



流体シミュレーションのご提案

テーマ例：超臨界流体を用いた
微粒子合成のシミュレーション

1. イントロ

2. 超臨界流体計算の位置づけ

-超臨界を利用した技術開発の視点で-

3. 流体分野についてのご提案

-弊社開発コード：AEOLUS -

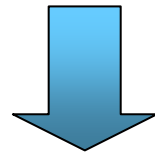


1. イントロ

- 最近, 活発な研究分野に, 特異な性質を示す超臨界流体研究とナノ物質研究がある。
- ナノ粒子合成法は様々あるが, その中に超臨界流体を用いた製造法が存在する。(二分野の接点となる)
原理: 瞬時に高い飽和状態(超臨界状態に特有)
→ 核形成の臨界半径の減少
- この中, ナノ粒子合成を実験前に評価する必要がある。
また, コード開発には利用者の要望に柔軟に対応する体制を備えておくことが賢明。

2. 超臨界流体コードの位置づけ -超臨界を利用した技術開発の視点で-

ナノ粒子合成は超臨界技術の一つという視点で議論



超臨界技術に興味をもつ利用者を広く確保

超臨界流体コードに含んでおきたいこと

- 2-1. 当面の対応：ナノ粒子合成の計算
- 2-2. 将来の対応：超臨界技術の計算



対応すべき点についてまとめると・・・

2-1. ナノ粒子合成への対応

ナノ粒子合成計算に求められること

- * 反応炉でのナノ粒子の平均半径・分散の推算.
- * ナノ粒子合成に対し, 最適な反応炉の形状を突き止めること.
- * 計算結果から反応炉の腐食対策を立てる.

以上を満足するシミュレーターの搭載



2-2. 将来の対応（超臨界技術の計算）

現在ホットな超臨界技術の可能性の認識が重要

- ☀ 経済性（二次廃棄物が出ない, 反応が速い）
- ☀ 安全性（元来あるもの: 水, 炭酸ガス etc. を使う）

超臨界技術を用いた化合物抽出・再合成・廃棄物処理や
粒径に依存した物性を持つ化合物の創製・探査などへの対応



超臨界技術計算への展開を意識すれば
コードの用途は広がる



コードに含めたい拡張性

-ナノ粒子合成と将来を考慮して-

- 調査したい物質の合成・分解反応が自由に組み入れられること.
- 超臨界の物性・状態方程式を、例えば水だけでなく他の物質に変更できること.
- メッシュ分割が柔軟で反応容器の形状を変えられること.
- 反応に重要な温度・密度場を状態方程式と整合的に精度よく計算できること.



3. 流体分野についてのご提案

-弊社開発コード: AEOLUS -

シミュレーター開発に対しクリアしておきたいこと

1. 物理モデル・データの検討
2. メッシュ分割の柔軟性
3. 反応に重要な温度・密度の精度

(温度差のある流体混合の計算を精度よく解きたい)

ここで、

AEOLUSの対象領域のご説明

B, C, D を指向し, CIP+GCUP法によって物理量の激しく変化する
場合の解析に優れる。

	単相・単純	多相・複雑
低流速	A <ul style="list-style-type: none">・ 非圧縮性乱流・ 熱対流・ 物質拡散	C <ul style="list-style-type: none">・ 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 <ul style="list-style-type: none">・ 圧縮性乱流・ 高速飛翔体・ 高速鉄道	D <ul style="list-style-type: none">・ 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



弊社開発コード: AEOLUS の特徴

1. AEOLUS は BFC であり, マルチブロック化に対応することで**形状に適合した精度良い計算が可能.**
2. AEOLUS は, **他社にない計算法: CIP+GCUP 法**で温度・密度場を状態方程式と整合的に解くため解の信頼性・精度が高い.



流体シミュレーションのご提案

超臨界シミュレーションの現問題
と将来を考慮して, AEOLUS での対応をご提案.

利点

1. シミュレーター利用者との対話によって, 自由に機能を充実させていくことができる.
(利用者との対話は, シミュレーターの実用性向上に重要)
2. ナノ粒子を含めて利用者の対象とする問題について, BFC, CIP+GCUP 法でより良いアプローチを提供できる.