



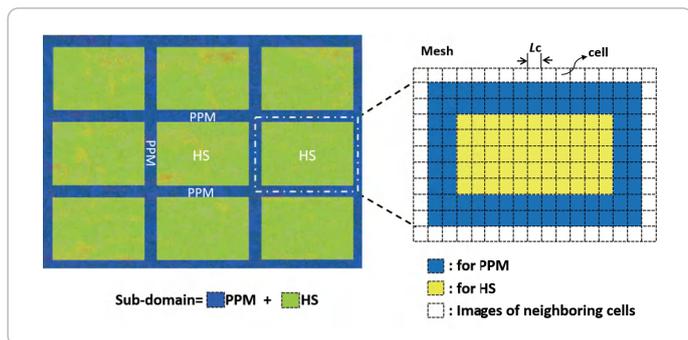
Pseudo-particle Modeling PPM+

PPM+ 大规模分子体系反应-传递拟颗粒模拟软件

PPM+是由中国科学院过程工程研究所研发的基于拟颗粒模拟(Pseudo-particle modeling, PPM)框架的高效大规模分子动力学模拟软件,面向过程工业和航空航天等领域的反应-扩散-流动-传热多尺度多过程耦合模拟,填补宏、微观模拟方法适用尺度间的断层。

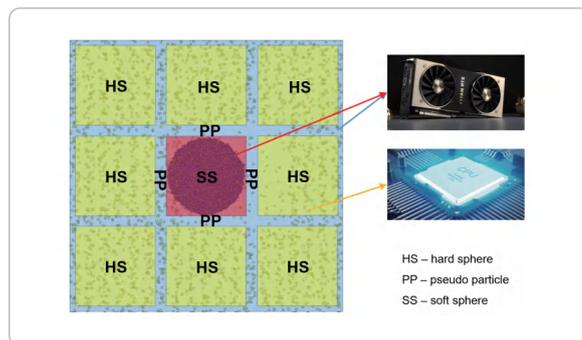
软件特色

针对气固反应体系，PPM+解决了传统分子动力学软球 (Soft sphere, SS) 模型效率低下，而硬球 (Hard sphere, HS) 模型难以并行的问题，并根据化学反应碰撞理论建立反应模块，形成了模拟计算效率高、可扩展性好的耦合模拟方法，可进一步耦合SS, SPH, DEM等离散模拟方法和CFD等网格方法，广泛应用于多孔催化剂/吸附剂反应过程模拟及孔道调优、飞行器气动分析、气液两相雾化等多相复杂反应-传递耦合问题模拟中。



HS-PPM耦合模拟方法

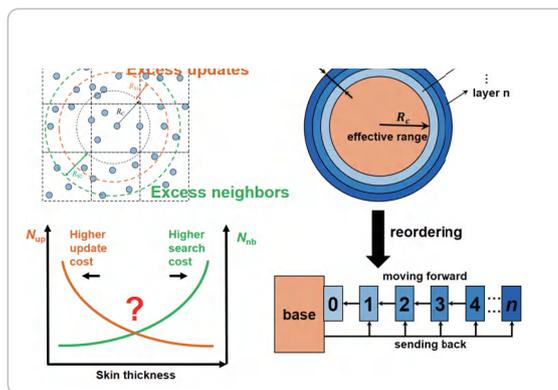
[Zhang et al., Molecular Simulation 42: 1171-1182, 2016.]



SS-PP-HS多尺度耦合模拟

高效算法

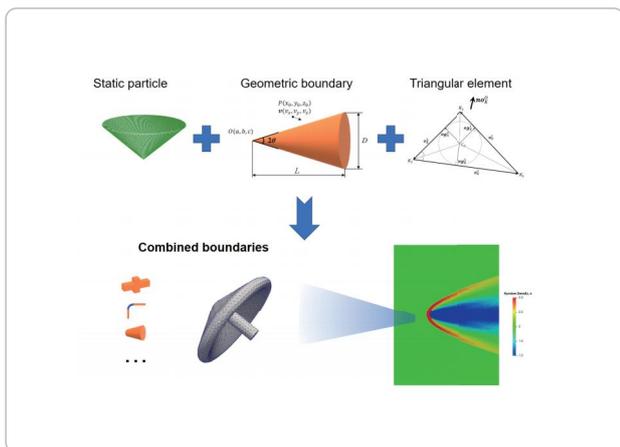
- PPM+采用了事件驱动和时间驱动耦合算法、多壳层邻居列表法、重叠链检测法等加速模拟，大规模并行模拟效率比经典分子动力学模拟提高3-5个数量级。
- 适配Intel CPU、ARM架构下多种国产CPU、NVIDIA GPU以及FPGA等平台，支持进程级+线程级+向量化单元的大规模多级并行异构计算。
- 采用网格列表建立并行化、数据重排、分支结构优化以及计算通讯隐藏等多种并行加速方法。
- 高效耦合了微观和宏观、离散和连续、粒子和网格等方法，跨越宏、微观模拟的断层，可以实现从原子级至毫米级规模体系统一的分子模拟。



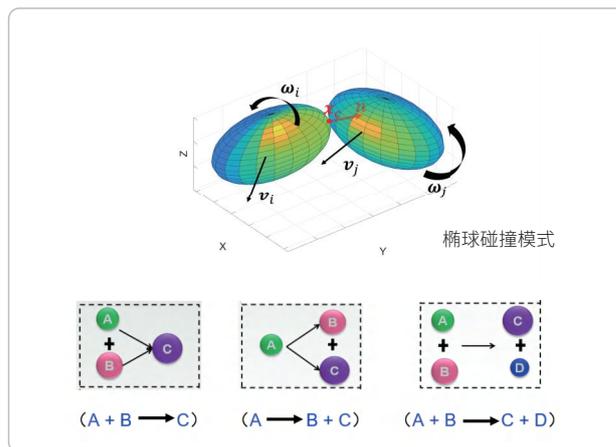
PPM+采用的高效算法及并行优化方法

功能特色

- 支持组合三角面元 (STL)、典型几何结构、堆积固定颗粒等多种方式构建复杂边界。
- 支持多种边界条件，包括：周期性边界、壁面、压力边界、出入口浓度和流速边界、PID控制的零梯度隐式边界条件等。
- 支持椭圆颗粒碰撞模式。
- 支持Larsen-Borgnakke能量转化模型、Maxwell散射模型等。
- 支持化合、分解、置换、复分解等多种反应类型；支持Langmuir-Hinshlwood, Eley-Rideal等吸附、脱附模型。
- 支持用户自定义模块接口，构造所需碰撞模型和边界条件。



复杂边界条件



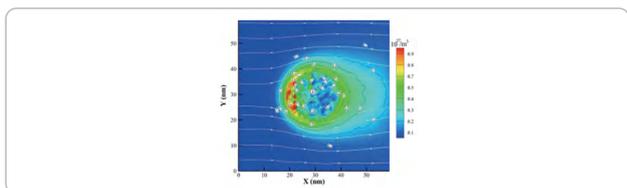
多种化学反应类型

典型应用

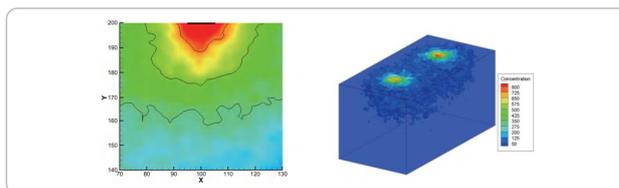
化工等过程工业

PPM+软件可应用于化工等过程工业的研究,包括:

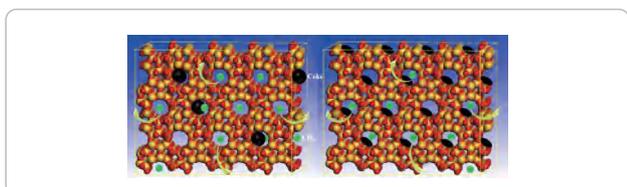
- ◎ 气固多相催化反应-扩散-流动耦合过程模拟分析
- ◎ 催化剂孔道内反应-传递耦合过程模拟及结构优化设计
- ◎ 吸附剂内吸附-扩散耦合过程模拟及结构优化设计
- ◎ 扩散-吸附-反应耦合机制和调控规律研究;



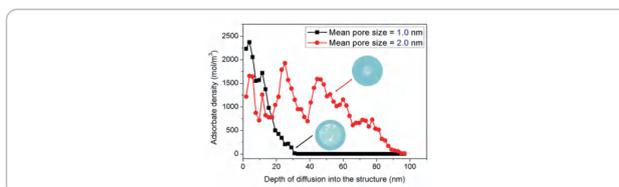
催化剂颗粒内外反应-扩散-流动耦合模拟



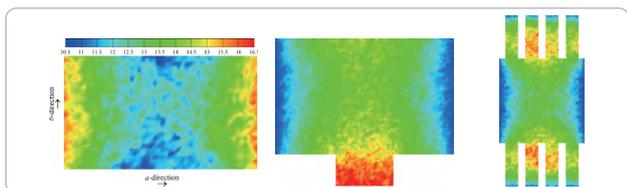
催化剂活性位点附近反应-扩散耦合模拟



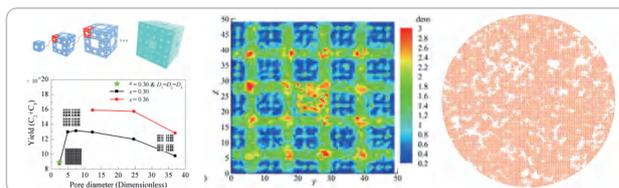
催化剂积碳失活机理和模式研究



吸附剂孔道结构优化设计



简单孔道单元结构优化设计

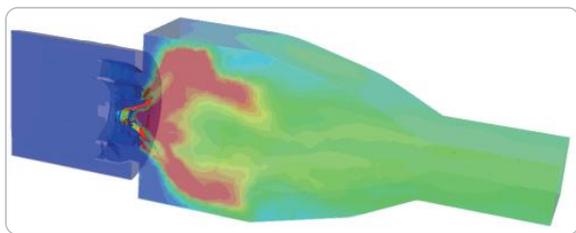


催化剂复杂孔道结构优化设计

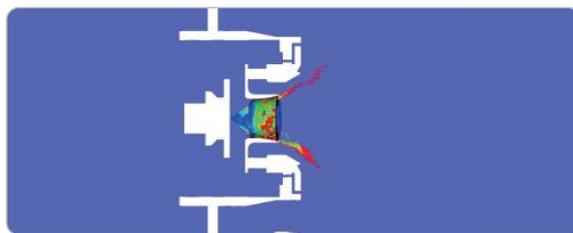
航空工程

PPM+软件具有多相流的高效高精度数值模拟功能,可应用于航空发动机设计研究,包括:

- ◎ 发动机内部多相流动过程模拟
- ◎ 典型雾化动态结构模拟
- ◎ 燃油雾化性能评估和预测

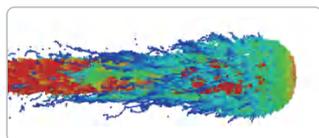


发动机燃烧室

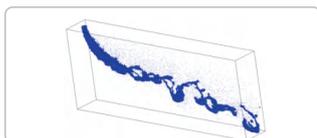


雾化器

射流雾化

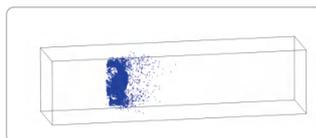


直喷雾化

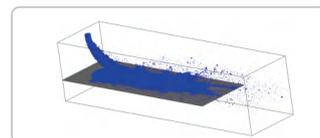


横流雾化

二次雾化



液滴破碎

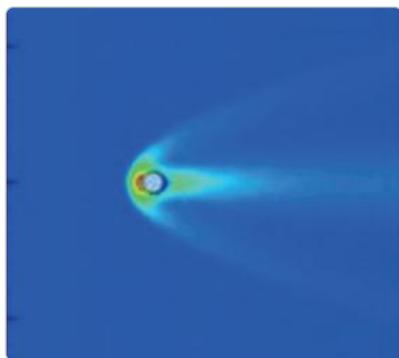


壁面油膜雾化

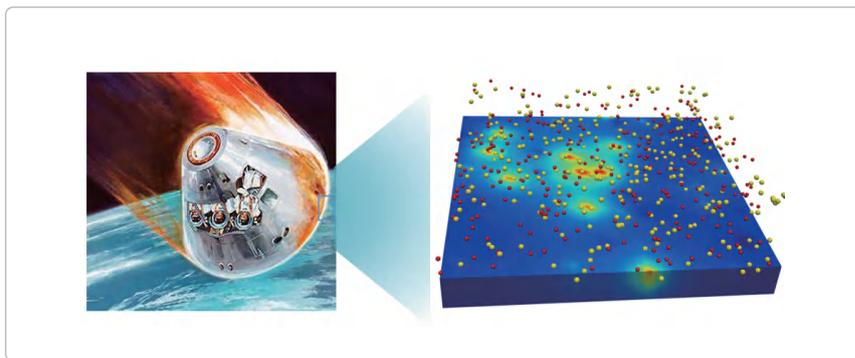
航天工程

PPM+能够模拟气体的流动和扩散、气固表面的催化复合反应以及气动加热等过程,为宇宙飞船、升空探测器等高超声速飞行器热防护研究提供理论模型和基础参数,可应用于:

- ◎ 高超声速飞行器近壁反应流模拟
- ◎ 高超声速飞行器热防护材料研制
- ◎ 高超声速飞行器热防护系统的设计、优化和性能评估



高速条件下圆球绕流模拟



高超声速飞行器近壁面反应流模拟

