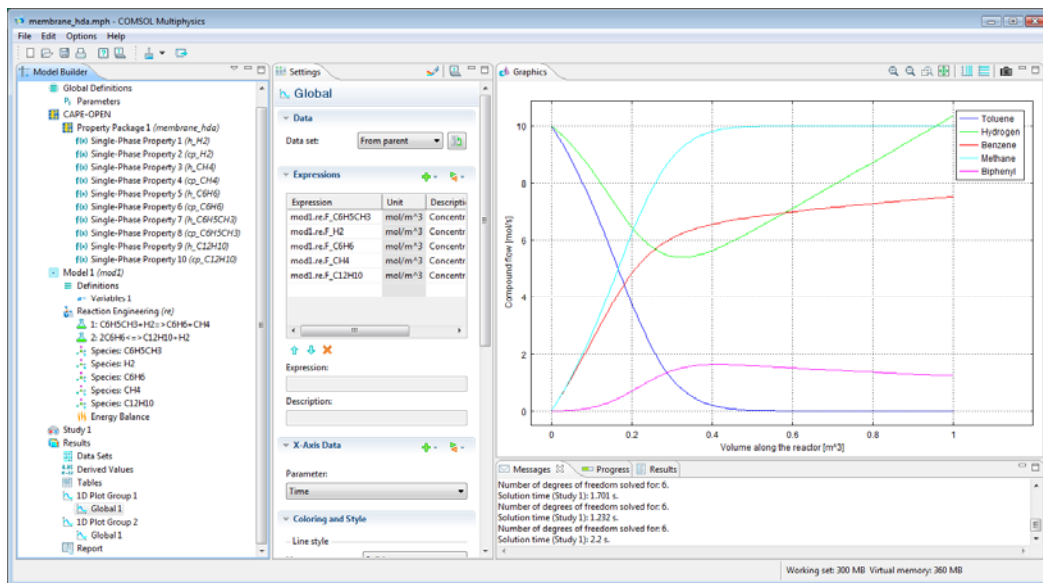


COMSOL, Inc.  
 1 New England Executive Park, Ste 350  
 Burlington, MA 01803 USA01803 USA  
 電話: +1 781-273-3322  
 FAX: +1 781-273-6603  
 Web サイト: [www.comsol.com](http://www.comsol.com)

日本国内総代理店:  
 計測エンジニアリングシステム株式会社  
 東京都千代田区内神田 1-9-5 井門内神田ビル 5 階  
 代表取締役社長 岡田 求  
 URL: <http://www.kesco.co.jp>  
 Mail: [comsol@kesco.co.jp](mailto:comsol@kesco.co.jp)  
 TEL : 03-5282-7040 FAX: 03-5282-0808

編集用注記: 下の画像は、高解像度のファイルを次のサイトからダウンロードできます。  
<http://www.comsol.com/press/imagegallery.php>



化学反応工学モジュールは、反応系のシミュレーションにおける使い勝手を向上させます。CAPE-OPEN のサポートにより、複数のサードパーティ製ソフトウェアで得られた熱力学的特性データを COMSOL シミュレーションに結合できます。上の図は、薄膜反応器におけるヒドロアルキル化プロセスのシミュレーション結果を示しています。

## 化学反応工学モジュールを発表

COMSOL Multiphysics の新モジュールは、反応系および反応プロセスのモデリングとシミュレーションの統合環境を提供します。

マサチューセッツ州バーリントン発 (2010/6/18) – 市場をリードする COMSOL Multiphysics シミュレーション環境の開発社として知られる COMSOL 社は、化学反応工学モジュールの発売開始を本日発表しました。この新モジュールは COMSOL Multiphysics のプラットフォーム上に構築され、技術者や科学者は多彩な化学的性質の組み合わせ、異なる運用条件の下に物質の輸送および化学反応に関する精度の高い研究を行える統合環境を手に入れることができます。バイオテクノロジーにおけるマイクロリアクターから化学プロセスにおけるユニットオペレーションに至るまで、ユーザーは幅広い反応系をシミュレーションし、必須の情報を開発の早い段階で獲得することが可能になります。総合的成果として、費用対効果の高い効率的な開発サイクルが製品/プロセスの両面で実現されています。

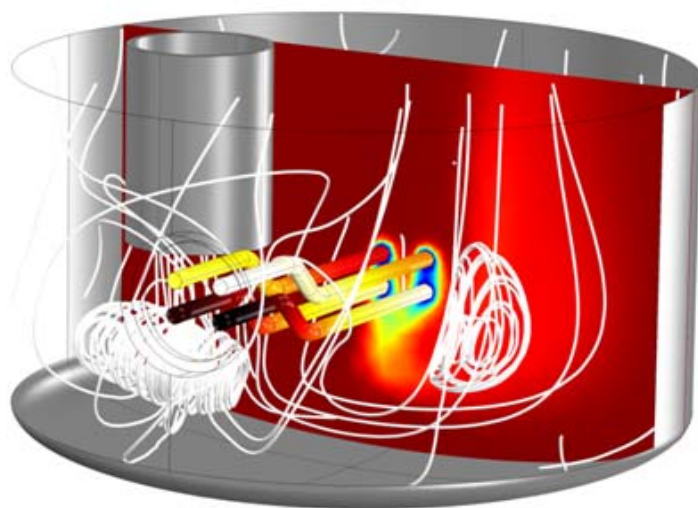
「化学反応工学モジュールは、きわめて広範囲な製品開発ならびにプロセス開発の応用分野に適合しています。」COMSOL 社の化学工学製品部長ヘンリック・フォン・シュネク氏はこのように語ります。「本モジュールは解析機器におけるセンサーの設計、自動車の排気系における触媒やフィルター的设计などで特に威力を発揮します。」化学反応工学モジュールは民生品、ファインケミカル、特殊化学製品、調合薬、バルクケミカルなどの分野における製品やプロセスの開発に特に有用です。

化学反応工学モジュールでは、既存の 2 つのモジュール(化学工学モジュール、反応工学モジュール)の機能が統合されています。新たにデザインされた COMSOL バージョン 4 のアーキテクチャを活用することにより、新たな主要機能の数々、ならびに卓越したユーザビリティが提供されています。エンジニアや科学者は、この新モジュールによって研究室段階の管理条件下での化学反応として完全混合系の解析を行うことができます。操作しやすい単一のインターフェースから直接、化学反応にアクセスできるので、実際の運用条件下で見られる複数濃度や温度変化の影響について研究できます。

「化学工学に関する弊社の卓越したポテンシャルを一つに融合し、専用ソリューションとして提供することにより、使い易い包括的環境が実現されました。これは多くの顧客ニーズに大きく貢献するでしょう。」フォン・シュネク氏はこのように言います。「新たなワークフローでは、ユーザーは化学種、反応、物質輸送、エネルギー輸送などを 1 つのシミュレーションの中で管理できるため、生産性が飛躍的に向上します。」

### 化学反応、質量輸送、エネルギー輸送、および多孔質流れのカスタムインターフェース

使い易くカスタマイズ可能な化学反応工学モジュールのインターフェースにより、化学反応、質量輸送、エネルギー輸送、および多孔質流れを定義して正確に反応系をシミュレートできます。化学反応インターフェースは COMSOL Multiphysics モデルの設定に完全に統合されており、ユーザーは単純に入力するだけで化学反応式を指定できます。入力に従って反応速度が計算され、質量およびエネルギーの収支が決定されます。計算が終了したのち、得られた質量およびエネルギーの収支を用いて、バッチ反応器、セミバッチ反応器、CSTR、およびプラグフロー反応器における完全混合系の反応器モデルの計算を行うことができます。



図はボイラーの発熱体からの炭酸カルシウム  $\text{CaCO}_3$  の除去の様子を示します(化学反応工学モジュールで作成)

ユーザーは、計算機的能力が要求されないこうした比較的小規模な完全混合から、時間依存および空間依存モデルの大規模シミュレーションへ簡単に移行できます。「化学反応工学モジュールでは、理想的な反応器モデルと詳細な時間的/空間的シミュレーションを比較することにより、設計の決断を迅速かつ適切に行うことができます。」フォン・シュネク氏はこのように説明しています。「このように、単純なレベルからシミュレーションを開始できるので、反応系の化学的性質の解析が容易になり、反応の時間スケール、温度、および理想的な運用条件をみつけることができます。次に、同じモデルを用いて完全な三次元シミュレーションを実行し、実際の運用条件下でのプロセスおよび反応器の解析・設計に用いることができます。

化学反応工学モジュールには、低濃度および高濃度の溶液における拡散、対流、および泳動による化学種の輸送を記述する質量輸送インターフェースが提供されています。また、これらのインターフェースでは通常の流体と多孔質流れの両方における輸送を記述できます。また、COMSOL Multiphysics の標準インターフェースに提供される主要な物理効果に基づき、層流および熱伝達をシミュレーションに組み込むことができます。どのような物理効果が関係する場合でも、直感的な共通の操作で素早く設定を行なうことが可能です。さらに、化学反応および化学種を追加/削除したり、オンザフライ方式で反応機構を変更できます。ユーザーは同じモデルに関して、化学的性質や運用環境がそれぞれ異なる複数の研究を維持管理できます。

### **COMSOL Multiphysics への熱力学特性データのインポート**

化学反応工学モジュールは、化学プロセス操作のモデリング、シミュレーション、および設計に関し、CAPE-OPEN 標準に適合しています。さらに、反応系を完全に記述する CHEMKIN<sup>®</sup> のファイルを読み込むことができます。CHEMKIN<sup>®</sup> のファイルには燃焼、大気圏の化学的性質、およびその他の気体相反応系のシミュレーションに必要な物理的特性、熱力学的特性などの情報が含まれます。

化学反応工学モジュールの CAPE-OPEN 内蔵ウィザードにより、ユーザーは複数のサードパーティソフトウェアベンダーから提供される複数のコンポーネントを COMSOL シミュレーションに結合できます。CAPE-OPEN 統合ブラウザにより、外付けの特性データパッケージに含まれる熱力学的特性および物理的特性に関する情報を簡単に見つけたり選択することができます。オープン性とユーザビリティを柔軟に組み合わせることにより、ユーザーは粘度、密度、熱容量、および気体・液体のその他の熱力学的特性を高いレベルで記述することができます。

### **化学反応工学モジュールの特徴**

- 化学反応の動力学、質量収支、エネルギー収支を化学反応式から自動的に生成。
- 1つのモデルの中で完全混合反応器モデルと、詳細な時間依存、空間依存の記述を組み合わせることで用いることが可能。
- 多彩なインターフェース。低濃度および高濃度の溶液における質量輸送(拡散、対流、泳動)をシミュレート可能。さらに、通常の流体と多孔質流れの両方を記述可能。
- 1つのモデル内の複数の解析において各種効果(反応、化学種、質量輸送)を追加/削除することにより、化学的性質や運用条件の違いについて解析を行うことができる機能性。
- 連続容積および容量可変シミュレーションに使用可能な既定定義の反応器タイプ。バッチ反応器、セミバッチ反応器、CSTR、プラグフロー反応器など。
- ユーザー定義の機能および表現によりユーザビリティを拡張。例えば、任意の反応の動力学を定義し、組成および温度の関数として記述するなど。
- CAPE-OPEN インターフェース。サードパーティ製の化学工学シミュレーションソフトウェアに接続することにより、熱力学的特性および物理的特性の迅速な計算が可能になります。

- CHEMKIN ファイルのインポート。燃焼、大気圏の化学的性質、およびその他の気相反応系に対応します。

## 購入について

化学反応工学モジュールは、Windows、Linux、Macintosh の各オペレーティングシステムで使用できます。化学反応工学モジュールは、COMSOL Multiphysics の Ver4.0a とあわせて出荷が開始されます。

現行の化学工学モジュールのライセンスサブスクリプションを所有するユーザーは、化学反応工学モジュール+COMSOL CFD モジュールへのワンタイムアップグレードを追加費用なしで利用できます。新製品「化学反応工学モジュール」の詳細については、[www.comsol.com](http://www.comsol.com) を参照してください。

## COMSOL Multiphysics について

COMSOL Multiphysics は、物理現象を基本とするシステムのモデリングとシミュレーションに使用するソフトウェア環境です。最大の特色は、無制限の組み合わせによるマルチフィジックス現象の取り扱いが可能なことです。オプションのモジュールでは、音響、バッテリー & 燃料電池、化学反応工学、地質環境、電磁気学、CFD、伝熱、MEMS、プラズマ、および構造解析の分野別ツールが追加されています。

## COMSOL について

COMSOL 社は 1986 年に創業されました。日本国内では、計測エンジニアリングシステム株式会社が総輸入販売元となります。米国では、マサチューセッツ州バーリントン、カリフォルニア州ロサンゼルス、カリフォルニア州パロアルトを拠点とします。同社の海外での活動は、ベネルクス諸国、デンマーク、フィンランド、フランス、ドイツ、インド、イタリア、ノルウェー、スウェーデン、スイス、英国と、成長を遂げてきました。その他の会社情報については、[www.comsol.com](http://www.comsol.com) を参照してください。日本国内においては、[www.kesco.co.jp](http://www.kesco.co.jp) を参照してください。

*COMSOL* および *COMSOL Multiphysics* は、*COMSOL AB* 社の登録商標です。 *Capture the Concept*、*COMSOL Desktop*、および *LiveLink* は、*COMSOL AB* 社の登録商標です。

*CHEMKIN* は、*Reaction Design* の登録商標です。

その他の製品またはブランド名は、各所有者の商標または登録商標です。