

<化学反応プロセス特化型シミュレータのご説明>

AEOLUS による化学反応プロセス計算のカスタマイズコンセプト

内容

はじめに 必要となる計算モジュール

1. CIP 法の特徴と弊社の実績について
2. CIP コードAEOLUS(弊社開発)ベースの熱流体解析コード
3. ニュートン力学による分子動力学計算コード
4. ツールの段階的な展開のご提案

Advanced Algorithm & Systems

はじめに 必要となる計算モジュール

ここでは、反応プロセス解析を実施するために必要であると考えられる種々の計算について、項目別の計算モジュールに分けて概要を示します。今回のような化学反応を含む流体では、本体となる熱流体計算に加えて、化学反応プロセス計算を行うためのモジュールが必要となります。

(1) 熱流体計算

- ・各計算モジュールの本体となる計算です。
 - ・以下の化学反応計算モジュール群と組み合わせることによって、反応プロセスの詳細な挙動解析が可能となります。
 - ・「1.」、「2.」の CIP 法及び AEOLUS の説明の項で詳細を記します。
- 【実績】** ガス燃焼、衛星大気圏再突入など

(2) 化学反応計算

- ・化学反応に伴う反応熱や反応過程を量子力学計算より算出します。
- 【実績】** 燃料電池の安定性評価など

(3) 反応速度論計算

- ・化学反応計算より求めた反応率を用いて 0 次元の反応速度論計算を行い、濃度変動や温度変動に関する流体側との連成解析を行います。
- 【実績】** 原子炉材料の照射欠陥の生成消滅過程計算

(4) 分子動力学 (MD) 計算

- ・化学反応計算より生成される物質を MD 計算することで、生成物の輸送係数をマトリックス的に算出し、データベース化して流体側から参照します。
 - ・「3. ニュートン力学による分子動力学計算コード」の項で詳細を記します。
- 【実績】** 燃料電池材中の原子拡散、フラーレンの格子振動など

(5) 容器腐食反応計算

- ・まず、容器との反応を、温度・圧力・濃度の関数としてスポット的に計算し、系全体の課題を抽出します。
- ・次の展開として、マトリックス的にデータベース化することで、流体側から参照できるようにします。

1. CIP 法の特徴と弊社の実績について

— CIP 法の特徴 *1 —

CIP 法は、物理量とその空間微分を 3 次補間式で近似し、移流操作を行う。更に、圧力方程式を用いて物理量の補正を行う分離解法である。以下に主な特徴を示す。

< 一般的特徴 >

- ・ 数値拡散が少ない ⇒ 物理量の界面をシャープに捉える。
- ・ メッシュ数が少なくてもよい ⇒ 計算コスト抑える。
- ・ 圧縮・非圧縮の統一解法 ⇒ 固・液・気の相変化を伴う系を同一アルゴリズムで解くことが可能。
- ・ 物理量の伝播方程式を解く方法 ⇒ 電磁場解析などに応用可能。

< 従来法と改良点 >

燃焼に代表される変動の激しい場の解析を行うとき、従来の方法では計算が破綻する。或いは、計算コストがかかる。これに対し、弊社は CIP-GCUP 法 (AEOLUS) を開発した。本法は、状態方程式を満たすように流体場を解く。これにより、解は自然に熱力学的関係を満たし、数値安定性を確保できるようになった。

< 実績例 >

CIP-GCUP 法を採用し、ガス燃焼や宇宙往還機大気圏再突入の問題に対して、現象に応じた解析を行った実績がある。

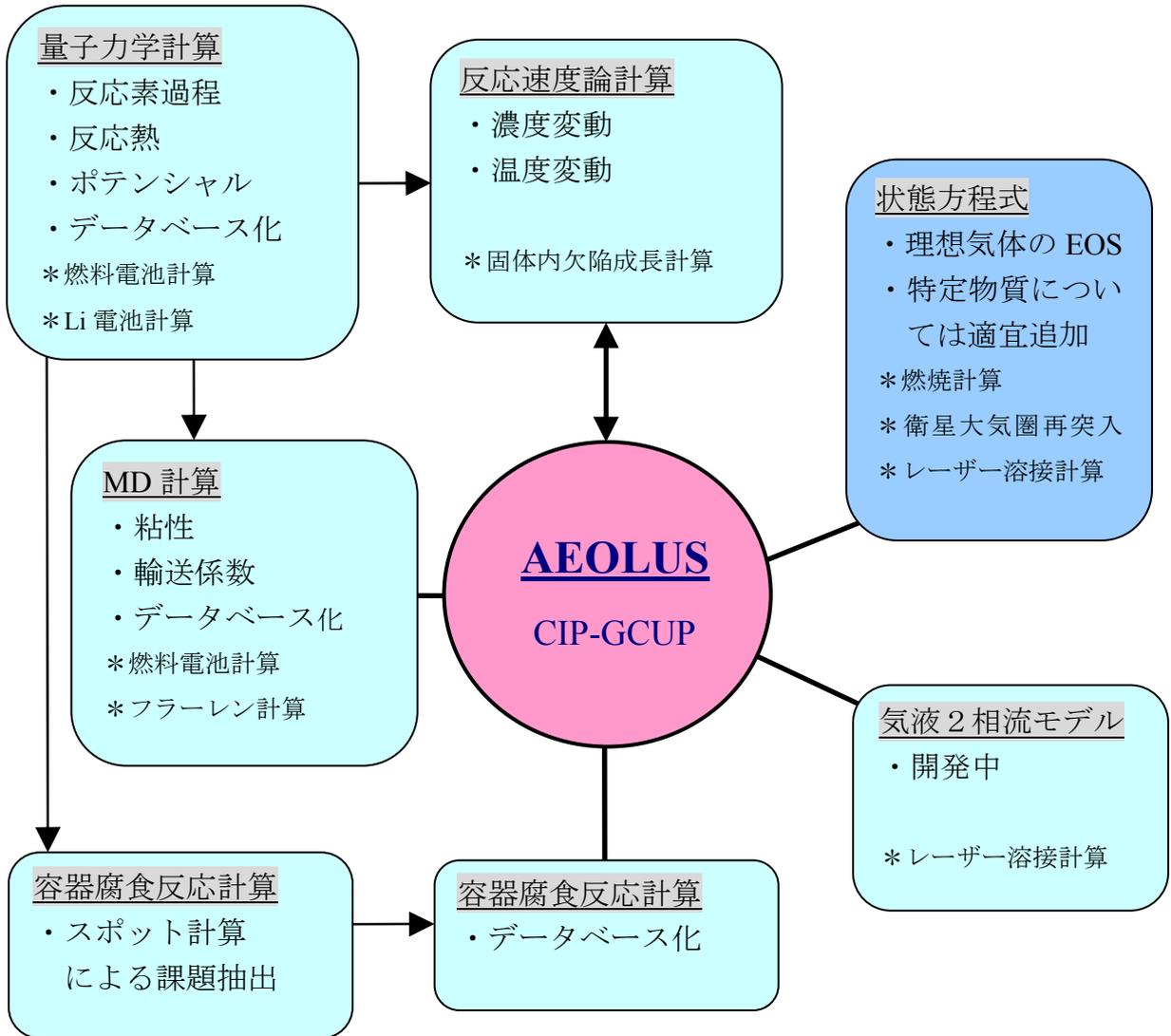
また、表の B, C, D に対し、CIP 法が展開を図れる分野だと認識している。

	単相・単純	→	多相・複雑
低 速 流	A ・ 非圧縮性乱流 ・ 熱対流 ・ 物質拡散		C ・ 気液 2 相流 ・ 燃焼解析 ・ MHD、磁性流体、ERF などの機能性流体现象 ・ 粉体流 (極性流体モデル)
↓			
高 速 流	B ・ 圧縮性乱流 ・ 高速飛翔体 ・ 高速鉄道		D ・ レーザー加工・溶接 ・ 爆縮 (レーザー核融合) ・ ジェットエンジン ・ 爆発・爆轟 ・ プラズマ

*1 : CIP+CUP 法を CIP 法と呼ぶことにします。

2. CIP コード AEOLUS (弊社開発) ベースの熱流体解析コード

本目的のためには、反応計算や MD 計算と熱流体計算とを有機的に組み合わせて解析を行うことが必要です。ここでは、各計算モジュールと弊社流体ソルバー AEOLUS との関係を図式的に示します。



データベース化：マトリックス的に計算、
参照データとする。

組み込み済みモデル

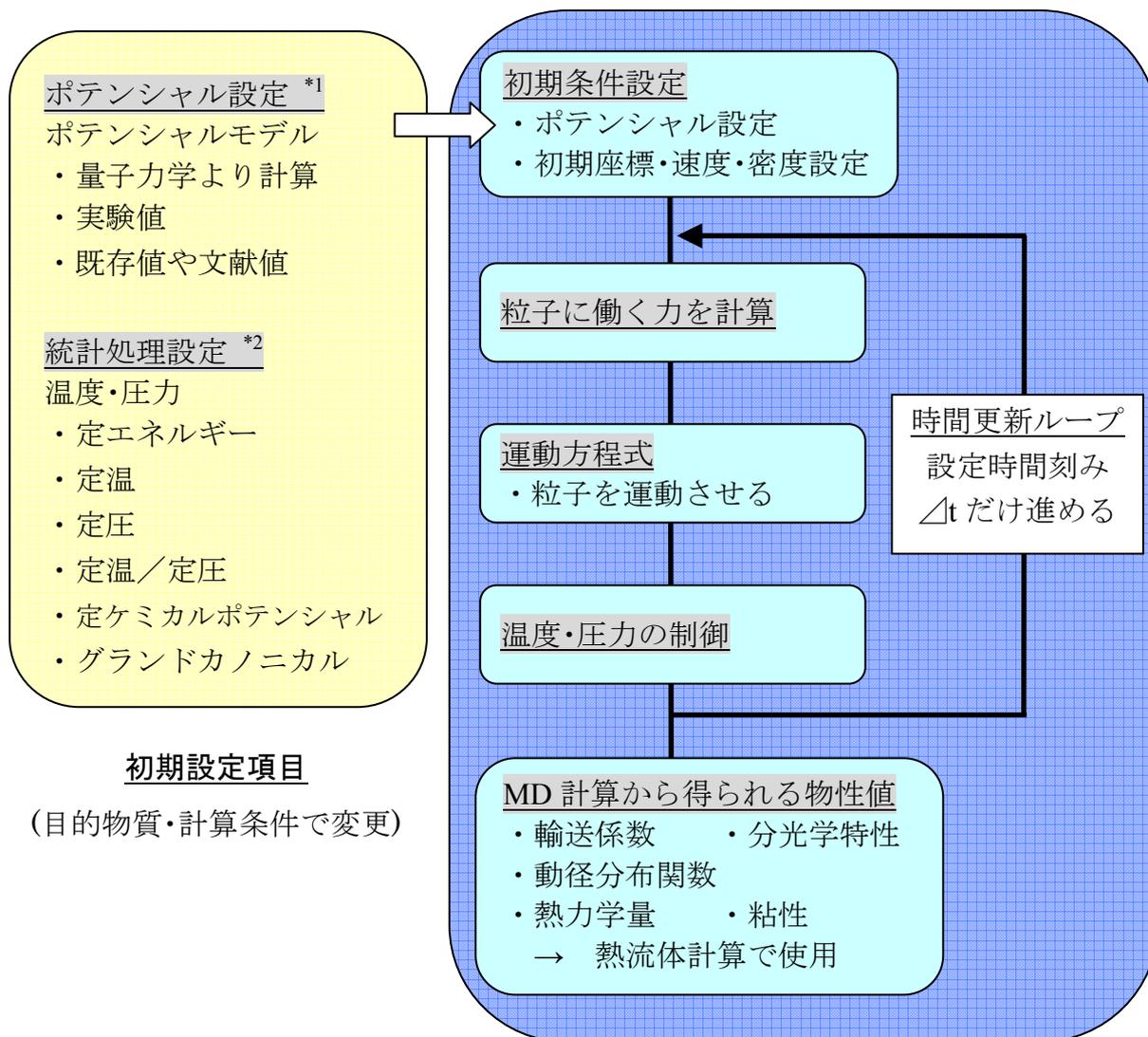
* 弊社実績

今回必要となるモデル

* 弊社実績

3. ニュートン力学による分子動力学計算コード

弊社開発のニュートン力学による分子動力学の計算フローは以下の通りです。



ニュートン力学による分子動力学計算コード

*1: ポテンシャルは、ペアポテンシャルやクラスターポテンシャル他の関数タイプがあります。目的とする物質により設定します。水 (H₂O) の場合は、Caravetta-Clementi による第 1 原理計算があります。

*2: 目的とする系により、アンサンブル (定温、定圧などの条件) を設定します。

4. ツールの段階的な展開のご提案

熱流体計算を本体とした反応速度論計算との連成、化学反応計算やMD計算から得られる物性値のデータベース化（＝参照データ）の段階的な展開をご提案します。

step1

- ① 気液2相流モデルの採用。
⇒ 状態方程式を組み込んだ気液2相流モデル。
- ② 化学反応による反応熱、反応種の把握、温度／圧力の関数として捉える。
⇒ 系の化学反応を計算。
- ③ 上記②の化学反応計算で得られた反応種の分子動力学により、粘性・輸送係数をマトリックス的（温度／圧力）に計算。
⇒ 気液2相流計算でのデータベースとして利用。

Step2

- ④ 平衡状態での化学計算より、反応熱、反応種をマトリックス的（温度／圧力）に計算。
⇒ 気液2相流計算でのデータベースとして利用。
- ⑤ 容器腐食反応 …… 容器との化学反応を計算、課題を抽出。

Step3

- ⑥ 容器腐食反応 …… 容器との化学反応をマトリックス的（温度／圧力／濃度）に計算。
⇒ 気液2相流計算でのデータベースとして利用。
- ⑦ トランジェントな状態での化学反応計算を行い、熱流体計算と組み合わせる。