

# COMSOL NEWS

THE MULTIPHYSICS SIMULATION MAGAZINE

写真提供: ボーイング社 Copyright © Boeing

ボーイング社は航空機の機体構造の  
雷撃保護用金属ホイル複合材の  
熱膨張をシミュレート

P. 4

薬剤溶出型ステントの  
放出メカニズムのシミュレーション

P. 10

シミュレーションで有人宇宙船の  
船内空気浄化システムを性能向上

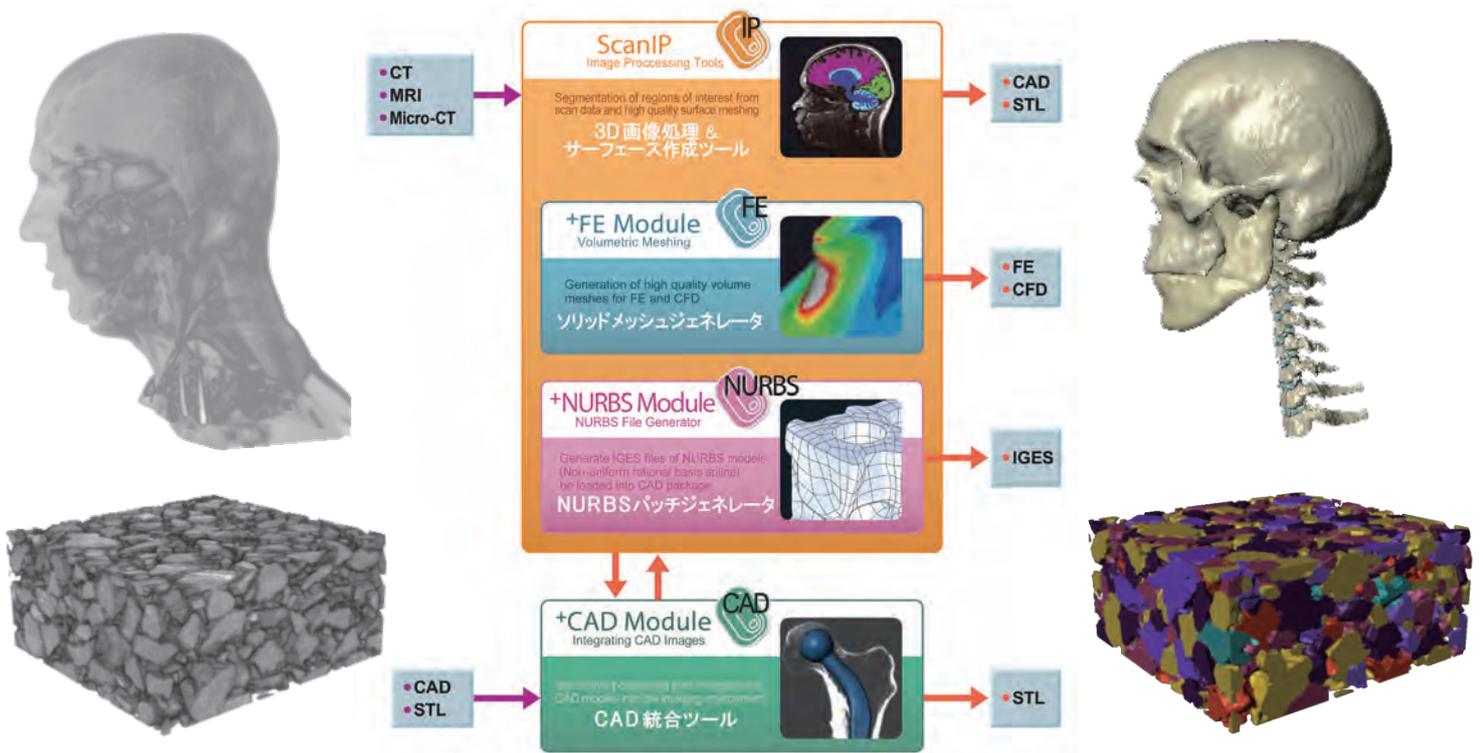
P. 16

# simpleware



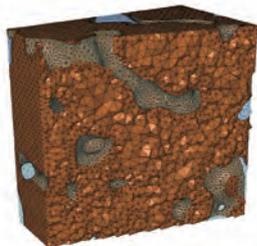
## CADのとおりに製品は製造されているでしょうか？ CADで設計できないモノはモデル化できないでしょうか？

Simplewareソフトウェアは現物からのモデル作成を支援し、解析への応用や開発へのフィードバックに活用できるイメージデータプロセッシングソフトウェアです。

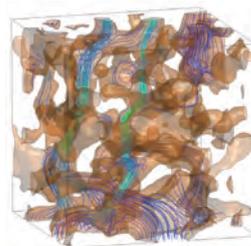
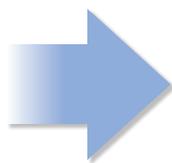


複雑な3次元画像データから中間フォーマットを介さずダイレクトに高品質なメッシュの作成やCADデータの出力など、広範囲なソリューションを提供します。X線CT、MRI、SEMなどの3次元画像はもちろん非接触3次元測定器から得られるSTLなどからもメッシュを作成でき、解析や設計、研究・開発に活用できます。

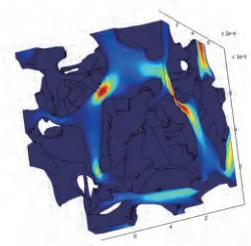
### COMSOL フォーマットのメッシュデータを出力し、幅広い分野で活用されています。



現物からモデリング



COMSOL によるシミュレーション



株式会社 JSOL エンジニアリングビジネス事業部

■ 東京 〒104-0053 東京都中央区晴海 2-5-24 晴海センタービル7F TEL: 03-5859-6020 FAX: 03-5859-6035  
 ■ 名古屋 〒460-0002 名古屋市中区丸の内 2-18-25 丸の内 KS ビル17F TEL: 052-202-8181 FAX: 052-202-8172  
 ■ 大阪 〒550-0001 大阪市西区土佐堀 2-2-4 土佐堀ダイビル11F TEL: 06-4803-5820 FAX: 06-6225-3517

E-mail [simpleware-info@sci.jsol.co.jp](mailto:simpleware-info@sci.jsol.co.jp) URL <http://simpleware.jsol.co.jp/>

# 株式会社 JSOL

# CONTENTS

## 解析、最適化、改革： マルチフィジックスシミュ レーションで革新的設計ソ リューションを

今年度の COMSOL News の話題は、マルチフィジックスシミュレーションが製品開発推進にどのように貢献したかを皆様にご紹介いたします。より安全でより良い製品を提供しながらコスト削減や増収をもたらす革新的な設計ソリューションを採用することにより、エンジニアや研究者たちは、優勢であることを追い求め続けています。しかし、かれらはどのようにしてそれを実現しているのでしょうか？

表紙の写真は、みなさんもよくご存じの Boeing 787 Dreamliner だと認識されたと思います。この革新的ジェット航空機は炭素繊維強化プラスチックを 50% 以上含んでいます。ボーイング社のエンジニア達はマルチフィジックスシミュレーションを使用して、雷撃保護用金属ホイル複合材料内の熱膨張を解析し、認証しました。Boston Scientific 社のエンジニアたちは、薬剤溶出型ステントの基本的放出メカニズム操作の深い知識を得ることにより医療装置開発に大革命を起こしています。宇宙飛行士たちが必要とする空気と飲料水を供給する生命維持装置の開発に携わった NASA のエンジニア達は、シミュレーションにより最適化と設計に成功しました。

これらの例は、エンジニアや研究者たちが信頼したマルチフィジックスシミュレーションの性能と正確性により達成できた数多くの成功のうちのわずかなハイライトにすぎません。ラボ・オン・チップから建築物理学、MEMS やロボット工学、そしてコンテナレス処理まで、数多くのプロジェクトが今回も満載です。

この冊子に登場する才能豊かなエンジニア、研究者そして設計者の皆さまと協働し、読者の皆様はこのマルチフィジックスシミュレーションマガジンである、COMSOL News をご紹介させて頂けることは大変光栄なことです。

どうぞお楽しみください。



Valerio Marra

TECHNICAL MARKETING MANAGER  
COMSOL, Inc.

INTERACT WITH THE COMSOL COMMUNITY  
You can comment on this year's stories via

**BLOG** [comsol.com/blogs](http://comsol.com/blogs)

**FORUM** [comsol.com/community/forums](http://comsol.com/community/forums)

**FACEBOOK** [facebook.com/multiphysics](http://facebook.com/multiphysics)

**TWITTER** [twitter.com/COMSOL\\_Inc](http://twitter.com/COMSOL_Inc)

日本語版連絡先: 計測エンジニアリングシステム株式会社

**E-mail** [comsol@kesco.co.jp](mailto:comsol@kesco.co.jp)

**Web** [www.kesco.co.jp/comsol\\_inq.html](http://www.kesco.co.jp/comsol_inq.html)

### 航空宇宙

- 4 ボーイング社は、航空機の機体構造の雷撃保護用金属ホイル複合材の熱膨張をシミュレート

### 製鋼

- 8 連続鋳造：機械とプロセス、シミュレーションで両方を最適化

### 医療技術

- 10 薬剤溶出型ステントの放出メカニズムのシミュレーション

### イメージング分光

- 13 保冷 :SRON は深宇宙望遠鏡の熱補正システムを開発

### 航空宇宙

- 16 シミュレーションで有人宇宙船の船内空気浄化システムを性能向上

### 医療技術

- 18 革新的な断熱技術で発展途上国にワクチンを輸送

### 原子力

- 20 核廃棄物貯蔵施設での腐食との戦い

### 土木・建築

- 22 建物損傷防止にマルチフィジックスシミュレーションを利用

### バイオテクノロジー

- 24 血液分析の最適化：実物試作が困難な時、シミュレーションが解答を提供

### 自動車

- 28 タイヤ内蔵空気圧監視センサの最適化

### 原子力

- 30 HFIR のための新燃料の研究：オークリッジ国立研究所における、安全性と信頼性をサポートするためのマルチフィジックスシミュレーションの必要性

### 圧電素子

- 34 音響流のための圧電材料の実態把握

### 材料工学

- 36 シミュレーションを中心とした腐食防止の戦略

### バイオテクノロジー

- 40 バイオ・アプリケーションのための細胞のスイッチのパターン

### 電磁気

- 42 粒子による電磁波の散乱

### コンテナレス処理

- 44 音波浮揚による浮遊

### MEMS・ロボット

- 46 マルチフィジックスシミュレーションを使用して開発された微小ロボットの作動テクニック

### GUEST EDITRIAL

- 48 コンセプトから市場へ：シミュレーションは製品革新における試行錯誤を削減



表紙写真

米国オレゴン州沿岸を飛行するボーイング787-8  
写真提供: ボーイング社([www.boeingimages.com](http://www.boeingimages.com))

## COMSOL NEWS

We welcome your comments on COMSOL NEWS; contact us at [info@comsol.com](mailto:info@comsol.com).

© 2014, COMSOL. COMSOL News is published by COMSOL, Inc. and its associated companies. COMSOL, COMSOL Multiphysics, Capture the Concept, COMSOL Desktop, and LiveLink are either registered trademarks or trademarks of COMSOL AB. All other trademarks are the property of their respective owners, and COMSOL AB and its subsidiaries and products are not affiliated with, endorsed by, sponsored by, or supported by those trademark owners. For a list of such trademark owners, see [www.comsol.com/trademarks](http://www.comsol.com/trademarks)

# ボーイング社は、 航空機の機体構造の 雷撃保護用金属ホイル複合材の 熱膨張をシミュレート

ボーイング 787 ドリームライナーのような近代的航空機の雷撃保護用金属ホイルの複合材には、50% 以上の炭素繊維が使用されています。ボーイングの研究者たちはシミュレーションを使用し、通常の飛行サイクル時の熱応力負荷がかかった状態における保護用金属ホイルの安全性を検証しています。

JENNIFER A. SEGUI による報告

ボーイング 787 ドリームライナーは大変革新的であり、軽量で並外れた強度を誇る炭素繊維強化プラスチック (CFRP) を 50% 以上使用しています。図 1 は、航空機の使用複合材の主要材料を示す航空機の全体図です。従来、CFRP を使用することで数多くのメリットはありますが、雷撃による電磁気の影響や損害を軽減することはできません。この問題の解決方法として、導電性

金属ホイル (EMF) を複合構造体のレイアップ内に追加することで、過剰電流と過剰熱を航空機上の雷撃保護 CFRP に急速に消散することが可能になります。

Boeing Research and Technology (BR&T) のエンジニア達は、マルチフィジックスシミュレーションと実際の物理学的計測の両方を用いて、図 2 の左側で示すような複合構造体のレイアップの各層に熱応

力やずれが発生した場合の EMF 設計パラメータへの影響を研究します。複合材構造の保護用コーティング内に蓄積される応力は、通常の離発着飛行サイクル時に発生する熱サイクルが原因です。時間の経過と共に、保護用コーティングにひびが入り、そこから湿気や環境化学種が侵入し EMF 全体の腐食を発生させます。その結果、伝導率や保護機能を低下させてしまいます。



図 1. ボーイング 787 では、航空機全体の 50% 以上に最先端複合材料を使用している<sup>1</sup>。

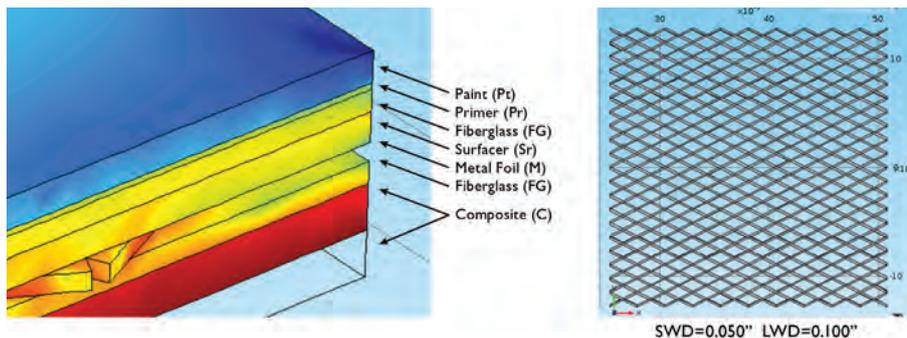


図 2. 左は COMSOL モデルの複合材構造レイアップ。右は、導電性金属ホイルのジオメトリを示す。SWD はひし形の最短値、LWD は最長値を表す。メッシュ縦横比:SWD/LWD は、シミュレーション内で変更されるパラメータの 1 つの値。

BR&T では、プロジェクトリーダーの Sealants and Electromagnetic Materials 社の Jeffrey Morgan 氏、シミュレーション担当で応用物理の共同技術フェローの Robert Greigor 氏、検証担当は Sealants and Electromagnetic Materials 社の Dr. Patrice Ackerman、そして技術フェローとして Quynhgio Le 氏が研究に寄与しています。彼らの研究の目的は、複合材の構造内における熱温度の安定性を向上することであり、その向上実現と共に保護用コーティングのリスクは削減され、コスト維持を実現することも可能です。

### 航空機複合の熱膨張シミュレーション

図 2 の左側に示す保護スキームは上から順番に、塗料、下塗り、腐食絶縁層、中塗り、EMF および下層の複合材構造です。熱サイクルにさらされた時、保護用コーティング内に徐々に機械的ストレスが蓄積される一因になります。その図表内のジオメトリは、Greigor<sup>2,3</sup> により開発された熱膨張率 (CTE) のモデルで、彼の同僚は、COMSOL Multiphysics® を使用して各層の 1 平方インチあたりの熱応力と変位を評価しています。

EMF 層の構造は、図 2 の右側に示されます。この研究では、構造全体にわたる熱変化の影響を解析するため、EMF の高さ、メッシュワイヤの幅、縦横比、金属複合材、表面のレイアップ構造は変更可能になっています。EMF の金属複合材はアルミニウムもしくは銅ですが、アルミニウム EMF を使用する場合は電界腐食を防ぐために、EMF と複合材との間にファイバーグラスが追加する必要があります。

COMSOL モデルにユーザ定義値として、熱膨張率、熱容量、密度、熱伝導率、ヤング率、ポアソン比を含む各層の材料特性が追加されます。図 3 をご参照ください。塗料層の熱膨張率はステップ関数を使用して定義され、各材料のガラス転移温度における熱膨張の突然の変化を示します。

CTE モデルでは、熱応力マルチフィジックスインタフェースを使用して固体力学と伝熱を連成します。熱膨張をシミュレートし構造内のずれを解決することができます。このシミュレーションは航空機が下降する状態に相当するものであり、複合材構造に蓄積された熱に限定され、それぞれ地面での温度と高度での温度を示す初期温度と最終温度がモデル内に定義されました。

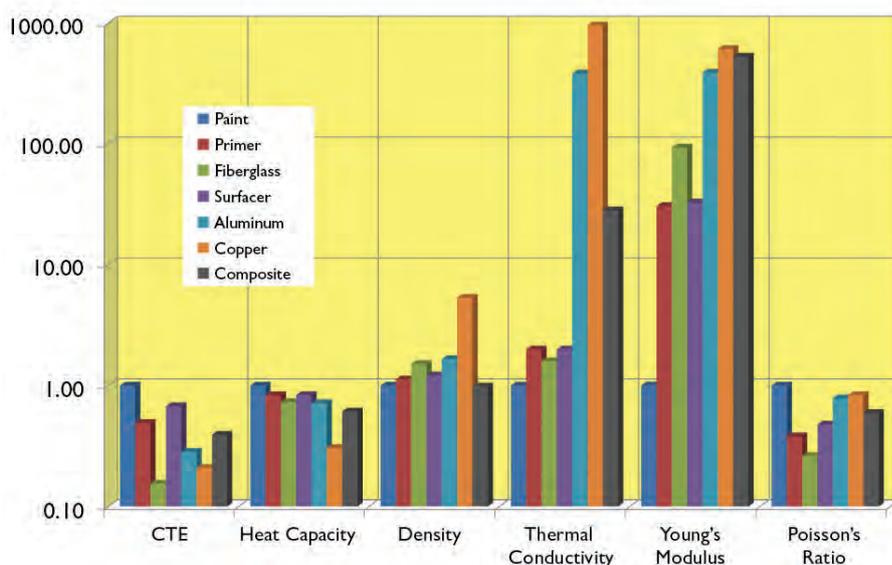


表 3. 各材料のパラメータ比率は塗料層と比較される。CTE、熱容量とポアソン比の数値に注目してみると、塗料層の値が他の層よりも高い数値を示している。これは、熱や冷却による圧縮応力や引っ張り歪みを受けているということを意味する。

### I 応力と変位、EMF のインパクト

導電性金属ホイルの多様なプロパティや熱に対する各層の応力や変位を定量的に計測するため COMSOL シミュレーション結果は解析されました。図 4 はシミュレーション結果の 1 例を示しています。

図 4 上部に示されている塗料層を基にその下部にある EMF の変位パターンを解析することが可能です。拡大断面図で確認できる通り、最上部の保護層には応力を軽減する傾向があると共に、メッシュ上部の変位では変異が確認できます。表 5 では、銅もしくはアルミニウム EMF を含む表面の保護スキーム内の各層の相対的応力を示しています。アルミニウム EMF に含まれているファイバーグラス腐食絶縁層はバッファーとしての役割を持ち、銅 EMF と比較すると、応力に関してはアルミニウムの方が軽減されています。

アルミニウム EMF 内の軽減応力にもかかわらず、EMF 設計パラメータのシミュレーション結果によると、銅と比較した場合、アルミニウム EMF を含んだ表面保護スキームの方が、より大きい変位が起こると一貫した傾向が明らかになりました。アルミニウム EMF によって起こる一般的な大規模な変位は、相対的にみると高い数値の CTE が原因と考えられます。

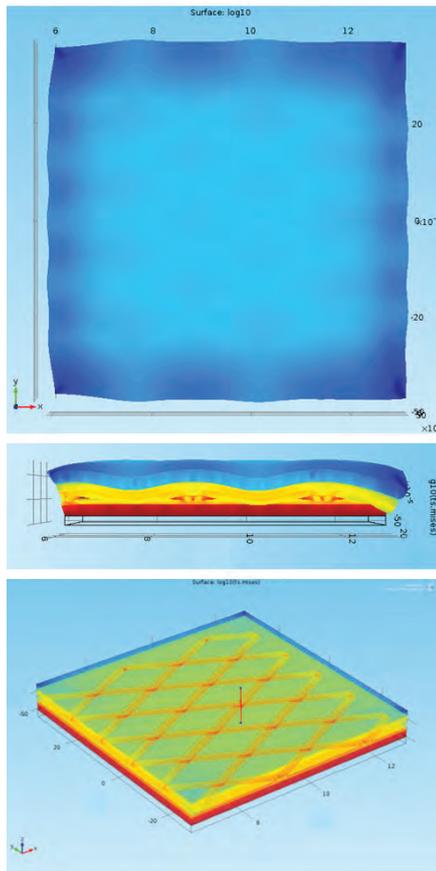


図 4. 上、中: 複合材構造レイアップの 1 平方インチサンプル。ミーゼス応力と変位を示す上面図と断面図。下: 複合材構造および EMF の高応力を示すため透明な画像が活用された。応力は、縦のラインに沿ってサンプルの奥行までずっと評価された。

保護層上にある変位の高さ、幅、メッシュ縦横比の変化に対する影響を確認するために EMF 設計パラメータの更なる解析を実施しました。メッシュ縦横比の比率を上げた場合、銅、アルミニウム EMF の両方で約 2% というわずかな減少が変位内に起こることが確認され、一方でより高い比率はよりオープンなメッシュ構造になることが分かりました。いかなる EMF 設計パラメータに対しても、通電容量、変位、そして重量間にトレードオフが生じます。メッシュ縦横比の場合、オープンメッシュ構造を選択すると変位と重量が減少します。それと同時に EMF の保護機能に必要な通電容量も減少するため、さらなる検討が必要になります。

同様にメッシュの幅を 3 倍に変更すると、銅およびアルミニウム EMF で約 3% というわずかな変位の増加が起こります。しかし EMF の高さを 4 倍に変更すると、銅、アルミニウムともに変位が 60% 増加してしまいます。表 6 では、銅とアルミニウム EMF の高さの値を変更した時の表面保護スキームの各層での変位の関連値を示しています。変位の影響をより軽減し、落雷保護のために必要な EMF の通電容量を増加するには、メッシュの幅を広げるもしくは、縦横比率を縮小するのがより良い方法です。

「落雷保護のために必要な EMF の通電容量を増加するには、メッシュの幅を広げるもしくは、縦横比率を縮小するのがより良い方法である」

### 亀裂形成を伴う変位

熱サイクルが原因で起こる機械的応力は時間の経過とともに蓄積されるため、BR&T の Greeger 氏と同僚たちは、拡大する可能性がある変位は保護層上の危険を増大させると定性的に考えています。

図 7 はチャンバー試験室内で湿気と熱サイクルに長時間さらされていたアルミニウムと銅 EMF を使用した保護スキームの横断面の顕微鏡写真で、この実験的証拠はこの論理を支援しています。銅 EMF レイアップの方には変位が全く見られませんが、一方のアルミニウム EMF の方は、下塗り、可視可能なエッジおよび表面亀裂が確認でき、メッシュが交差している箇所ではかなりの亀裂が確認できます。

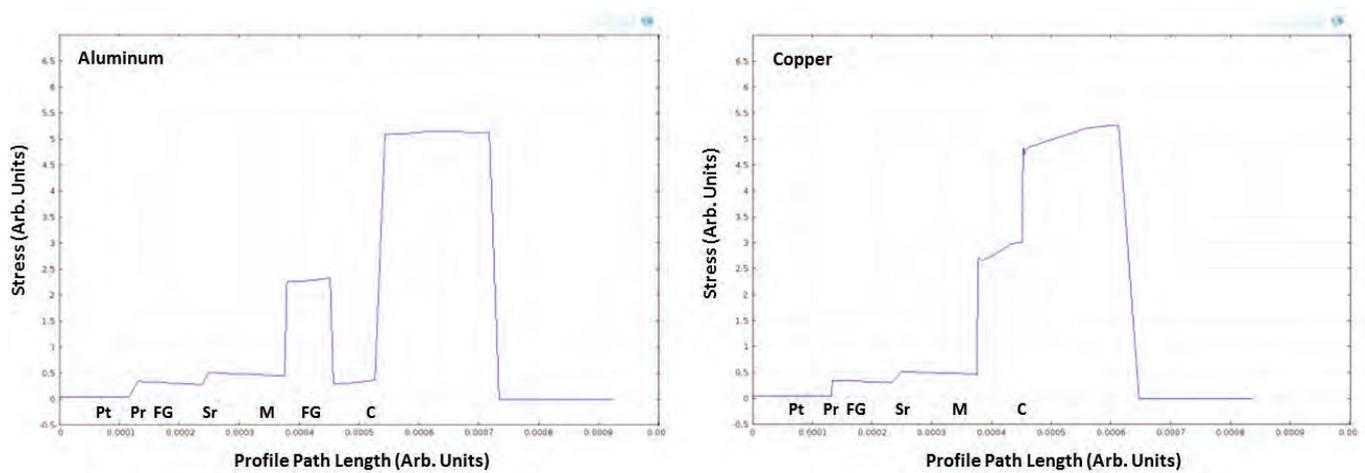


表 5. 任意ユニットに関連した応力は、アルミニウム (左) もしくは銅 EMF (右) のどちらかを含む複合材構造レイアップの奥行までプロットされている。

同温度の範囲内においては、実験とシミュレーションではほぼ同様な結果となり、アルミニウム EMF を使用したケースの方が、変位が大きいうという結果を得ました。

シミュレーション、実験の両方が示していることは、航空機の複合材構造の雷撃保護として銅 EMF を使用することが良い選択であるということです。この結果からマルチフィジックスシミュレーションは、EMF 設計パラメータの応力や変位に関する相対的評価を行ったり、より深く理解し亀裂形成の可能性を減少させるための信頼できる手段と言えるでしょう。

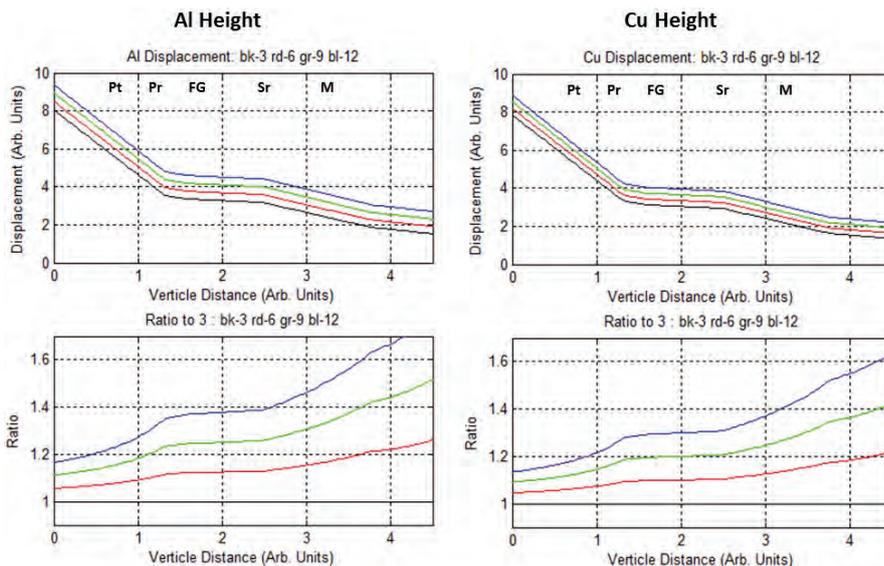


表 6. EMF の高さの変更時の影響、表面保護スキームの各層の変位を示す。上のグラフは任意ユニットの変位を示す。下のグラフでは比率が変位の大きさを示す。それぞれの高さは最少の変位を正規化したもの。

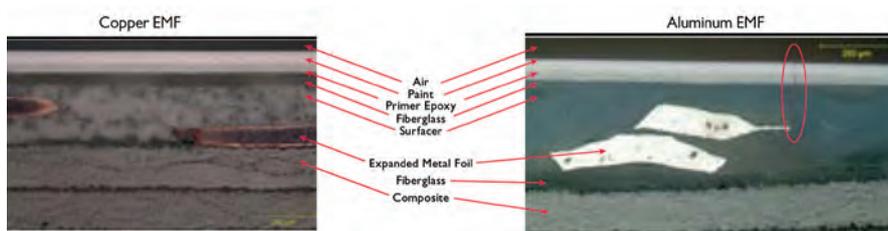
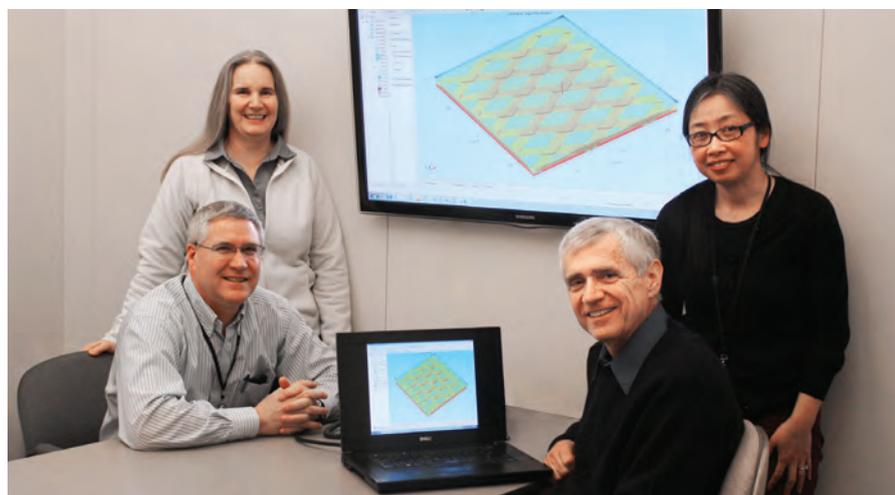


写真 7. 湿気と熱のサイクルにさらされた複合材構造レイアップの顕微鏡写真。左：銅 EMF の結果 右：アルミニウム EMF の結果

〈参考文献〉

The information presented in this article is based on the following publicly available sources:

- <sup>1</sup> The Boeing Company. 787 Advanced Composite Design. 2008-2013. [www.newairplane.com/787/design\\_highlights/#/visionary-design/composites/advanced-composite-use](http://www.newairplane.com/787/design_highlights/#/visionary-design/composites/advanced-composite-use)
- <sup>2</sup> J.D. Morgan, R.B. Greigor, P.K. Ackerman, Q.N. Le, Thermal Simulation and Testing of Expanded Metal Foils Used for Lightning Protection of Composite Aircraft Structures, SAE Int. J. Aerospace 6(2):371-377, 2013, doi:10.4271/2013-01-2132.
- <sup>3</sup> R.B. Greigor, J.D. Morgan, Q.N. Le, P.K. Ackerman, Finite Element Modeling and Testing of Expanded Metal Foils Used for Lightning Protection of Composite Aircraft Structures, Proceedings of 2013 ICOLSE Conference; Seattle, WA, September 18-20, 2013.18-20, 2013.



Boeing Research and Technology の研究チーム。左から Patrice Ackerman 氏, Jeffrey Morgan 氏, Robert Greigor 氏, Quynhgio Le 氏。

# 連続鋳造：機械とプロセス、 シミュレーションで両方を最適化

製造プロセスが複雑になればなるほど、より巨大でより高品質な製品を、という鋼製品への要求は高まります。SMS Concast 社は、お客様がエネルギー消費量を削減しつつ、製鋼のサイズ、品質、そして複雑さについて新たな領域へ駒を進められるようシミュレーションを活用しています。

Jennifer Hand による報告

最初に凝固し、銅モールドにて広がるシェルのモデル

20 世紀半ば過ぎ、インゴット鋳造のバッチ処理が連続鋳造法へと移行された時、製鋼法は一変しました。この技術により、溶鋼の流れは停止することなく、金色に光る熱い固体金属へと絶え間なく変形し続けています。(図表 1、2 参照)



図 1. 連続鋳造法の排出テーブル。凝固ストランドが切断、排出されています。

インゴット鋳造の場合、各鋳塊は鋳型から取り出された後、その鋳塊の頭部は切捨てられるため製品ロスが起きてしまいました。しかし、連続鋳造法ではこの鋳塊の頭部切捨てが起こるのは数百トンの鋳造の流れの最初と最後のため、製品ロスが大幅に削減されています。さらに鋳造ストランドの型は最終圧延品の型にはるかに近いものになっています。以前の鋳造法と比較すると、連続鋳造法は生産性向上と高品質をもたらし、費用対効果にも優れています。当然のことながら、今日、鋼の 95%

はこの連続鋳造法で鋳造されています。

SMS Concast 社は、60 年あまりこの分野でのリーダーとして、溶鋼、精錬、そして連続鋳造のそれぞれの装置の設計、建築技術を牽引し続けています。世界マーケットシェアは 40% にもなります。SMS Concast 社の Metallurgy & Process Continuous Casting のリーダーである Nicholas Grundy 氏は以下のように述べています。“既知の境界のさらなる進化や技術向上時に必須となる分析。連続鋳造法では、その分析に必要な不可欠な変数が膨大に存在します。” “私たちは常に限界を超え続けており、未経験の出来事を理解する唯一の方法、それがシミュレーションです。”

## 全ての分野でシミュレーション

一般的な連続鋳造法では、溶解された精錬鋼は最大容積 30~350t の鋳造機に運ばれます。溶鋼はタンディッシュに注がれ、その後 8 か所あるストランドに分配され注がれます。最初の凝固鋼は、常時水冷されている銅製の鋳型で凝固されます。そして凝固されたストランドは、セクションサイズに合わせて分速約 0.1 から 6 メートルの様々な速度で回転する回転ローラーのモールドから取り外されます。(図表 2 参照) 完全に凝固した赤く熱いストランドは 3~15 メートルの長さでカットされ冷却されます。

連続鋳造法のプロセスでは、鋳造を半製品状態に仕上げます。これは最終製品

の型に大変近い状態ですが、圧延や鍛造にかかる更なる製造コストを大きく削減するものです。モールドの型にもよりますが、ビレットと呼ばれる四角い型を使用して、コンクリート強化材からピアノのワイヤなど広範囲にわたるアプリケーション向けのバー、ワイヤなど様々なサイズを鋳造することが出来ます。ブルームと呼ばれるより大きいサイズの長方形の型では、例えばクランク軸、バーやレールなどを鋳造可能です。スラブは金属薄板に引き伸ばされ、

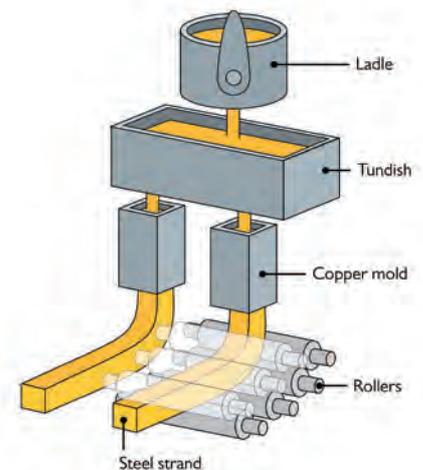


図 2. 連続鋳造の略図。溶鋼が取鍋鋳造機に運ばれています。タンディッシュの溶鋼は銅製の鋳型に注がれ、その後、凝固したストランドは回転ローラーによりモールドから取り出されます。

車から大型石油タンカーまで様々な製品へと製造されます。

SMS Concast 社では、鋳造全行程においてシミュレーションを活用しています。シミュレーションでは、タンディッシュ内の液体流、モールド内の主な凝固、ストランドの凝固と機械的変形、切断ブルームの急冷、もしくはゆっくりとした冷却の解析などを行います。私たちがすべきことは、凝固中にストランドの中心に向かって起こる合金化元素の分離を最小限に抑え、非金属含有物を除去し、そして凝固上の微細構造を強化することです”と Grundy 氏は語ります。

“これら全てを達成する唯一の方法は溶鋼を攪拌することです”と彼は続けます。(図表 3 参照) ストランドの周辺に強力な回転電磁場を発生させる電磁攪拌機を設置、使用します。これによりストランドの中心にある溶鋼は攪拌されます。攪拌で発生する電磁場と溶鋼流のパターンの結果は、COMSOL Multiphysics® でシミュレーションされます。シミュレーションは、電磁攪拌を正確に設計するため、また高品質な溶鋼製造の到達実現に大変重要なステップです。攪拌は軸受鋼のような高合金製造にとっては特に重要です。それは、その製品が高純度（非金属介在物がほとんど含まれていない）で、さらに微粒子の微細構造や成分（低い偏析）に関しても高い要求がされるからです。

“基本的に私たちが直面する課題というのは、様々な分野 - 物理分野 - 電磁気、

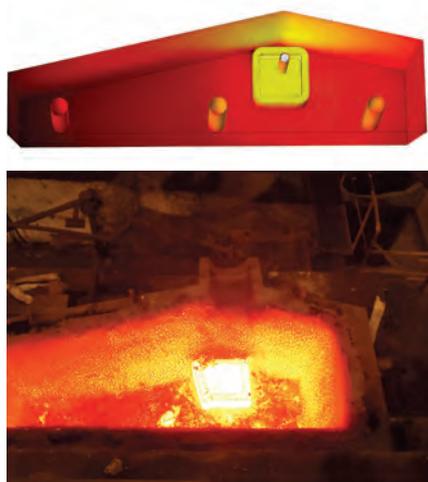


図 3. COMSOL Multiphysics の CFD モジュールを使用してタンディッシュモデル（上）と中身が空の実際のタンディッシュ（下）

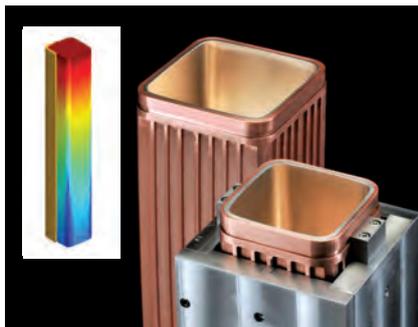


図 4. 冷却された銅モールド管、最初に凝固される溶鋼の型は連続鋳の心臓部と言えるでしょう。

液体・気体流 - 流体力学 - 伝熱など - が組み合わさった分野を研究しなければならないということです。そしてこれが COMSOL Multiphysics® を使用する理由です。私たちは COMSOL ほどこのように広範囲な物理分野を一つのプラットフォーム上でシームレスにリンクできるツールを他に見たことがありません。”

#### 凝固と鋳引けの予測

近年の製鋼のトレンドは、以前のように溶鋼を一度冷却して再度再燃炉にて復燃させるのではなく、まだ溶鋼が熱いうちに鋳鋼ストランドを圧延します。これはホットチャージと呼ばれ、熱エネルギーの削減につながりますが、ストランドの凝固過程に関して、さらに正確な理解が必要となります。Grundy 氏は“銅のモールドは連続鋳造の各装置の内、心臓部にあたる最も重要な部分です”と説明します。ここでは、凝固鋼板が初めて形成されます。もし銅管の内部形状が溶鋼の収縮にそのまま沿った形になる場合ビレットは申し分ないものになるでしょう。そしてもしそれがホットチャージの場合、ビレットの表面は完璧になることは間違いないでしょう。”と Grundy 氏は続けました。

SMS Concast チームは、モールド内における最初の凝固時の複雑な熱交換プロセスを理解するために COMSOL モデルを使用しました。その結果、角が大きく丸くなった新しいタイプのモールド設計にたどり着きました。鋳造後も角の温度は下がらないため、その結果、表面温度はより均等になります。この設計がもたらしたものは、従来の製鉄所のように一度冷却したビレットの表面を化石燃料の火力を使用して

再加熱することなく、圧延装置にて直接ホットチャージすることができます。

この革新的モールド設計は、2010 年、ガス燃焼の再加熱溶鋸炉不使用の台湾の製鉄所の Tung Ho Steel 社で成功をおさめ、環境にも経済的にも多大なる影響力と利益をもたらしました。自動車約 20,000 台の排気ガス排出に値する約 40,000t の二酸化炭素排出の削減を実現したのです。

#### シミュレーションと検証

Grundy 氏は、“私たちは可能な限り、シミュレーションと実際の数値、物理的モデルの結果を解析し検証を行っています。例えば、タンディッシュの流れのシミュレーションを認証するために、私たちのお客様はプレキシグラススケールの水のモデルを作成しました。その結果、私たちが得たものは、物理的モデルとシミュレーションの流れは全く同じ結果ということでした。シミュレーションへの信頼が深まると、可能



Nicholas Grundy 氏：連続鋳造の CFD モデルの 1 シミュレーション結果を表示しています。

性を追求する設計の研究への信頼も深まります。”と語りました。このアプローチは、この企業にとってはとても適していました；世界最大級のビームブランク (1150 x 490 x 130 mm) は、ドイツの SMS Concast 製鉄所にてすでに鋳造されています。また史上最大の丸型（直径 1000 mm）は、2015 年、韓国の製鉄所で製造される予定です。

# 薬剤溶出型ステントの放出メカニズムのシミュレーション

Boston Scientific 社のエンジニアたちは、医療装置設計に大革命をもたらしています。最近の薬剤溶出型ステントのシミュレーションでは、計算モデルと実験上での発見を組み合わせることにより薬剤放出のメカニズムの理解をさらに深めることが可能です。

COMSOL, INC. LEXI CARVER による報告

寄稿者: BOSTON SCIENTIFIC CORPORATION, TRAVIS SCHAUER 氏、ISMAIL GULER 氏

プラークにより遮断された心臓動脈の治療は、医療専門家たちにとって共通の課題です。これは狭瘻として知られ、心臓への血流の妨げになり、その結果、息切れや胸痛の症状が起こり得ます。この課題は、遮断された動脈の治療用に設計された小さな網目の筒状のステントを使用して解決される場合もあります。図 1 で示された通り、通常、ステントを載せたバルーン付きカテーテルを冠動脈に挿入します。それを

広げるとステントも広がる仕組みです。

ステントが動脈の広がりを持てている間は、動脈はもう一度狭くすることが可能です。なぜなら周囲の組織がステントの外側まで成長しているからです。これを再狭瘻と呼び人間の体の自然な治癒反応なのですが、実際には回復の妨げになってしまいます。そのため、細胞増殖を低減し、必要ではない成長を抑制する医薬剤を動脈組織まで届ける薬剤溶出型ステントが開

発されました。これらには、コーティングされた薬剤とポリマーマトリックスが塗布されており、局所まで運ばれます。ステントメッシュの各ストランドはこれらのコーティングが施されています(図 1C 参照)。近年、再狭瘻率を低減させるため、このステント設計は飛躍的に改善されていますが、放出過程に関しては不明点が多く残っています。

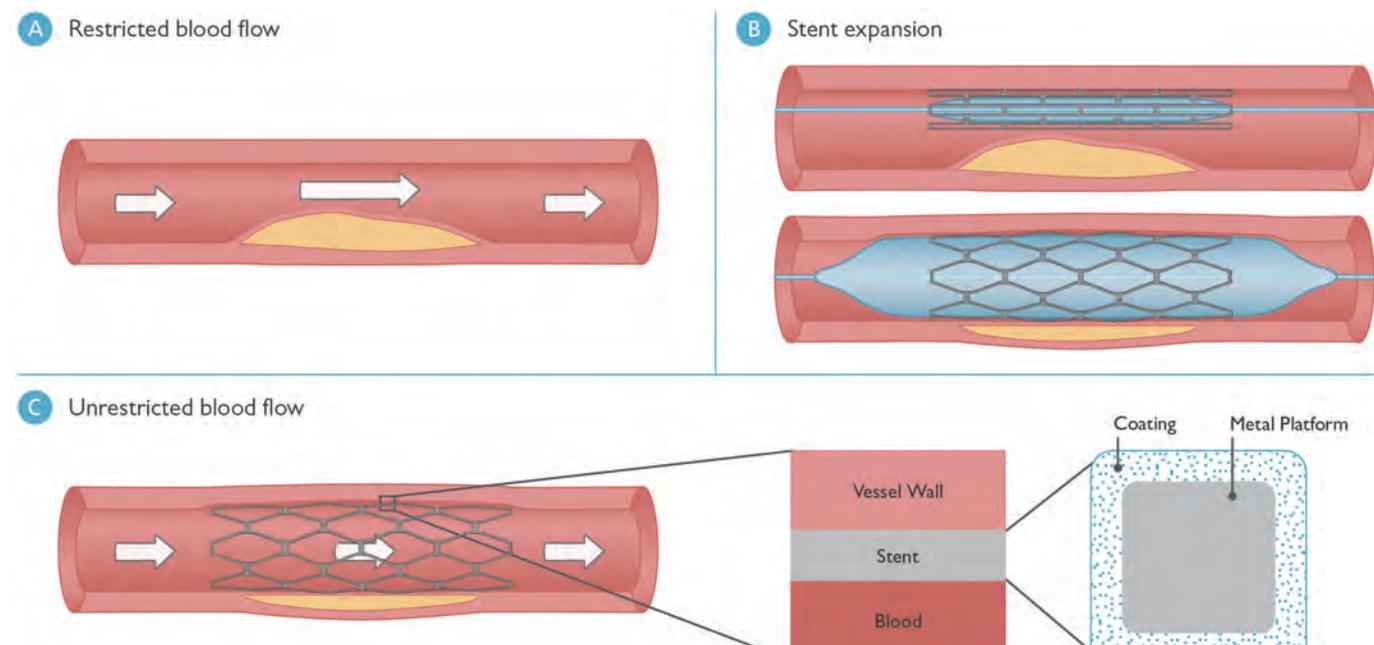


図 1. A. 血管内の狭窄されている血流 B. ステントの挿入、拡張 C. 通常の血流 (左)、血流内部の配置 (中央)、ステント支柱の断面図 (右)

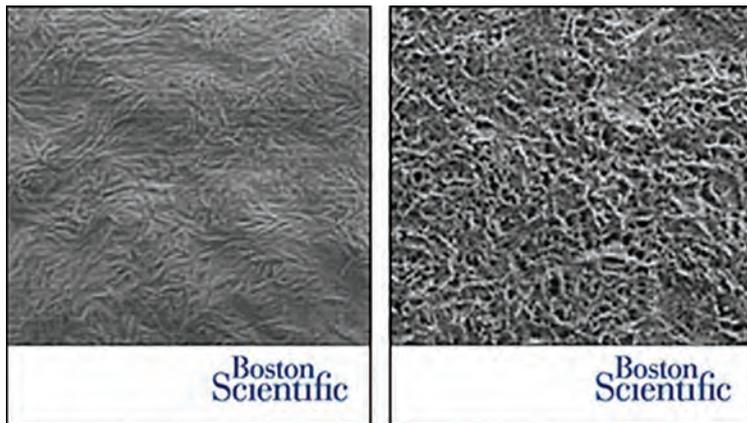


図 2. 放出前のコーティング微細構造（左）とコーティングからの放出後のポリマーマトリックスにより包まれた空いた細孔（右）

### 薬剤放出過程

多様な分野の医学的診断、その治療を実施する装置や技術の開発を行っている Boston Scientific 社の Travis Schauer 氏、Ismail Guler 氏とエンジニアチームは、コンピュータシミュレーションを使用し、薬剤溶出のメカニズムに関してさらなる理解を追求しています。COMSOL Multiphysics® を使用して、放出プロフィール（コーティングから薬剤が溶出される速度、血管組織に取込まれる速度）、またその影響因子を解析するためコーティングされたステントをモデリングしました。彼らのシミュレーションデータと実験データのカーブを最大限近づけるために、彼らは COMSOL 製品の内、最適化モジュールを使用しました。Schauer 氏は「コーティングの基本的メカニズムと微細構造の理解を深めることにより、放出過程とその調整方法を理解することができます。それにより必要な分析結果を得ることが可能になります」と説明します。最終的には、今まで不可能であった放出過

程を完全に制御するレベルへ繋がります。

Schauer 氏と Guler 氏がモデリングしたステントコーティングは、2 層からなる微細構造です：薬剤豊富で表面が連結されている層とポリマーにより薬剤分子が包まれている層です。この微細構造の開発は薬剤の溶解度、薬剤 - ポリマー率、そして製造中のプロセス状況にも影響されます。ステントが動脈内に挿入されると薬剤豊富な層は即座に溶解し、組織内に拡散します。図 2 のように、ポリマーコーティング内には空洞（穴）が後に残されます。もう一方で、ポリマーで包まれた薬剤分子の方はよりゆっくりと拡散されました。

### 薬剤デリバリのモデリング

Schauer 氏と Guler 氏は、コーティングの微細構造の複雑なジオメトリを理想化しました：彼らのモデルの中では、コーティングは固形溶剤で満たされた円筒状細孔の型から形成されています。その周囲はポ

リマーでカプセル化された固体薬剤と溶解された薬剤の両方を含むポリマーシェルにより包まれています。分子は、放射状および軸方向に拡散し、シェルと穴の境界においては、微細構造のジオメトリは放射状にのみ変化します。そのため、2 次元軸対称のモデリングが適切でした（図 3 参照）。

Schauer 氏と Guler 氏は、COMSOL を使用したおかげで彼らのモデリングを簡単にカスタマイズすることができました。Schauer 氏は、「私たちは、煩わしいプログラミングに時間を費やすのではなく、輸送現象を理解することに集中しました」と語りました。「ユーザインタフェースを使用して、ニーズに合わせて基本的な方程式をカスタマイズしました」と続けます。薬剤の累積放出に関する解析を得るために、彼らは管内と体内の 2 つの放出プロフィールについてシミュレーションを行いました。「私たちは、なぜ特定の放出プロフィールが観察されるのかを理解したかったのです」と Guler 氏と Schauer 氏は語ります。「私たちは、自分たちの発見を確認するために、実験データとシミュレーション内で生成された放出プロフィールデータを比較しました。」

Schauer 氏と Guler 氏は、個体薬剤の溶解と溶解した薬剤の拡散の両方のプロセスを解析しました。細孔内で溶解する時、細孔は周囲の組織からの液状媒質でいっぱいになります。薬剤は、ポリマーの中よりも液状媒質内の方で多様な溶解限度が起こります。その結果、細孔とシェル間のインタフェースにおいて溶解された薬剤濃度にばらつきが生じてしまいます。Guler 氏は「インタフェースの最適な状態は、拡散流量を継続的に確保する COMSOL の

「コーティングの基本的メカニズムと微細構造の理解を深めることにより、私たちは、放出過程とその調整方法を理解することができます。それにより必要な分析結果を得ることが可能になります。」

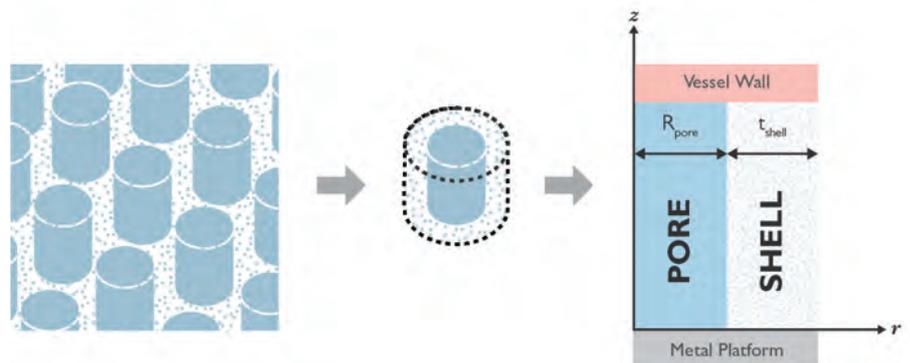


図 3. ステントコーティングの微細構造の理想化。単一の細孔シェルがモデリングされています（中央） $R_{\text{pore}}$  と  $t_{\text{shell}}$ （右）の表示は、細孔半径とシェルの厚みを示します。

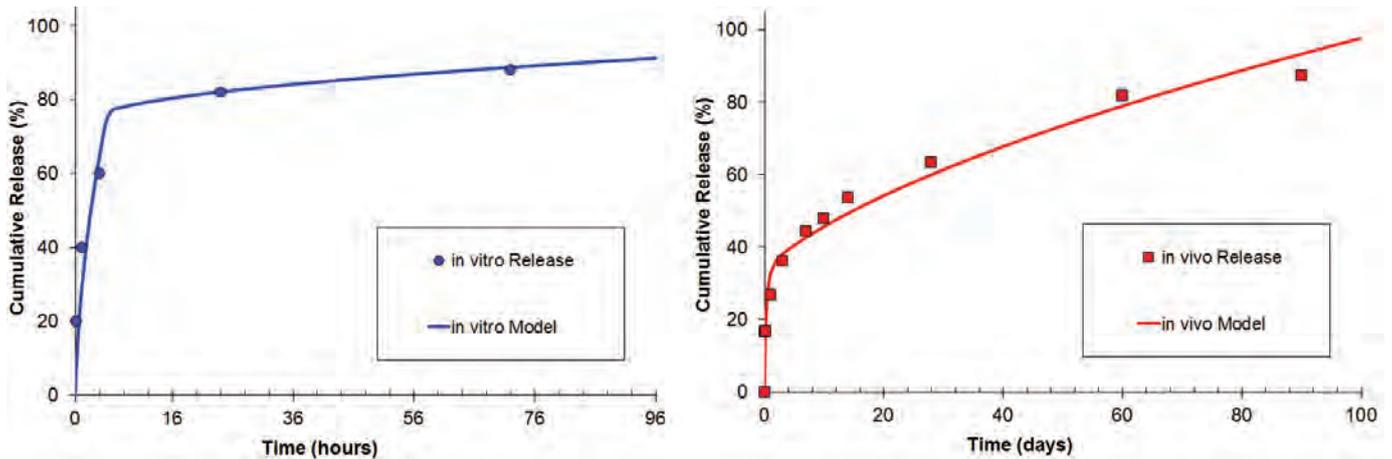


図 4. 体外と体内それぞれの放出カーブのシミュレーション結果と実験結果を示す。

剛体ばねを使用して簡単に実装することが可能です。”と説明します。COMSOL Multiphysics のカスタマイズ可能な境界条件には、必要条件を簡単に追加することができます。

ポリマーシェルの厚さなど直接計測することが不可能な“効果的”な値に関しては、測定不可能なため、特定モデルのパラメータは推測する必要がありました。他には、ねじれた形、細孔の狭搾、立体効果をあたえる値から構成される遅延係数などがあります。これらのパラメータは、最適化モジュールを使用し改善することができました。Schauer 氏と Guler 氏は、薬物動

態放出 (KDR) 実験データをもとに、シェルの厚みと遅延係数に関して最初の推測を行いました。彼らはモデリングにより予測された放出プロフィールと KDR データを比較しました。モデリング結果と実験データ間の最適数値を得るため、シェルの厚みや遅延係数は、最適化モジュールにより修正されました。放出カーブ (図 4 参照) は、細孔内の薬剤は瞬時に放出され、一方シェル内の分散分子はカプセルに包まれたポリマーからゆっくりと拡散されるということを示します。図 5 の結果は、シェルと比較で、細孔内により速い溶解と拡散を示します。

### 未来のステントの研究

薬剤溶出型ステントにより多大にサポートされている再狭窄率の低減は、医者や医療専門家たちの現在の目標です。Schauer 氏と Guler 氏が実装したモデリングのアプローチは、あるタイプの放出メカニズムに対し素晴らしい洞察を提供しました。簡略化された微細構造のモデリングは、放出カーブの詳細全てをカバーしていませんが、細孔 - シェルのシミュレーションは、十分な一致を示しており、理想化モデリングの妥当性に信頼をもたらしています。

微細構造の構成を解析するために、アメリカ食品医薬品局の研究者たちは、拡散インタフェース理論を基にさらに包括的なシミュレーションを開発しています。これらのモデリングの目的は、プロセス、微細構造と放出作用の関係を解明するために実践されました。シミュレーションにより、医療装置設計者は放出プロセスをさらに統制可能となり、そして循環器疾患向けの治療を改善する可能性も高まっています。

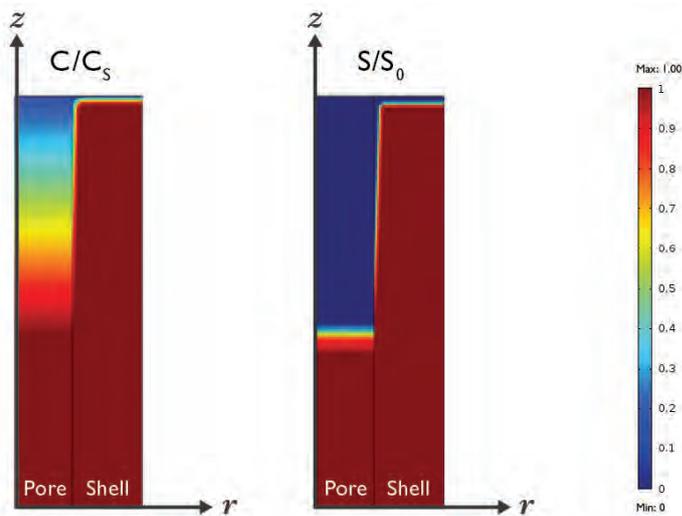


図 5. 体内の薬剤濃度の予測 時間 = 2 時間 :  $C/C_s$  = 溶解された薬剤濃度 / 溶解度の限界 (左)、 $S/S_0$  = 固体薬剤濃度 / 最初の固体薬剤濃度 (右)

# 保冷 :SRON は深宇宙望遠鏡の熱補正システムを開発

新星や惑星が誕生している宇宙空間領域を観測、分析するには超高感度検知器が必要です。放射線と過熱は、こうした感知器の故障の原因となり得ます。マルチフィジックスシミュレーションを活用して、SRON のチームは、このような壊れやすい装置と共に動作可能なイメージング分光計のための校正用線源を開発しています。

LEXI CARVER による報告

熱管理は宇宙空間で独特の役割を担っており、特に熱放射を検知するためにかなりの低温が必要となる極低温システムにとって、この熱管理は大変重要になります。これは、SRON オランダ宇宙研究機関のエンジニアリングチームが Spica Far-InfraRed (SAFARI)( 赤外線天文衛星 ) 機器であるピクセルイメージで遠赤外線スペクトルを測定する赤外線カメラを設計したときに直面した課題でした。SAFARI は日本の天体物理実験用の次世代赤外線天文衛星 (SPICA) に搭載される予定です。

SPICA は、これまでの宇宙望遠鏡よりも

より詳細に観察可能な能力を持つとされています。なぜならば、SAFARI は超高感度感知器を装備し、絶対零度近くの低温環境でも、以前の宇宙カメラよりもはるかに微弱な遠赤外線をとらえることができます。地上および宇宙空間での正確な補正機能はセンサーの正確性と本ミッションの成功にとって極めて重要です。こうした補正機能の設計と最適化を実現するために、SRON チームはその方向性を見極める手段として COMSOL Multiphysics® を利用することにしました。

## 望遠鏡調整システムにおける熱の課題の解決

この SAFARI の補正機能には、熱源温度にのみ依存するスペクトルで放射線を発生する黒体空洞もしくは放射線源が含まれ、これは信頼性の高い正確な補正機能です。「しかし SAFARI 検知器は余りにも高感度なので、この発生源の検出力は約百万倍と余りにも高く、対物レンズ口径や積分球を使用する場合には工学的に弱めなければなりません」と SRON エンジニアの Chris de Jonge 氏は述べています。「放射線は、積分球を通過した後、正確な出力とスペクトル分布を測定するために、SAFARI の検

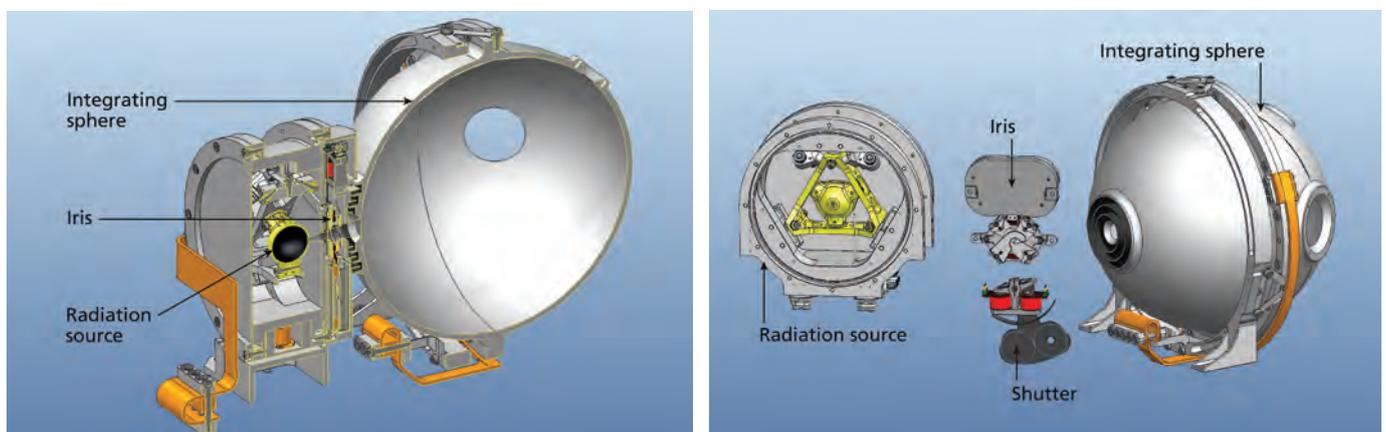


図 1. 左 : SAFARI 補正システムの横断面 右 : 個々のハード部品

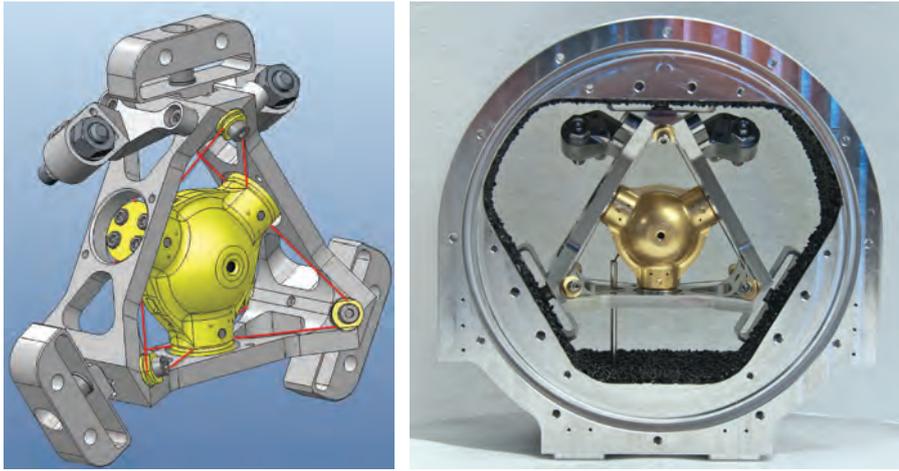


図 2. 左: ステンレススチール製ストリングス緩衝材を持つ放射線源の CAD 図面 右: 実物

出器配列上で再撮像されます」。放射線源と積分球の間には、機械的なシャッターと絞りがあります(図 1 参照)。このシャッターは開口部を放射線源に対して開閉し、この間に絞りはこの出力の微調整および変調を行います。

熱管理は重要です。このシステムは、その設備自体から発生するバックグラウンド放射線量を減少させるために、4.5 K(ケルビン)「Super-dark」環境に保たれています。この検知器の基本温度の変化、(宇宙船の方位によって影響される)バックグラウンド放射線、絞りとシャッターのメカニズムによって失われる出力は、この補正機能を全て妨害する可能性があります。

「この放射線源の温度は、放射線を生成するために、95K から 300K の間で設定されています。このことで、発生源と 4.5K の環境の間で大きな温度差が生じると同時に、これらの温度で可能な冷却力が数十ミリワットに制限されます」と de Jonge 氏は説明しています。「このことを解決するために、私たちは、温度の絶縁緩衝システムを開発する必要がありました」。SRON チームはこの発生源から他の機器への熱伝導を防止すると同時に不要な振動から発生源を保護すると考えられる高共振周波数を持つ硬質の緩衝が必要でした。

「COMSOL は、それを使わなければ解析が難しいと考えられる様々な形状を、素早く計算 (Study) することを可能にしました」

#### 温度の絶縁緩衝システムの開発

De Jonge 氏は COMSOL シミュレーションを利用して、この緩衝材にかかる熱負荷を計算し機械的剛性と熱負荷とのトレードオフの関係を模索しながら、様々な形状や素材を用いて緩衝コンセプトのモード解析を実行しました。「COMSOL は、それを使わなければ解析が難しいと考えられる様々な形状を素早く計算 (Study) することを可能にしました」と De Jonge 氏は述べ、「温度関数として非常に早く変化するブラケットおよび熱特性による非常に大きな温度勾配のために、温度依存材料特性が満たされなければなりません。最終的に私たちは、機械的剛性と断熱の最良の組み合わせを持つソリューションを選択しました」。この結果に基づき、このチームはこの放射線源を三角形のフレームに挟み込むために、薄い (100 μm) のステンレススチール製ワイヤー構造を設計し最適化を図りました (図 2 参照)。

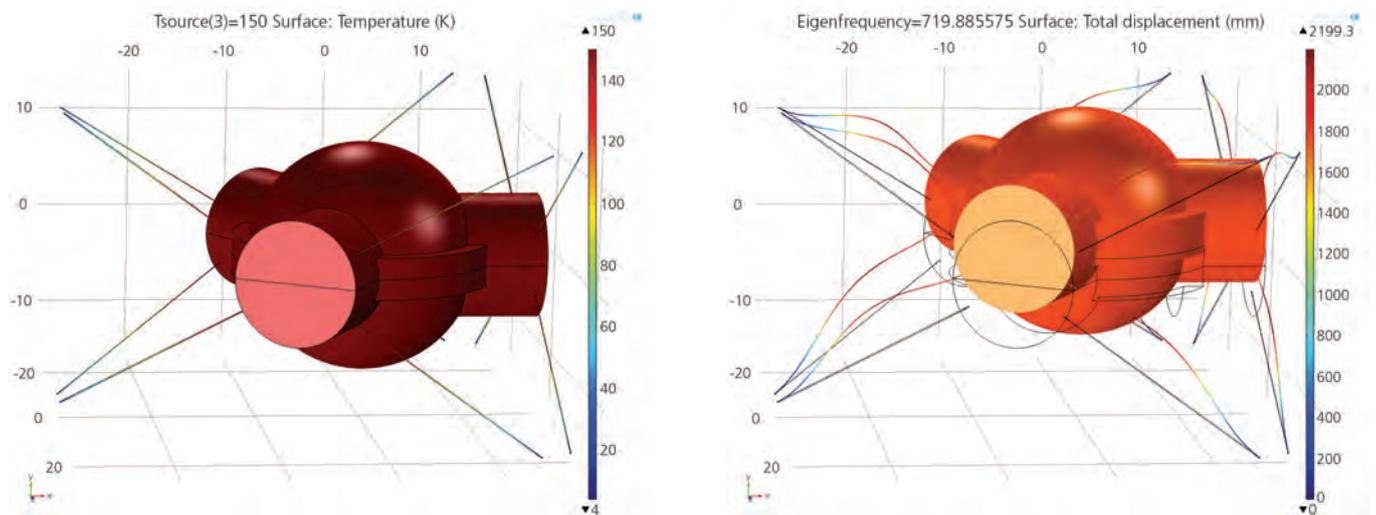


図 3. 左: (1) ステンレススチール製緩衝ストリング (2) 放射線源体 (3) 緩衝装置と 4.5K の周辺環境との接触面を有する放射線源システムの熱モデル 右: 720 Hz の共振周波数を示す放射線源のモデル解析

ステンレススチールは極低温で熱伝導率が低く、ワイヤー断面は非常に小さいのでワイヤーを通過する熱伝導が限られていることをこのシミュレーションで確認しました(図3参照)。150Kの発生源の温度に対して、実分析では伝導熱 10.17mWを示しました。このシミュレーション結果もほぼ近い値を示しており、0.01mWまで正確でした。この設計も放射線源の正確な作用を確認するために十分な720Hzの共振周波数を持たせました。

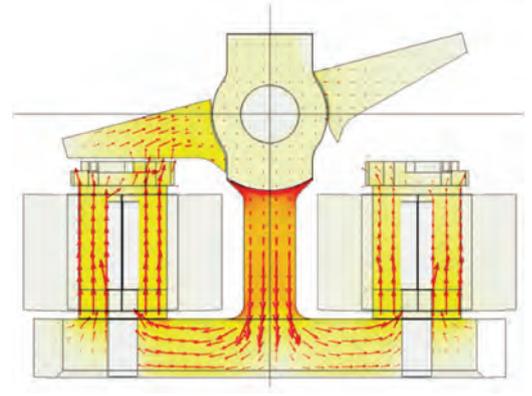
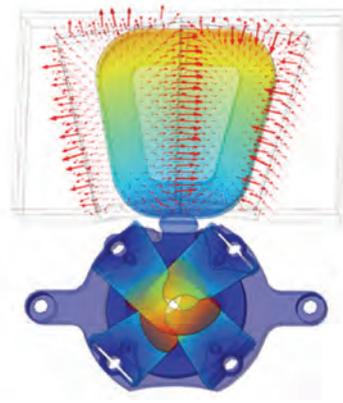


図 5. 左: ブレードとコイルそれぞれの総合変位 (表面プロット) と磁束密度 (矢印) を示す絞り機構のモデル。シミュレーションはマルチボディダイナミクスモジュールと AC/DC モジュールを使用して実施された。この図形は、COMSOL LiveLink™ を使ってインポートされた。右: シャッター機構のモデル。磁力は関数として研究された。

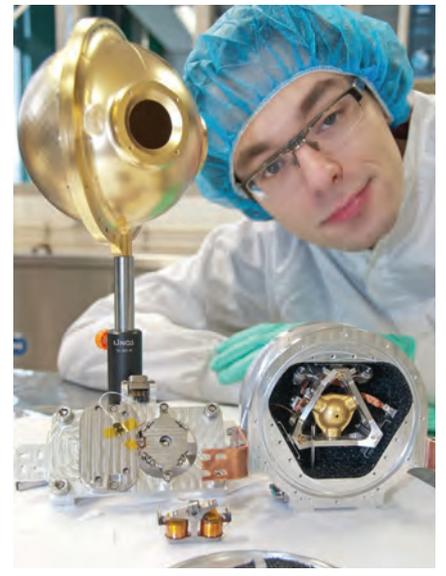
### 最大効果を得るための絞りとシャッターの最適化

次に De Jonge 氏は、コイル式駆動絞りとシャッターのメカニズムの最適化を図りました(図4)。この絞りは音声コイル動作装置によって駆動され、摩擦のないベアリングのまわりを回転する4枚のステンレススチール製ブレードから構成されています。シャッターは磁気ラッチ式です。

De Jonge 氏はこれらの装置の動作中の電流と放散する熱を最小限に抑えることを目指して、絞りコイルと筐体の形状を最適化するために COMSOL を利用しました(彼のシミュレーション結果は図5に示しています)。エアギャップとコイル巻線数の主要な設計パラメータのパラメトリクスウィープを実行することにより、このチームは、駆動電流 38mA および消費 1.6mW の最適なコイル設計を開発しました。

### 開発中の SRON 耐熱性深宇宙検出システム

SAFARI 高感度検知器と極低温システムの散逸メカニズムの必要性のために、管理された温熱環境を維持することが SPICA ミッションの成功には不可欠です。De Jonge 氏と SRON のチームは、COMSOL によって極低温で可能な最適な熱、物質、構造条件での設計の最適化が実現できるようになりました。SAFARI 補正機能の最初のテストで COMSOL シミュレーションの正確さが確認されました。SPICA は 2022 年に軌道に打ち上げられる計画です。この時に SAFARI は、私たちの太陽系以外の新しい神秘的な宇宙を明らかにする一助となると思います。



Chris de Jonge 氏: SRON の設計エンジニア  
SAFARI 補正システム開発担当

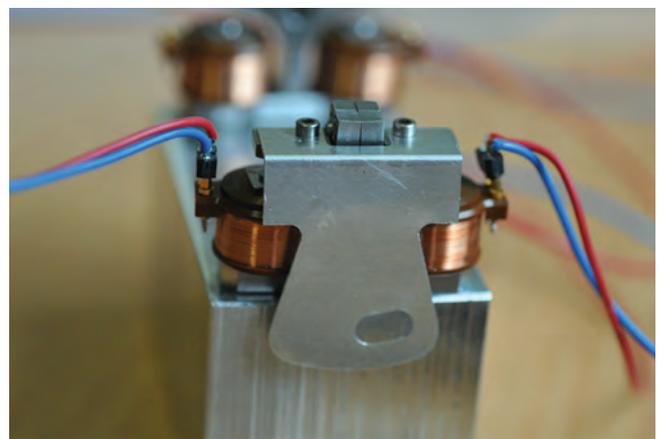
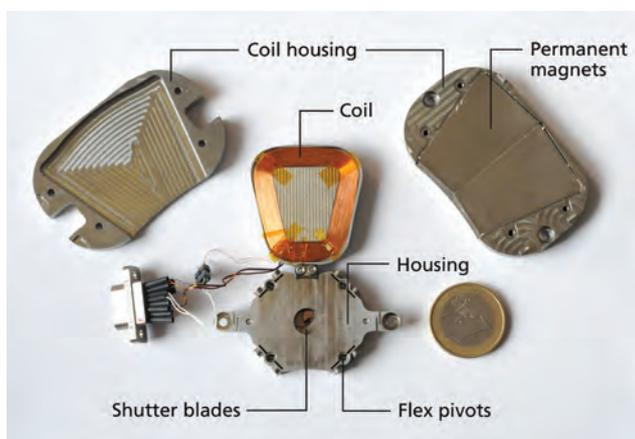


図 4. 左: 絞りの組立部品 (コイル、ワイヤー、筐体) (内部) ブレードの端が開口部の中央から見える 右: シャッター機構

# シミュレーションで有人宇宙船の 船内空気浄化システムを性能向上

有人宇宙船内の宇宙飛行士たちが必要な空気と飲料水は、生命維持装置により供給されます。NASA の技術者たちは、船内空気浄化・回復および環境モニタリング (Atmosphere Revitalization Recovery and Environmental Monitoring project) プロジェクトにより宇宙船クルーの安全のための船内空調装置を開発中です。

Lexi Carver による報告

Image courtesy of NASA

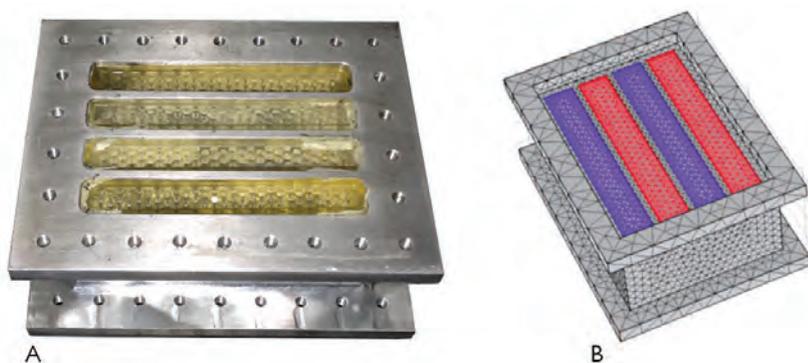


図 1. (A) 4 列の定温バルク乾燥装置 (IBD) の写真 (B) IBD のメッシュ化 COMSOL モデル 紫色の部分は湿気層を示し、赤色部分は乾燥層を示しています。

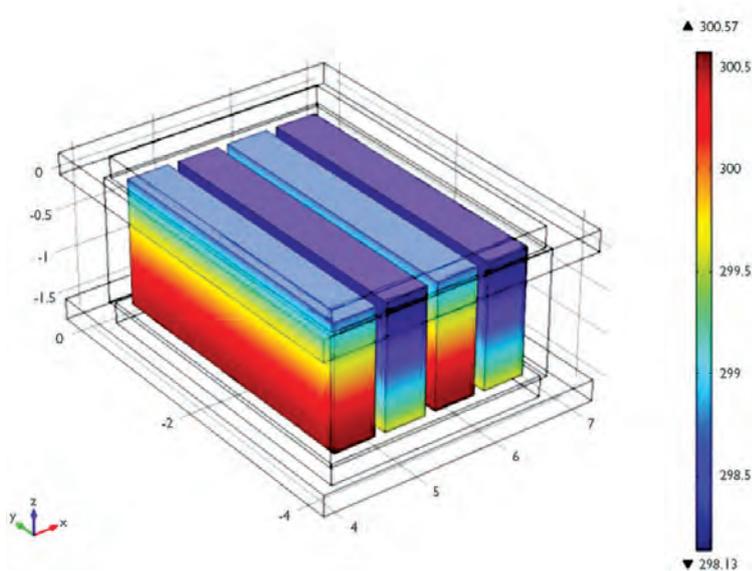


図 2. それぞれの層の温度 (K) を表示するシミュレーション結果 第 1 列および第 3 列は下方へ流れる湿った空気を含み、第 2 列および第 4 列は上方へ流れる乾いた空気を含んでいます。

有人宇宙船内の空気は、宇宙飛行士の安全と宇宙飛行任務の成功を確実にするため、定期的に浄化することが必要です。数か月にわたる任務では、空気は常に除湿され、水は再利用のために回収され、二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) は取り除かれます。宇宙船内空調システムの構成する装置の一つは節水装置で、NASA 宇宙船技術者の Jim Knox 氏は、船内空気浄化・回収および環境モニタリング (Atmosphere Revitalization Recovery and Environmental Monitoring:ARREM) プロジェクトの一環として、この装置の最適化をはかっています。彼は、マーシャル宇宙飛行センター (Huntsville, Alabama) のチームリーダーで、この装置の電力消費を減らし、節水を最大限にすることによって、より費用効率が高く、効果的な部品の製造をめざしています。彼らの目標は、空気中の水分の 80 から 90 パーセントを節約することです。彼らは NASA 飛行システム開発者に対して、移動可能時間と距離空間を飛躍的に増加する空気浄化と水分の回収を実現するための統合的な手法を提案したいと考えています。

## 効率の良い吸着作用による水分と二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) の分離

宇宙船内の空気の浄化には、まず水分を分離し、二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) を取り除き、水分が液体に濃縮される前に水分を空気中に戻すことが必要です。このチームが開発した節水システム (図 1A 参照) は、定温バルク乾燥装置 (Isothermal Bulk

Desiccant:IBD)と呼ばれています。これは、水分の吸着作用（水分を抜き取るための「乾燥層」）または脱着作用（水分を空気に戻すための「湿気」層）を促進するシリカゲル（乾燥剤）ペレットを並べた充填層といわれる密閉管から構成されています。それぞれ一対の層は熱の移動のために使われるアルミニウム発泡空間格子の間に置かれています。

この節水プロセスは、空気が湿気層から出ていくと同時に空気が乾燥層に入っていくという同時半周期で起こります。乾燥層内では、空気中の水分は発熱を伴いながらシリカゲルに吸着され、節水のためにこの気体を乾燥させてから、空気をCO<sub>2</sub>除去システムに移動させます。このCO<sub>2</sub>が除去された空気は湿気層へと再び流れます。同時に乾燥層での吸着によって生じた熱は、アルミニウム空間格子を経由して湿気層へ送られ、水分をシリカゲルから脱離させ、空気に戻すために利用されます。この伝熱作用は、乾燥層の温度を下げる付加的な効果があり、吸着作用を長持ちさせることが可能になります。この水分は、船室に送り返され、CO<sub>2</sub>は宇宙空間に放出されます。IBD装置を通過した後、船室の空気は熱交換器および遠心分離器にかけられ、水分を同時に液化・分離し、再使用のために回収されます。

### 気体の流れのシミュレーションと層の最適化

Knox チームは、COMSOL Multiphysics® を使い、4 列の IBD をモデル化しこの装置の効率を計算しました（彼のモデルは図 1B に表示されています）。この IBD の図形

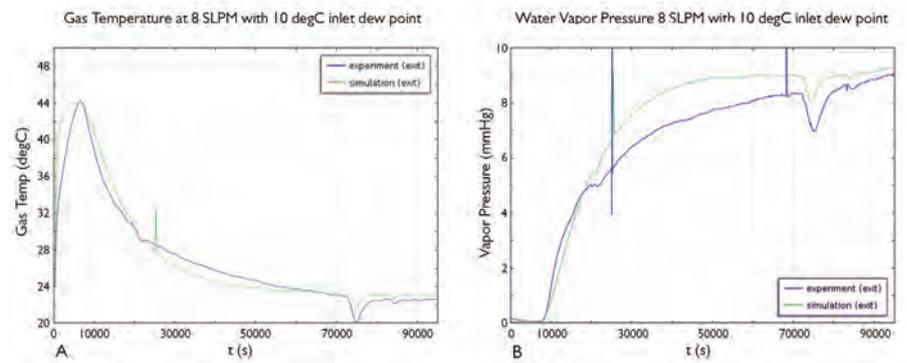


図 3. (A) ガス温度および (B) 水蒸気圧を示す出口付近の空気のシミュレーション結果

は Pro/ENGINEER® で作成され、LiveLink for Pro/ENGINEER® を利用して、インポートされました。「私たちが難解で複雑なジオメトリのマルチフィジックスシミュレーションを実行できるようになったのは、COMSOLのおかげです」と Knox 氏は感想を述べています。「私たちは、これらの層の中の多孔質媒体の流れ、複数の物質の伝熱、入力圧力境界をシミュレーションし、吸着速度を見出すことが必要でした。」発熱吸着のため、気体が下方へ流れると乾燥層では熱が発生することを留意していました。反対に湿気層は、気体が上昇するときに熱が失われます(図2及び図3参照)。

このチームのメンバーの Rob Coker 氏は、空気が乾燥層へ送り込まれる箇所、ブレイクスルー・テストを行い、IBD の効率を計算しました。最初に乾燥層から出る空気は完全に乾燥していて、全ての水蒸気はシリカゲルに吸着されていました。さらに空気が通過した後、出口付近での空気中の水蒸気密度が上昇し、シリカゲルパ

レットが水分をもはや保持できない状態となり、入口と同じレベルの湿気を示しました。このプロセスを観察することで、このチームは IBD モデルのパラメータ値を収集し、ブレイクスルー・テストと実験結果とを比較することができました(図3参照)。COMSOL の機能により彼らは、流出入および湿気 - 乾燥空気の半周期ごとに変化する境界条件の水濃度、流量、圧力を監視することができるようになりました。

このシミュレーション結果に従って、この IBD 装置は空気中の水分の 85% を取り除き、回収のために空気中に戻しました。このモデルを使用して IBD の効率を正確に予測することができました。これにより、彼らは、熱と関係する層の設計のさらなる改善を図ることができるようになります。

### 宇宙船内空気調整のための信頼性の高いアプローチを NASA へ提案

COMSOL シミュレーションにより、このチームは節水用部品のための貴重な最適化と設計指針を得ることができました。彼らは、電力使用量を最小限に抑え、CO<sub>2</sub> が除去される前に保存された水分を最大限に活用することによって、IBD の効率を高めています。これは、彼らが期待する再生システムの数多くの部品の一つであり、宇宙ミッションの範囲をさらに拡大可能とするでしょう。彼らはまた、CO<sub>2</sub> から酸素を分離して、宇宙船内に送り込まなければならない、O<sub>2</sub> の量を減らすことができる、長期ミッションに適した新システムを開発するために COMSOL シミュレーションを活用しています。このような革新的な開発と強力なシミュレーションによって、今までよりもはるか遠くへ飛行する有人宇宙船が間もなく実現することになるでしょう。



NASA MSFC の空気浄化コンピュータシミュレーションチーム 左から右へ: Rob Coker 氏, Carlos Gomez 氏, Greg Schunk 氏, Jim Knox 氏

# 革新的な断熱技術で 発展途上国にワクチンを輸送

Intellectual Ventures の Global Good プログラムは、世界中のあらゆる国にワクチンを届ける最新技術の開発に懸命に取り組んでいます。ワクチン保存容器 (Passive Vaccine Storage Device) は、特に外部の電源を使用することなく、ちょうど 1 バッチの氷のみでまる 1 か月間ワクチンを低温保存が可能です。

LAURA BOWEN による報告

発展途上国の多くの地域では電気へのアクセスが非常に制限されており、またいかなる種類の電力インフラを一度も使用したことがないエリアがほとんどです。この現実には救援活動家と医師たちにとって大きな課題となっています。近年、ある一定温度での冷却保存が必要なワクチンを、そのワクチンを最も必要としている遠隔地に届けることが出来ませんでした。Intellectual Ventures (IV) の Global Good プログラムの一環として、革新者チームは、ワクチン保管容器 (Passive Vaccine Storage Device :PVSD) と呼ばれる高性能断熱材が使用されている魔法瓶のような容器を発明しました。この容器により電力供給が全く無いあるい

はほとんどないエリアでのワクチンの保存方法が一変しました。

## 厳格な安全要求事項への対応

ある特定の温度内でワクチンを常に保存できない場合は、そのワクチンは廃棄物となり使用不能となってしまいます。Global Good の研究者たちは、世界保健機関から指示された下記のパラメーターを基に任務を遂行しました。安全に届けるために、ワクチンは 0° ~10° C までという非常に限られた温度にて保存されなければなりません。

研究者たちが設計した最初のプロトタイプは、極低温貯蔵デューワー瓶を基にしており、非常に冷たい液体を保存するために

真空とマルチレイヤー断熱技術に依存していました。液体窒素や液体酸素を長期間保存可能なデューワー瓶では、しかしながら、氷はわずかに数日で溶けてしまいます。

Global Good の研究者たちは、高温でも高いワクチンレベルが維持することが可能な PVSD の材料や設計を特定するために、COMSOL Multiphysics® で作成した熱 - ワクチンのシステムモデリングを活用して実験を行いました。極低温貯蔵デューワー瓶のように、PVSD は真空空間内の伝熱を最小限に抑えるマルチレイヤー断熱材を使用しています。実際、高品質の真空は対流と気体の伝導伝熱を除去し、マルチレイヤー断熱は放射熱伝達を劇的に除去します。マルチレイヤー断熱材は、反射する非常に薄いアルミニウムシートで低伝導率のスペーサーから出来ており、宇宙船で使用している素材とよく似ています。

「Global Good の研究者たちは、高温でも高い真空レベルが維持することが可能な PVSD の材料や設計を特定するために、COMSOL Multiphysics で作成した熱 - 真空システムモデリングを活用して実験を行いました。」



図 1. Intellectual Ventures チームと救援活動家たち。現地にてワクチンを輸送する PVSDs と一緒に。

「モデルの作成に長時間必要な複雑なモデルの場合でも大幅な時間削減につながり大変優れています ... 全体の流れがシームレスで使いやすく、マルチフィジックス連成についても説明が分かりやすい」

### 極限状態下でのワクチン保存のシミュレーション

Intellectual Ventures の Global Good プログラムでは、厳格な実験を行うためにサハラ以南のアフリカの気候とよく似た状態を環境室にて作成し、彼らのプロトタイプのパフォーマンスを理解しました。しかしながら、高品質プロトタイプ真空デューワーを作成するにはかなりの労力を有するため、プロトタイプを作成する前により効果的で設計の方向性を広範囲に広げるため、チームは COMSOL Multiphysics の伝熱モジュールと分子流モジュールを使用し始めました。冷却時間を最大限に伸ばすための内部形態の最適化、高い真空能力の維持、そして真空空間内の気体放出、これらは彼らが掲げた課題です。気体放出を最小限に抑えることは大変重要で、PVSD の使用期間中を通して真空空間内にたとえ中程度の量が放出されたとしても、それにより真空はその完全性を失い装置内への伝熱増加へとつながってしまいます。

その装置のジオメトリは、ワクチンの保存期間を最大限に最適化されたもので、現地で活動する医療従事者がアクセス可能でなくてはなりません。この課題をクリアするために、PVSD の外部には、保護用緩衝ゴムで覆われた金属エンクロージャーが使用されています。一方装置内部の一番上部はカンチバレーのネック式で外部と接続することになっており、より小規模な骨組みで構成されています。(図 2 参照) この設計の場合、伝熱が発生するのはこの接続部のみです。また複合式ネックにより真空空間は維持され、それにより外気からの気体透過の心配もありません。

COMSOL での研修を受けた PVSD 設計サポートエンジニアの 1 人、David Gasperino 氏は“COMSOL Multiphysics は、モデルの作成に長時間必要な複雑なモデルの場合でも大幅な時間削減につながり大変優れています。”と語りました。彼は“全体の流れがシームレスで使いやすく、マルチフィジックス連成についても説明が分かりやすい”と語り、高く評価しています。チームは、使用可能な広範囲におけるモジュールが彼らのモデルを通して探索する必要のある複雑な物理の把握に役立つことに気づきました。

### 次世代のための保存装置設計の改善

PVSD 設計に投入された実験と理論的研究の結果、装置は発展途上国でのワクチンの低温流通体系に非常に重要な影響をもたらし、より多くの辺境地にワクチンを届けることが可能になり、そして電力を使用せずに長期間ワクチンを保存することを実現しました。将来、Intellectual Ventures は、この保存装置をさらに改善し、冷却保存したワクチンをより効率的でより長期間保存可能な装置へと改良することでしょう。このチームは、今後も画期的な装置を作り続け、世界中の人々の生命を救う重要な任務を担うことでしょう。

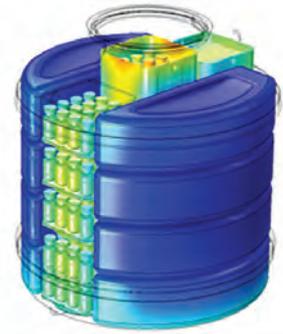


図 2. 上: 積荷直後の PVSD の熱シミュレーション。氷の塊が溶けるプロセスは COMSOL Multiphysics の相変化機能を使用してモデリングされている。

下: PVSD は、極低温貯蔵デューワーと同様な温度管理保存方法を使用しています。1 バッチの氷でワクチンを長時間保存可能です。

## 核廃棄物貯蔵施設での腐食との戦い

GARY DAGASTINEによる報告

Sogin 社での、放射性廃棄物のドラムの腐食を防ぐ、シンプルでエネルギー効率のよい除湿システム的设计にマルチフィジックスシミュレーションが貢献

腐食は金属にとって情け容赦のない執念深い敵であり、この敵と戦うのが核廃棄物を収めた鉄のドラム缶であれば負ける訳にはいきません。

このような状況が発生しているのはイタリアです。イタリアでは国内の原子力発電はすでに停止されているものの、発電、研究、医学、工業分野での活動の副産物として出される低レベル放射性廃棄物を安全に貯蔵する必要性は継続しています。

Sogin 社はイタリアの国営会社であり、同国内の核関連施設の廃止や放射性廃棄物の管理を担っています。

### 核廃棄物貯蔵には正確な湿度管理が必要

同社で進行中のプロジェクトの一つが、イタリア中心部にある以前は原子力発電所であった施設のビル改修です。目標は、低レベル放射性廃棄物を国の永久貯蔵施設に運べるようになるまで一時的に貯蔵するための、国内および国際的な要件を満たすことです。

一時貯蔵施設は広さ約 30 m × 15 m で 1 階建ての長方形の空間であり、2 つの部屋に分かれています。廃棄物は放射性物質であることから、コンクリートで包まれた鉄のドラム缶に入れて貯蔵されます。Sogin 社の建築技師であり、このプロジェクトのチームリーダーである Gianluca Barbella 氏は次のように説明します。「使用する鉄製ドラム缶がステンレスではないため、空気中の湿度管理が必要です。ド

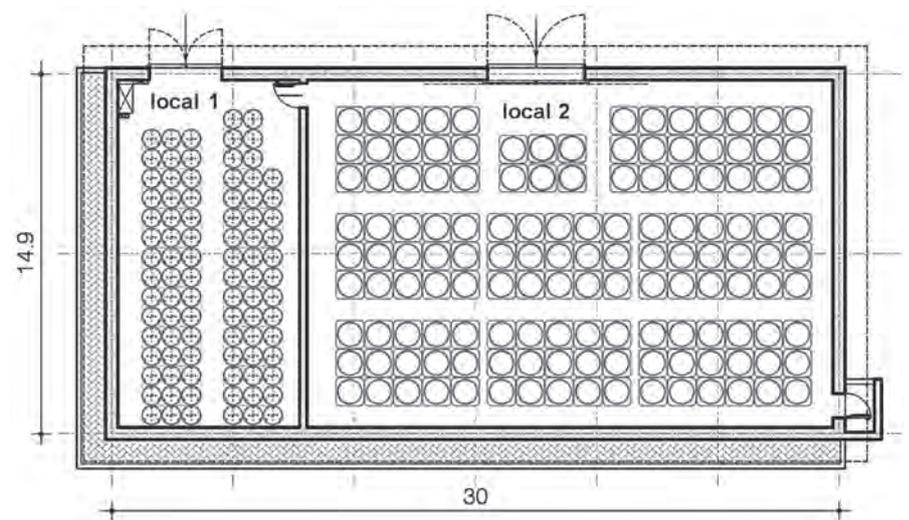


図 1. 低レベル放射性廃棄物の一時貯蔵施設となる、2 つの部屋に区切られた空間の平面図。廃棄物はステンレスではない鉄製ドラム缶に入りコンクリートに外側を覆われた状態でこれらの部屋に貯蔵される。

ラム缶はコンクリートで覆われておりそこから取り出さねば検査ができず、腐食の進行を常時監視するのは困難です。また、この施設は高い相対湿度にさらされています。そのため、湿度管理は必須なのです。」

しかしながら、25 年と予測されるこの施設の耐用年数の間、最適な環境を維持するための暖房、換気、空調 (heating, ventilating, and airconditioning, HVAC) システムのコストは相当なものになります。

さらに、施設を拡張することはできないため、HVAC システムの要件によっては廃棄物貯蔵スペースが狭くなってしまうかもしれません。また、設備の不具合又は計画的なメンテナンスにより HVAC システムに運転不能時間が生じることは避けられません。

有望な代案の一つは工業用の恒温除湿装置を使うことであり、これらは比較的小さく移動可能であり、メンテナンスの手間も少なく、運転費をかなり抑えることがで

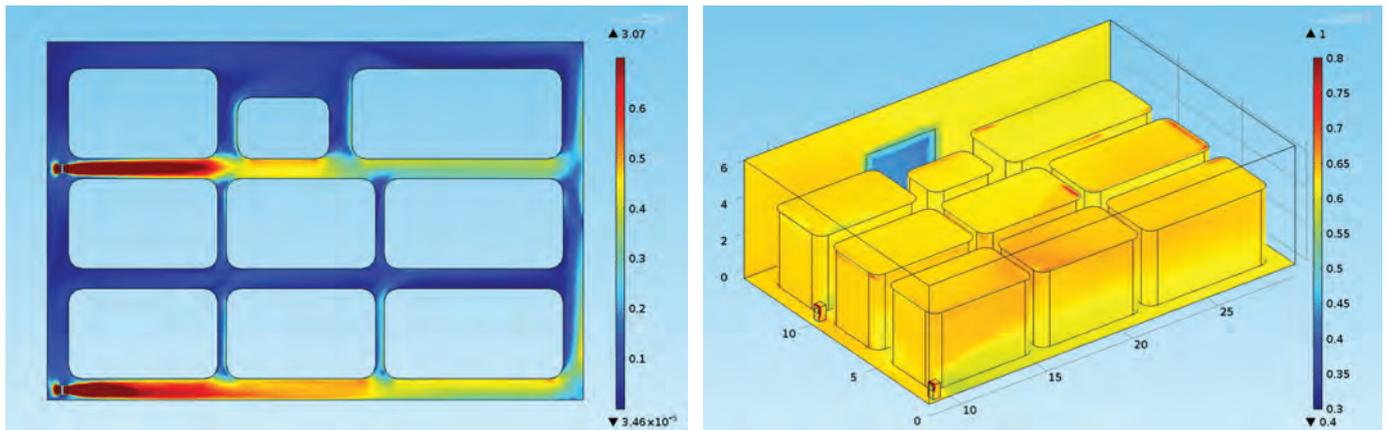


図 2. イタリアの Sogin 社は、25 年にわたる放射性廃棄物貯蔵を目的とした部屋について、恒温除湿装置の種類や配置により変化する室内での気流速度（左）および表面相対湿度（右）の分析を COMSOL のシミュレーションを用いて行った。シミュレーションの結果は技術者が空気の様子を最小限に抑える除湿システムを設計する際の助けとなり、運転効率の最大化および相対湿度の最適化が可能となった。

きます。恒温除湿装置はカルノーの可逆熱サイクルに基づいており、通風機により装置内に取り込まれた空気が蒸発装置を通過することで冷却されます。空気中の余分な水分は凝結し水滴となってタンクに落ちます。その後空気はコンデンサーを通過することで再度温められ、湿度が下がり温度が上がった状態で周囲に放出され再利用されます。

Sogin 社のこのプロジェクトは、2 種類の工業用恒温除湿装置の大きさおよび構成の影響を検討する数値シミュレーションを頼りに進められました。この解析を行ったのが Mechanical Design Department の Piergianni Geraldini 氏です。目標は設備要件を特定すること、また、部屋の中での装置の最適な配置を決めることでした（図 1）。

### シミュレーションが最適なレイアウト決定の助けに

チームではまず、単相、非圧縮性の  $k-\epsilon$  乱流モデルに基づいて定常流体流れの検討を行い、室内の乱れた空気の流れを調査しました。その目的は、恒温除湿装置を使用した場合の、貯蔵エリア内での気流速度領域を再現することでした。

その後、この調査結果を時間依存の完全連成解析シミュレーションに用いて、貯蔵室の雰囲気中の熱および湿度の伝導を分析しました（図 2）。検討の結果はすべて恒温除湿装置の最適な配置を決めるために使用されました。

シミュレーションはすべて COMSOL Multiphysics® および伝熱モジュールを使って行われました。「このように洗練されたシミュレーションツールがなかったとしたら、単純な近似法を装置メーカーの提供する性能特性曲線と組み合わせることで除湿プ

ロセスのモデル化を行わなければならなかったでしょう。実施したシミュレーションは、COMSOL が 3 次元の熱および水分伝導問題を解くための高い性能を持つことを示していました」と Geraldini 氏は話します。「COMSOL Multiphysics はさまざまな物理現象を容易に組み合わせることができ、インターフェースも直感的です。また、モデル化プロセス全体を同一インターフェースで管理する可能性も開かれています。」

「シミュレーションの助けにより、他の配置では 4 機を必要とした除湿性能を 2 機の恒温除湿装置で実現するレイアウトを設計することができました。」と Barbella 氏は述べています。「私たちが設計したシステムは、停滞するエアポケットを制限することで装置の運転効率をピークにすることが可能であり、この施設がひとたび完成し稼働開始となれば、ドラムの腐食リスク低減に役立ってくれることでしょう。」

「COMSOL Multiphysics はさまざまな物理現象を容易に組み合わせることができ、インターフェースも直感的です。また、モデル化プロセス全体を同一インターフェースで管理する可能性も開かれています。」

# 建物損傷防止に マルチフィジックスシミュレーションを利用

建築物基礎は、異常気象時の湿度と温度変化により損傷を被る可能性があります。Vahanen Group 社は、霜害を未然防止するための知識や建築物の安全維持をサポートするために必要な評価知識を建築物チームが取得できるよう、マルチフィジックスシミュレーションを使用しています。

LEXI CARVER 氏による報告

あまり知られてはいないことですが、地下の断熱材や暖房システムを活用して危機的損傷を未然に防止することができます。またこのシステムは居住者の安全と室内の暖かさを維持することが可能になります。コンクリートは多孔質のため水や混入物質はその土台に入り込みます。地下の土壌や基礎が凍結した場合、ひびなど構造的損傷が起こる可能性があります。古い建築物の中には断熱材によってこの損傷発生を未然に防止したり、他の建築物の場合ではボイラーから建物の室内加熱装置までつながっている加熱管によりこの損傷を防いでいます。

進行中の損傷は、建物の座屈や倒壊のような重大なリスクの引き金となりえます。寒さと湿度の課題に取り組んでいる Vahanen Group 社 (Espoo, フィンランド) は、建築物品質評価、提案などのような建物に関するサービスに特化した企業であり、改築を検討している建築物に対し霜害の可能性を分析します。例えば既存の暖房装置やパイプなどが損傷し修理が必要な場合、彼らの業務は特に必須となります。

## 建築物の断熱の最良方法とは？

Vahanen 社の建築物専門家、Pauli Sekki 氏は、リスク評価を行う時に COMSOL Multiphysics® のシミュレーションを活用しています - 彼が使用する目的は、基礎もしくは暖房装置改築において、外部の凍結断熱装置が必要か否かを判断するためです。もし不必要なものを設置してしまったら、それはお金、時間、そして労力の無駄になってしまいます。

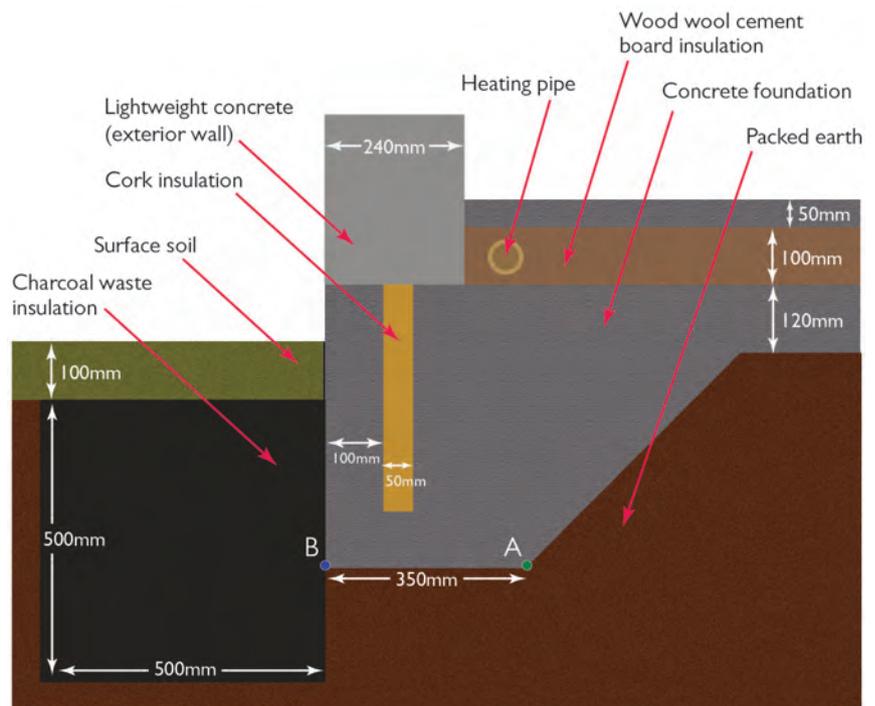


図 1. 建築物モデルジオメトリの概略図。加熱管はボイラー室から室内暖房装置までつながっており、同時に建物の基礎も保温しています。

1 プロジェクト例として、Sekki 氏の COMSOL モデリング (図 1 参照) をご紹介します。この図には、基礎、土壌の緩み / 充填レベル、断熱の種類、コンクリート壁の重量、壁と基礎脇で建物の地下を通っている暖房装置のパイプが含まれています。

最初に Sekki 氏は、フィンランド、ヘルシンキ地域の天候データを基に温度変化をシミュレーションしました。政府の凍結データ表は、年間の合計凍結時間 (FDH) を表しています。すなわち 1 日の平均気温 0°C 以下の気温を数値で表しています。(例

えば、日平均気温が -5°C の時、FDH は 5 度 x 24 時間 = 120) 毎日の FDH を合計したものが年間合計数値になります (年間凍結インデックス)。ヘルシンキでは約 14,000 FDH が一般的です。

現在のデータを基にすると、Sekki 氏は歴史的にみて平均 50 年に 1 度の間隔で起こる“異常な凍結”量を異常な厳冬としました。建築物の強度と寿命の重要性を考慮した場合、改築は通常の冬だけではなく、大変まれですが非常な厳冬にも耐えられるだけのより強い耐久性がなくてはなり

ません。Sekki 氏は、“設計と建築チームは Vahanen 社に戻り、彼らが出した修復計画が安全で耐久性もあり、そして使用可能な資源と材料を最大限活用しているかどうかを検証しました”と説明します。“そして私たちは COMSOL にその情報を求めたのです。”

今回のケースで彼が必要だったことは、損傷した加熱管の完全撤去は建物に損傷を与えるかどうかを決定することでした。既存の断熱は効果的でしょうか？この質問に答えるために、彼はパイプ、断熱材、そして基礎の伝熱をそれぞれモデリングしました。“COMSOL Multiphysics のツールは、このような複雑なモデリングでも簡単に使用できます”と彼は語ります。“境界条件設定はほぼ制限なく全ての事が実現可能になり、これは非常に大きなメリットになっています。”

### 霜害の未然防止

Sekki 氏は、コンクリート基礎の最も低い 2 か所の角の温度についてシミュレーションを使用して予測しました。(図 1、ポイント A と B) 彼は、以下の 3 ケースを解

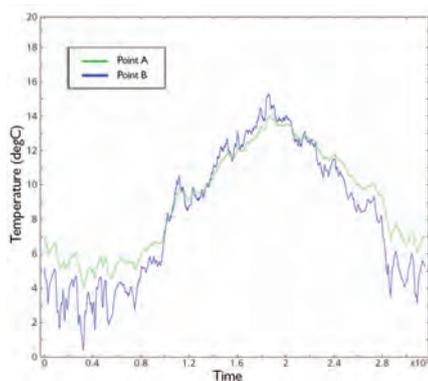


図 2. EPS 断熱材に追加修復した建物がある地域の一般的な年間気温のシミュレーション結果 (14,000 FDH)

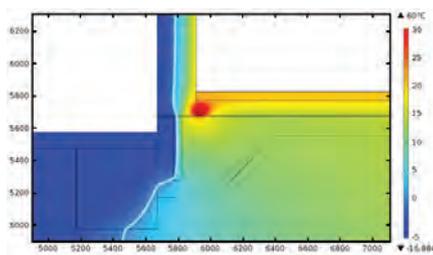


図 3. 50 年に 1 度訪れるといわれている厳冬 (40,000 FDH) 時の未改築建物の温度分布

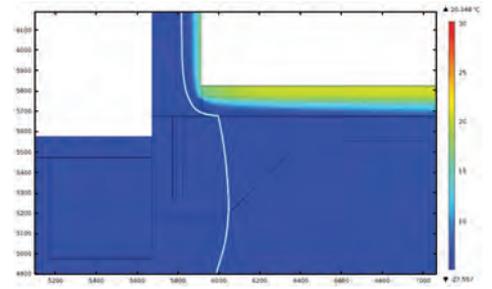
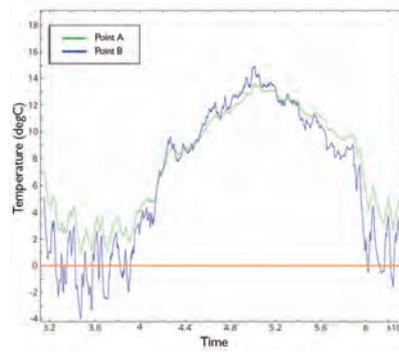


図 4. 改築後 EPS 断熱材を追加改築した建物の温度結果 (40,000 FDH の場合からの変化)。オレンジ色の線 (グラフ線) と垂直の等高線 (表面プロット) は 0°C を示します。

析しました：オリジナル構造、暖房システム修復後の構造 (パイプからの伝熱が全くない状態)、そして損傷した木毛セメント板 (WWCB) を発砲スチロール (EPS) 断熱材に交換修復後の構造。

ヘルシンキの一般的な年の地面温度は、オリジナル構造、暖房システム修復後の建物に対しては損傷を与える危険はなく、未然防止が十分可能なほど暖かいことが分かりました。しかし、WWCB 断熱を EPS と交換後、基礎近くの地面温度は 0.5°C にまで下がり (図 2 参照)、これは懸念するに値する数値となっています。“新しい EPS 断熱構造は霜害の被害にあう可能性がありました” “マルチフィジックスシミュレーションのおかげでそれを事前に防止することができました” と Sekki 氏は語ります。

### 最も厳しい冬に備えて強靱な構造を維持

建物を長い冬の間の設定でシミュレーションした結果、オリジナル構造基礎のみが氷点下の気温でも安全に建物を維持可能だという結果を得ることが出来ました。(図 3 参照)

シミュレーション上では、WWCB 構造を修理した場合、基礎周辺の温度は -2°C まで下がりました。基礎構造を EPS 断熱に追加改築した場合は、温度はさらに下がり -4°C の数値を示しています。これが意味していることは、加熱管を撤去してしまうことは建築物基礎に重大な損傷を与える可能性があることを示唆しています。それと同時に何か他の断熱を追加する必要があるということです。

### 正当な提案を基に構造的完全性を順守

Sekki 氏はこの分析結果を活用し、ヘルシンキのような気候を持つ地域での安全で確実な建築、増築に役立てています。複雑なジオメトリが必要な暖房構造を評価する場合も、シミュレーションを使用し評価することが出来ます。建築チームへ確実なサポートを提供するという目標に近づくため、Vahanen 社でもまた COMSOL を使用し、過度熱、水分移動、室内の空気の流れを含んだモデリングを実施しています。“シミュレーションのおかげで、お客様に適切なアドバイスを提供することが可能になりました。” また “最終的に構造に損傷を与えてしまうような改築を事前に防ぐことも可能になりました。”



Pauli Sekki, building physics specialist for Vahanen Group.

# 血液分析の最適化： 実物試作が困難な時、シミュレーションが解答を提供

物理的に測定することが難しい部分を計測するために、HORIBA Medical 社はシミュレーションを使用して最適化を試み、優れた血液分析装置のさらなる改善に努めています。

ALEXANDRA FOLEY による報告

血液分析のような臨床検査は、病院への入退院や治療方法などの重要な決定事項に対し最大 70% もの影響力を及ぼしています。そのため、これらの検査の正確性は極めて重要で、患者の病気の治療、もしくは命を救うという核心にも影響してい

ます。医療診断装置を世界中に提供している HORIBA Medical 社にとって、研究やプロセス開発においてシミュレーションソフトウェアは大変重要な役割を担っており、これらの診断が最大限正確で広範囲になるようにサポートしています。

HORIBA Medical 社の最先端血液分析装置は、血液分析としては周知のアプローチで、光学的測定と、サンプル解析を実装する電気インピーダンスの両方の組合せを活用しています。インピーダンス測定装置は、血液が装置内を通過するマイクロアパーチャ - 電極システムを活用しています (図 1 参照)。電気インピーダンスは、細胞数のカウントやサイズ測定を行い、また赤血球、白血球、血小板の分類も実施します。インピーダンス測定後、レーザーと光測定器により白血球の種類は分類されます。

HORIBA Medical 社の血液学的関連製品や臨床化学装置は、スピード、正確性、サイズ、そして使いやすさにおいて高い評価を得ています。“今日、臨床検査専門家たちは、ますます複雑化する検査に対応可能なシステムを設計する必要があり、同時にそのシステムは検査結果を容易に解析可能なシステムでなければなりません”と、HORIBA Medical 社、Scientific Computing Engineer の Damien Isebe 氏は語ります。“数値シミュレーションを使用すると、これらのゴールを達成可能な装置設計が実現できます。” HORIBA 社はこの数値シミュレーションを研究活動の中心におき、予算の 10% は研究開発活動費として割り当てています。

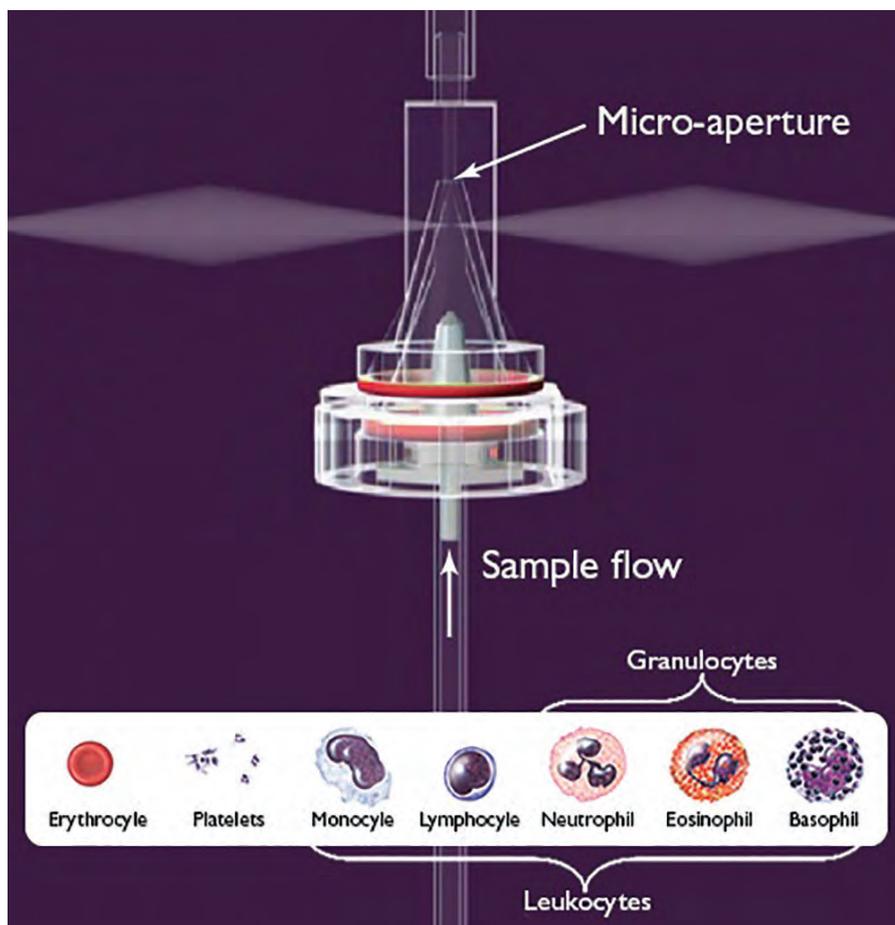


図 1. ABX Pentra Series Analyzers のアパーチャ - 電極システムの略図

## マイクロアパーチャ-電極システムのシミュレーション

Isebe 氏は、HORIBA 社の医療用最先端血液分析装置である Pentra Series 内の電気インピーダンスシステムの改善のために COMSOL Multiphysics® を使用しています (図 2 参照)。それは、完全自動プロセスで、分析チャンバー内に血液サンプルが設置されると、水圧チャンネルを通過し、その後試薬と希釈されます。希釈後、サンプルは、1 対の電極が両側面に配置されている計数-測定チャンバーのマイクロアパーチャに送られます (図 3 参照)。

電極は、計測チャンバーの内部に強力な電場を作成します。血液サンプルの粒子がマイクロアパーチャを通過する時、媒体の電気インピーダンスは 2 本の電極間の電圧変化を誘導します。この電圧差により、粒子数と粒子サイズは計測され、より大きな電圧差ほどより大きな分子に相当します (図 3 参照)。

## 「コンピュータ解析やスーパーコンピュータの性能の進歩により、数値シミュレーションは、理論、実験につぐサイエンスの第 3 の柱となっています。」

“計数チャンバー内では、複雑な物理的プロセスが数多く起こっています：高速な流速、アパーチャ通過内での圧力低下、伝熱、強力な電場、そして機械的設計問題から発生する汚染の危険性” と Isebe 氏

は語ります。“この装置でこれらの物理がどのように影響しあうのかという理解をさらに深めるために、私たちは COMSOL を使用しています。” COMSOL Multiphysics が持つ大変有益な点は、CAD モデルを直接ソフトウェア環境にインポートすることが可能だという点です。“測定チャンバーの

ドメインを作成します。” 1 度、アパーチャ-電極システムジオメトリ (図 4 参照) が COMSOL 内にインポートされると、装置の実際のジオメトリを使用して、解析と最適化が実装されます。

### 複雑さが正確な測定に影響

Isebe 氏の研究の主要目標は、その装置が持つ正確性をマイナスへと影響している要因を分析し制御することによって、インピーダンス測定システムを最適化することです。これには、アパーチャを通過した粒子軌道とその方位が含まれます。これらは両方とも電圧差測定に影響を与える要因です。

例えば、粒子が、高い勾配磁場を示すアパーチャの側面近くを通過する時、(図 5 の血液 T2 参照)、粒子はアパーチャの中央を通過するよりも、より高い磁場を通過することになります。このような現象はエッジ効果と呼ばれています。この効果のために、電気パルスの結果は変形し、粒子サイズの計算結果は過大なものとなってしまいます。

CAD モデルのインポートは、コンピュータドメインの展開を可能にします” と彼は説明します。“もしシステム内の流量を計算したい場合、シミュレーションソフトウェアが CAD モデルから直接かつ自動的に流体



図 2. ABX Pentra 60C+ (左)、Pentra 80 XLR (右)、Pentra シリーズの血液分析装置、インピーダンス法による血液計数と血液粒子のサイズ測定にアパーチャ-電極システムを使用

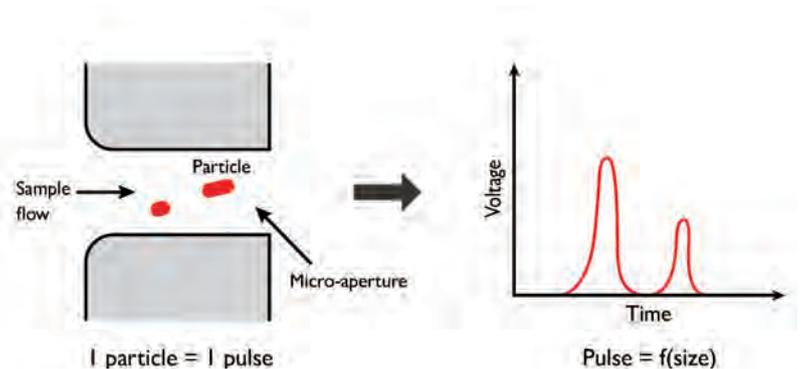
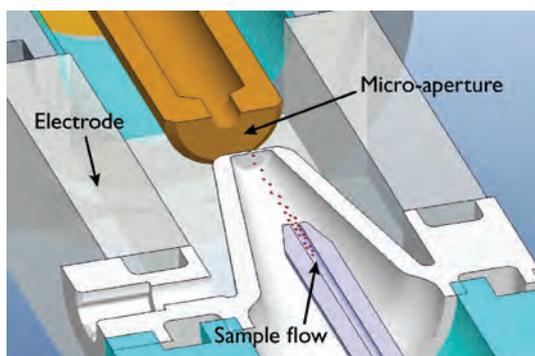


図 3. インピーダンス測定の原理

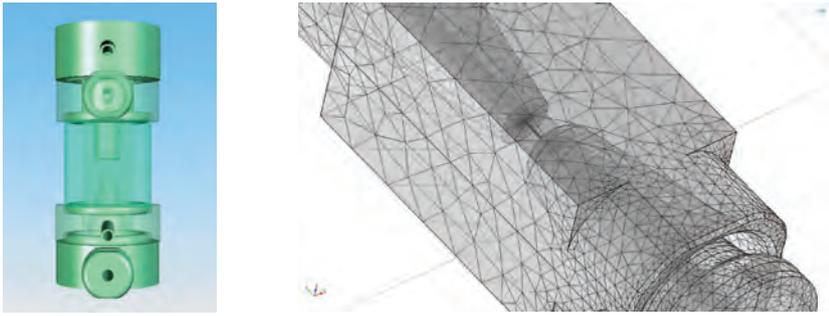


図 4. CAD インポートモジュールを使用して、COMSOL Multiphysics にインポートされたマイクロアパーチャ - 電極システムの CAD モデル

アパーチャを通過する粒子の方向によっては、これはさらに複雑化してしまいます。アパーチャを縦に通過する粒子、平行して通過する粒子により、磁場分布は異なります。その結果、粒子サイズの過大評価は再び起こってしまいます (図 6 参照)。

#### 診断効率の真の向上

Isebe 氏は、粒子の血液分析や方向転換を可能とする方法を開発するためにシミュレーション技術を活用しました。“これは大変小さなシステムですので、測定実験を実施することは大変難しいのです”と Isebe 氏は説明します。“物理的プロトタイプのみでは、アクセス不可能なプロセスも改善することが出来、これはシミュレーションのおかげです。”

歴史的に見て、アパーチャ - 電極システムを使用した生物学的粒子の計数やサイズ測定は、かつてはマイクロアパーチャ内に均等に分布されたサンプルから得た仮定数を活用していました。平均粒子サイズは、粒子の血液分析や方向によって生じる誤差を相殺するために統計的に確定されました。この相殺方法では、側面近くを通過する粒子に生じた電気パルスは考慮されて

いません。しかし実際には、高速計数のため一般のパルスと変化したパルスを区別することは困難です。

この装置の正確性をさらに改善し、解析誤差を低減するために使用される流体力学的フォーカスを証明するために、Isebe 氏は、数値モデルを開発しました (図 7,8 参照)。“流体力学的フォーカスでは、アパーチャ内を通過するサンプルレートを制御し、アパーチャ内の中心軸にサンプルフローが近づくように移動させるシーフローを使用します。”と Isebe 氏は説明します。“このシステムのシミュレーションでは、粒子流量解析と組み合わせさせたインピーダンス変化により発生する電気パルスをモデリングするマルチフィジックスアプローチを使用します。”

Isebe 氏は、流体力学的フォーカスがどのようにしてインピーダンス測定を改善するのかの情報を得るため、また装置の最適形状の確定などを解析するためにシミュレーションを活用しています。“これらのモデルを使用して装置の速度場を正確に計算

「シミュレーションのおかげで、物理的プロトタイプでは到達不可能であったプロセス改善を実現することができました。」

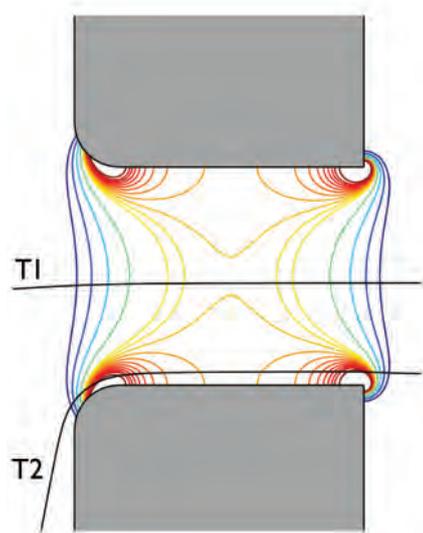


図 5. 電極 - アパーチャ内部の電場等高線図。2つの粒子軌道、T1 と T2 が示されている。

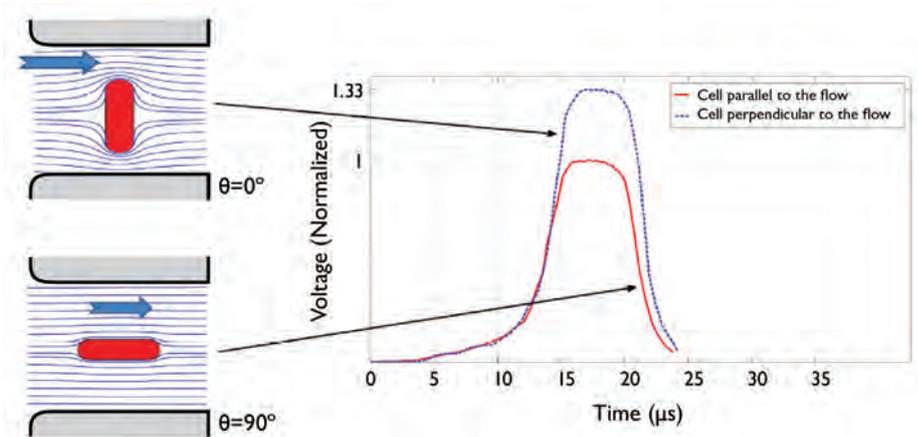


図 6. 電極 - アパーチャシステム内の電場分布の粒子配向の影響と異なる電圧差の結果を示しています。

し、マイクロ-アパーチャの入り口付近の加速局面を解析します。”その後、これらの情報を活用し、どの設計が最も正確な結果を出すのかを確定します。シミュレーション結果は、流体力学的フォーカスは粒子測定 of 正確性を大幅に改善したということを示しました (図 8、上部参照)。

続いて、これらの解析は実験結果と比較されました。“私たちが2つのケースについて、シミュレーションと実験結果を比較した結果、ハイドロフォーカス装置は、そうではない装置よりも2倍も正確でした”と Isebe 氏は、図 8 下図を参照しながら説明しました。

### テクノロジーイノベーションを証明するシミュレーション

血液学的解析の電気インピーダンス測定 of システム設計と最適化は、力学、流体、化学そして電気解析の連成を含むマルチフィジックスアプリケーションそのものでした。この結果により完成した装置、ABX Pentra シリーズは、今日の市場における完全自動血球計数装置のうち最も正確な装置です。“シミュレーションを使用して、私

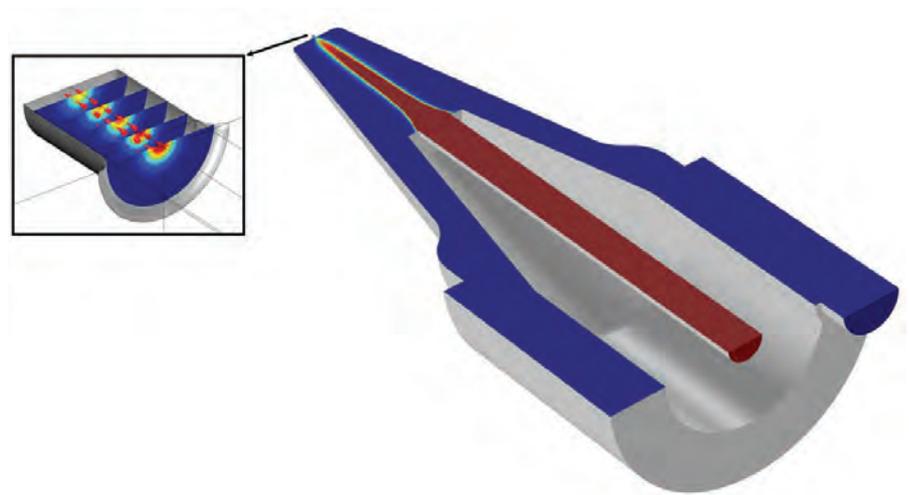


図 7. 水力学のフォーカスシミュレーション。電極アパーチャの中心軸のそったサンプルをシースフローがどのように移動させているかを示しています。(赤はサンプルフロー、青はシースフロー)

は HORIBA 社の分析装置の血液学的解析技術の実装を証明することが出来ました”と Isebe 氏は語ります。最近では、Isebe 氏は、粒子の流量解析改善、3D プロセスと水力学的圧力下での粒子の変形能を含む将来的な研究の計画に取り組んでいます。“コンピュータ解析やスーパーコン

ピュータの性能の進歩により、数値的シミュレーションは、理論、実験につぐ、サイエンスの第 3 の柱となっています。”と Isebe 氏は語ります。“シミュレーションは HORIBA Medical 社の研究と開発にとって必要不可欠で、技術革新の意思決定にとってカギとなる極めて重要なリソースです。

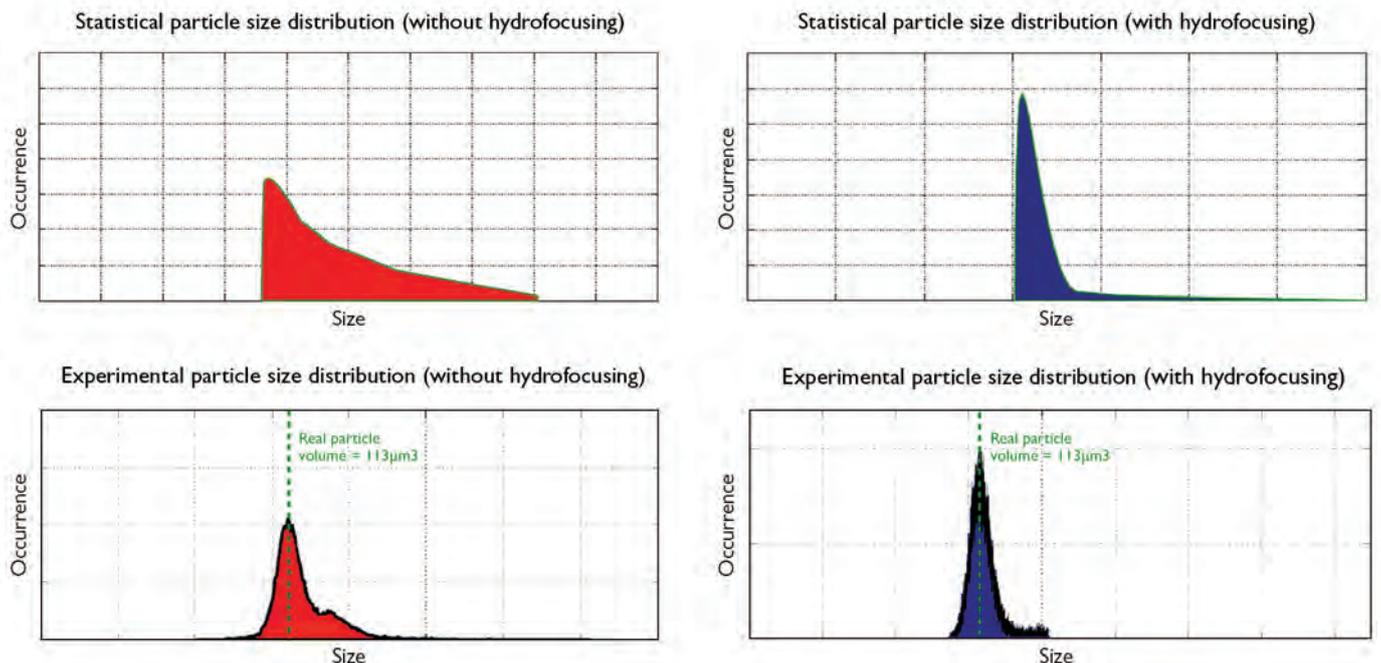


図 8. 上: ハイドロフォーカスなし (左) とハイドロフォーカスあり (右) の静的粒径分布のシミュレーション結果  
下: ハイドロフォーカスなし (左) とハイドロフォーカスあり (右) の実験検証

# タイヤ内蔵空気圧監視センサの最適化

自動車性能を統制する小型センサは、走行中の自動車タイヤに直接収納される一方で、適切な運転を実現するために大変独特な方法で設計されています。そのセンサには、運転中に測定可能な感度および様々な要因に耐えるための耐久性が必要です。

LAURA BOWEN による報告

自動車性能において、タイヤの空気圧は縁の下の力持ち的存在です。適切な圧力に膨らんだ時、タイヤは設計者が意図したぴったりの形になります。空気圧が低下すると、タイヤは動作するために必要以上のエネルギーが必要になります。ドライバーは、ある場所から他の場所へ移動するという日々の習慣的な移動時に、タイヤ圧のメンテナンスを忘れがちです。しかしながら全く知らない間に、そして突然に、パンクは起こり得ます。タイヤ内蔵センサがタイヤへ空気を入れる時期をドライバーに警告することによりその状況は一変し、これがタイヤ内蔵センサを自動車に設置すべき理由なのです。これらのセンサの開発に必要なことは、細かい点全てを注意深く熟慮することです。そしてシミュレーションは適切な設計開発用のツールを提供してくれます。

## タイヤ空気圧センサは運転経験を語る

空気圧の低いタイヤの使用時の懸念事項の1つは、燃費が悪くなることです。また、空気圧の低いタイヤで走行している自動車は、長時間かけて大量の温室効果ガスを大気中に排出することになります。空気圧の低いタイヤ使用で急ブレーキはかかりにくくなり、濡れた道路ではスリップの原因にもなります。通常自動車メーカーには、タイヤの空気圧が設定値よりも下回った場合、ドライバーにその情報を伝える圧力監視センサをタイヤに内蔵することが義務付けられています。Schrader Electronics社は、近年、この圧力監視技術において世界的市場リーダーとして活躍しています。

Schrader Electronics社は、年間4500万個のセンサを製造し、GM社、Ford社、そしてメルセデス社など主要な自動車メー



図1. 上: 高速内蔵タイヤ圧力監視センサ (Hi-Speed Snap-In Tire Pressure Monitoring Sensor: TPMS) は、タイヤ圧力を監視し、測定情報を送信します。

カーへそのセンサを提供し続けています。自動車両が走行可能な寿命期間中、どのような道路状況でも動作可能なセンサの重要なカギとなるのは信頼性と耐久性です。必要不可欠な機能-ジオメトリ-材料を設計する際に考慮すべき検討事項は、衝撃、振動、圧力、湿気、温度、そして様々な大きな負荷です。Schrader Electronics社の機械設計チームのエンジニアであるChristabel Evans氏は、あらゆる種類の自

動車に使用可能で効率的かつ有能なタイヤセンサを開発するために有限要素解析 (finite element analysis: FEA) とマルチフィジックスシミュレーションを使用しています。

「COMSOL は、大変使いやすく、使い方を覚えるのも大変簡単です。エンジニアはその場で使いこなせるようになりました」

### FEA を使用してより良いセンサの設計

図1で表している高速内蔵タイヤ圧力監視センサ (Hi-Speed Snap-In Tire Pressure Monitoring Sensor:TPMS) は、Schrader 社では頻繁に使用される製品です。これは、車輪アセンブリ上に直接搭載され、タイヤの空気圧を測定し、たとえ自動車が走行中の時でさえも使用可能です。タイヤの空気圧があまりにも低下してしまった場合、警告音が突然鳴り出し、ドライバーに車を停止してタイヤに空気を入れるよう警告します。

Schrader Electronics 社は、センサをもう20年間も開発し続けていますが、Christabel Evans氏と彼の同僚たちは、その設計と解析をより効率的なアプローチで追求したいと思っています。彼らはFEAを使用してその設計をシミュレートし、プロセスを反復します - これにより実験費を最小限に抑え、開発中の設計性能の解析を行うことが可能になります。Schrader Electronics 社は、もしチーム全員が既存のFEAソフトウェアオプションを使用する場合、かなりの高額になってしまうということに気づきました。その後、彼らは、COMSOL Multiphysics®の構造力学モジュールとCADインポートモジュールを使用し始めました。彼らは一連のテストを開始し、ソフトウェアを検証、シミュレーションの平均的なサンプルを比較し、そしてその結果に信頼を得ることができました。

### より良いシミュレーションツールを使用して感度と耐久性を向上

研究者たちはシミュレーションに、遠心力がかかるダイナミックな道路から、温度変化が著しい環境ストレス、圧力や圧碎荷重のような静的因子まで、より自然なパラメータを組み込み始めました。高速内蔵タイヤ圧力監視センサ (Hi-Speed Snap-In Tire Pressure Monitoring Sensor:TPMS)



図2. シミュレートされた装置の回転テスト。ボルトの位置に集中している遠心力によって誘発される圧力を示しています。

は、エンクロージャー内に設置され電気回路で作られたトランスミッタにより構成され、蓋つきバルブ軸に取り付けられています。バルブ軸は、タイヤリムと接続しており、その中を空気が通り抜けます。高速内蔵タイヤ圧力監視センサのバルブのジオメトリには、リムホルルの部品維持をサポートするリップが含まれています。

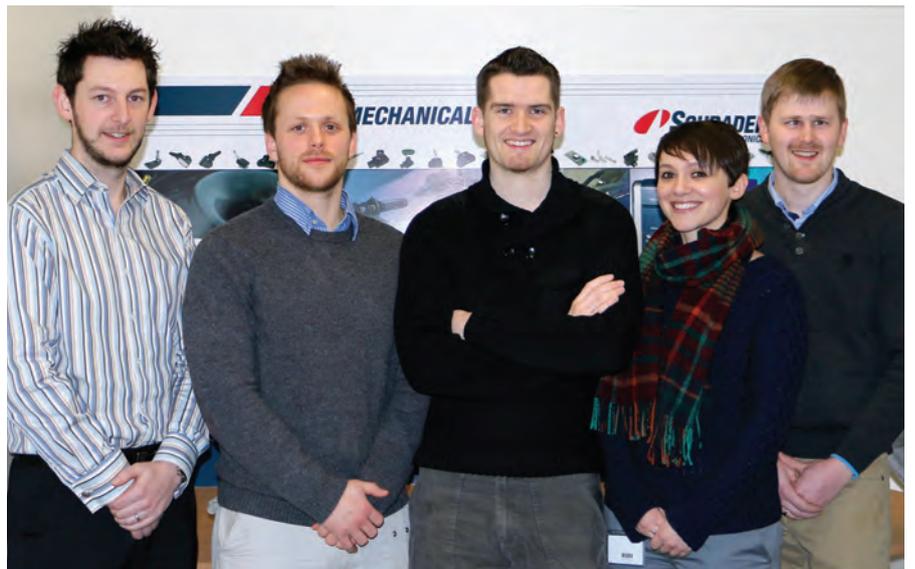
Schrader Electronics 社は、図1のように、様々な道路状態によって起こり得るタイヤ装備、衝撃や振動のような外部からの力がかかる状況下において、装置に負荷がかかった時のエンクロージャーへの圧力

を測定します。図2は、高速回転(循環)のテスト用に設計された部品を示します。選択した材料が、要求された負荷に耐えることが可能かどうかを確認するためにこの部品は解析されます。

複数のモデルを同時に解析することにより、Evans氏と彼のチームは、自分たちの設計をさらに改善してくれる最適なモデルを見つけることができました。彼らは、様々なジオメトリや材料、異なる負荷のテストを重点的に取り組みました。

COMSOL Multiphysics ソフトウェアは、同じような種類のシミュレーションパッケージよりも容易にそして短時間で学ぶことができます。また柔軟性のあるライセンスオプションのおかげで、組織間での展開もより簡単です。“COMSOLは非常に使いやすく、使い方も容易に覚えることができます。エンジニア達はその場で使いこなせるようになりました”とEvans氏は語ります。

現時点では、Schrader 社は、故障解析、設計、そして改善に重点をおく計画を立てていますが、今後はシミュレーションツールを使用しながら開発にフォーカスしたアプローチ方法を改善したいと思っています。この新しい設計開発の実現により、環境にもやさしくて、ドライバーがより快適で安全運転が実現出来るよう、研究者たちは日々、努力しています。



Schrader Electronics 社の Mechanical Engineering Department 内の様々なチームに所属する多くのエンジニアたちが、COMSOL を活用しています。  
左から右: Andrew Herron 氏, Sam Guist 氏, Adam Wright 氏, Christabel Evans 氏, Russell McKee 氏。

# HFIR のための新燃料の研究：オークリッジ国立研究所における、安全性と信頼性をサポートするためのマルチフィジックスシミュレーションの必要性

高中性子束同位体炉を、地球的規模脅威削減イニシアティブ（Global Threat Reduction Initiative）の定めた要件に従って低濃縮ウラン燃料に転換する研究が、オークリッジ国立研究所で進められています。新燃料と炉心設計の安全性および性能の評価に、研究者はマルチフィジックスシミュレーションを活用しています。

Alexandra Foley による報告

中性子ビームが試料に向けられると、平易な言葉で説明するのであれば、ビリヤードで衝突する球と同様に、中性子がその物体を通り抜ける場合とある角度で散乱する場合があります。その最終的な偏向のパターンと中性子のエネルギーを分析することで、科学者は研究対象である物体の基本的な物質特性の情報を得ることができません。中性子散乱を研究する科学者はこれにより物質の原子的および磁気的な構造を突き止め、最終的には私たちの住む世界をより深く理解することが可能になるのです。

米国オークリッジ国立研究所（Oak Ridge National Laboratory, ORNL）の高中性子束同位体炉（High Flux Isotope Reactor, HFIR; ハイファーと発音）は、毎年 500 名以上の世界中の研究者が利用する中性子散乱施設を備えています。HFIR は、研究用、産業用、医学用に安定同位体および放射性同位体の提供もしている多目的研究炉です。また、HFIR は独自の照射実験施設を有し、中性子活性分析が可能です。HFIR は出力が高く（85 MW）、ターゲットに向かって生成される高中性子束も同様に高密度であり、世界の研究炉の中でも最高レベルの定常状態中性子束を提供しています（図 1）。

HFIR は高濃縮ウラン（93% U-235、略称 HEU）を使用する設計になっており、HEU は兵器級ウラニウムと同類です。地

球的規模脅威削減イニシアティブは、核物質拡散により生じるリスクの認識が高まっていることを踏まえ、HEU 燃料を使用する研究炉の低濃縮ウラン（low-enriched uranium, LEU）燃料への転換を求めています。

世界中の原子炉の多くがすでに転換した一方で、高性能 HEU 原子炉はまだいくつ

「COMSOL はマルチフィジックス性能を有しており、目標達成のために使える優れたツールであることが分かりました。」

か残っています。HFIR もその一つであり、その独特な燃料および炉心設計により（図 2）、また、高出力密度を有する炉であるがために、燃料の転換は複雑かつ難易度の高い任務となっています。ORNL の研究者はシミュレーションソフトである COMSOL Multiphysics® を使い、燃料の転換が HFIR の性能、中性子散乱の最先端研究、同位体生産、照射実験、中性子活性化分析に与える影響を探索しています。

「HFIR の転換が成功すれば、原子炉の性能を維持し、運用効率への悪影響を最小限に抑え、安全性確保の一助となります」

と PhD 課程の大学院生である ORNL の Franklin Curtis 氏は述べています。「COMSOL はこれらの目標達成のために使える優れたツールであることが分かりました。マルチフィジックス性能を有すること、有限要素法を用いていること、ユーザー定義の数式を入力できることがその理由です。」

## HFIR での使用が提唱された LEU とは

このプロジェクトに携わる ORNL の研究者は、現在の 93% 濃縮ウランの代わりに 19.75% に濃縮したウラン 235 を使用する代替燃料設計の発展に取り組んできました。LEU 燃料への転換に伴う核特性、密度、熱特性の変化に対応するため、HFIR 炉心の燃料体、つまり燃料板内の核分裂性物質を設計しなおさねばなりません（図 2 および 3）。新しい設計でも、燃料体の外側にある現在の HFIR 炉心の全体的な形状特性は既存のまま引き継がれます。

さらに、中性子束を同レベルに維持す

るためには、HFIRは85 MWではなく100 MWで運転しなければならず、原子炉の熱マージンの必要性がより高くなることが事前研究により明らかになっています。「私たちが携わるのは原子炉であるため安全性は最重要事項であり、私たちの使うモデルが正確で信頼できるものであることを把握しておく必要があります」とORNLの senior research staff engineerであるJames D. Freels氏は話します。

「転換を進めるためには、私たちのモデルは徹底的な検証プロセスを経て、最終的にはエネルギー省のレビューおよび承認を受けることになります。」

ORNLの研究者は現在、COMSOLのコードの正確性を証明するための検証研究を行っています。Curtis氏はその研究について「ORNLでの私のプロジェクトは、現在のHEU燃料での安全性関連の計算に対して実証され、また、LEU燃料を用いた設計の評価および安全性分析が可能となる一方で、原子炉での必要な冷却材流れ速度の維持を可能とする、流体-構造相互作用 (fluid structure interaction、FSI) シミュレーション技術の確立です」と述べています。

### 燃料板のたわみのFSIモデリング

HFIRの主要構成品の一つに燃料板があり、この板によって冷却材が炉心に入る速度および温度、炉心内での流れの分布が管理されます。燃料板は、原子炉の稼働により生じる速度や温度の変化に応じて、



図1. ORNLでHFIRの燃料要素を交換する技師たち。HFIRは1966年から稼働しており(452燃料サイクル超)、現在ORNLで稼働する唯一の原子炉。画像提供: 米国立オークリッジ研究所、米国エネルギー省

わずかに振動し変形する可能性があります。燃料板を用いるタイプの研究用原子炉で最も重要な研究の一つが、たわみが原子炉の性能および安全性に支障をきたさない状態での最大流速の解明です。「たわみが大きい場合には、燃料板が流れの範囲を狭めてしまうか、あるいはお互いが接触してしまい、流路内での流れが変化し冷却材の炉心への流入速度に乱れが生じる可能性があります」とCurtis氏は話します。

HFIRに似た流れのジオメトリを用いた代表的な試験から燃料板のたわみについて見

識を得て、コード検証に用いることも可能です。ORNLでの使用が検討されその後キャンセルされた原子炉 Advanced Neutron Source Reactor (ANSR) はHFIRと設計が似ており、実験的なテストが幅広く行われたため、COMSOLのコードを実証するための貴重な実験結果が残っています<sup>1</sup>。

ANSRは、HFIRと同様のインボリュート形状をした燃料板を有し、毎秒約25 mの流れ速度で冷却材が流れるよう設計されています。ANSRのテストの一つとして、燃料板のたわみ特性を突き止めるための実験も行われました。「HFIRとANSRのインボリュート燃料板に使われる燃料体の設計は、米国内の他の研究用原子炉の、よりシンプルでカーブのある板に使われるものとは異なります」とCurtis氏は述べています。「この全体としての形状により、炉心での冷却材流路の幅が一定に維持されます。しかし、HFIRに必要な中性子束を維持するためには、この独特の形状のため、新しい燃料および炉心の設計に際して特別な注意が必要です。」

COMSOLモデル内でみられた機械的なFSIを理解するために、1板、2流路のモデルが開発されました。最初の解析ではまず平板を試し、複雑さを増したインボリュート形状の燃料板はその後で分析しました。その結果、モデルは正確にFSIを予測しており、ANSR燃料板の変形は板の縦方向での変形実験を正確になぞるものでした(図4)。

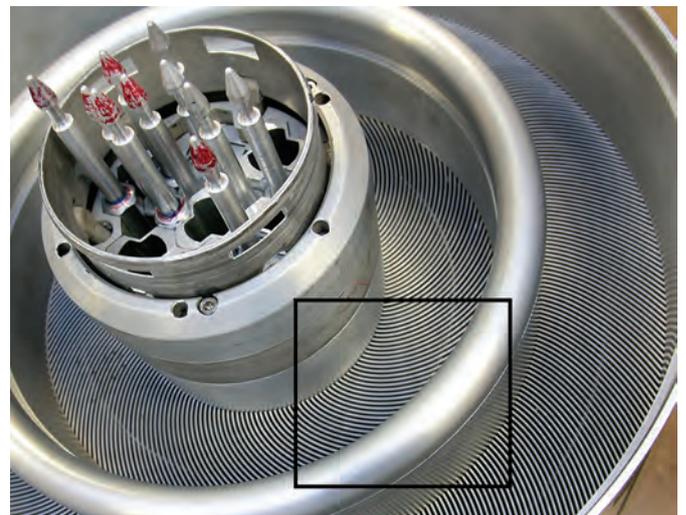
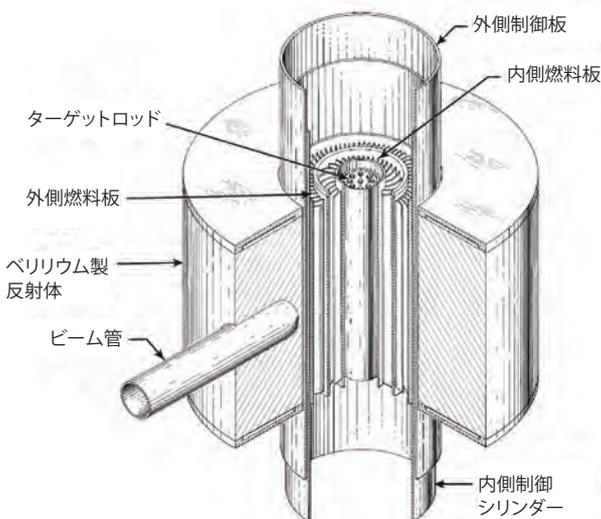


図2. 左: 現在のHFIR炉心の概略図。炉心は同心の環状部分の連なりで構成されており、内側燃料板と外側燃料板に分かれている。右: 黒の四角は、ORNLでの流体-構造解析で分析された燃料板の先端を示す。画像提供: 米国立オークリッジ研究所、米国エネルギー省

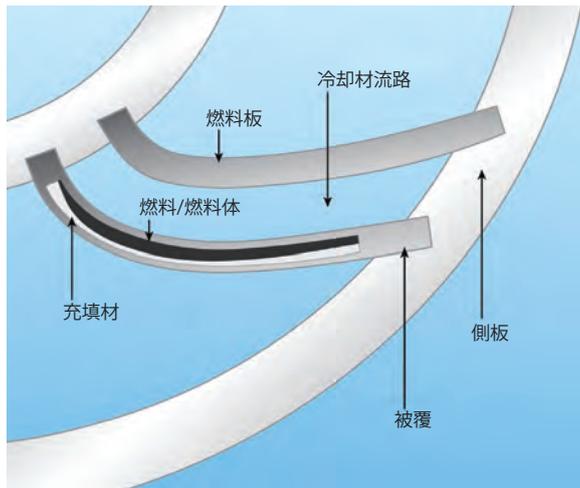


図 3. 現在の HFIR の HEU 燃料板を構成する 3 つの領域である、燃料（燃料体）、充填材、および被覆。冷却材流路は燃料板を囲んでいる。LEU への転換プロセスでは内部の燃料体を変更する。本図の縮尺は正確ではなく、また ORNL による公式な図ではない。本図は COMSOL によって作成された HFIR 炉心の設計概念の再現である。

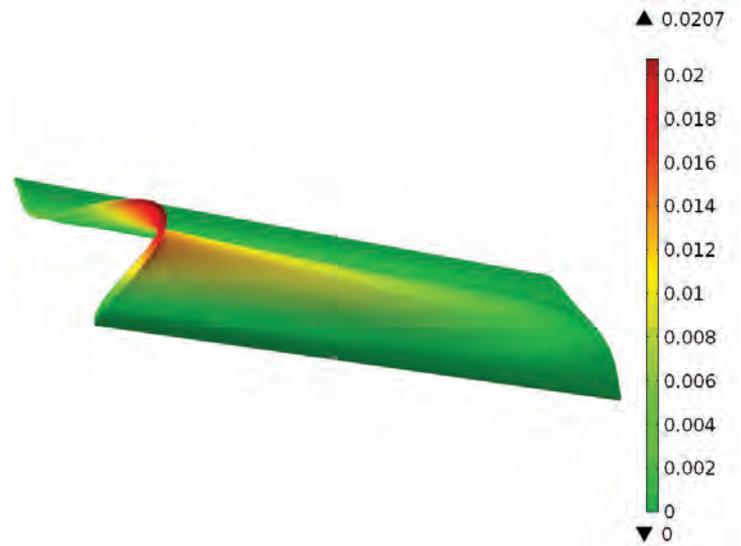


図 4. インボリュート燃料板の先端たわみ。固有振動数分析により、ANSR および HFIR のインボリュート燃料板の「S」字型のたわみが予測された。

現在の FSI シミュレーションは、冷却材流路の乱流 CFD 解析および燃料板の流体-構造たわみを含んでいます。ORNL では以前、この FSI 問題を解く試みのなかで、最初に流体領域を解き、その後その情報を構造解析に用いる、弱連成アプローチを用いていました。「しかしながら、このアプローチでは解が安定せず、成功は限ら

れていました。」と Curtis 氏は述べています。「現在の解析では、このアプローチの代わりに COMSOL Multiphysics が備えた完全連成解析を用いており、ANSR モデルの安定性および正確性がどちらも改善されることが分かりました。」Curtis 氏は、この完全連成解析アプローチを用いると、さまざまな流体速度のシミュレーションが実験

結果と極めてよく一致することに気付きました。

ANSR モデルで用いた解析技術をベースに、現在、LEU 燃料を用いた HFIR の内側燃料板のモデルが開発されています(図6)。「このモデルから得られた先行研究の結果を私たちは非常に嬉しく思っています」と Curtis 氏は話します。「今後数カ月で、最終的な燃料転換に向けた安全性の根拠として貢献するようこのモデルの改良を重ねていきます。」ORNL では燃料板上の熱の多次元伝導、燃料板の熱-構造たわみと、燃料欠陥、腐食、流れ遮断などの物理現象を連成した COMSOL モデルを別個に開発中であり、HFIR のモデルも今後、これらと組み合わせる予定です。

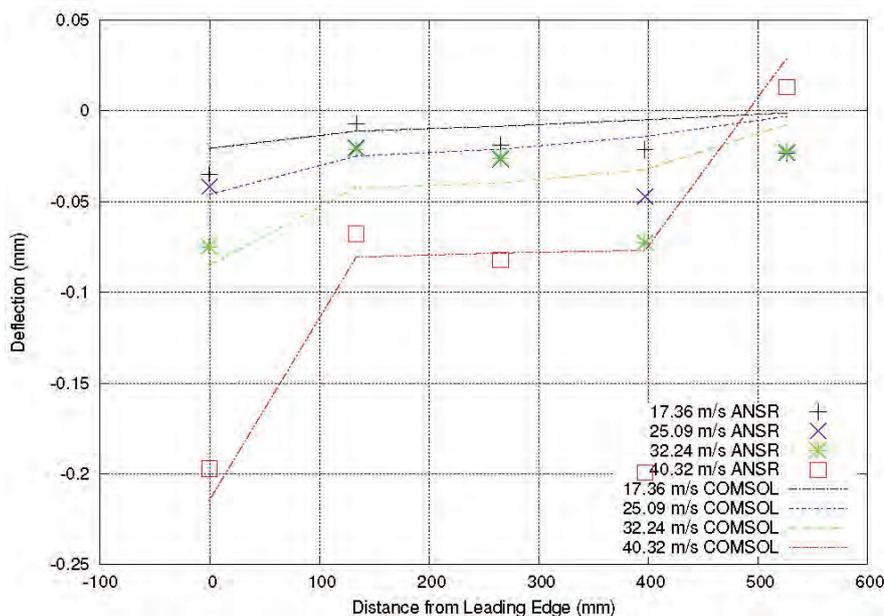
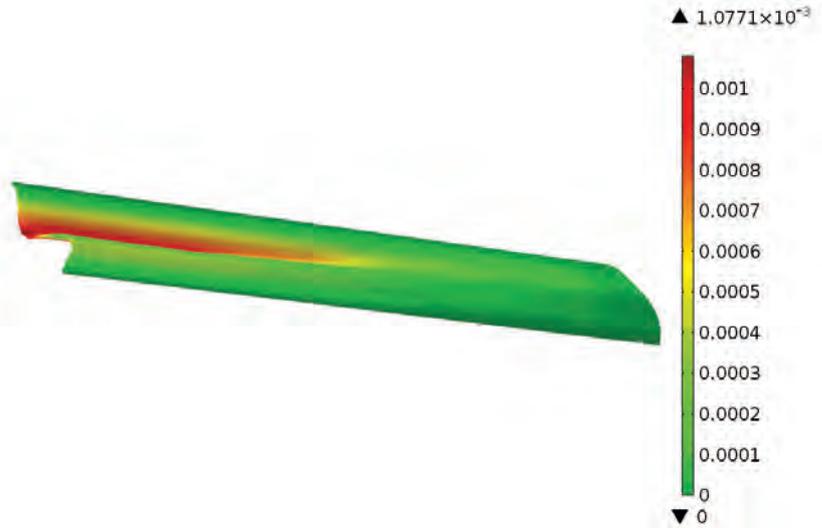


図 5. ANSR での流れのテストにおける燃料板たわみの実験結果と、さまざまな流体流れ速度のシミュレーション結果との比較。

**検査と妥当性検査がカギ**

原子炉のような複雑なものを設計するとき、技術者は設計の安全性を確保するため最大限の注意を払わなければなりません。そのためには、作成されるシミュレーションの十二分な検証とコードそのものの証明が必要不可欠です。「ORNL での過去の実験に関するシミュレーションにより、COMSOL Multiphysics の熱、構造、乱流モデリングの性能は検証済みです」と Curtis 氏は述べています。「私たちの最近の研究で COMSOL の FSI ツールが検証されたことで、新しい HFIR 炉心の設計と最適化に自信を持って取り組むことができます。」



< 参考文献 >

1 Swinson, W. F., Battiste, R. L., Luttrell, C. R. & Yahr, G. T. Fuel-Plate Stability Experiments and Analysis for the Advanced Neutron Source, Symposium on Flow- Induced Vibration and Noise, 1992, (5) 133-143.

図 6. HFIR 燃料板の先端でのたわみ

PR

COMSOL  
MULTIPHYSICS®

## バージョン 5.0 登場!

Application Builder で業務コラボレーション  
作成したモデルからアプリケーション化

モデル作成

アプリケーション

COMSOL

<http://www.comsol.jp>

KESCO KEISOKU ENGINEERING SYSTEM

計測エンジニアリングシステム株式会社

<http://www.kesco.co.jp/comsol/>

Tel : 03-5282-7040 • Fax : 03-5282-0808

# 音響流 「音響流のための圧電材料の実態把握」

研究者は、数値シミュレーションの活用で、表面弾性波とマイクロ流体の流れの間の相互作用を理解

GARY DAGASTINE による報告

マイクロ流体素子は、医療診断用ラボオンチップセンサーや低価格フローセンサーのように、幅広い応用分野において極めて重要な素子ですが、その小さなサイズゆえに効率的な揚水や流体混合において課題となります。

数百マイクロンもしくはそれ以下のジオメトリ内の流体の機械的性質は、マイクロスケールにおいてはその性質が極めて異なる可能性があります。これは、小さな規模では、流体の容量に対する表面積の比率がより大きく、表面張力、熱伝導、粘性がより重要な役割を担うからです。

米国ニューヨーク州アルバニーのSUNY ナノスケール科学工学大学 (SUNY College of Nanoscale Science and Engineering: CNSE) の研究者たちは、流体駆動の可能性として、流体の流れを誘発するために表面弾性波 (surface acoustic waves: SAWs) の活用を検討しています。音は、基板や流体の中では異なる速度で伝わりますので、この音の拡散は、ある角度でこの液体を動かす波を引き起こします。この圧力波の減衰は、音響流を引き起こします (詳細は 35 ページの下欄参照)。

これらの素子を効率的に設計するためには、SAWs を生成するために必要とされる圧電材料の音響物質の理解が最初の重要なステップになります。この点で数値シミュレーションは、例えば電極金属や音響波伝播の図形などの決定に役立つ強力なツールとなります。ここで得られた理解は、設計を判断する情報として用いられます。

CNSE 大学院生の Graham Potter 氏は、音響流を活用した応用技術のために、各種圧電材料の利用について研究しています。CNSE は、先端技術の製造分野で重要な課題に取り組むことを目的とし

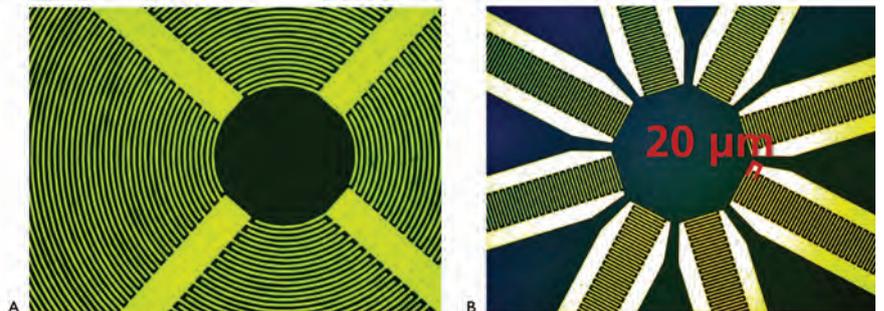


図 1. A) 中心に向けて表面波を起こすために用いられたニオブ酸リチウムの円形パターンにおける、くし型電極トランスデューサまたは IDTs の光学的画像。 B) 2 ポート構成のリニア IDTs シリーズ。これらの素子は、表面上で選定した方位での音響流効果をテストするため、そしてシミュレーション結果を実験により検証するために利用されています。このモデル領域の大きさは 20  $\mu\text{m}$  線分に対応しています。

た全世界半導体産業コンソーシアムである SEMATECH との優れた産学パートナーシップの一部を担っています。

Potter 氏は CNSE の James Castracane 教授の実験室で研究しており、彼のチームは 128° Y カットニオブ酸リチウム (Y-cut lithium niobate: LiNbO<sub>3</sub>) のような圧電性の基質で作成された素子を設計しています。「このカット角度は結晶軸を基準にして決定されます。この特別な方位は、水の表面に沿って一方向に伝播する強力な電気機械結合を持つ SAW の一種であるレーリー波があるために、伝統的にバンドパスフィルターで利用されてきました」と彼は説明しています。

「この理由のため、この物質を用いた多くの音響流の研究では、一方向にだけ方位を持つ線形素子に限られていました。私たちは、円形パターンの作成またはデバイスアーキテクチャに注力したいと考えました (図 1 A 参照)。この理由および、この水晶圧電素子の異方性のために、私たちは、

全表面に及ぶ波の伝播特性を良く理解することが必要になりました」と Potter 氏は続けて述べています。

彼の設定では、くし型電極トランスデューサまたは IDTs として知られている金電極の配列が圧電基板上で組み立てられます。交流電流がこの電極に流れると、逆圧電効果のために、この表面が調和的に振動し、SAW を生み出します。「表面上に置かれたこれらの実験用素子の方位を変化させることにより、伝播方向の作用として、共鳴振動数および音響流反応が測定されます。」と Potter 氏は説明しています。

## シミュレーションと実験の完全な一致

シミュレーションは、COMSOL Multiphysics® (図 2 参照) を利用して複数の物質の方位で実施され、CNSE で組み立てられた素子に対して、その正当性が立証されました。「私たちは、シミュレーションと実験の測定結果がほぼ一致したことを確認しました (図 3 参照)。」このことは、私たちの設

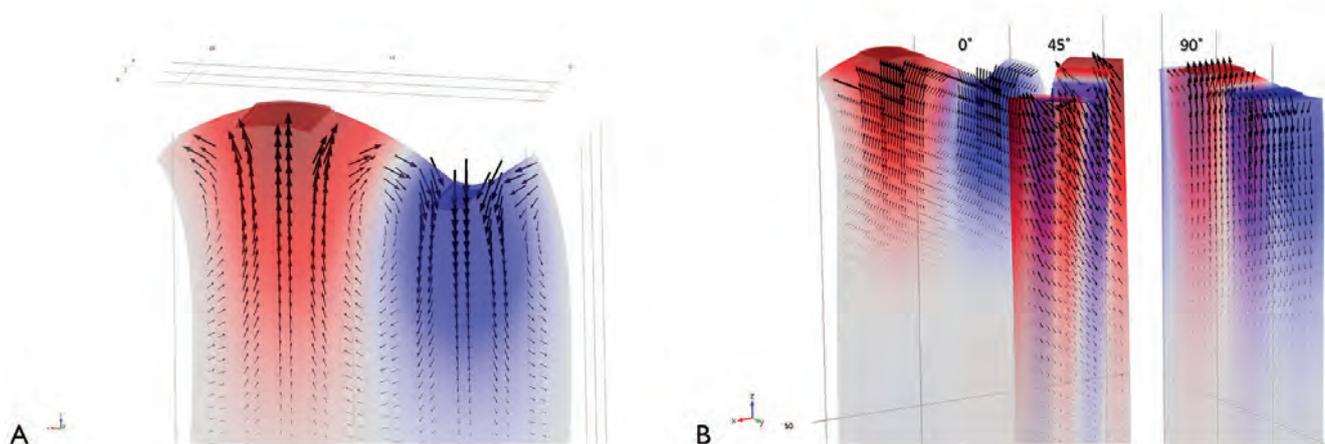


図 2 A) このシミュレーションによって観測された鉛直変位および共鳴の変位力線。この方位（結晶 X 軸に対して 0°の回転）に対して、この表面のわずかな波長にとどまる矢状面で顕著な変位を伴ってレーリー波が観測されます。 B) 作成された素子の方位に対応する複数の方位（水晶 X 軸に対して 0°から 90°）で実行されたシミュレーションの物質変位の多重画像。

計プロセスの中で COMSOL Multiphysics® が更に活用できることを確信し、この問題の理解を早める結果となりました」と Potter 氏は述べています。

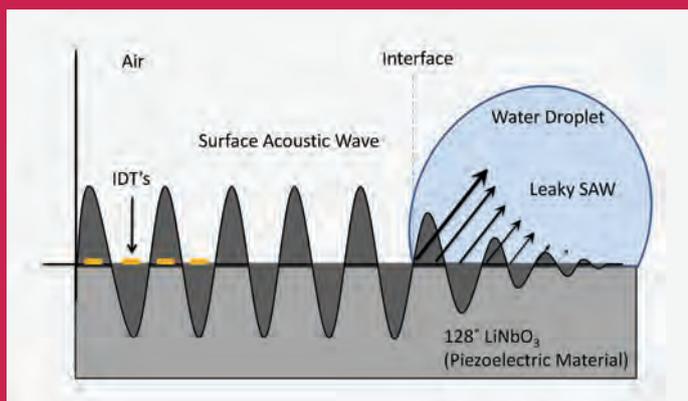
「例えば、私たちは、より大きな鉛直変位を持つ表面には、さらに高い流速の可能性のあることを確認したいと思いました。実際に、シミュレーションの結果を実験で計測された流速と関連付けることができました」と彼は述べています。「このような情報の一部は、こうした問題の状況を解明することに役立ち、具体的な設計上の選択に最終的につながっています。」

Potter 氏は、この特別研究の中で周波数領域分析のために、COMSOL Multiphysics® の圧電素子インターフェー

スを活用しました。彼はこのシミュレーション結果から、音響流の素子図形を最適化する重要な設計の検討となる SAWs の共鳴振動数および位相速度を測定することができました。「私たちのグループは、いろいろな方法でこの音響流の効果を最適化したいと考えましたが、この研究はもともと複数の専門分野にわたっていますので、COMSOL Multiphysics® の機能は大変役立ちました」と彼は述べています。「私たちは、これらの研究で引き続き COMSOL を利用する計画で、私たちの素子の性能に対する複数のパラメータの効果を同時に調べることができ、私たちがプロトタイプを作成するために費やす時間を削減することに役立つことでしょう。」

| Rotation from X-Direction (°) | Experimental Resonance (MHz) | Simulated Resonance (MHz) | Relative Error (%) |
|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|--------------------|
| 0                             | 192.25                       | 190.5                     | .9                 |
| 15                            | 187.75                       | 188.2                     | .24                |
| 30                            | *damaged                     | 182.5                     | N/A                |
| 45                            | 178.75                       | 176.8                     | 1.1                |
| 60                            | 174.25                       | 176.0                     | 1.0                |
| 75                            | 177.0                        | 177.2                     | .1                 |
| 90                            | 178.75                       | 178.7                     | .03                |

図 3. 選択された方位でのシミュレーションと実験によって測定された素子反応の比較。実験による共鳴は、ネットワークアナライザを利用して、素子の挿入損失を計測することによって決定されます（図 1B）。シミュレーションによる共鳴は周波数領域から得られた最大アドミタンスから測定されます。



### どのように音響流は機能するのか

表面弾性波 (AWS) は圧電物質の表面上に、くし型電極トランスデューサ (ITDs) を設置することによって発生します。このレーリー表面波は、わずかな減衰で空气中を伝播しますが、収縮液体上では、この波は流体の中で「漏れ」始めます。現段階で、これは leaky SAW (漏れ表面弾性波) と言われています。

この leaky SAW が液体に入力する角度は、この液体中の音速と関連した SAW の速度によって決まります。かなりの時間をかけて進む圧力波の減衰によって流体に流れが生じます。このプロセスは、音響流として知られており、1983 年にファラデーによって最初に定常波の実例が実験にて観測されました。

# シミュレーションを中心とした腐食防止の戦略

腐食は世界中のあらゆるところで発生し、年間何 10 億ドルもかかるもの費用がかかる、みんなが頭をかかえている問題です。米国海軍研究試験所 (Naval Research Laboratory:NRL) における腐食科学の基礎研究で科学者たちは、本質的に腐食を防止する材料を開発設計しています。

JENNIFER A. SEGUI による報告

腐食は大変複雑なマルチフィジックスの課題であり、ワシントン D.C. の米国海軍研究試験所 (Naval Research Laboratory:NRL) に勤務する機械技師の Siddiq Qidwai 氏と彼の同僚たちは現在この件で調査を行っています。“長い目で見ると私たちの研究の成功というものは、新しい耐食材料の開発である一定の特性を含むもしくは除外することが判明する微細構造 - 腐食の相関関係を導き出すということです。”

米国学術研究会議 (National Research Council) の 2011 年全米科学アカデミーのレポートでは、“腐食と実際のアプリケーションに関する基礎知識の不足は、腐食が原因で課される高額な社会的コストに直接的な影響を与えるでしょう”と記述されてい

ます。2010 年 12 月に発表された数値によると、U.S. の国民総生産の 2~4% にあたる 6,000 億ドルは腐食の修理もしくは腐食損傷防止のために使われました。

海上、航空、そして陸上輸送を含む運送業は腐食による影響を特に受けやすく、乗客の安全と車両や輸送機 / 船の長期寿命のために必要な維持費は極めて高いものです。“明確に言うと、海軍に関しては、維持費の内、一番の問題は腐食です”と Qidwai 氏は語ります。

## 大きなインパクトと小さな増加

隣接した電解質溶液内で電気化学反応や物質移行により材料の限局性欠損が起こる時、図 1 に示している通り金属内で孔食

が起こります。“孔食による穴は広がり続け、結局、最終的には、材料や構成要素は負荷により機能しなくなってしまう。”と Qidwai 氏は語ります。また、腐食の影響は材料の強度や完全性といったものに強く影響を及ぼします、と強調しました。

Qidwai 氏と彼の同僚たちは 孔食の理解をより深めるために革新的で包括的なアプローチを考え出しました。海水環境下にある金属内の孔食の成長をモデリングしようと思いました”と彼は説明します。“金属の微細構造は、以前の研究ではあまり注目されていませんでした。その結果、微細構造を考慮していなかったことにより発生したイレギュラーな成長は大きな課題となりました。私たちの目標は、材料の微細構

「私たちの目標は、材料の微細構造の整合性に対する全体的な影響を数値化するため、機械的アプリケーションを使用して、孔食増殖を完全連成のマルチフィジックスモデリングで実装することです。」

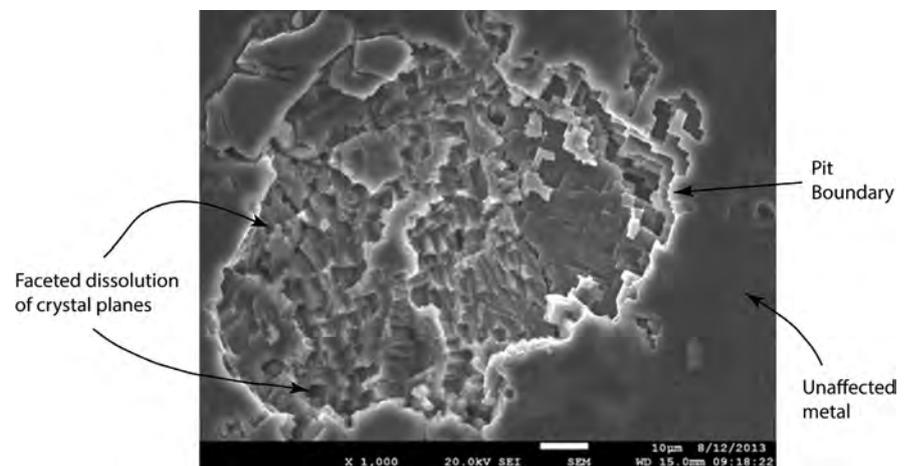
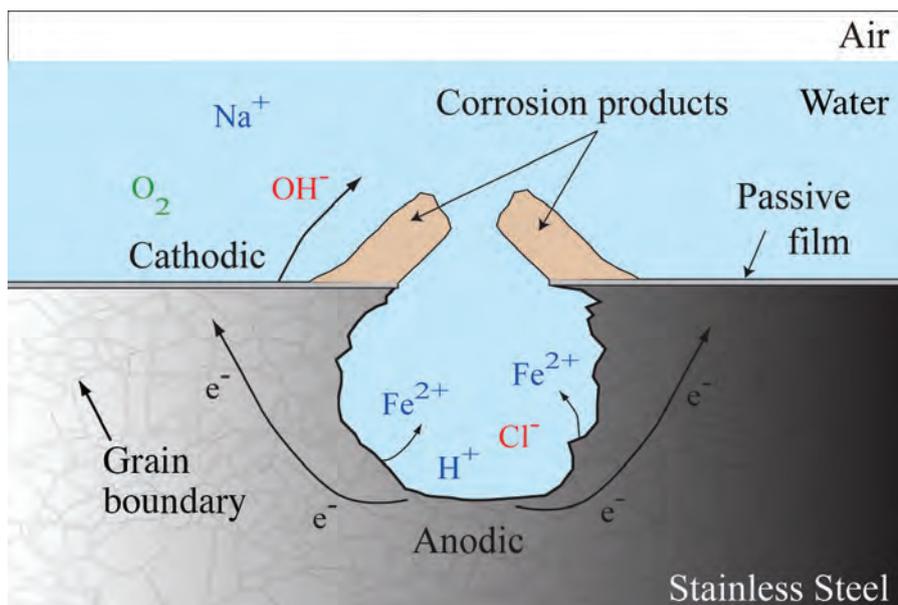


図 1. アルミニウム合金の孔食の例 (トップ - ダウン表示)、材料の局限性欠損の性質が明確に表れています。孔食の層は材料の強度を弱めてしまいます。

イメージ提供 : NRL C. Feng 氏、S. Policastro 氏



「COMSOL Multiphysics の腐食モジュールを使用することが可能です。以前はとても難解だと思われていたことも、今は簡単に実現可能です。それは、多くのことはモジュールが行ってくれるからです。」

図 2. ステンレス鋼のような金属内の腐食は、電解質溶液内の電気化学反応と物質移行の結果生じました。イレギュラーな腐食フロントは、金属微細構造が原因で起こります。

造の整合性に対する全体的な影響を数値化するため、機械的アプリケーションを使用して、孔食増殖を完全連成のマルチフィジックスモデリングで実装することです。”と彼は続けました。

金属の微細構造により形成するイレギュラーな腐食を図 2 で示しています。それぞれの粒子のそのユニークなサイズや形が原因で発生します。各粒子は、腐食率や局所的な表面の動きに影響を及ぼす、結晶方位を保持しています。二次相、沈殿物、双晶境界は、腐食孔の発生と成長に影響を及ぼす金属の付加的な特徴です。

### 金属微細構造の腐食シミュレーション

“孔食成長に関する完璧な説明には、複数のイオン種および電解質内における反応速度や拡散種を含む構造的説明を表す電気化学と物質移行の方程式の連成が不可欠になります。一方で、金属 - 電極インタフェースもしくは溶解の過程により移行が左右される腐食フロントについても解析が必要です”と Qidwai 氏は説明します。図 2 は、COMSOL Multiphysics® を使用して Qidwai 氏によりシミュレーションされた複雑な腐食メカニズムを表します。図 3 は、金属内の孔食成長を解析するために使用した同様のモデリングジオメトリです。

“複雑なモデリングを開発する時、私たちの戦略は、まずはよりシンプルな数値の

研究から始めます。” 最近のシミュレーションでは、私たちは電気化学と物質移行の方程式を別々に解きました。将来的には、腐食の電気化学 - 物質移行モデリングの完全連成を確立する予定です。それらのモデルを作成するために、彼らは物質移行のために希釈種フィジックスの移行を、電位のためにラプラス & ポアソンの方程式を、そして腐食フロントのために移動メッシュ機能 (ALE) を使用しました。“この問題を解決するために、COMSOL Multiphysics の腐食モジュールを使用することが可能です。”と Qidwai 氏は語ります。“以前はとて

も難解だと思われていたことも、今は簡単に実現可能です。それは、多くのことはモジュールが行ってくれるからです。”

金属微細構造の 3D イメージを取得するためにオリエンテーションイメージング顕微鏡 (OIM:orientation imaging microscopy) を使用して、微細構造を孔食のマルチフィジックスモデリングに組み込むことは、NRL が直面した極めて難しい課題です。OIM ベースで再構成された鋼のイメージは図 3 で示されます。

統合された方法は、316 ステンレス鋼の微細構造を、COMSOL 環境の孔食マルチフィジックスモデルに組み込むために使用されました。“腐食フロントに沿った全方位、全箇所、孔食電位との一致を計算し

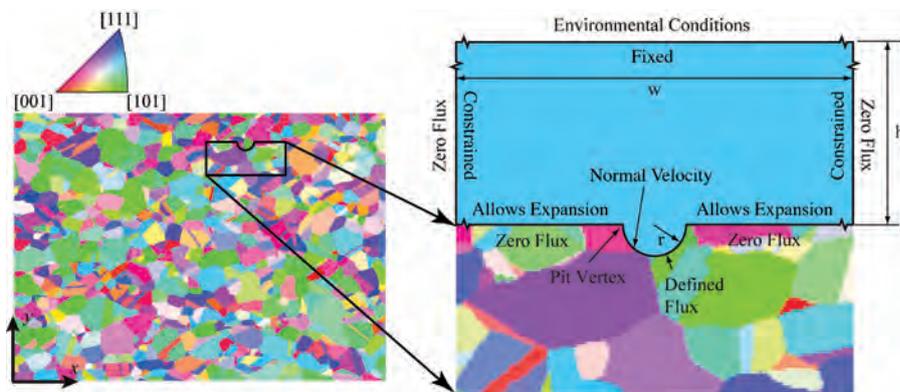


図 3. 右: 金属内の孔食成長を解析するために COMSOL Multiphysics で実装されたモデルジオメトリ。左: 再構成された金属微細構造は、NRL のオリエンテーションイメージング顕微鏡、幾何学的配置を使用して測定されます。色がついたキャプションは、各粒子の結晶方位と一致しています。

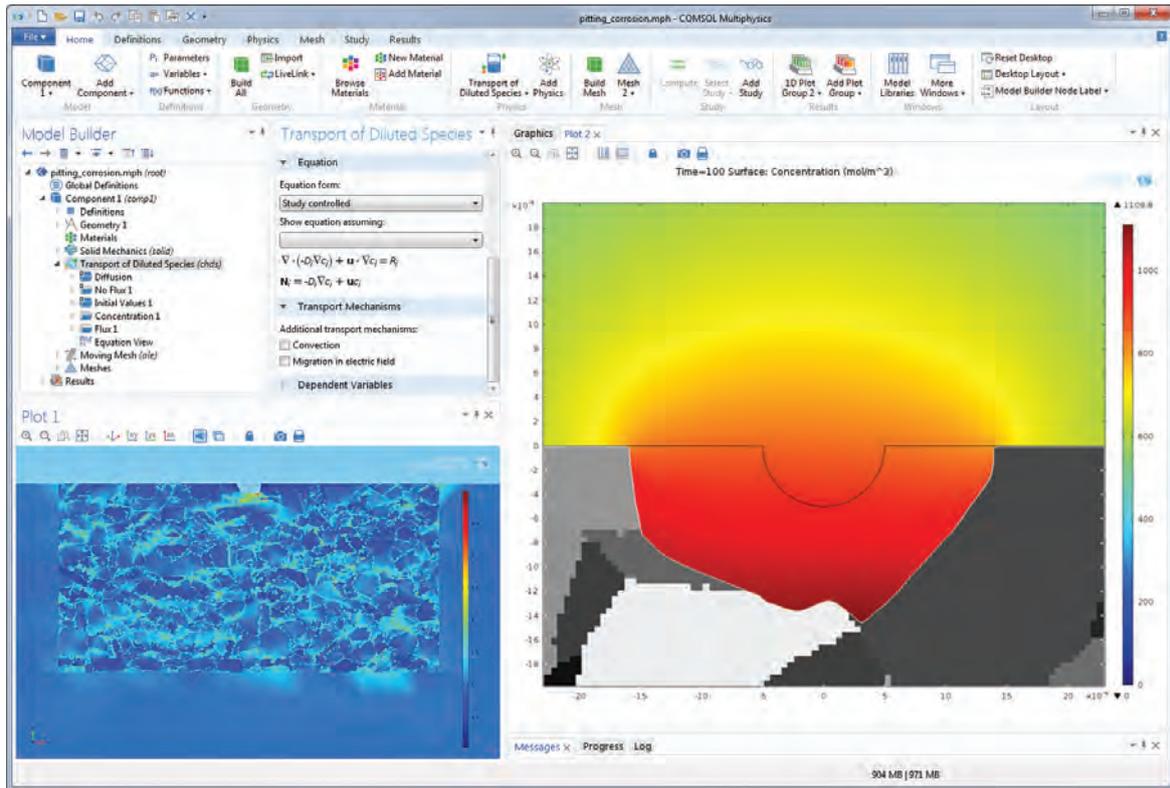


図 4. COMSOL 環境の画面。プロット 1 では、金属内のミーゼス圧力を示し、孔食の周辺の強いストレスがかかっています。プロット 2 では、イレギュラー腐食の孔食増殖と電極の平均的金属濃度の配分を示しています。

結晶方位を決定しなくてはなりません。同様に腐食率とフロントの動作を確定する必要があります”と Qidwai 氏は語りました。孔食電位は、ある特定の結晶方位について MATLAB® 内で解析されます。そして最終的には腐食率と腐食フロントの進み具合を計算するため COMSOL モデルに使用されます。“LiveLink™ for MATLAB® は、金属微細構造の影響解析するために必要不可欠な特性です。” 316 ステンレス鋼のプロパティは、モデル内でユーザー定義されました。図 4 に示されている COMSOL 環境内でのシミュレーション結果は、孔食による材料の限局性欠損を表しています。

孔食のマルチフィジックスモデルを実装中、Qidwai 氏は、“COMSOL は大変万能で、極めて複雑なアプリケーションでも私たちがソリューションへと導いてくれる”ということを発見しました。“まさにこれが、実験検証がカギとなるという証明なのです。” これらのシミュレーションから得た洞察はすでに、ミクロン規模での腐食解析のための新しい実験方法の開発の刺激となっていま

す。実験から得た結果は、モデルの検証のために使用され、微細構造、孔の形や増殖の関係を確立します。

### 腐食防止の未来

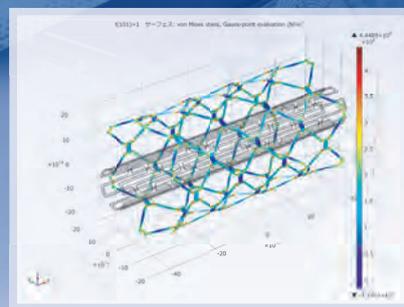
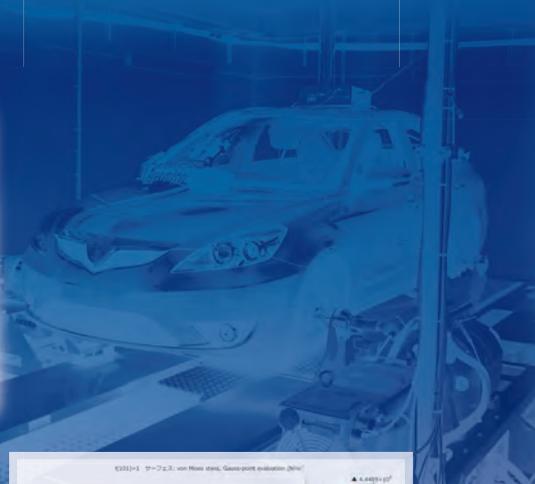
モデルが検証され、さらに展開される時、金属内の孔の増殖が孔の強度と信頼性にどのように影響するのかを解明するため完全連成された構造力学解析が含まれます。現時点では、微細構造鋼の分離された構造の解析は完璧に実装され、図 4 で示されています。



Qidwai 氏と NRL の彼のチームは、微細構造、孔食成長と機械的性能の関係を数値で表すために積極的に取り組んでいます。“この関係確立は、私たちの最終的なゴールです。これにより材料の設計者たちはより強力な耐食を持ち、さらには腐食防止可能な材料の開発が可能になります。みなさんに法外な費用がかかっていた開発、対策への削減と不便さの軽減にもつながることになるでしょう。”

左から右 :Siddiq Qidwai 氏 (NRL), Virginia DeGiorgi 氏 (NRL), and Nithyanand Kota 氏 (Leidos Corp.)。金属内の腐食の基本的メカニズムの研究を行っています。

# 世界のマーケットリーダー HBMの試験計測器がCOMSOLと融合



試験計測環境に最適化された  
COMSOLによるシミュレーション

## 車載でも、ベンチでも、選ばれるのはHBMの計測器 軽さ、データの品質、多様な信号入力

様々な信号入力に1台で対応。モジュールを任意に組み合わせ、分散配置での多チャンネル同期計測も可能。堅牢でコンパクトなHBMのデータ収集システムQuantumXシリーズ



### サポート可能な信号

- ◊ フルブリッジ(4ゲージ式)
- ◊ ハーフブリッジ(2ゲージ式)
- ◊ クォータブリッジ(1ゲージ式)
- ◊ 電磁誘導型フルブリッジ
- ◊ 電磁誘導型ハーフブリッジ
- ◊ LVDT
- ◊ 電圧

- ⊕ 高電圧
- ⊕ 電流(±20mA)
- ⊕ 電流供給電圧式変換器(IEPE)
- ⊕ 直流半導体
- ⊕ 抵抗
- ⊕ ポテンショメータ
- ⊕ 測温抵抗体(PT100、PT1000)

- ⊖ 熱電対
- ⊖ 電磁誘導型ロータリーエンコーダ
- ⊖ インクリメンタルロータリーエンコーダ
- ⊖ SSI
- ⊖ 周波数計測、パルスカウンタ
- ⊖ PWM
- ⊖ トルク/回転速度

- ⊖ CANbus
- ⊖ アナログ出力
- ⊖ 演算機能
- ⊖ デジタル入力(静的)
- ⊖ デジタル出力(静的)
- ⊖ EtherCAT
- ⊖ CCPI×CP-on-CAN

※2014年11月現在。  
今後拡張予定

HBMの計測器は各国の計量研究所が基準器として採用しています

お問い合わせ先：スペクトリス株式会社HBM事業部

〒101-0048 東京都千代田区神田司町2-6 司町ビル4F TEL：03-3255-8156 E-mail：hbm-sales@spectris.co.jp

www.hbm.com/jp



# バイオ・アプリケーションのための 細胞のスイッチのパターン

任意の電場において形がバラバラな細胞がどのようにして急速にパターン形成されるか、シミュレーションがその理解を深めてくれます。現在、クレムゾン大学および東京エレクトロンでは、この誘電泳動という手法を使用して、多層物質を作成するための開発が進んでいます。

JENNIER A. SEGUI による報告

過去 10 年間にわたるバイオ製造技術の飛躍的な進歩は、細胞の分子または群を操作する（例えば、系統的な構造や反応性の高いバイオシステムの）ための革新的なパターン化手法の開発に伴ってもたらされました。こうした工学的バイオ物質は、医薬品の初期段階での開発や実験など、広範囲な応用分野で使われるようになりました。

誘電泳動 (DEP) は、細胞をパターン化する手法、そして電気、エネルギー、医療などの応用分野の物質をナノスケールで組み立てるための手法として、最近開発されたものです。「DEP は細胞や物質をパターン化するには特に魅力的な手法です。なぜならば、この手法は、大規模産業の大量生産に最適である多重層の作成にとって、正確で効率的な技術だからです」とク

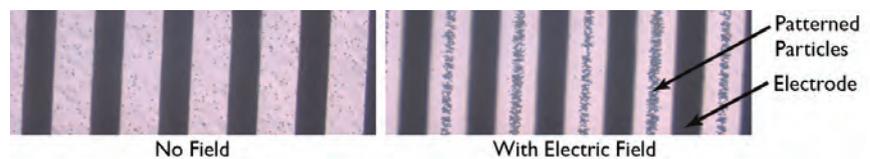


図 1. 実際に適用された電場、左側の不均質粒子のサンプルは、陽電位と接地電位を繰り返す一対の電極の間で系統的に整理された構造になります。

レムゾン大学バイオ工学の Guigen Zhang 教授は説明しています。この大学で彼はバイオセンサーおよびバイオ工学のリーダーを務めています。「DEP の中では、誘電体粒子が単層全体に広がっている不均質な電場のサンプル全体を、ほんの数秒で、パターン化することができます (図 1 参照)。」

Zhang 教授は、DEP の背後にある基本原理を良く理解し、パターン化して DEP の最適化をはかるために、東京エレクトロ

ン U.S. ホールディングスの Jozef Brcka 氏、Jacques Faguet 氏、Eric Lee 氏と共同研究を進めています。彼らの研究では、誘電泳動力に影響を与える新しい理論と方程式を検証するために、実験と組み合わせたマルチフィジックスシミュレーションを利用することが必要です。複雑な生物学的 DEP 研究から得た結果により、半導体産業向けツールの拡大に貢献する最新バイオの素晴らしい方法が生み出されるかもしれません。

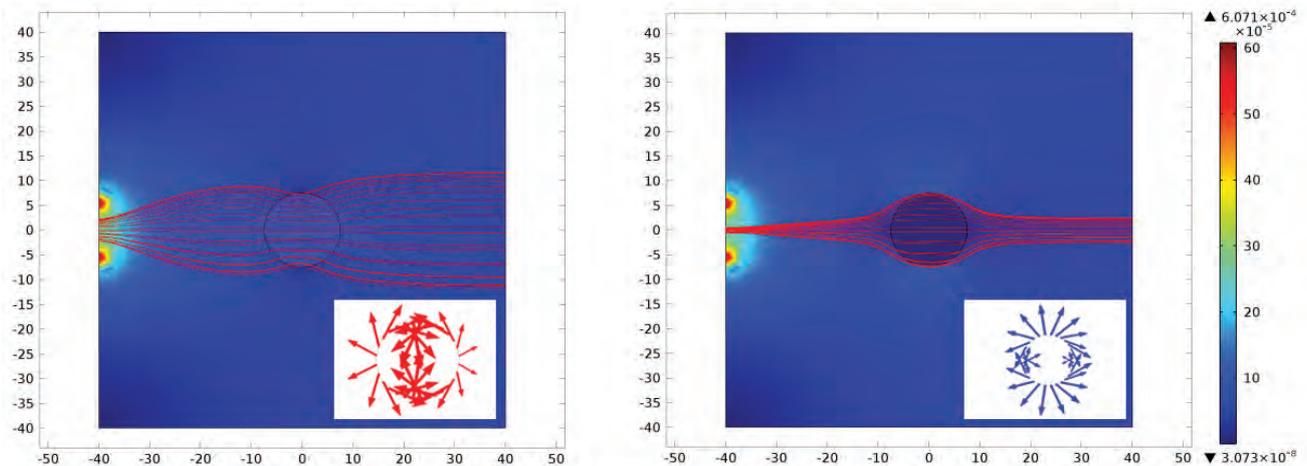


図 2. COMSOL Mutiphysics のシミュレーション結果は、中間に浮遊している粒子モデルの表面分極を表示しており、不均質な電場の影響を受けています。左側：電場強度を増加する方向で、左方向を示すネット誘電泳動 (DEP) 力を生み出す浮遊媒体よりも、この粒子に分極性があるときに正の DEP が生じます。右側：負の DEP は、この粒子の分極性が浮遊媒体よりも少ない場合に生じ、この粒子は電界強度が減少する方向で右側に向かって移動します。

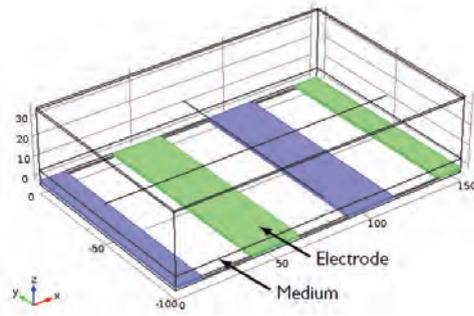


図 3. このモデルジオメトリは、シミュレーション内の交流電位と接地により、バイアスがかかる並列電極を示したものです。

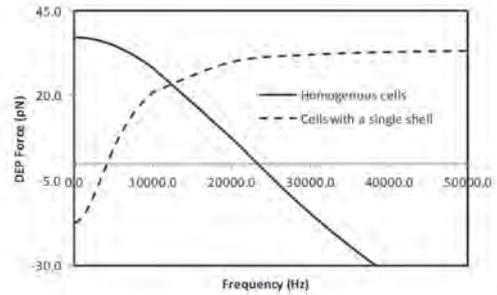


図 4. セルがシングルシェルで均質物体または不均質物体としてモデル化されたときに、セルに生じた周波数に依存する誘電泳動力のプロット図。

### DEP の仕組み

DEP では、不均質な AC もしくは DC 電場に媒体中の荷電粒子または細胞を加え、これらを 2 極化します。この粒子と媒体の相対分極率が最終的に分極子の方向性を決定し、その結果、力線に沿う動きの方向を決定します (図 2 参照)。

Zhang 教授および彼の同僚たちは、セル・ローテーション、粒子配列、電場の歪みなど、観測された作用を正確に説明する上で、既存の DEP 理論にいくつかの相違や限界があることを認識しました。彼らの研究は、こうした限界に取り組み、パターン形成において観測された作用の影響を明らかにすることを目的としています。

### セルの誘電泳動力のシミュレーション

クレムゾン大学と東京エレクトロンの共同研究によって、数種類の 2D および 3D モデルが、COMSOL Multiphysics の静電気インターフェース、移動メッシュインターフェース (ALE)、方程式を基にしたモデリング機能を活用して開発されました。それぞれのモデルでは、観測されたローテー

ションや配列の作用につながる粒子に生じる誘電泳動力に影響を及ぼす変数を研究します。

3D モデルにおける電極の配置は、等距離にある長方形の細長い金で作られており、絶縁用の酸化アルミニウム (アルミナ) でコーティングされています。そこでは、交流電極が正にバイアスされ接地されています (図 3 参照)。粒子または細胞は、このモデルで純水またはその他の媒体の中で懸濁しています。

既存の DEP の活用の限界を説明するために、細胞の不均質物質を考慮したシェルモデル (shell model) が、このシミュレーションで複素誘電率と誘電泳動力を計算するために利用されました。加えていくつかの研究の中で、この粒子の伝導率を計算する際に、電気的二重層の形成および粒子の大きさが考慮されました。

例えば、シミュレーションによって、細胞薄膜の不均質な粒子を考慮したシングル・シェルモデル (single shell model) を活用して決定された誘電泳動力の大きさは、実際には既存理論とは反対の傾向を的確

に示しています (図 4 参照)。Zhang 教授は次のように述べています。「COMSOL を利用したシミュレーションは、もはやブラックボックスアプローチではなくっており、DEP に作用する因子を十分に理解することができるようになっています。」

細胞を用いたシングル・シェルモデルによって、より正確な予測が可能となりましたが、原子核を含む他の細胞成分に不均質性を組み込むために、Zhang 教授と彼の同僚たちは、電場の歪みを説明し、細胞に生じる誘電泳動力やトルクを定量化する容量測定アプローチを開発しました。「新しいアプローチに基づくシミュレーション結果は、細胞体や中心を外れた核が非円形のために、細胞は回転することができるという実験観察を十分裏付けるものです」と Zhang 教授は報告しています。

多数の因子を組込むことが可能な包括的なマルチフィジックスモデルを開発、検証することにより、彼らの研究に豊かな情報をもたらし、DEP が細胞や他の物質をどのようにパターン化するのか、またどのように活用できるのかを深く理解することができるようになります。Zhang 教授は、「バイオプリンティング、バイオアプリケーション、最先端医薬品スクリーニングとその開発のためのバイオセンシング、細胞組織工学、再生医療などバイオ工学の重要な応用分野において、彼らの努力がいつか、DEP の多様な潜在的機能実現に役立つ日が来る」と信じています。



左側 左から右へ: クレムゾン大学 Johnie Hodge 氏, Sam Bearden 氏, Guigen Zhang 氏, Yu Zhao 氏, Vandana Pandian 氏  
右側 左から右へ: 東京エレクトロン U.S. ホールディングス技術開発センター Jozef Brcka 氏, Eric Lee 氏, Jacques Faguet 氏

### 〈参考資料〉

COMSOL カンファレンス 2013 発表資料オンライン参照  
[www.comsol.com/papers-presentations](http://www.comsol.com/papers-presentations)

# 粒子による電磁波の散乱

粒子は、電磁波との相互作用により生じる独自の散乱パターンにより特徴づけることが可能です。光学的な散乱の測定は、気象学、粒度測定、生物医学、メタマテリアルなど幅広い分野に応用されています。

Altasim Technologies 社、Sergei Yushanov 氏、Jeffrey S. Crompton 氏、Kyle C. Koppenhoefer 氏による寄稿

電磁波が物体を通して拡散するとき、粒子や局所的な電子分布の乱れを起こす不均質性との相互作用が起こります。この変化により粒子内で電荷が断続的に分離し、局所的な双極子モーメントが誘発され、振動が発生します。この断続的な加速が電磁放射の根源となり、散乱が起こります。

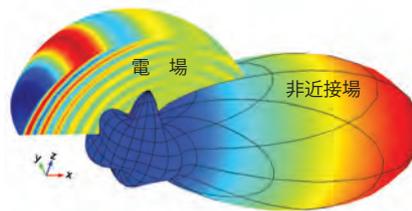


図 1. x 方向の入射波の Mie 散乱による電場。順方向で散乱の増大がみられる

## 粒子の大きさが重要

粒子による電磁波の散乱は二つの理論的枠組みで説明可能です。一つは Rayleigh 散乱でサイズの小さい、誘電性、非吸収性の球状粒子に適用され、もう一つの Mie 散乱は粒子サイズに依存しない一般的な散乱の解を提供します。粒子サイズが大きい場合、Mie 散乱の理論は幾何光学の限界に有限値をとります。そのため、Mie 散乱の理論は Rayleigh 散乱を含むほとんどの球状粒子による散乱を描くことができますが、実装の複雑さのため、多くの場合 Rayleigh 散乱理論が好んで使われます。Rayleigh 散乱モデルは粒子が入射電磁波の波長の約 10% を超えるサイズになると破たんするため、この場合 Mie 理論を適用しなければなりません。Mie 散乱の解は、球状粒子による電磁放射散乱の Maxwell 方程式を解析的に解いて求めます。この手法は単純な数式ではなく、無限級数に変換してモデル化されています。

Mie 散乱はいくつかの点で Rayleigh 散乱と異なります。まず、波長にほとんど依存せず、逆方向よりも順方向で大きくなります (図 1)。粒子のサイズが大きければ大きいほど、より多くの光が順方向に散乱します。Mie 散乱は、光散乱の数々の大気への影響だけでなく、大気中の塵の粒子、水中の油滴などの環境モデル、また、生

体内の細胞核や体細胞内の膠原線維の測定に使われる医学用技術にも応用されています。

## Mie 散乱

粒子または物体による Mie 散乱の解析解の実行は複雑であり、入射領域、散乱領域、内部領域を表わす Maxwell 方程式を解く必要があります。これらはベクトル球状調和関数の無限級数展開のかたちをとり、断面積、有効係数、強度分布の予測が可能となります。さらに、粒子形状、波の入射角、粒子の物性の影響を分析することも可能です。

電磁波散乱問題では、全波を構成要素である入射波および散乱波に分解します。重要な物理量は散乱領域から得ることができます。その一つが断面積であり、粒子の中心に位置する仮定の球体表面を通過する際の電磁エネルギーを入射放射 ( $P_{inc}$ ) で割った純率と定義されます。粒子により吸収される電磁エネルギー ( $W_{abs}$ ) および散乱される電磁エネルギー ( $W_{sca}$ ) の率を定量化するため、吸収 ( $\sigma_{abs}$ )、散乱 ( $\sigma_{sca}$ )、吸光 ( $\sigma_{ext}$ ) の断面積は以下の通り定義されます。

$$\sigma_{abs} = \frac{W_{abs}}{P_{inc}}, \sigma_{sca} = \frac{W_{sca}}{P_{inc}}, \sigma_{ext} = \sigma_{abs} + \sigma_{sca}$$

吸収された総エネルギーは、粒子の体積に対するエネルギー損失を組み合わせで求めます。散乱したエネルギーは、粒子の周りの仮想球体に対して Poynting ベクトルを組み合わせで求めます。

## 計算電磁気学

Mie 散乱の計算モデルは COMSOL Multiphysics® とその RF モジュールを使って作成しました。このモデルは、半径  $a$  の、誘電性球体粒子、磁気を持つ球体粒子、金属の球体粒子による散乱を解きます。図 2 はこのモデルのジオメトリを示しています。

空気領域は、モデルの範囲に関心がありかつ管理可能な領域に限定するため完全整合層 (perfectly matched layer, PML) を挿入して切っています。この領域内での解は PML の存在に影響されず、これにより領域を無限とみなして解を求めます。PML は外向きの波エネルギーを、境界上でのスプリング反射を引き起こすようなインピーダンスの不整合なしにすべて吸収します。PML は、解の望ましいレベルの正確性を維持するため、また、計算リソース利用の最適化に有用です。COMSOL はさらに非近接

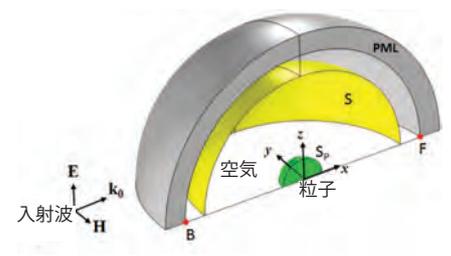


図 2. 球状粒子による Mie 散乱のモデルジオメトリ

場の計算もサポートしており、これは近隣領域と一体化した PML 領域の内的境界上で実施されます。表面 S は総散乱エネルギーの計算に使用されます。入射平面波は正の x 方向に進み (図 2)、電場は z 軸に沿って分極します。X-z 対称平面では完全磁気導体 (perfect magnetic conductor、PMC)、x-y 対称平面では完全電気導体 (perfect electric conductor、PEC) の境界条件がそれぞれ使われます。平面波の球体への入射は、波の振幅、空気中での波ベクトル、および円振動数によって決まります。便利なおことに、COMSOL は散乱の積分値を計算するために必要な機能をすべて持ち合わせ

ています。3 種類の粒子について散乱の特性を考察したのが図 3、4、および 5 です。計算解析の結果は、入手可能な実験結果 1 との良好な一致がみられます。Mie 散乱問題のシミュレーションにより、入射する電磁波に小さな粒子が与える影響を可視化でき (図 6)、相互作用のより深い理解につながっています。

〈参考文献〉

1 Mätzler, C., MATLAB Functions for Mie Scattering and Absorption, Version 2, IAP Research Report, (Bern: Institut für angewandte Physik, Universität, 2001), No. 2002-11.

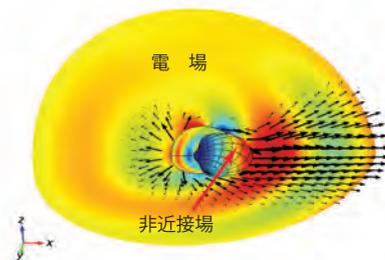


図 6. 半径 0.1  $\mu\text{m}$  の粒子による入射電磁波の散乱で生じた電場の z 成分の分布。矢印は、周波数 950 THz での相対領域における時間平均電力潮流を示す

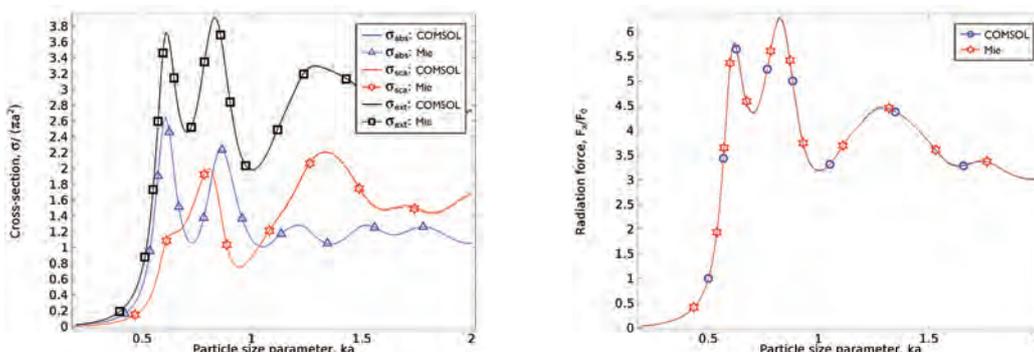


図 3. 誘電性粒子 (屈折率  $n = 5 - 0.4j$ 、比透磁率  $\mu = 1$ ) の断面積パラメータおよび放射圧

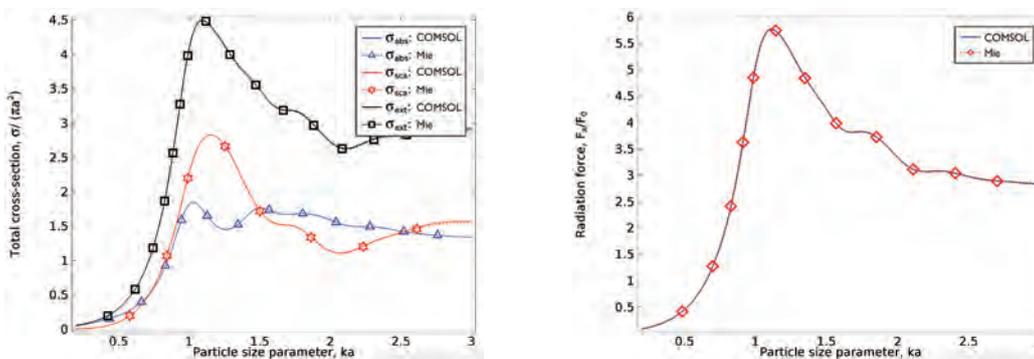


図 4. 磁気粒子 (比誘電率  $\epsilon = 5$ 、比透磁率  $\mu = 8 - 2j$ ) の断面積パラメータおよび放射圧

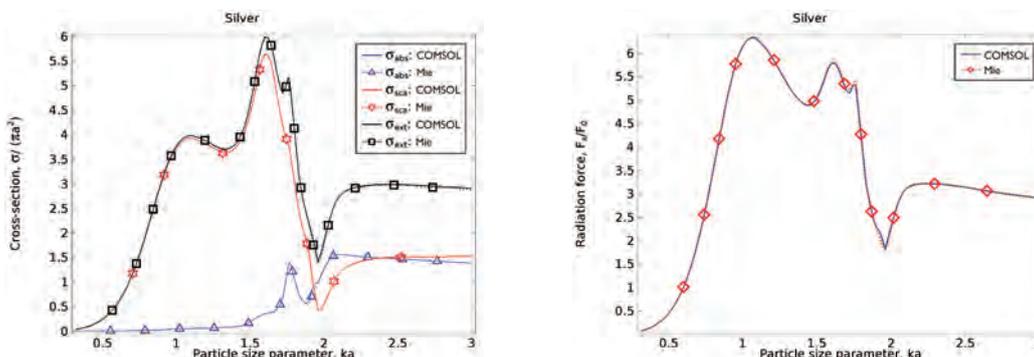


図 5. 誘電性銀粒子の断面積パラメータおよび放射圧

# 音波浮揚による浮遊

音の力は莫大です。条件が揃えば、物質の状態を操作したり変えたりすることが可能です。医薬品業界では、患者を治療するための技術が拡大しカスタマイズが進むなか、常に存在する高品質な薬物送達システムのニーズに対応するため、音波浮揚に着目しています。

Laura Bowen による報告

米国エネルギー省の一部門である Argonne National Laboratory では、Kamlesh Suthar 氏と Chris Benmore 氏が、医薬品製造の転換を目指し、音響技術の実装に熱心に取り組んでいます。両氏のチームでは、物質を持ち上げて操作するための音波を生成する音波浮揚装置の改良に、マルチフィジックスシミュレーションを活用しています。

## 音が製造する医薬品

Argonne での空気中で浮遊し回転する化学物質を混合させる研究は、医薬品のより効率の良い製造および送達を促進するための取り組みです。管理された環境下で、この浮揚装置は高純度のアモルファス化合物を生成するためのコンテナレスかつ汚染のない空間を提供します。Argonne のチームの話では、「アモルファス製剤の多くは、

長期にわたり安定させておくためにポリマーで結合されています」。Suthar 氏の音波浮揚装置では、定在波の各節の間で分子が集まって滴となり、小さな球形状をとります (図 1)。滴は互いに数ミリメートル離れた状態で浮きながらゆっくりと回転し、2つの小さな圧電変換器の間で浮遊します。大きさが可聴域よりもわずかに高い 160 dB で 22 KHz の周波数により、高圧域のポケットを持つ定在音波が生成されます。2つの変換器は電気エネルギーを音圧に変換します。Suthar 氏と Benmore 氏が取り入れた手法は、医薬品開発に大きな影響をもたらす技術です。アモルファス化合物は可溶性と生物学的利用能がより高く、結晶化したものより人体内での吸収と処理が容易になるのです。



図 1. 音波浮揚装置は、液体の滴を浮揚させる定在音波を生成する。装置は2つの変換器からなっており、波のパターンをコントロールするため、それぞれが薄い発泡樹脂層でおおわれている。

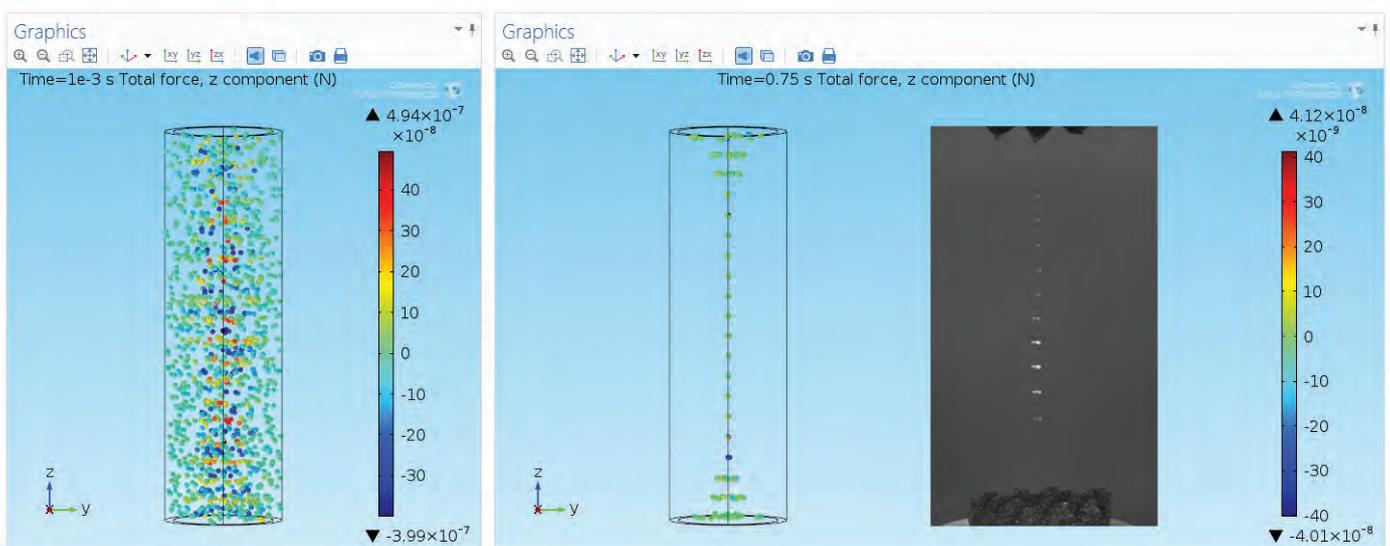


図 2.  $t=0.001$  での、当初の粒子分布 (左)。 $t=0.75$  で集まって滴となった粒子と、物理的な粒子分布の写真 (右)。

## 音伝播の浮揚力

粒子の動きをコントロールするために最適な形状に設計することが、この装置の機能で最も重要な点でした。今回の実験では、いくつかの平衡力が一度に働き、コントロール通りに粒子を浮遊させる現象を発生させます (図 2)。音伝播の力、粒子間の相互作用、抵抗、重力、そして滴の表面張力を考慮しなければなりません。ガウス分布のポリスチレン製発泡樹脂の特定のパターンは、変換器が発生させる不要な音波を除去する設計になっており、それぞれの変換器の縁に沿ってフィルターとして作用することで、干渉が少なく、均一に反響する明確な定在波が生成されます。

このような要因により粒子が垂直に並び、迅速に滴が形成されます。滴は水平方向に絶えず動いているため、思い通りの垂直方向の位置に留まります。

## 音響シミュレーションを実験結果と比較

チームでは COMSOL Multiphysics® のシミュレーションを作成し、西半球で最も強力な蓄積リングの生成する X 線ビームを利用可能な施設、Advanced Photon Source (APS) で実施したシンクロトロンによる X 線実験の検証を行いました。作成には、COMSOL のアドオン機能である音響モジュールと粒子トレーシングモジュールを使用しました。まず、圧電変換器の周波数および物性、浮揚装置に影響を及ぼす可能性のあるあらゆる熱の影響を検討しました。その後、個々の滴がどのように形成されるかをコントロール可能にするための発泡樹脂の形状を試行錯誤で突き止めました。さらに、粘度および表面張力の変化が滴の形状に与える影響も検討しました。このような干渉が、Suthar 氏が流体 - 構造連成 (fluid structure interaction、FSI) シミュレーションを使ってマッピングした構造の滴を作り出します。これらが関連する現象の検討に Suthar 氏が利用したのが、

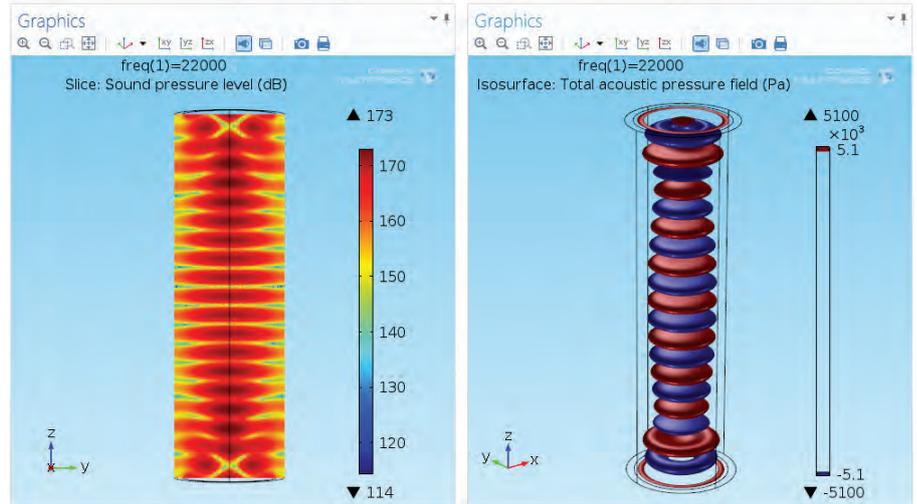


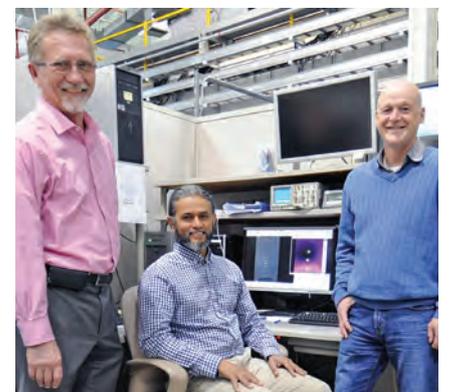
図 3. 周波数 22 KHz の定在圧力波により発生する音圧の標準レベル (左) と正圧・負圧の圧力ポケット (右)

CFD モジュールと、シミュレーションにおける異なるメディア間のインターフェースを把握する数値的な手法、レベルセット法です。音響モードのさまざまな変化における滴の形状をコントロールするためにレベルセット法を用いたことで、Suthar 氏は球状化を達成し、滴間の相互作用のコントロールを実現することができました。

研究者たちが設計の検証のために実験を行ったところ、シミュレーションの結果が APS で撮影した高速写真の示す滴の挙動と整合していることが分かりました。シミュレーション結果の示す音場分布 (図 3) も、実験結果と同様でした。

Suthar 氏は、「圧力波の建設的干渉のため、定在圧力波に正圧、負圧のポケットが発生しました。これらのポケットの中では、音は滴の浮揚とほぼ同様のレベルに達します。そのため、霧状の水を吹きかけると、滴は中央に向かって押され、働いている平衡力により浮揚するのです」と話しています。

Argonne の研究者たちは、マルチフィジックスシミュレーションを活用してこの装置の設計を固めました。科学者が音波浮揚装置の設計に磨きをかけ続けていくことで、技術革新の可能性は無限大に広がります。医薬品開発会社は医療用化合物のすべてについて濃度、滴の大きさ、量をコントロール可能になることでしょう。Argonne での発見は世界の医薬界で幅広い用途に応用可能です。新しい手段や機器が患者にとって本当の意味で人生を変える前進であることを意味する場合には、特にそう言えるでしょう。



Argonne のチームメンバー。左から Patric Den Hartog 氏、Kamlesh Suthar 氏、Chris Benmore 氏

# マルチフィジックスシミュレーションを使用して開発された微小ロボットの作動テクニック

フランスの Atomic Energy and Alternative Energies Commission では、研究者たちが組立てと操作のより簡単な微小ロボット操作装置の製作を進めています。彼らは、手術デバイス用のアクチュエータを既存品よりも安く提供できることを期待しています—いつの日かこの装置が手術台の上での手法に大変革をもたらすかもしれません。

Lexi Carver による報告

侵襲性を最小限にとどめる手術は、動作信頼性と安定したパフォーマンスを備えた、小さく柔軟性の高いツールに依存しています。ロボットデバイスは、外科医が何時間も立ったまま行う手技の補佐役として手術室に導入されました。しかし、ロボット手術デバイスは高価でかさばり、操作で疲れ果てるものが多いのです。フランスの Atomic Energy and Alternative Energies Commission の Systems and Technologies Integration Laboratory (CEA LIST, 所在地フランス、ジフ・シュル・イヴェット) で働く研究者 Christine Rotinat 氏は、これらに代わるデバイスの考案に取り組んできました。

## 相転移作動により外科医の体験を向上

Rotinat 氏の目標は、外科医が長時間の手技の後に感じる辛さを低減できる万能ロ

ボットツールを手頃な価格で提供することでした。そのためのデバイスは、安価で小型化され、比較的大きな変位量で高い力を生みだし、電力消費はほどほどで、医療ガイドラインに従ったものである必要があるでしょう。例えば、高い電圧は危険であり、また MRI のような機器の周辺で磁場を発生させるわけにはいきません。

Rotinat 氏は微小サイズの相転移アクチュエータを研究しており、このアクチュエータでは物質が固体から液体へ相転移するときに発生する体積膨張により動きと力が生み出されます。Rotinat 氏は、膨張率とストレス耐性が高く、患者の体温と規制限界温度の間の温度で相転移が発生する材料を必要としていました。Rotinat 氏は Goldschmidtboing 氏らが考案したパラフィンを使用する微小アクチュエータを検討しました。このパラフィンはワックス様の

炭化水素であり、加熱により固体から液体に変化する際に体積が 10~20% 膨張します。これをカーボンブラック粒子と組み合わせることで、電流が流れるとジュール加熱が生じる導電性複合材料が出来上がりました。

Goldschmidtboing 氏の微小アクチュエータは、カーボンブラックを濃度にして 2% 含む導電性パラフィンで満たされたチャンバーが、シリコン膜と電流を流すための金属製の封止片で覆われており、電気絶縁層で隔てられています (図 1)。パラフィンの膨張がシリコン膜を外側にたわませ、アクチュエータが駆動します。

Rotinat 氏と彼女のチームがこの複合材料の CEA LIST 微小アクチュエータ内での機械的挙動と制御の状況を評価し (図 2)、Rotinat 氏の同僚 Panagiotis Lazarou 氏が、その設計を最適化するために COMSOL

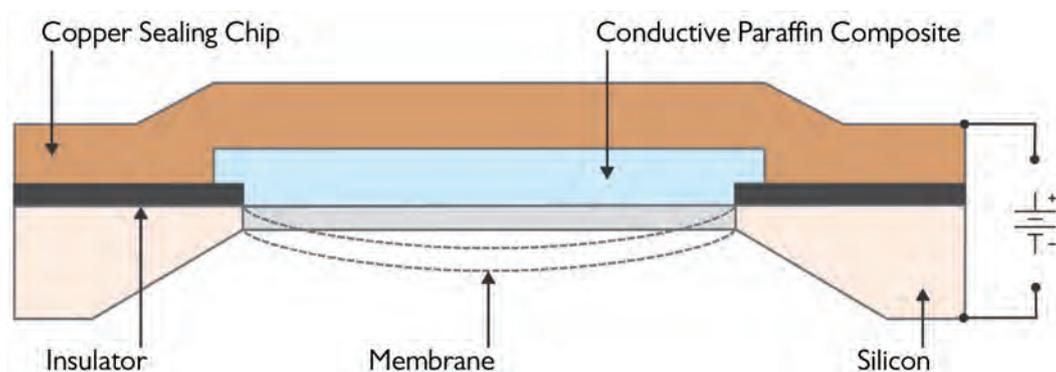


図 1. Goldschmidtboing らの研究に基づいた、相転移微小アクチュエータの原理模式図

## 「アクチュエータの縦幅、膜の厚み、ワックス様複合材料モデルを簡単にパラメータ化し変更することができます」

Multiphysics® を使って予測モデルを作成しました。デバイス内でのこの複合材料の挙動をシミュレートするため、両氏は Goldschmidtböing の微小アクチュエータの研究に基づきモデルの較正を行いました。

### マルチフィジックスシミュレーションを使用してアクチュエータの挙動を予測

Lazarou 氏のシミュレーションは形状的、熱的、機械的、電気的要因を組み込んでいました。「COMSOL では関連する物理的過程を直接連成できました」と同氏は話しています。「これは、非線形の電気導電率、密度と固有の熱容量、変化する粘度がからむマルチフィジックスな問題であり、これらすべてがシリコン膜のたわみに影響を与えます。」COMSOL を使うことで Lazarou 氏はそれぞれの要因が変位にどのような影響を与えるのかを調べることが可能になりました。

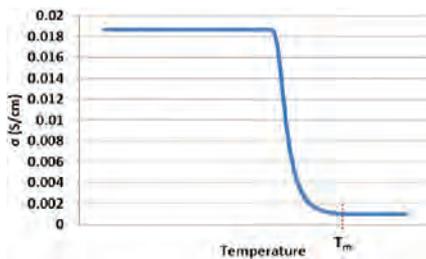


図 2. 温度によって変化する非線形の電気導電率の近似値。変性温度  $T_m$  は約 42.8 度となっている。

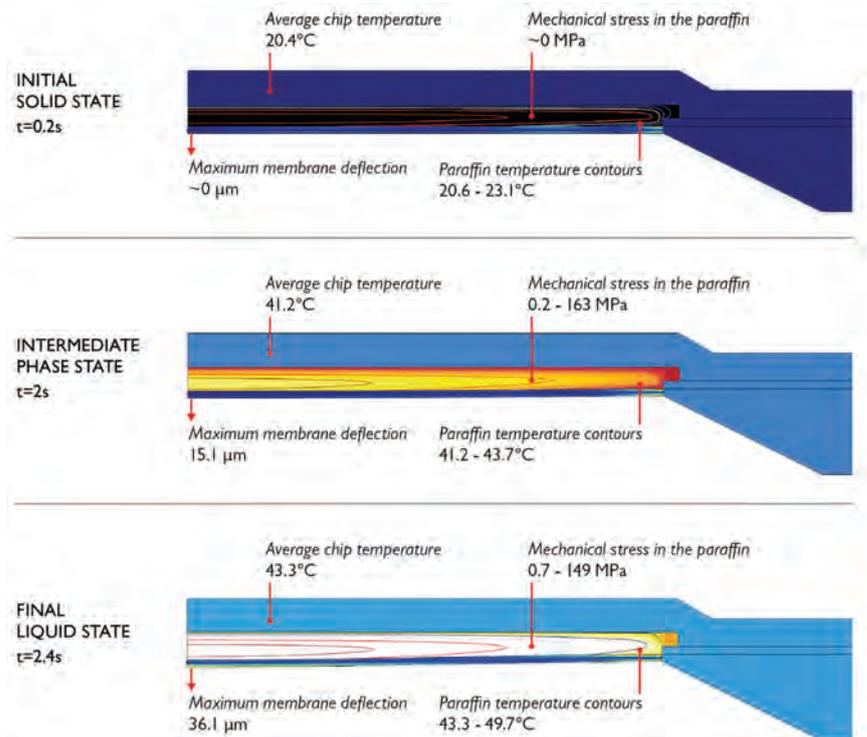


図 3. 封止片およびパラフィンの温度範囲、パラフィン内での応力、膜のたわみを示す検証モデルと結果

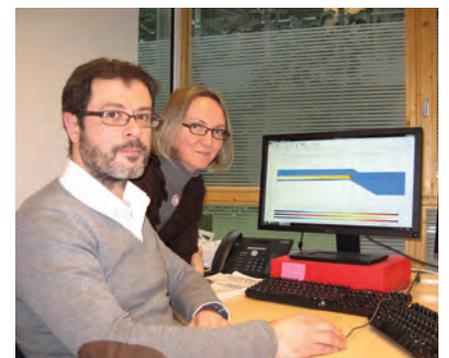
「私たちは COMSOL を予測ツールとして使っています」と Lazarou 氏は述べています。「アクチュエータの縦幅、膜の厚み、ワックス様複合材料モデルを簡単にパラメータ化し変更することができます。さらに、温度が上がると抵抗率が増しますが、これはパラフィンが膨張するとカーボンブラック粒子が離れて広がるためです。」Lazarou 氏は電気導電率分布をモデル化しこの挙動の近似値を求めました (図 2)。

シミュレートされた膜のたわみ (図 3) は Goldschmidtböing 氏らが研究で示したたわみと非常に近く、モデルと導電率の近似値の正確性を反映するものでした。これにより Rotinat 氏と Lazarou 氏はモデルを調整し CEA LIST 微小アクチュエータの設計を最適化することが可能になりました。

### ロボット手術ツールのニューフェイス

Lazarou 氏は、機械的な挙動と制御の状況をシミュレートし、相転移アクチュエータの現実的なマルチフィジックスモデルの作成に成功しました。Lazarou 氏と Rotinat 氏が思い描いた通りの高い負荷と動作範囲を実現するため、CEA LIST で作り上げた微小アクチュエータの設計と最適化に、こ

のシミュレーションを応用しています。このアクチュエータは電気消費が少なく医療上の要件を満たしており、コストと外科医の負担を低減します。2014 年に完成が見込まれているプロトタイプは、ロボット手術ツールへの組み入れ前に入念にテストされる予定です。無理なく購入でき簡単に使える手術ロボットを手術室で見る日も近いことでしょう。



微小アクチュエータのシミュレーションに取り組む Panagiotis Lazarou 氏と Christine Rotinat 氏

# コンセプトから市場へ：シミュレーションは製品革新における試行錯誤を削減

シャープヨーロッパ研究所、CHRIS BROWN 氏による寄稿

今日のエレクトロニクス産業で、成長に欠かせないのは革新です。一方でアイデアを市場に進出させる期間が短期間であるかどうか、その価値を最大値まで進出可能かどうかのカギとなります。R&Dの初期段階での意思決定プロセスを改善することにより、莫大な利益を得ることができるという議論は、“あいまいなフロント・エンド”と呼ばれ、正当な理由としては、疑う余地がないと思われています。しかし私の経験上、それはアイデアの質にもよりますし、そのアイデアを十分支援し裏付けるだけの証拠が極めて重要です。たとえ潜在的な画期的技術でも検証が乏しければ、プロセスが最高であったとしても決定的な結果を出すことは不可能なのです。試行錯誤を削減し迅速で費用効果がある方法が必要です。

イギリス、オックスフォードにあるシャープヨーロッパ研究所（Sharp Laboratories of Europe:SLE）は、新しい技術を同企業内へ提供する責任部門であるシャープ R&D グローバルネットワークに所属しています。私たちの役割は、近年のシャープ製品のポートフォリオの継続改良への支援だけで

**「幸運にも、研究所で私たちが直面する複雑な課題が増すと、私たちは COMSOL Multiphysics® のような高性能な有限要素シミュレーションツールで最先端コンピュータモデリングの支援を得ることが出来るようになりました。」**

はなく、完全に新しい製品ラインナップを開発するために長期的でより急進的な革新を通して、将来の成功を確保することです。

約 15 年前、ちょうど私が SLE に勤務し始めたころと比較して、研究室での顕著な変化はより多くの専門分野がかかわる総合的な業務へと移行していることです。今まで、保険制度や電力システムのように全

体としてのシステムや製品へのシフトはありました。仕事の本質が多分野にわたると共に複雑さは増し、研究者たちは全てのパーツがどのように組み合わせるのかを理解し、また 2 つの物理システム間の境界に存在する複雑な関係も理解する必要があります。

幸運にも、研究所で私たちが直面する複雑な課題が増すと、私たちは COMSOL Multiphysics® のような高性能な有限要素シミュレーションツールで最先端コンピュータモデリングの支援を得ることが出来るようになりました。私たちにとって COMSOL の重要な利点は、現実の世界で行うと大変困難で時間も費用もかかってしまう実験を仮想実験することができ、また様々な物理的メカニズムの境界を超えた実験も実装可能だということです。

COMSOL が大変価値あるツールだという 1 例は、私たちが行った、医療診断アプリケーション用のラボ・オン・チップ装置の開発プロジェクトです。そのプロジェクトとは、シャープの LCD 製造専門知識を活用し、電子センサーアレイ上にあるサブ



CHRIS BROWN 氏は、シャープヨーロッパ研究所の Health & Medical Devices グループのマネージャーです。彼は、ケンブリッジ大学、電子情報工学専攻

(Electrical and Information Sciences)、工学修士と文学士の学位を持っています。彼は、日本に勤務した 3 年間を含め、シャープにてディスプレイの技術開発に 10 年間携わった後、現在はエレクトロニクスと生物学を組み合わせて、ヘルスケア市場に進出する新しい装置を開発するため、総合研究を牽引しています。彼は、COMSOL との連携を今でも楽しみにしています。

フェース、電場分布、液体流量を同時に実装することが可能でした。その結果、シンプルな手計算と比較した時、実験研究に対して、より正確な起点を提供したのは液体投入構造の初期設計でした。物理設計の繰り返される試行錯誤の回数が結果として減少したことで、R&D の試作時間と費用削減につながり、大きな支援となりました。そしてその削減が無ければ時間がかかることが予想される市場にもより速くその装置を進出させることが出来るでしょう。

現代生活のより多くの場面でエレクトロニクスが大幅に増加し続ける場合、かつては分散されていた科学的専門分野とエンジニアリング専門分野の境界はさらに不鮮明になることでしょう。科学者やエンジニア達が直面している課題が日々複雑化し、開発速度が日々進化している SLE のような研究機関では、COMSOL Multiphysics は絶対不可欠なツールになっています。このような不明瞭さの中で業務を行っている私たちにとって、COMSOL Multiphysics が提供する導きの手には感謝の気持ちで一杯です。