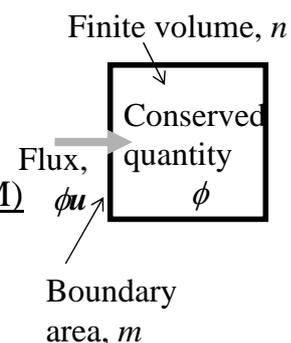
Numerical Method (Finite volume method)

- Generalized transport equation

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_k + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{u}_k) = b_k$$

- Discretization by Finite Volume Method (FVM)

$$C_n \frac{d}{dt} \langle \phi_k \rangle_n + \sum_m (A_{nm} \phi_{k,nm} u_{k,nm}) = C_n \langle b_k \rangle_n$$



- Time integration by Euler Method

$$\langle \phi_k(t + \Delta t) \rangle_n = \langle \phi_k(t) \rangle_n + \frac{d \langle \phi_k(t) \rangle_n}{dt} \times \Delta t$$

φ: conserved quantity , *b*: source , *C*: finite volume capacity , *A*: boundary area ,
Δt: time step (suffix) *n*: finite volume number , *m*: boundary area number

Compressible Fluid Calculation

Compressible Single-phase theory

Riemann invariant

$$\Delta u \pm \frac{1}{\rho a} \Delta P = 0 \quad \text{along lines of characteristics}$$

a: sound speed (m/s)

Solution by method of characteristics

$$u_{i+1/2} = \frac{1}{2}(u_i + u_{i+1}) + \frac{1}{2\rho a}(P_i - P_{i+1})$$

$$P_{i+1/2} = \frac{1}{2}(P_i + P_{i+1}) + \frac{\rho a}{2}(u_i - u_{i+1})$$

Extension to two-phase flow*

u Volumetric velocity of two-phase mixture, j

$$j = \alpha_g u_g + \alpha_l u_l$$

a Sound speed in two-phase mixture, $a_{2\phi}$

*Minato, A., "Numerical Analysis of Gas-Liquid Two-Phase Flow by Using Compressible Two-Fluid Model," Kikai-Gakkai-Ronbunshu (JSME Journal), Ser. B, 68[673], pp. 2489-2495 (2002) (in Japanese)

Constitutive Relationships

Interface friction (Andersen's model*)

$$F_{ik} = \alpha_g \alpha_l \frac{g(\rho_l - \rho_g) |u_k - u_{k'}|}{\bar{V}_{gj}^2} (u_k - u_{k'})$$

Phase change rate

$$\text{Evaporation} \quad \Gamma_{l,g} = \rho_m \frac{x_{eq} - x}{\tau} \quad \text{for } x < x_{eq}$$

$$\text{Condensation} \quad \Gamma_{g,l} = \rho_m \frac{x - x_{eq}}{\tau} \quad \text{for } x > x_{eq}$$

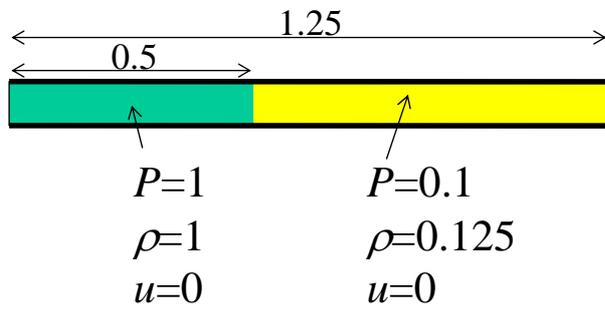
\bar{V}_{gj} : drift velocity, x : quality, τ : time constant of evaporation

*Andersen, J.G.M., "Interface Shear Model of Two-Fluid Model," Transactions of American Nuclear Society, 41, pp.669-671 (1982)

Benchmark Problem

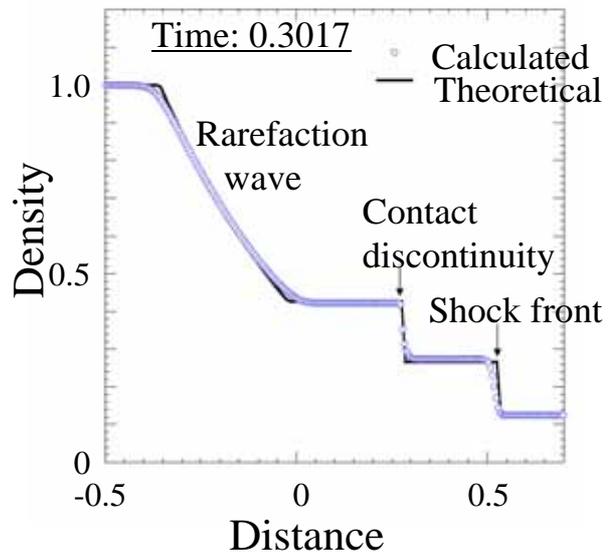
(Sod's shock tube)

Initial state



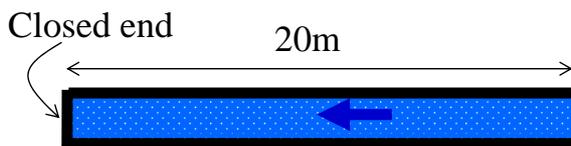
Time step : $\Delta t = 1.0 \times 10^{-3}$

Number of finite volumes: 200



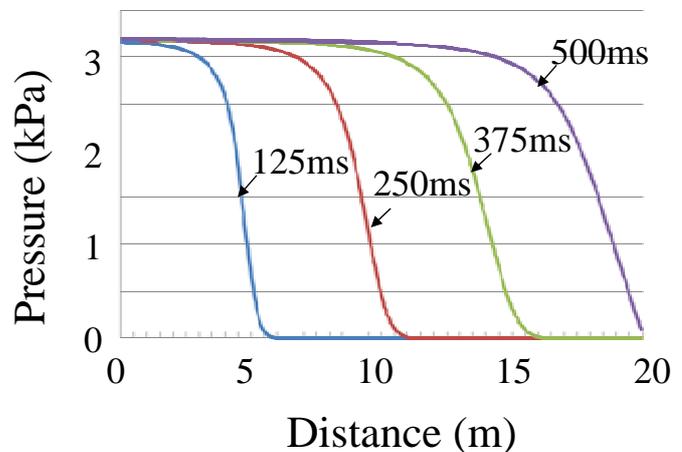
Benchmark Problem

(Hydraulic hammer in two-phase flow)



Uniform air-water mixture

Air-water
 Void fraction 10%
 Velocity 0.1m/s

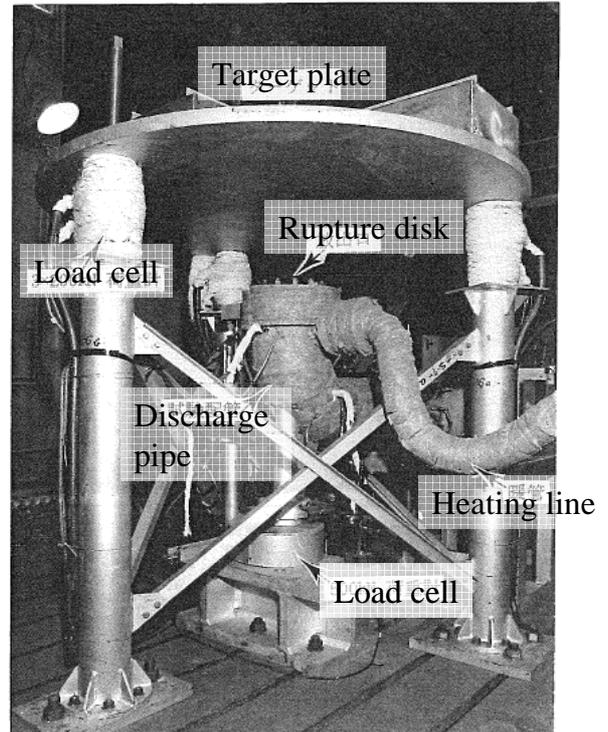
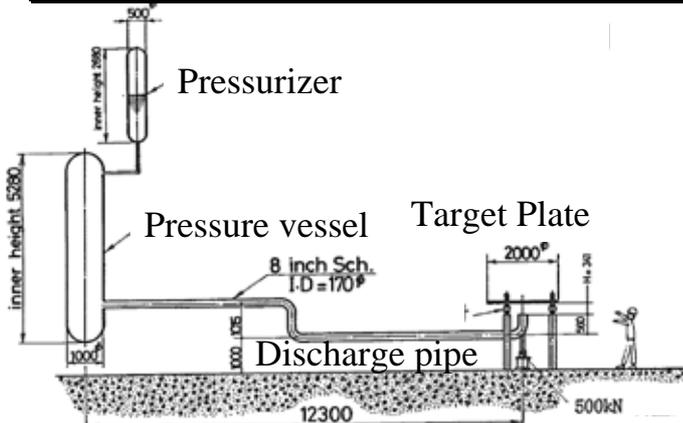


	Theoretical	Calculated
Wave propagation velocity (m/s)	35.3	36.4
Pressure rise (kPa)	3.18	3.20

Two-Phase Jet Experimental Facility of JAERI*

Experimental conditions

Reactor type		BWR	PWR
Water	Pressure (MPa)	6.8	15.5
	Temperature ()	285	325
Pipe diameter, D (mm)		90-190	
Distance to target, H/D		1, 2, 5, 18	



*Isozaki, T., Miyazono, S., "Experimental Study of Jet Discharge Test Results under BWR/PWR Loss of Coolant Accident Conditions," Nucl. Eng. Design, 96, pp.1-9 (1988)

解析結果

当日のセミナーにてご紹介いたします。

結 言

- (1) 圧縮性二流体モデル解析プログラムをSod衝撃波管及び二相流水撃のベンチマーク問題の解析により検証した。ジェット荷重圧力分布の解析結果は原子力機構の実験式とよく一致した。
- (2) BWR及びPWR条件における破断口からの自由ジェットを解析した。二流体モデルによるジェット荷重評価はANSI/ANSモデル及び原子力機構の実験式の評価値と同程度であった。
- (3) ジェット圧力分布およびその影響半径に関する二流体モデルANSI/ANSモデル及び原子力機構の実験式による評価は相互に類似した結果を得た。異なる手法の評価結果が一致したことは、これらの評価が妥当かつ信頼性のあることを示す。



「デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト」



アドバンスソフト技術セミナー 原子力における流体解析の現状と当社の取組み

中性子による物質の構造解析

アドバンスソフト株式会社
技術第4部 主事研究員
森田 秀利

5.

背景

- 規則構造をもつ物質

結晶

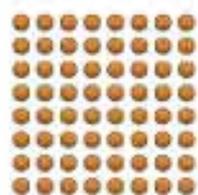
- 複雑構造

不規則構造

- アモルファス

規則構造と不規則構造の混在

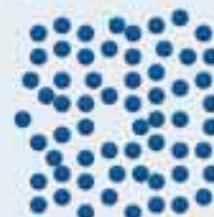
ミクロの構造を知ることによって材料開発に応用



(規則構造)



(規則構造と不規則構造の混在)



(不規則構造)

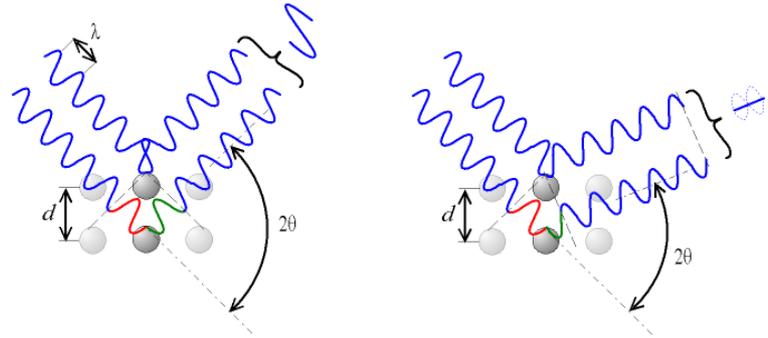
複雑構造



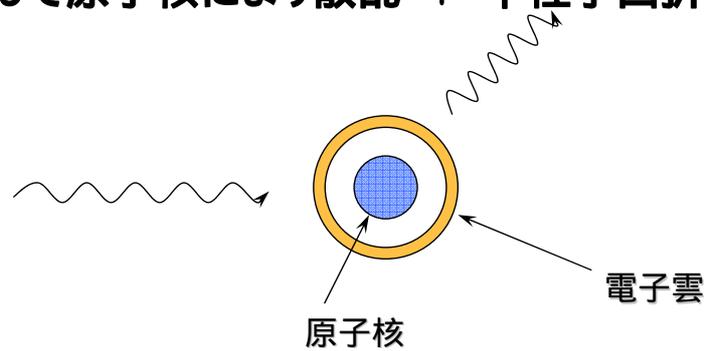
X線回折、中性子回折法による構造解析

- **ブラッグの回折条件**

$$2d\sin\theta = n$$



- X線を入射して電子により散乱： X線回折
- 中性子を入射して原子核により散乱： 中性子回折



実験施設

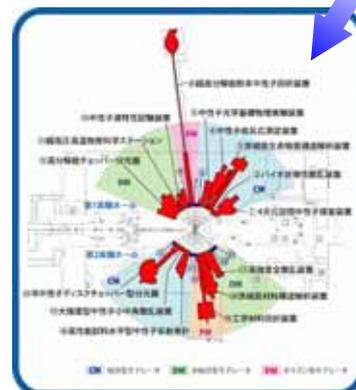
- X線回折実験
Spring-8
兵庫県播磨

<http://www.spring8.or.jp/>

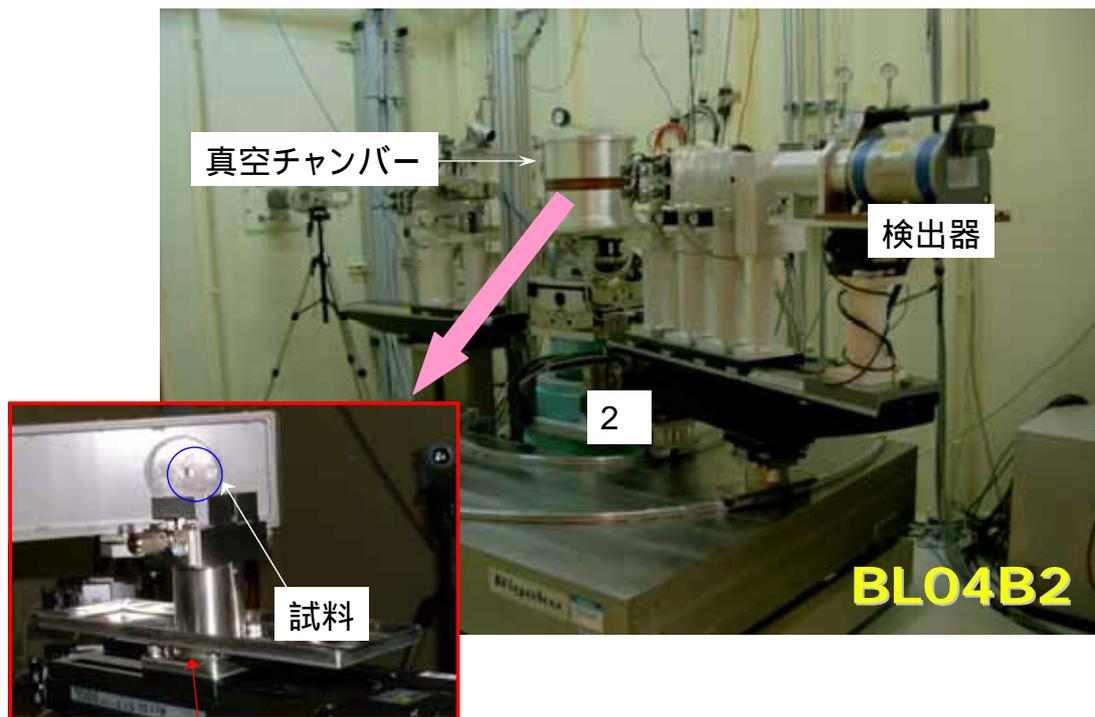


- 中性子回折実験
J-PARC
茨城県東海

<http://j-parc.jp/>



Spring8実験装置[1]

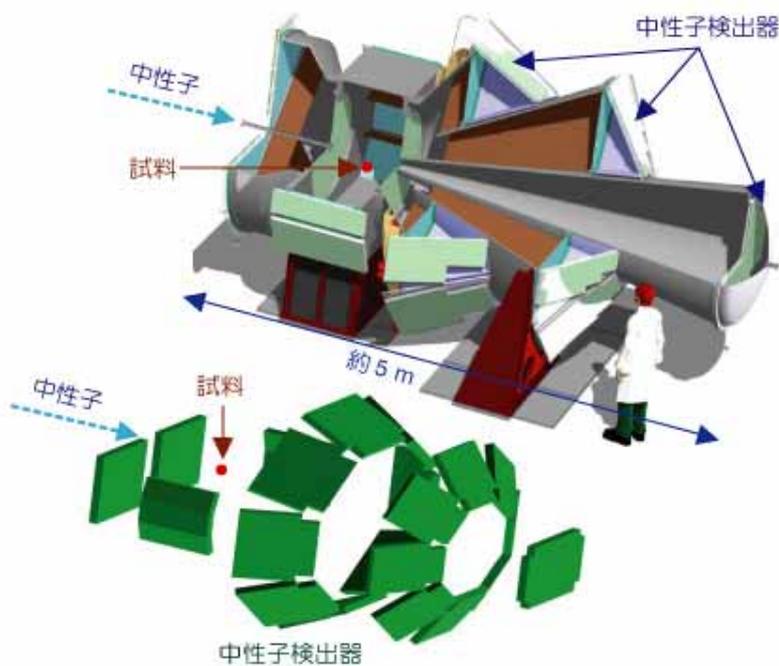


試料ホルダー

[1] S. Kohara et al., *Nucl. Instr. and Meth. A* **467-468**, 1030 (2002).;
S. Kohara et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 506101 (2007).

5

中性子回折実験装置(NOVA) [2]



NOVAの構造概念と中性子検出器の立体配置 (最大約14m²)

[2] 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 HYDRO STAR NEWS Vol.2 2008. 秋



6

X線回折と中性子回折の特徴

■ X線回折

散乱振幅は原子番号に比例

H, Li, C, Oなどの軽元素は重元素との測定

■ 中性子回折

電氣的に中性なのでクーロン力を受けない

原子番号とは無関係

H, Li, C, Oなどの軽元素も測定可能

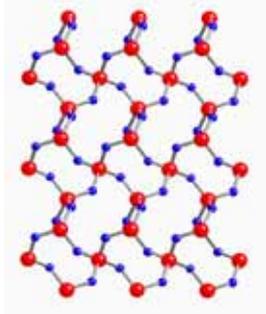


水素吸蔵合金中の水素の配置を研究に有利

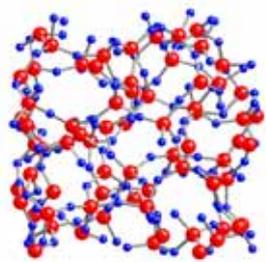


7

非晶質物質の乱れた構造

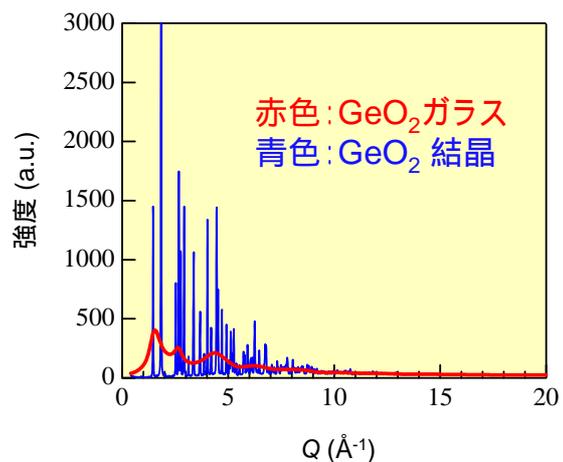


原子が規則正しく
配列している



原子の配置は無秩序!?

X線回折パターン



$$Q = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$

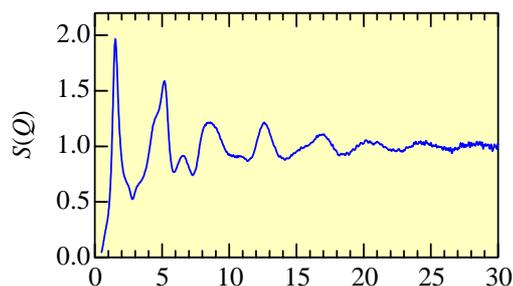
Q: 波数ベクトル
2θ: 回折角
λ: X線の波長



8

データ解析

実験データから構造因子 $S(Q)$ を求める



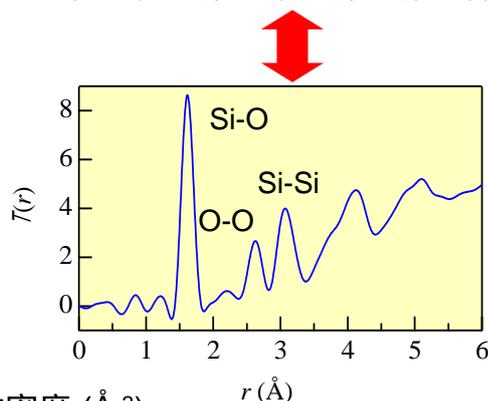
構造因子 $S(Q)$ をフーリエ変換することにより
全相関関数 $T(r)$ が得られる

$$T(r) = 4\pi\rho r + \frac{2}{\pi} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ$$

$$Q = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$

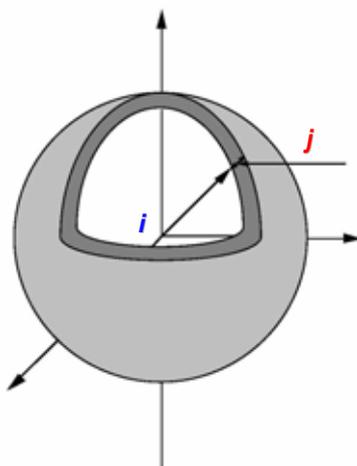
Q: 波数ベクトル
2 θ : 回折角
 λ : X線の波長

ρ : 原子数密度 (\AA^{-3})



2体分布関数 $g(r)$

- 2体分布関数 $g(r)$ は、あるひとつの原子が原点にあるときに、距離 r だけ離れたところにもうひとつの原子を見いだす確率

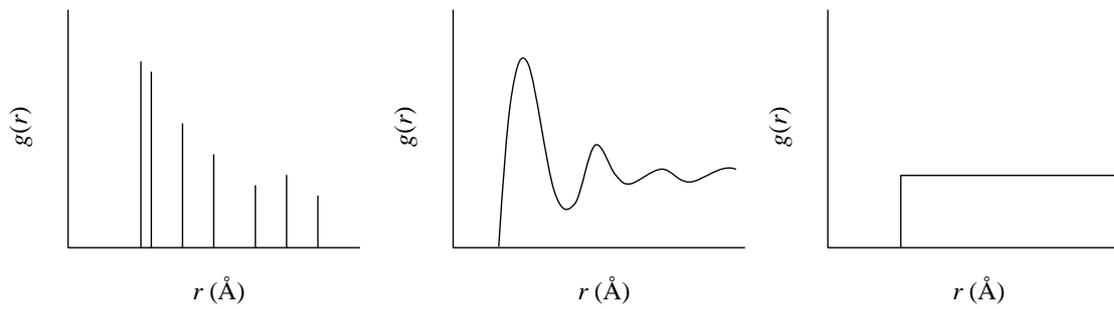


全相関関数 $T(r) = 4\pi\rho r g(r)$

ρ : 原子数密度



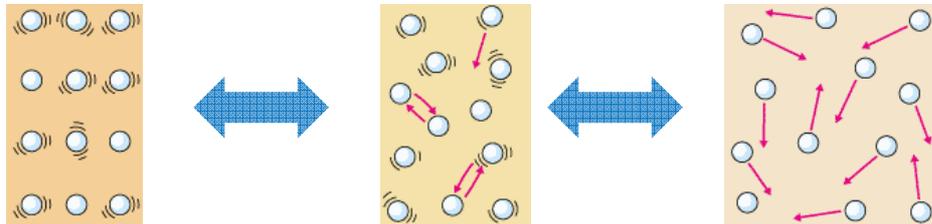
構造変化による2体分布関数 $g(r)$



結晶

液体

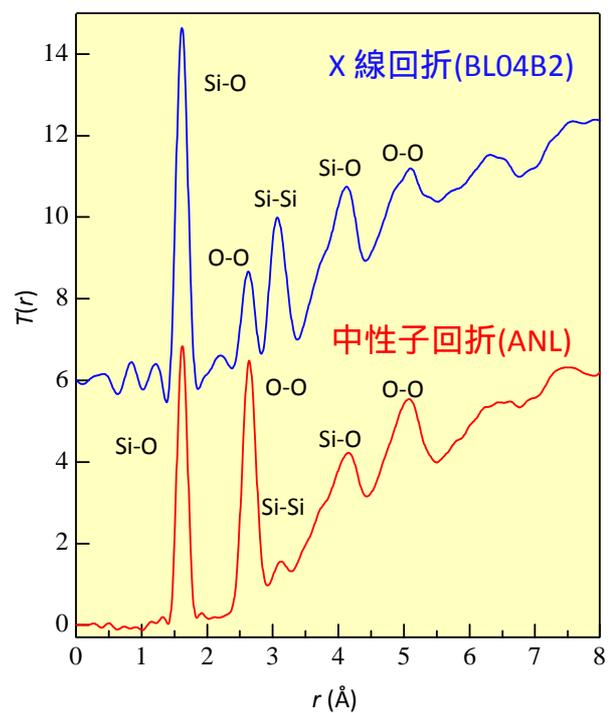
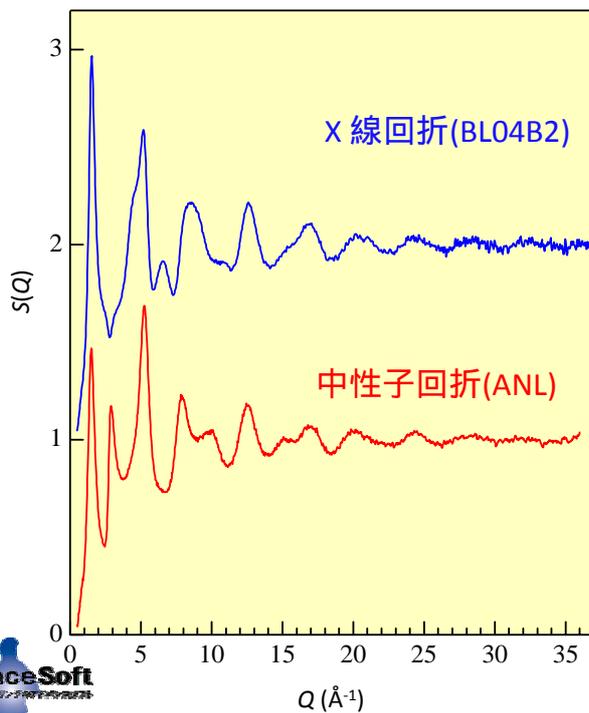
気体



石英ガラス(SiO_2)の構造因子、全相関関数

構造因子 $s(Q)$

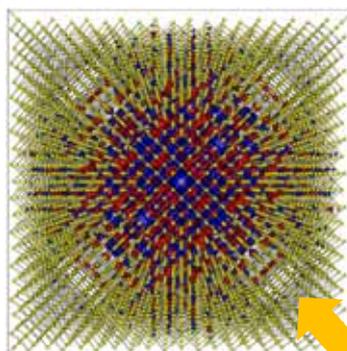
全相関関数 $T(r)$



コンピュータシミュレーション

- **結晶構造、アモルファス**

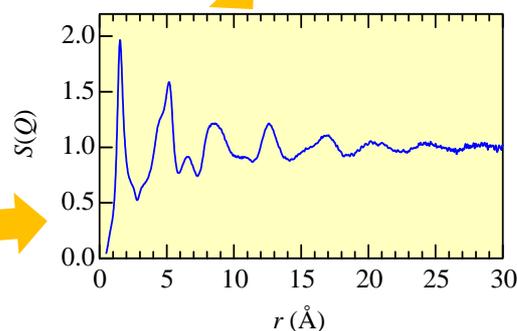
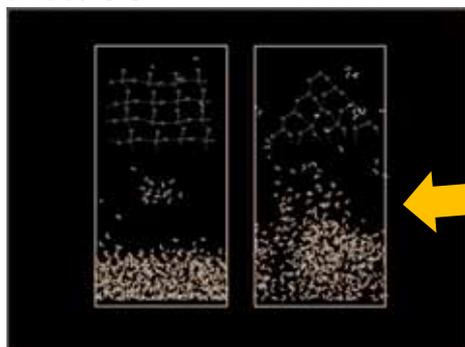
第一原理計算
Advance/PHASE



ヒ素をドーブしたシリコン結晶(Si₇₉₉₉As)
(地球シミュレータによる計算)

- **有機分子**

分子動力学法
Advance/OCTA



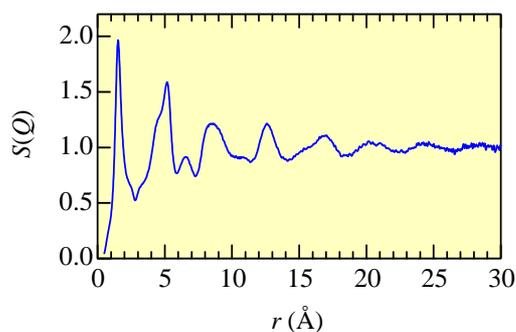
13

コンピュータシミュレーション(2)

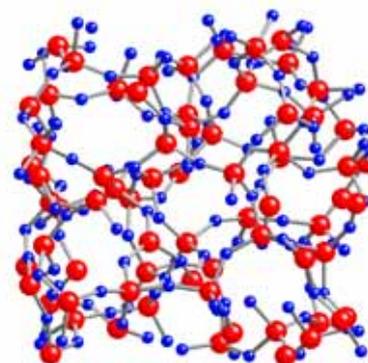
- **実験結果から3次元構造を再現**



- **逆モンテカルロ法(RMC: Reverse Monte Carlo)**



RMC
←
MD
FPMD



実験データを再現するように原子数密度を満たしたシミュレーションボックス内の粒子を乱数で動かす

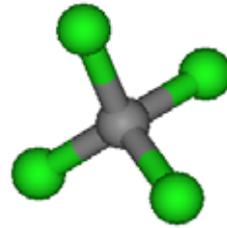


14

RMC法

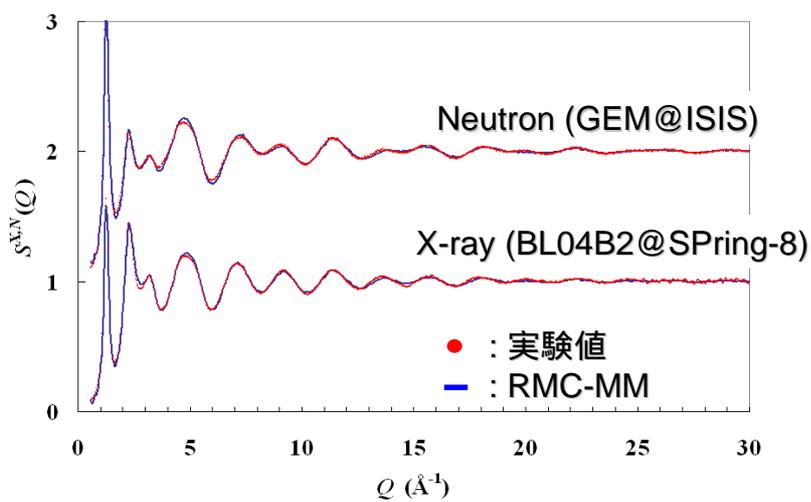
- RMCA Original Program
 - 角度
 - 配位数
 - RMC++
 - RMC-MM
- 分子にも対応できるように改良

四塩化炭素

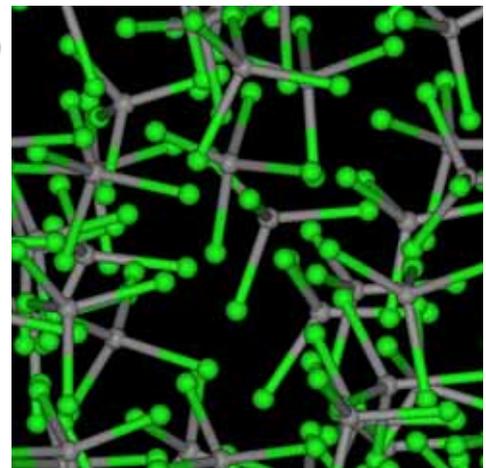


15

計算結果



スナップショット



16

まとめ

- 水素吸蔵合金、Liイオン電池などこれからのエネルギーに
関与する材料を解析可能。
- シミュレーションを組み合わせることでさらに材料開発が進
歩する。



17

AdvanceSoft

「デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト」



18