

データ駆動科学を活用した化学反応プロセスの研究

1. はじめに

長崎県では海洋関連工学・再生可能エネルギー分野の振興が推進されており、シミュレーション構造解析・流体解析技術は重要な役割を果たすと期待されています。本研究では、海洋・水処理分野にターゲットを絞り、従来のシミュレーション手法では解析が困難である膜分離プロセスの解析に取り組みます。マルチスケールシミュレーション（ミクロ分子レベルからマクロ流体レベルを横断するシミュレーション）を活用して膜透過現象を解析し、膜分離プロセスの技術改善を行います。

2. 内容

従来のCAE (Computer Aided Engineering)シミュレーションでは、構造体・流体・材料が独立して解析されます。そのため、構造力学・流体力学・化学変化が複雑にからむ現象、たとえば潮流（風力）発電・化学プラント・触媒・電池といった複雑事象に対して、十分な知見を与えることが困難でした。今まで培ったミクロ系の材料シミュレーション技術をマクロ系のCAEシミュレーションと融合することで、力学的変形や流れ現象に化学反応や物質移動を組み込んだ連成シミュレーションを実現します（図1）。

濾過・海水淡水化技術は日本が技術的強みを有する分野ですが、他の化学工学プラントと比較して膜分離の動作機序は不明な部分が多く、膜材料やプラント設計は各社の経験的ノウハウに左右されている現状です。マルチスケールシミュレーションの活用によって、集積経験知としての膜分離技術を理論体系化し、高性能な濾過・海水淡水化装置の実現につなげることを目指します。

3. 成果の応用例

分子レベルのシミュレーション手法（分子動力学）・メソスケール手法（格子ボルツマン法・直接シミュレーションモンテカルロ法）・マクロ流体解析を組み合わせ、信頼性の高い膜透過シミュレーションの実現を目指します（図2）。水処理関連技術の県内企業と連携して、マルチスケールシミュレーション知見を活用するとともに、シミュレーション技術全般の底上げを支援します。

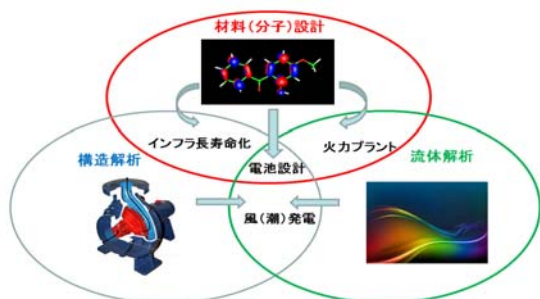


図1. 連成シミュレーション（イメージ）

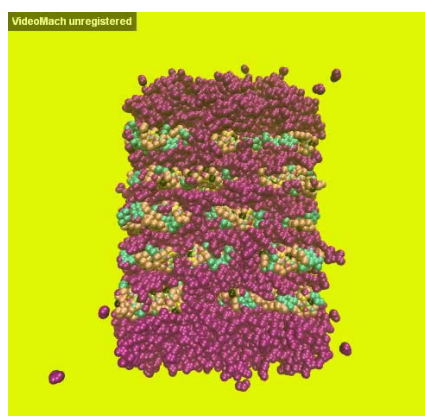


図2. 膜透過シミュレーション（イメージ）

関連する研究事業：

県経常研究「マルチスケール概念に基づく膜透過シミュレーションの研究」

（令和3年度～令和5年度）

連絡先

長崎県工業技術センター

工業材料・環境科 重光 保博

0957-52-1133 E-mail ; shige@tc.nagasaki.go.jp