

COMSOL NEWS

THE MULTIPHYSICS SIMULATION MAGAZINE

全ての人の
モデリングと
シミュレーションを

P. 4

Newtecnic 社の
革新的建築デザイン

P. 28

Nestlé 美味しさの裏側
にあるシミュレーション

P. 13

ベストな設計をどのように作成し、シミュレーション専門知識をどのようにシェア出来るのでしょうか？

これはエンジニア、設計者、そして研究者たちが時々自問する質問です。今年度の COMSOL News は、COMSOL Multiphysics® バージョン 5 と Application Builder からスタートしシミュレーション業界で起こっているパラダイムシフトに注目しています。

早速本号 4 ページをご覧になっていただければお分かりになるように、皆さんのシミュレーション専門知識は、Application Builder を活用することで、簡単かつ効果的な方法で他の皆さんとシェアすることが可能になります。専門家たちは、自分たちのモデルへアクセスするため、ユーザインタフェースに特殊化されたシミュレーションアプリケーションを構築することが出来ます。

このように COMSOL ユーザたちは、イノベーションのための絶え間ない努力により刺激を受け、また、関連したフィジックスを扱うにあたり、カスタマイズされ、適応性がありそして正確な新しいモデリングツールを活用しています。そして、利益を得る人たち全員とこのような方法で情報をシェアしています。これがまさに「全ての人にモデリングとシミュレーションを」に向けてシミュレーションアプリケーション構築性能が鼓舞される時なのです。

どのようにして私たちはベストな設計を構築可能なのでしょうか？もちろん、この正しいツールとともに、私たちの仲間たちから学ぶことによって、実現可能になります。今回の COMSOL News では、様々な業界の専門家の方たちからシミュレーションをご紹介頂きました。

Nestlé 社の食品製造関連、Newtecnic 社の建築フィジックスと建築設計に関して、Daimler 社からは自動車アプリケーションの腐食防止について、Lawrence Livermore National 研究所のレーザ物質相互作用、TNO の 3D プリンタや、他にも盛りだくさんの内容になっています。

モデリング作業とモデリング内容をシェアして下さった COMSOL ユーザの皆さんの寛大さには大変感謝しています。ユーザの皆様からお話を伺えたことに感激するとともに、今回のストーリーが皆様のお役に立つことを心からお祈りしております。❖



それでは、お楽しみください。

テクニカル・マーケティング・マネージャー
Technical Marketing Manager
Valerio Marra

INTERACT WITH THE COMSOL COMMUNITY

BLOG comsol.com/blogs

FORUM comsol.com/community/forums

LINKEDIN linkedin.com/company/comsol-inc.

FACEBOOK facebook.com/multiphysics

TWITTER twitter.com/comsol_inc

GOOGLE+ plus.google.com/+comsol

We welcome your comments on COMSOL News; contact us at info@comsol.com

日本語版お問い合わせ先

計測エンジニアリングシステム株式会社 comsol@kesco.co.jp Tel: 03-5282-7040

※記事の投稿も上記まで

EDITOR Alexandra Foley, Technical Marketing Writer, COMSOL, Inc.

**COMSOL
NEWS**
2015

© 2015 COMSOL. COMSOL News is published by COMSOL, Inc. and its associated companies. COMSOL, COMSOL Multiphysics, Capture the Concept, COMSOL Desktop, COMSOL Server, 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

CONTENTS

COMSOL® VERSION 5

4 全ての人にモデリングとシミュレーションを

USING SIMULATION APPS

5 シミュレーションアプリケーションを使用した 3D プリント技術の最適化

HOW TO BUILD AN APP

7 Application Builder and COMSOL Server™: レビュー

ACOUSTIC ENGINEERING

9 正確度という性能～完璧な計測の追及



FOOD PROCESSING TECH

13 Nestlé 美味しさの裏側にあるシミュレーション

AUTOMOTIVE

17 自動車部品の腐食による破損の防止

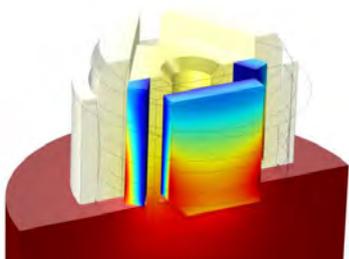


OPTICS REPAIR

20 レーザ材料の相互関係のシミュレーション

23 **PHOTOVOLTAIC MATERIALS**
ソーラーセルのためのシミュレーション

25 **MATERIALS SCIENCE**
3Dプリンタのバーチャルマテリアルデザインによるマルチスケール・モデル化の推進



28 **BUILDING PHYSICS**
複雑な建物正面（ファサード）の性能の最適化

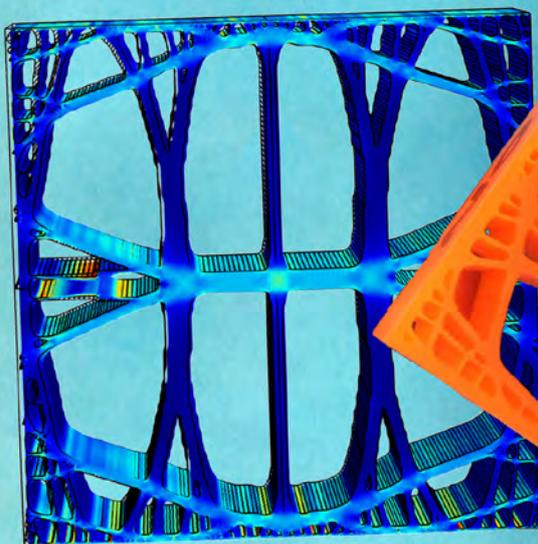
31 **BIOFUELS**
コスト効率の高い再生可能エネルギーを実現するバイオ燃料技術

34 **FORENSIC ENGINEERING**
シミュレーションがエレベータ事故に潜むミステリーを解明

36 **SUSTAINABLE ENERGY**
ビル冷暖房の改善策

39 **COMSOL BLOG**
最新のマルチフィジックスシミュレーション情報を COMSOL ブログで紹介

40 **GUEST EDITORIAL**
シミュレーションアプリは、火星への近道



FEATURED

TNO

3Dプリンタのバーチャルマテリアルデザインによるマルチスケール・モデル化の推進

25

DAIMLER AND HZG

自動車部品の腐食による破損の防止

自動車用品の腐食防止で革新的な設計を実現するハイブリッド材料自動車部品および接合部分のシミュレーション

17

MTC

シミュレーションアプリケーションを使用した3Dプリント技術の最適化

金属粉末を利用する3Dプリンタの開発にシミュレーションを利用

5

36

FRAUNHOFER ISE
ビル冷暖房の改善策

全ての人に モデリングと シミュレーションを

執筆者：SVANTE LITTMARCK 氏

ニュートン、マクスウェルや他の著名な科学者たちは、ある一定の境界条件や初期条件下での宇宙空間や時間で、物理的対象物や物理的システムがどのように発達するのかを正確に予測可能にしてくれる数学モデルである、“科学の法則”を残してくれました。応用数学者たちは、この法則の解法を正確に説明し、数値やグラフを作成する数値計算法を考案しました。

この数値計算法によりシミュレーション、パラメータ調整などが可能になり、最終的にはベストとまでは行かなくても、ベターな設計に達することが出来ます。

物理、数学、コンピュータツール、そしてエンジニアリングコミュニティのあらゆる分野の疑問は、シミュレーションを使用することで解答にたどり着くことが出来ます。火星に着陸後、地球にレポートを送信する火星探査機や携帯電話、GPSのようなコミュニケーション機器の開発などはそのうちのわずか2例に過ぎません。

飛躍的に進歩した技術革新の多くは、ここ数十年間で目の目を見えています。しかしながらシミュレーションにより多くの利益を得られる様々な分野の大半では、今日利用可能となっているこのパワフルなコンピュータツールによる開発がほとんど未着手のままなのです。それはなぜでしょうか？

→ 障害

最近のコンピュータツールは大変複雑で使いこなすことが困難であり、少なくとも将来受益者となる可能性がある人数よりも少ない人数で、専門のトレーニングを受けた本当にわずかなエンジニア達のみが使いこなすことが可能、ということが現状です。数学的モデルの設定は、数学者もしくは物理学者によるセットアップが必要になります。モデルの簡素化は、コンピュータの時間、メモリ、ソリューションデータマネジメントの節約には必要不可欠です。ささいな現象というものは、無視すべきでしょう。その現象を無視すべきかどうかは、アプリケーションの種類や到達すべきターゲットに関係してきます。どの物理的現象を含め、どの現象を省くのか、またその影響をどのようにモデリング反映させるのか、これらを理解するにはモデリングの専門的知識が必要です。

一度モデルを設定し、計算上方程式を解くとは、連続的な微分方程式を空間と時間において離散した差分方程式に置き換えるということです。差分方程式の解法では微分方程式の解法が収束するように、離散化を終えなければなりません。そうしなければ、それには物理的な意味合いがなくなってしまいます。また、正確な解答を得るために、離散化は正確でなければなりません。多くの物理分野での正規定値の数値ソルバ設定にはたくさんの方が見解がありますが、それらは全く同じではありません。時には、数値解析専門家の手によるソルバ設定の定義が必要になることもあります。

結果、シミュレーションパッケージの一般的ユーザは、博士もしくは理学修士を取得した人、または数年間のモデリングやシミュレーションの経験がある人になってしまいます。ある特定のパッケージを使用するために、ユーザは綿密なトレーニングも必要です。その人達は一般的には、大きな組織の研究開発部で科学者として勤務している人材です。モデルを作成しそのシミュレーション結果を解析するために専門家に依頼するかどうかはその人の判断に任せることとなります。これが意味しているこ

とは、小人数のグループの人たちが、より大人数のグループの人たちが従事する製品開発、設計、製造にサービスを提供しているということです。シミュレーションのモデリングは大変複雑になる場合もあるため、有効的なアウトプットを取得するために必要な、インプットデータを安全に提供することが出来る人はわずか1名というケースもあります。

→ 解法

小人数のグループの人たちが大人数のグループへと、サービス提供を可能とするための明確な解決方法は1つです。シミュレーションパッケージを作成することにより、シミュレーションの専門家たちは直感的で詳細なユーザインタフェースを構築し、その人達専用、もしくは一般的なモデルのready-to-useアプリケーションを作成することができます。アプリケーションには、ユーザドキュメンテーション、“境界内でのインプット”のチェック、ボタンクリック時の定義済みレポートが含まれます。これらの性能を有するシミュレーションアプリケーションは、ユーザによる予想外のインプットエラーを防止し、関連性が高いアウトプットに焦点を絞ることが可能になります。そして、アプリケーションは大規模グループのユーザたちとシェアすることが可能になります。

この記事の最初にリストアップした項目を達成するよりも、こちらの方が達成しやすいのです。皆さんがこれを読んでいるこの瞬間にもこれは実現可能です。シミュレーションアプリケーションの拡張は、即時可能です。取り残されたいエンジニアなどはいません。競合企業がより迅速な対応を受け入れのために利益を得ることを喜ばしく思う企業もありません。最終的には、お客様がシミュレーションアプリケーションをインストールし、より優れた購買の決定を下すのです。❖



COMSOL グループ CEO、共同創業者、Svante Littmarck 氏

シミュレーションアプリケーションを使用した 3D プリント技術の最適化

執筆者：ALEXANDRA FOLEY 氏

全く新しい技術開発コンセプトを初期段階から、正式に産業利用が実現可能な段階に至るまでには、厳しい検査と検証が必須になります。例えば、積層造形（3D プリント）が最初に登場したのは1980年代で、TRLはレベル1でした。（TRL: Technology Readiness Level：技術成熟度のことで、1970年代にNASAが開発した評価法。技術を産業利用する上での成熟度を評価する方法）そして、その後、この製品が新たな大人気製造技術として産業市場に衝撃を与え、世界を一変するまでに何十年もの歳月がかかりました。

→SMD (shaped metal deposition) のシミュレーション

イギリスのCoventryに位置するManufacturing Technology Centre (MTC) では、ある製品の基礎研究から産業利用への実現が可能となるよう（TRL 1～TRL 3からTRL 7～TRL 9へ）、設計や必要なリソースを提供し、製品コンセプトと産業利用とのギャップを埋める橋渡しの役割を担っています。MTCの近年の功績の1つは、SMD (shaped metal deposition) と呼ばれる付加的産業技術の研究です。

“SMDは粉体ベースのアディティブマニファクチャリング技術を使用することで複数のメリットが生まれます”と、語るのは、MTCのManufacturing Simulation担当、研究エンジニアのBorja Lazaro Toralles氏です。彼はCOMSOL Multiphysics®ソフトウェアを使用してSMDプロセスのモデル設計とシミュレーションアプリを構築しました（図1参照）。“複数あるSMDのメリットは、高い凝結率、既存の部品上に新しい特徴の付加が可能、もしくは、同じ部品上に複数の材料が使用可能である、ということです。”

粉体の薄層を溶解する際にレーザを使用する他のアディティブマニファクチャリング技術と異なり、SMDは溶解金属のシートを使用します。場合によっては、溶接のように表面上に層をビルトアップしチタン同様、高額になる場合もあります。“これに関するチャレンジの1つは、溶解金属上で熱膨張が起こるため、冷却する時に被覆材が変形してしまう可能性があるということです。結果として最終製品は予想していたものとは異なるものになってしまいます”とLazaro Toralles氏は語ります。“設計案の結果を予測するため、歪みを最小限に抑えたり、製品を構成する設計自

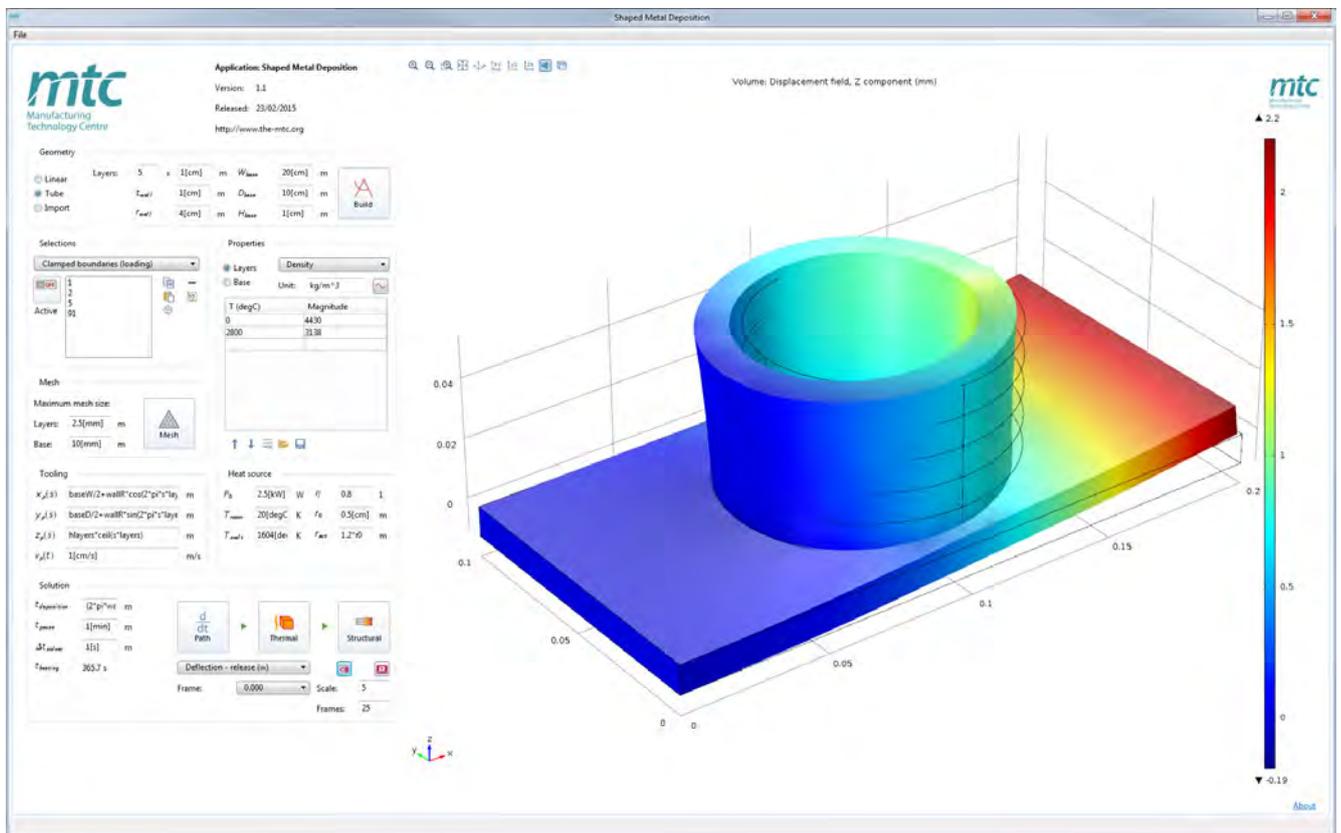


図1. COMSOL MultiphysicsのApplication Builderで構築されたSMD (Shaped metal deposition) シミュレーションアプリケーション。このアプリケーションでは、製造プロセス中に発生した残留応力を算出し、最終偏位を予測します。

体を変更する必要があります。” 図2はSMDを使用している製品の一例を示しています。そこには、6回の沈着後に偏位が見られる溶解金属も示されています。図2でも明らかですが、設計者はモデリングを実装し、製造中に起こる偏位を予測し、その結果を設計にアップデートすることができます。

→ シミュレーションアプリケーションと共に複雑化対応

MTCでは、複数のシミュレーションを使用し、複数のプロセスを介するような複雑な設計アイデアにより効率的に対応するため Application Builder を活用しています。これによりアプリケーションユーザーたちは、設計案の結果をより簡単に検証することができるようになります (図1参照)。もしシミュレーションアプリケーションがなければ、検証と解析には膨大な時間がかかってしまいますし、もし物理的な検証のみの場合は費用もかなり高額なものになってしまいます。

SMDのシミュレーションには、SMD熱サイクルから生じる残留熱圧力と偏位を予測する時間依存の連成熱機械分析が含まれます。

“私たちは Application Builder を使用してアプリケーションを構築しました。ユーザはこれを使用し、定められた耐性の範囲内の堆積プロセスにて部品製造可能かどうかを予測します”と Lazaro Toralles 氏は語ります。“もしも不合格の場合は、基準条件に満たす最終的な結果にたどり着くまで、ユーザフレンドリーでコスト効率の良い方法を複数提供し続けてくれます”と彼は続けます。

このアプリケーションを使用すると、モデルの複雑さを考慮せずに、熱源、堆積パスや材料などの幅広いジオメトリを容易に試みることが出来ます。このアプリケーションには、すでに2つの定義済みパラメータが搭載済みで、カスタムジオメトリもインポート可能です。

最近では、MTCのチームメンバーの中で今まで一人でシミュレーション構築の経験が無いメンバーでさえも、このアプリケーションを使用して、他の部品製造にチャレンジしたり、他の顧客プロジェクトに使用したりもしています。“もしこのアプリケーションがなかったとしたら、シミュレーションのプロたちは、各プロジェクトを拡張するたびに実験、検証しなくてはならず、熟練したプロの人手不足になる可能性もありました”と Lazaro Toralles 氏は説明します。“Application Builder を使用している今、私たちは他のMTCチームにもユーザフレンドリーなアプリケーションインタフェースを提供することが出来ます。”MTCはアプリケーションプログラムをカスタマにも提供していく予定です。

そして“シミュレーションアプリケーションの使用は、産業環境で実用的な使用が可能となるさらに高レベルなTRLでの技術展開をサポートしてくれます。”“Application Builder は、力強い開発基盤を提供してくれます。これにより私たちは、複雑なマルチフィジックスモデルを構築し、広範囲にアクセスが可能になります”と Lazaro Toralles 氏は締めくくりました。❖

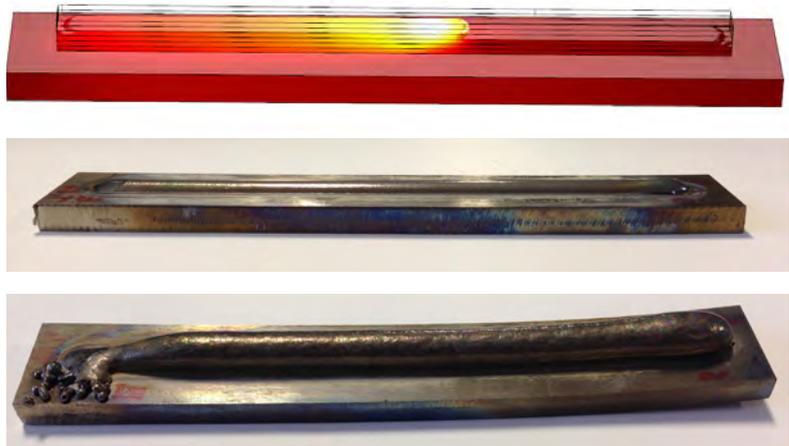


図2. SMDプロセスの間、熱サイクルによって製造部分上に残留応力が引き起こされます。上:SMDパートのシミュレーション 中:1回だけの沈着。目立った偏位は見当たらない。下:6回の沈着。容易にその偏位が分かる。



MTCチームのAdam Holloway氏(左)、Borja Lazaro Toralles氏(中央)、Willem Denmark氏(右)が、COMSOLモデルを実行し、実験検証を行い、最終的にSMD COMSOLを構築しました。

MANUFACTURING TECHNOLOGY CENTRE (MTC) について

MTCは製造プロセスにおける最先端技術開発を進める上で大変ユニークな環境を提供しています。イギリスの第一線にいる学者たち、エンジニア、そして業界の専門家たちを一同に集め、産業規模での新しい技術の開発やその紹介をしています。クライアントたちは、このシステムによって商業的製品環境の制限なく、安全で中立的な工業設定の中で新しい製造プロセスを開発することができるのです。

BAE Systems, GKN, HP, GM, Airbus, そして Rolls Royce を含む80以上の組織がこのメンバーとして所属しています。

APPLICATION BUILDERと COMSOL SERVER™ : レビュー

執筆者: WILLIAM T. VETTERLING 氏

COMSOL Multiphysics® バージョン 5.0 の全く新しい製品を設計企業へご紹介しましょう: Application Builder とその相棒の COMSOL Server™ です。Application Builder を使うことによって設計者はモデル作成で使用していた詳細設定指向のツールを一掃し、より親しみやすいアプリケーション (アプリ)、より直感的で簡単操作できるアプリを作ることができます。

アプリはボタン、リスト、メニュー、グラフィックス、テキストなどを組み合わせて直感的に操作できるシンプルなインターフェースとして作り込むことができます。アプリは COMSOL Multiphysics から起動することができます。さらに重要な点は、COMSOL Server ライセンスを用いることで、世界中からリッチクライアント環境でフル機能で起動させることも可能です。COMSOL Server を併用した場合はスタンドアロンアプリとして起動するだけでなく、Web ブラウザーを通じて Web アプリとして起動することも可能です。

また Application Builder を利用する見込みがある数多くのシナリオが見つかるでしょう。アプリを使うことで解析結果を表やグラフなどの静的データを見るのではなく、その場で計算実行しリアルタイムで確認することが可能です。同様に、アプリを講義またはデモ実行用に構築することも可能です。企業はデータシートの代わりに、シミュレーションアプリで製品性能をデモ実行することを要求することも可能です。またライセンスされたアプリ製品として彼ら自身の権利で作成することも可能です。

一言でいえば、Application Builder は、モデルを構築する側のモデリングのプロとモデルを使用する側の科学者やエンジニアリングのプロとの新しいコミュニケーション製品なのです。

→アプリケーションの構築方法

アプリの作成を試すのはとても簡単です。まずはアプリに作り替えたいと考えている COMSOL Multiphysics 機能モデルから始めました。ファックス機で使うような、電流密度とマルチピクセル圧膜感熱プリントヘッド加熱のシンプルな 3D モデルを使うことを選択しました (図 1 を参照)。抵抗薄膜の当該部分を加熱するために、プリントヘッドの選

択された電極に電圧が印加されます。そしてモデルの目的は、薄膜の最終的な温度分布を取得することです。

このモデルをアプリとして作り込むために、アプリケーションウィザードを使用しました。(訳注: v5.1 では [アプリケーションビルダ] の [新規フォーム] 機能に該当します) このウィザードは COMSOL モデルの選択から始まり、[Inputs/Outputs (入力/出力)], [グラフィックス], [Buttons] タブの各リストから適宜選択します。

“電極数 (Number of electrode)” と “電極幅” を [Inputs/Outputs] で選択し、ジオメトリを構築する “Plot Geometry” と計算実行する操作の “Compute” ボタンを [Buttons] で選択し、[グラフィックス] タブでジオメトリを表示する画面とサーフェス温度を表示する画面を追加しました。

これらを選択することで、入力/出力データのためのエディットボックスや表示ボックス、実行するためのボタン、グラフィックス

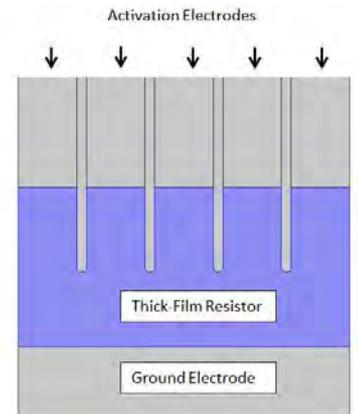


図 1. 理想的なプリントヘッド回路図

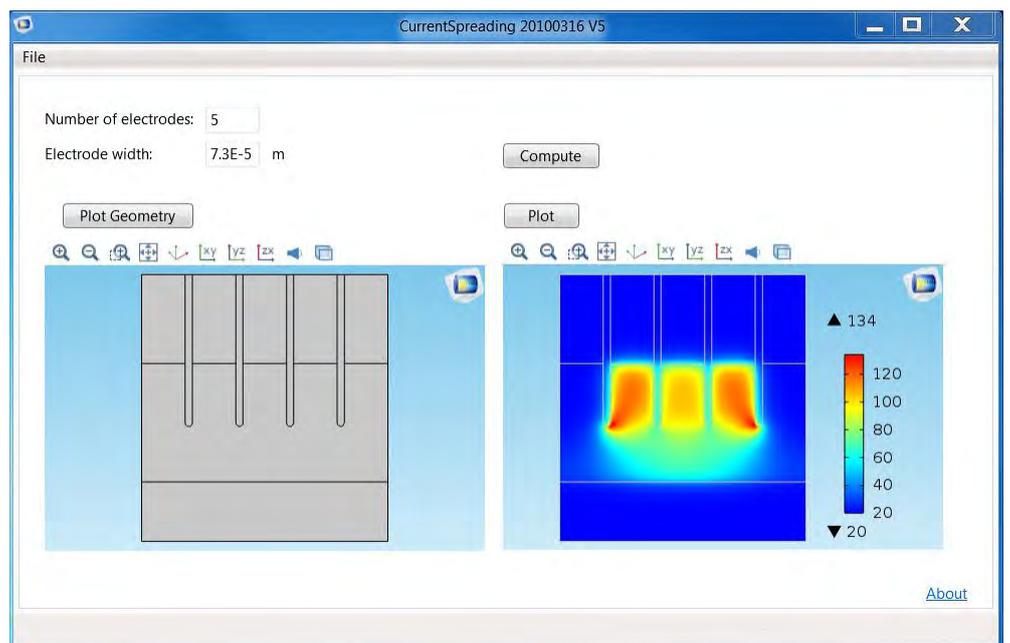


図 2. Application Wizard を使用して構築したアプリのスクリーンショット。2015 年 2 月の Physics Today のウェブサイトに掲載された図の概略

表示のためのディスプレイパネルを備えたアプリケーションができました。各アプリコンポーネントまたは各ウィジェットはキャンバス上に表示され、マウスドラッグで拡大・移動ができ、魅力的なインターフェースに構成できます。[テストアプリケーション] ボタンをクリックすれば新規アプリが起動され、COMSOL デザイン環境上で各機能をテストすることができます。図 2 が私が解析モデルからアプリケーションウィザードを使って構築したアプリです。

→ 全力前進

アプリケーションウィザードを使うことで素早くまたユーザフレンドリーな解析モデルを 2, 3 分で作ることができますが、これだけでは Application Builder の真価は問えません。もし私がもう少しより魅力的なものに仕上げようとする際には、いくつかのツールを使って機能豊富なアプリを作ることができます。その目的のために、Application Builder は 2 つのサブツールが備わっています：フォームエディタとメソッドエディタです。

最初のサブツール、フォームエディタはアプリのページレイアウトを構築するのに使われます。非常に多くのグラフィカルユーザインタフェース・ウィジェット選択肢を提供し、ユーザはその各ウィジェットに関連した一連のアクションを設定します。アプリケーション・ライブラリのサンプルにはボタン、チェックボックス、コンボボックス、ラジオボタン、テキストボックス、スライダー、テーブルが含まれています。さらにフォームエディタには、プログレスバー、メッセージログ、LaTeX 記法ウィジェット、それに結果テーブルも含まれています。

2 番目のサブツールはメソッドエディタです。これは本質的には Java プログラミング環境であり、これを使用することでユーザは COMSOL の Java インタフェースと機能追加のための外部ライブラリを組み合わせてすることができます。

メソッドエディタは解析モデリングに関しても可能性を秘めています。Java プログラミング環境として、もちろん Java コード、クラス、ライブラリをあらゆるソースから構築可能です。それだけでなく、メソッドエディタを使うことで COMSOL モデルツリーや COMSOL API をいくつかの有益な方法で相互作用することも可能です。例えば、[コードをレコード] 機能を使うことでユーザはレコーダをオンにし、引き続きモデルツリーで操作を実行し（例えばグラフを作成したり、メッシュを指定するなど）、[レコーダをオフ] にすることでメソッドに特定の Java コードが追加されることに気がつくでしょう。

→ 更なる機能拡張

Application Builder の COMSOL ワークショップに参加し、“Introduction to Application Builder” を読んだ後、オリジナルアプリを 1 日かけて拡張しました。新しいアプリは、図 3 に示していますが、最上段にツールバーを持ち、ジオメトリ設定の項目を追加し、モデル実行、それに結果表示を個別のページに表示しています。最初のタブウィンドウでは、プリントヘッドのピクセル数と寸法の設定が可能になっており、その後にプリントヘッド形状を描画します（ジオメトリは入力値によって作成され、グラフィックスウィンドウにフィットするようにサイズ調整されます）。

アプリの 2 番目のタブは、図 3 に表示されていますが、2 つの機能を持っています。選択ボックスでドメイン選択することにより、グラフィックスウィンドウのジオメトリが描画されます。これは

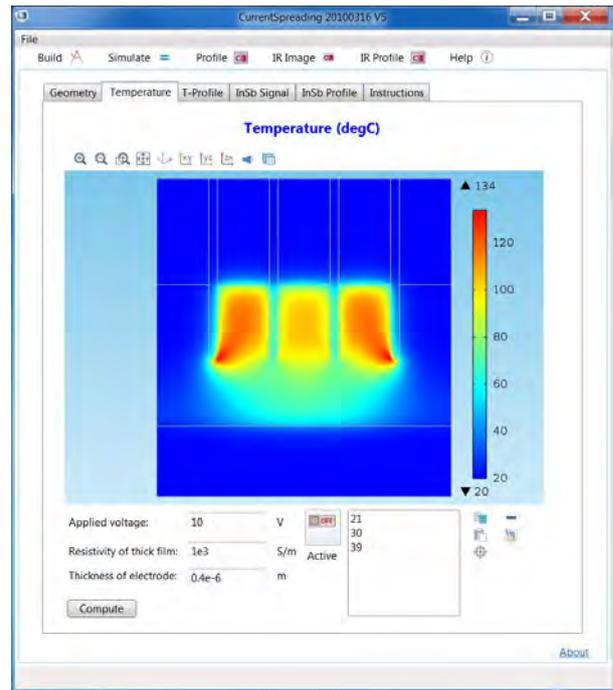


図 3. Application Wizard を使用して構築したアプリケーション。フォームと他の機能強化が修正可能です。

リアルタイムで描画され、電極の境界をクリックすることによってアプリケーションに反映されたり、電位が除外されたりするのです。[Compute] ボタンをクリックすることによってメッシュ作成が実行され、計算実行されます。計算実行中はプログレスバーが画面右下隅に進捗を反映して表示されます。

計算が完了すると、モデルはチャイム音を鳴らして、追加の結果表示と 2-3 ページのレポートを準備します：1 つは 2D 表面温度データの 1D 切片でピクセル中心を通過する温度プロファイルを示し、残りの 2 つは温度データの法線方向データと、インジウム・アンチモン反応の代表的な反応曲線です。

これが私の Application Builder を数時間使用した奮闘記です。使いやすいインターフェースを作ることは厄介な仕事ではなく、技術力のある解析モデル作成者にとってさえ、モデルを生産的に使うことによって以前にあった乱雑さが取り除かれるのを見るのは満足感があります。

COMSOL Multiphysics 5.0 に追加された新しいツールは、アプリケーション開発をたった一つのツールに集約する可能性、それに API 連携の素晴らしいシンプルさへの可能性、それにスタンドアロンサーバの提供による詳細設定指向モデル開発からの開放の可能性に主に寄与します。この変更によって、ユーザインタフェース作成をより自然なものかつモデル開発プロセスのより中心的部分とし、より多くの人々にマルチフィジックスモデルの利用と理解に引き込むことを約束します。❖

William T. Vetterling 氏は、Zink Imaging、Image Science Laboratory の主任研究員で、マネージャです。また Numerical Recipes の本とソフトウェアシリーズの共著者です。



正確度という性能～完璧な計測の追及

Brüel & Kjør 社の研究者たちは、産業用、計測用のマイクロフォンおよびトランスデューサの正確度と精度をこれまでにない水準に引き上げるためにシミュレーションを用いています。

執筆者：Alexandra Foley 氏

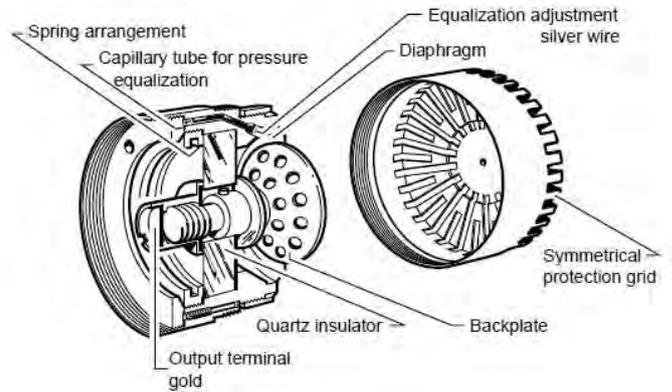


図 1. 左：4134 マイクロフォンの写真。振動板の上に保護グリッドが置かれている。右：一般的なマイクロフォンカートリッジの断面図。主要な部品が示されている。

完璧な計測や、絶対に間違いのない道具というのはいつになっても現実にはならないものです。自分で計測したものを無条件で信用することはありますが、計測に誤りは付きものです。というのも、機器は計測したものを定義する訳ではないからです。計測機器は定義するのではなく、周囲の現象に反応し、絶対的な標準を不完全に表したものに照らして、計測したデータを解釈します。

そのため、すべての機器にはある程度の許容誤差、つまり有用性を損なわずに計測を誤ることが許される範囲が設定されています。難しいのは、既知かつ一貫した誤差範囲を、長い期間にわたって持つ機器を設計することです。

Brüel & Kjør A/S は 40 年以上にわたり音響や振動の計測および分析の分野をリードしてきました。同社の顧客には、Airbus, Boeing, Ferrari, Bosch, Honeywell, Caterpillar, Ford, Toyota, Volvo, Rolls-Royce, Lockheed Martin, NASA などが名を連ねます。

産業界での音響、振動に関連した課題は、道路や空港での騒音から車載エンジンの振動、風力タービンの騒音、生産品

質管理まで多岐にわたるため、Brüel & Kjør 社はさまざまな測定規格を満たすマイクロフォンや加速度計を設計しなければなりません。これらの要件を満たすため、同社の研究開発プロセスには、開発した機器の正確度や精度を検証し、新しく革新的な設計をテストするための一手段として、シミュレーションが組み込まれています。

→ 精度の高いマイクロフォンの設計、生産

Brüel & Kjør 社では、超低周波不可聴音から超音波までの周波数、並びに聴覚域値よりも低いレベルから通常の大気環境下での最大音圧レベルまで対応するコンデンサマイクロフォンの開発および生産を行っています。そのリストには作業標準や実験室標準となるマイクロフォン、特殊な用途専用のマイクロフォンなどが含まれます。一貫性と信頼性は、同社でのすべてのマイクロフォン開発における重要な要素です。

「当社では、コンデンサマイクロフォンの開発や、開発したマイクロフォンが国際電気標準会議 (ICE) や国際標準化機

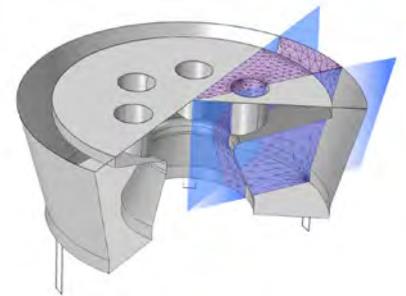


図 2. 4134 コンデンサマイクロフォンのジオメトリ図。セクタ数を削減したジオメトリで用いたメッシュの図であり、ジオメトリ全体の 12 分の 1 が示されている。

構 (ISO) の関連規格を満たすことを確実にするためにシミュレーションを使っています」と Brüel & Kjør 社 Microphone Research and Development 部の開発エンジニアである Erling Olsen 氏は話します。「シミュレーションは私たちの研究開発プロセスの一部として用いられており、他のツールとともに、当社のマイクロフォンが幅広い条件下で確実に機能することを確信させてくれます。例えば、静圧、温度、湿度などの影響、また、その他のパラメータが当社のそれぞれの製品にどのように影響するのかを正確に知ることができます。シミュレーションを使わずにこ

れらを評価しようとしたら非常に難しかったでしょう。」

Brüel & Kjær 社の 4134 コンデンサマイクロフォン (図 1) は、長年にわたり論理的、実用的研究の対象となってきた旧型のマイクロフォンです。4134 マイクロフォンは Brüel & Kjær 社でコンデンサマイクロフォンのマルチフィジックなモデルを開発する際にもプロトタイプとして使われてきました。Olsen 氏のシミュレーションには、マイクロフォンの性能を分析するため、振動板の動き、振動板の変形と電気信号生成との電気機械的相互作用、共振周波数、マイクロフォン内部の空洞における音の粘性損失、熱損失が含まれます。

→ **マイクロフォンのモデリング**

音がマイクロフォンに入ると、音圧波が振動板を変形させ、これが電気信号として測定されます。電気信号はその後デシベルで表される音に変換されます。「マイクロフォンのモデリングでは、動くメッシュや、緊密に連成した機械的、電気的、音響的な問題を解く必要があり、これらはマルチフィジックスな機能なしでは不可能です」と Olsen 氏は述べています。「(マイクロフォンカートリッジの形状に起因する) 大きなアスペクト比とサイズの小ささにより、多くの場合、熱および粘性損失がマイクロフォンの性能に重大な影響を与えることになるため、モデルは非常に細かい部分まで作り込む必要があります。」

このモデルは、バックプレートと振動板との間で起こる相互作用の予測にも使うことができます。この相互作用は、マイクロフォンの指向性に特に影響します。「私たちは、このシミュレーションを使って振動板の曲がり方のパターンを分析しました」と Olsen 氏は話します。熱応力や共振周波数などのシミュレーションでは、計算時間短縮のために対称モデルが使われました (図 2)。セクタ数を削減したモデルは、振動板に垂直入射する音の、マイクロフォン内での音圧レベル分析にも使われました (図 3)。しかし、音が垂直入

射しない場合、振動板は非対称な境界条件におかれることになります。振動板の曲がり方を正確に把握するためには、ジオメトリ全体を考慮したシミュレーションが必要となります (図 4)。

マイクロフォン内の空気孔が低周波数の音の計測に与える影響を確認するためにもシミュレーションが使われました。「マイクロフォンのモデルは、空気孔が外部の音場に曝露されているもの、音場外 (曝露なし) のもの、空気孔なしのもの、を準備しました」と Olsen 氏は話します。「最後の一つは実際にはあり得ないのですが、空気孔の配置と入力抵抗の結果との間に起こる相互作用をさまざまな低周波数音について確認することができました。これはシミュレーションの最も大事な点の一つと言えます。すでに生産されている機器から離れてモデルのパラメータに変更を加えることができ、他の設計をテストしたり機器の限界を探索したりできるのです (図 5)。」

研究開発プロセスの一環としてシミュレーションがあることで、Olsen 氏と同僚らは Brüel & Kjær 社の主力商品のいくつかを設計しテストするだけでなく、顧客それぞれの要件に合わせて機器を製作する

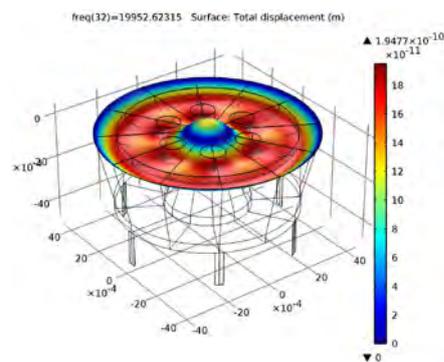


図 3. セクタジオメトリを使って計算した、振動板の下での垂直入射時の音圧レベルを図示したもの。振動板の変形は $f = 20$ kHz で評価した。

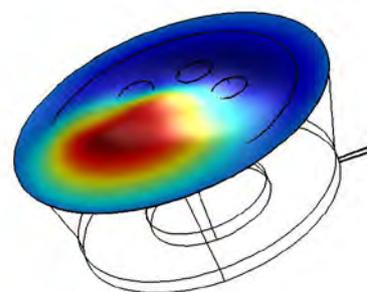


図 4. 25 kHz での非垂直入射での振動板の変形をシミュレーションした結果。変形が非対称であるため、フル 3D モデルを使って計算した。

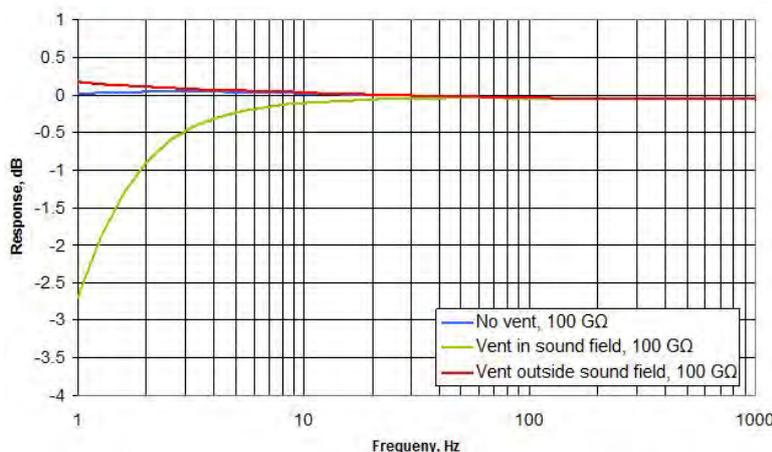


図 5. 空気孔なしの構成の場合、感度が増すのは超低周波ではマイクロフォン内部の音場が完全に等温になるため。音場の外に空気孔がある構成の場合、最初は空気孔なしと同様に推移するが、空気孔が振動板の裏側で圧力を解放し感度がさらに増す。

ことも可能になりました。

「シミュレーションがあれば、顧客のニーズに基づく具体的な改善に向けた正確なアプローチが可能になります。マイクロフォンの音響はテストだけでは計測が非常に難しいのですが、ある特定の構成について物理モデルとの比較でシミュレーションを検証した後は、そのシミュレーションを使って、他の構成や環境をケースバイケースで分析することが可能です。」

→ 振動トランスデューサのモデリング

Brüel & Kjær 社の開発技師である Søren Andresen 氏も、振動トランスデューサの設計およびテストにシミュレーションを使っています。

「振動分析に用いるトランスデューサの設計で難しいことのひとつが、このような機器は過酷な環境での使用に耐える必要があるということです」と Andresen 氏は述べています。「私たちの目標は、極めて厳しい環境に耐えるに十分な抵抗力を備えた機器を設計することでした。」

機械システムの多くでは、共振周波数は比較的狭い範囲に限定されている傾向があり、一般的には 10 ~ 1000Hz の間です。トランスデューサの設計で重要な側面のひとつは測定する振動と同じ周波数で共振しないということであり、共振すると計測結果にまで影響が及んでしまいます。図 6 には、吊下げ型 [suspended] 振動トランスデューサの機械的変位と、共振周波数のグラフが示してあります。

「私たちが望むのは、測定の対象となる振動域でのトランスデューサの周波数応答がフラットであり、共振周波数がないことです」と Andresen 氏は話します。

「シミュレーションを使えば顧客のニーズをピンポイントで実現できる」

— Erling Olsen, development engineer at Brüel & Kjær

「特定の設計でフラットなプロファイルが得られる（共振がゼロとなる）材料と形状の組み合わせを突き止めるため、私たちは COMSOL を用いてさまざまな設計の実験を行いました。トランスデューサはこのような領域で使用されます。」

トランスデューサの設計では、もし共振した場合でも不要な信号を取り除けるよう、ローパスフィルタ、別名メカニカルフィルタを使うことが可能です。このようなフィルタでは、媒材（一般的にはゴム）が 2 つの装着用ディスクの間に接合されており、トランスデューサと装着面の間に固定されます。

「経験則から、当社では周波数上限をトランスデューサの共振周波数の 3 分の 1 に設定しています。そうすることで、振動部品の周波数上限が 10 ~ 12% を超えない誤差範囲内になると考えられるので

す」と Andresen 氏は話します。

→ できるだけ正確かつ高精度に

完璧なトランスデューサを設計すること、絶対に確実な計測を行うことは不可能かもしれませんが、シミュレーションは多種多様な運用シナリオに対応した新しい設計ソリューションを素早くかつ効率的にテストすることを可能とし、研究チームと開発チームをこれまでよりもずっと近づけます。

「競争相手よりも常に前に出しておくためには、独自の知見が必要になります」と Andresen 氏は述べています。「シミュレーションは私たちにその知見を提供してくれます。実験では不可能だった調整を行い、事実上の計測ができることで、革新的な新しい設計をテストし最適化することができるのです。」 ❖

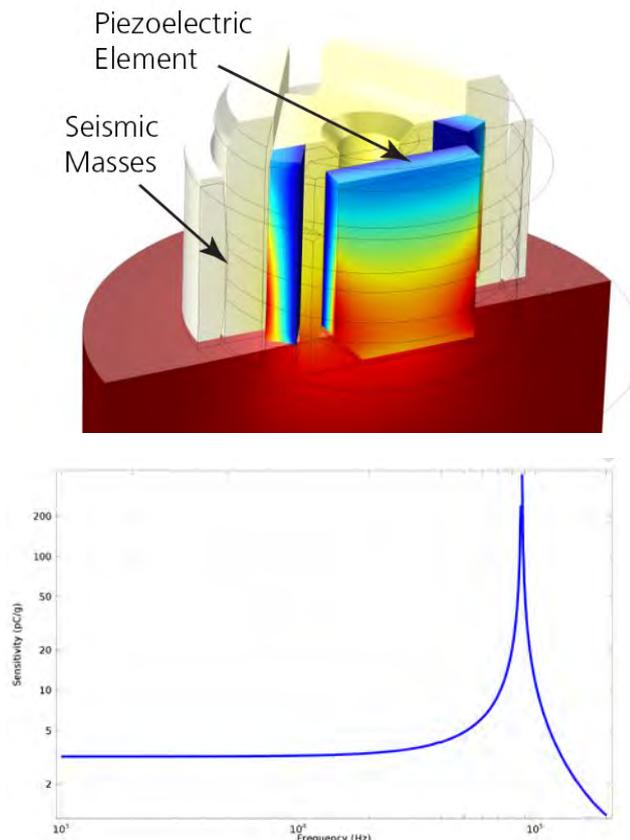


図 6. 吊下げ型圧電振動トランスデューサのシミュレーション結果。上：圧電部品と振動物質における機械的変位および電場。下：トランスデューサの最初の共振が約 90 kHz で生じることを示す周波数応答のグラフ。この機器での計測は、90 kHz よりもかなり低い周波数のものだけを対象とすべきである。

THE SOUND AND VIBRATION SPECIALISTS BEYOND MEASURE



ブリュエル・ケアは業界をリードする専門知識、スペシャリストによるサービス、そして世界でも類を見ない正確な技術を通じて、70年以上お客様の音響振動の課題を解決する手助けをしてきました。製品の品質保証や、性能強化、そして環境改善など、目的を問わず、ビジネスの成長を加速させるために、私たちは音と振動を測り、分析、試験して、最適化します。ワンストッププロバイダであることは、私たちが計測を超えたクオリティと価値を提供することを意味しています。

www.bksv.jp



FIND OUT
WHO WE ARE

Brüel & Kjær 

BEYOND MEASURE

Nestlé

美味しさの 裏側にある シミュレーション



イギリス、ヨーク州にある Product Technology Centre の研究者たちは、Nestlé で完璧なチョコレートを製造するためにシミュレーションを使用

執筆者: **ALEXANDRA FOLEY** 氏

Nestlé で完璧なチョコレートバーを製造するために必要な、研究、設計、製造は魅力的なプロセスであり、あの感動的なウィリー・ウォンカのチョコレート工場とは全く別世界なもの、とは決して言い切れません。海外には、ウンパ・ルンパのチョコレート製造工場はないかもしれませんが、そのプロセスは、熟考した広範囲なシミュレーションにより更に完璧なものになります。

イギリスのヨーク州に位置する Nestlé' の Product Technology Centre (PTC York) のエンジニアたちは、中でも下記の3製品の研究開発に携わっています：チョコレートバーを製造するチョコレートデポジッター、ウェハーのベーキングプレート、そして押切機です。Nestlé 製品のうちお菓子の研究開発を中心に行っている施設がこの PTC York で、エンジニアたちはこの施設で、製造プロセスの最適化および効率化のためにマルチフィジックスシミュレーションに比重を置いて解析を行っています。

→ チョコレート研究開発

Kit Kat®, Aero®, Crunch のようなチョコレートバーやシンプルなミルクチョコレート味の板チョコは、型で敷き詰められたチョコレートデポジッターに溶かしたチョコレート生地を流し込み製造されます。チョコレートはデポジッター上部に設置されているアームを通り、各ノズルチップを介して各型に入ります (図1参照)。

“1つ1つのチョコレートバーを確実に同等サイズにするため、ノズルから出るチョコレートの流量や圧力は正確で同等でなければなりません” と Nestlé のプロセスエンジニアである William Pickles 氏は語ります。“各チョコレートバーが同量である必要性は、ただ単にコストパフォーマンスや標準化という理由だけではなく、パッケージに記載したカロリー情報が全て正しいという保証義務を負っているからでもあります。お客様のバランスの取れた食事にぴったりとフィットするよう厳格な栄養素含有量を持つ製品を製造する必要があります。” この標準化を達成するため、各ノズルチップ間の流量と圧力の統一性は僅差で正確でなければいけません。

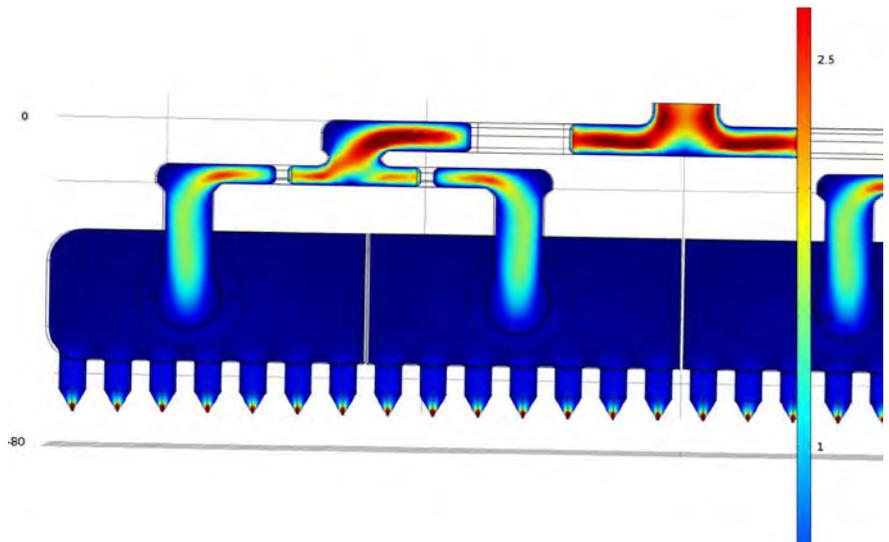
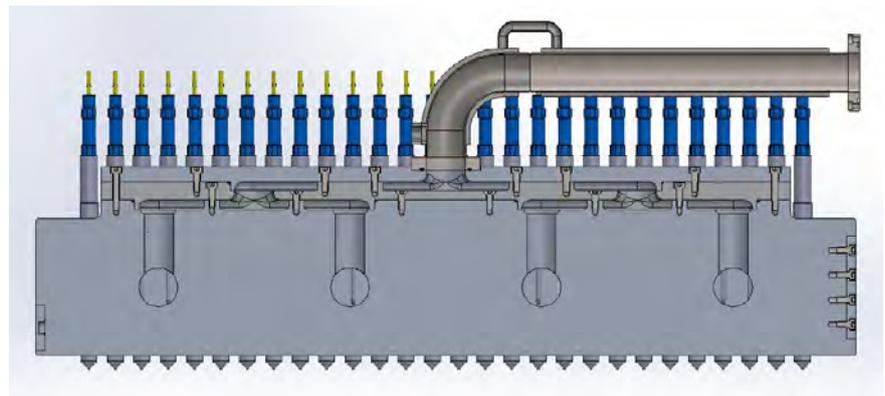


図1. 上：デポジッターの SOLIDWORKS® ソフトウェアジオメトリ 下：COMSOL Multiphysics® シミュレーションデポジッターのノズルと流路内のチョコレートの流れのサイズを示しています。

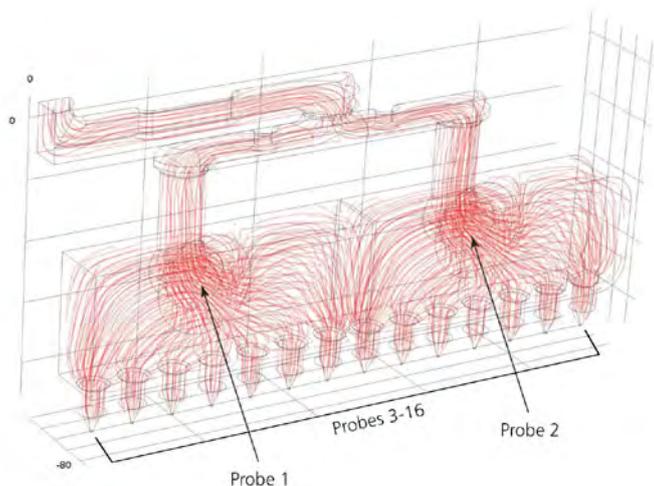


図2. 各ノズルチップと各流路に位置するプローブは、デポジッターとノズルのチョコレート流量と圧力を示し、スペック内で変化しています。流線はチョコレートが流れる方向性を示しています。

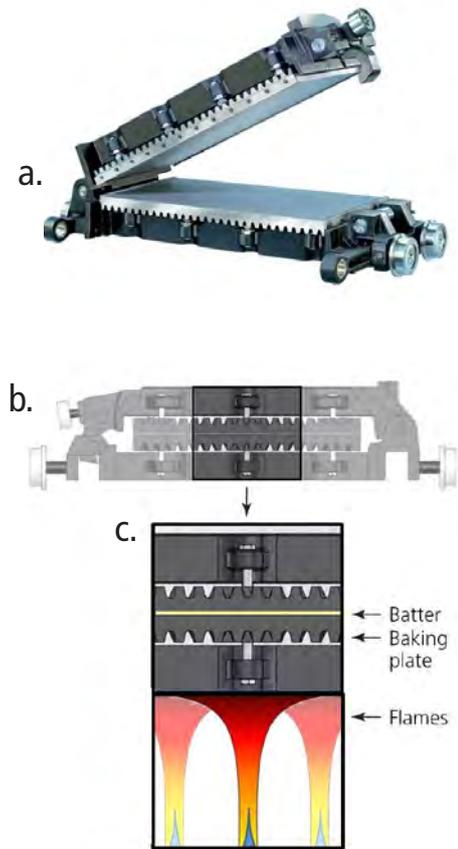


図 3. 2つのウェハー・ベーキングプレート (a) Kit Kat® のウェハーを焼き上げるために使用。(b) 上下のプレートが間の生地を挟み圧搾します。(c) プレートの下の炎は、ウェハーを焼き上げます。

「全てのチョコレート製造業者は、各自オリジナルレシピを持っており、独自の特徴と味を持つチョコレートを製造しています。私たちは COMSOL Multiphysics を活用し、Nestlé のサイン入りチョコレートを完全にモデリングしました」

—NESTLÉ プロセスエンジニア
WILLIAM PICKLES 氏

そして、この統一性達成のために、Nestlé はモデリングとシミュレーションツールの両方を使用しています。図 1 で表示されているチョコレートデポジッターは、最初に SOLIDWORKS® ソフトウェアを使用して構築され、その後解析を行うために、ジオメトリは COMSOL Multiphysics® シミュレーションソフトウェアにインポートされました。シミュレーションは流量の最適化、機械的ストレス、特定のジオメトリの温度プロパティ解析を実装するために使用されました。

“全てのチョコレート製造業者は、各自オリジナルレシピを持っており、独自の特徴と味を持ったチョコレートを製造しています”と Pickles 氏は語ります。“液体のせん断応力に対するせん断率の実験曲線がインポートされたシミュレーションを設定し、Nestlé のサイン入りチョコレートの非ニュートンの作用を完全にモデリングす

ることができました。この方法により、実際の製造と同量の液体プロパティを持つチョコレートをモデリングしていることを確信しました。”

チームは流量率の高いエリアと低いエリアをシミュレーションから認識することができ、またデポジッターの先端からの流量の違いを解析することも出来ました。流路内とノズル先端の数値的解析は、ある特定位置におけるジオメトリ状態の解析に使用されました。

“デポジッター設計を最適化することにより、各ノズルの流量率は一貫して目標値の 0.1% 以内におさまるようになりました”と Pickles 氏は語ります。このシミュレーション結果は図 2 をご参照ください。

→ クランチを守るシミュレーション

Kit Kat® を割った時、内部にあるウェハーが割れる時のあの有名な「パキッ」という音、あの音無しでは Kit Kat® は語れません。ウェ

ハーを焼く時、むらがある焼き加減ではウェハー内部の水分濃縮が不均一になり、さくとした食感やあの「パキッ」とした音にも影響を及ぼしてしまいます。

Nestlé では、ウェハーを焼き上げる際に、生地を上下から挟んで焼き上げるため 2つのベーキングプレートを使用します (図 3 参照)。ベーキング中、プレートは連なる 40か所の炎の上を通過

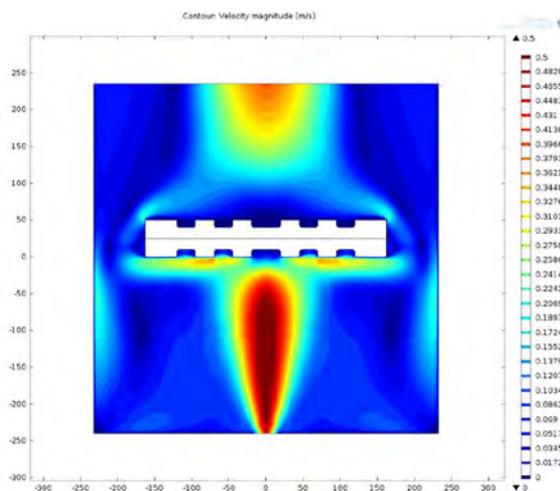


図 4. ベーキングプレート周囲の空気の流れ

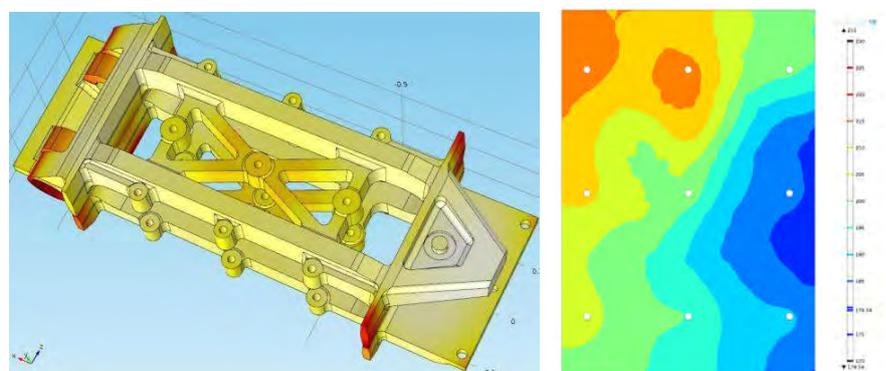


図 5. 左：ベーキングプレートの支持フレーム内の温度分布 右：ベーキングプレートの表面上部の温度プロファイル。ここではボルトの周囲でより温度が高く、複数箇所にて見られる (白丸部分)

します。

“プレート表面全体の温度プロファイルが均等にするため、シミュレーションを使用してプレートの下や周囲の熱い空気流を確認しベイクングプレートを最適化します。”と Pickles 氏は説明します。“私たちのこの研究目的は、バーナーの火力調整とウェハー製造の最適化を模索しつつその一方で使用エネルギーの削減に努める、というものです。”これは、全製造プロセスにおいて継続的かつ効率化の向上を実施するという Nestlé’ のポリシーに適しています。

ベイクングプレートの下の炎は対流により発生する熱風の噴出としてモデリングされました。図 4 では、ベイクングプレートの下の炎およびプレート周辺の空気流の解析結果を示しています。

“私たちが解析したベイクングプレートのモデルは実験を通じて確認することができます。そしてモデルと実証のシミュレーション結果は見事に合致しました”と Pickles 氏は説明します。またその結果ではベイクングプレートをとめているボルトを介し熱の伝導や温度の高い部分がどのように生じているのかを示しています。(図 5 参照)

“次のステップは、プレート上の熱が可能な限り均一になるように、また温度のピークを最小限に抑えられるように設計を最適化することです”と Pickles 氏は語ります。

→ 押出機のクッキング

Nestlé で製造されている Cheerios®, Trix®, Nesquik® および他の数多くのシリアル製造には、押出機が使用されています。“Nestlé で使用している高温度押出機は、ある特定のシリアルの生地を型から押出して製造しています。”このプロセス中に発生する圧力と摩擦から粘性加熱が生じ、それにより生地は調理されます”と Pickles 氏は図 6 で示された押出機を示しながら語ります。“製造における押出機は費用対効果が高く一般的です。”

Pickles 氏は、製造過程の型内の生地粘度を測定する粘度計の保護枠を設計中です。温度計を設置することにより生地の質は一貫し、予測確認しながら調理することが可能です。“設計上の必須条件として、粘度計の保護枠は装置にかかる高圧力にも耐えられるものでなくてはなりません。”と Pickles 氏は語ります。

元々設置されていたオリジナル押出機の粘度計保護枠では、圧力があまりにも高く耐えきることができませんでした。

“私たちは、圧力が低減されるように保護枠を再設計しました。粘度計が装置内に安全に保護されるため、設計された方の圧力が、発生する圧力を超えないという点にも注意を払いました。”と Pickles 氏は説明します。また粘度計の偏位が一貫するようシミュレーションにて確認をしています。装置の偏位が一貫していないと、シリアルの形やサイズが不均一な製品になってしまいます。(図 7 参照)

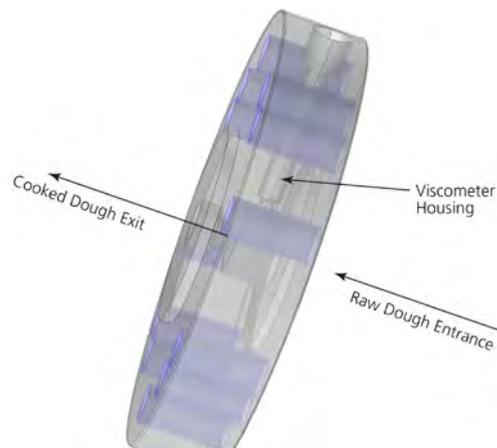


図 6. 押出機ジオメトリ

→ マルチフィジックスシミュレーションと共に、より良く、安全な製品を

Nestlé においてシミュレーションは、チョコレート製造からウェハー、シリアルそしてそれ以外の製品全てにおける設計プロセスの大変重要な役割を担っています。“Nestlé 製品はお客様たちが直接消費しますので、私たちの設計が実社会で持続可能だということを確実なものにしなければいけません。”“私たちは、シミュレーションから得た結果に大変自信を持っており、現時点で可能な限り最適で一番安全な設計だと信じております。その結果、私たちは、常に今よりもさらに美味しく、健康な製品を提供し続けることが可能だと信じてやみません。”と Pickles 氏は語りました。❖

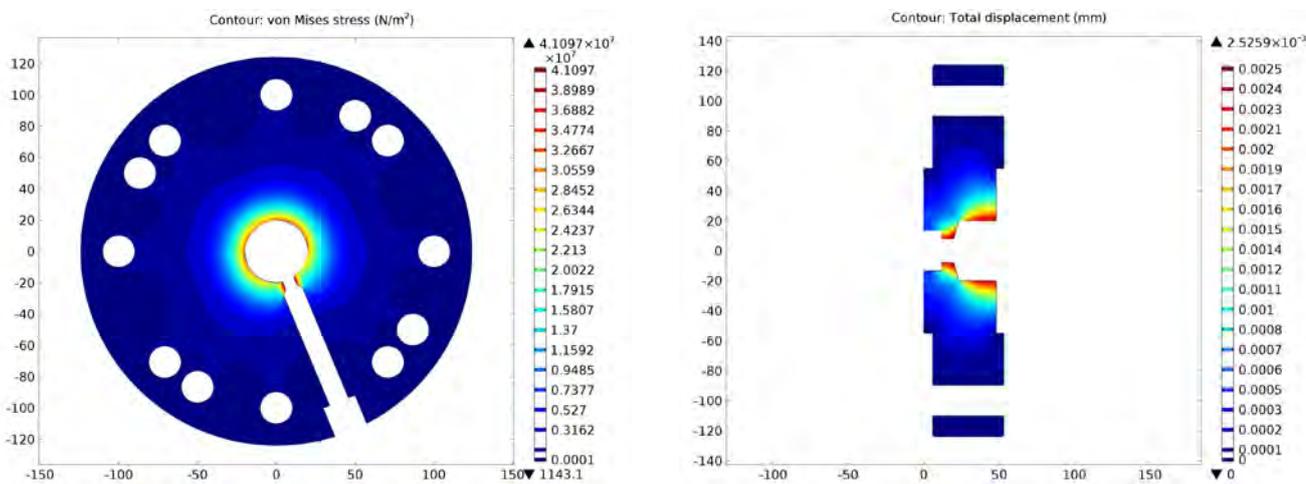


図 7. 型と粘度計保護枠のシミュレーション結果。 左：ミーゼス応力曲線 右：全体的な変位のスライス図

自動車部品の腐食による 破損の防止

自動車用品の腐食防止で革新的な設計を実現する
ハイブリッド材料自動車部品および接合部分のシミュレーション

執筆者: **LEXI CARVER** 氏

交通渋滞中に橋を支える梁を見たり、搭乗待ち中に飛行機のドアをチェックしたり、自動車のボンネットを確認してみると、さまざまな表面を固定している小型の丸頭リベットに気づくでしょう。輸送業界で使用されている金属車両や補助構造物に見られるように、これらのリベットは、膨大な機械的ストレスを支える部品を結合する役割を担っているにも関わらず、ほとんど注目されることはありません。自動車の中には、2,000 個以上のリベットが使われているものもあります。

自動車の設計では軽量化がすすめられ、複数の金属が使われる傾向にあるため、その犯人となる破壊的箇所は目に見えず、発見された時にはすでに手遅れの状態になっていることが多いのが現状です。それが、金属腐食なのです。

→ 金属と金属の接触部分の破損： ガルバニック腐食

ガルバニック腐食はどこにでも起こる現象で、自動車業界で年間数十億円の費用をかけて対策しています。これは異種類の金属の接触箇所で行われる化学反応が原因で、このタイプの金属腐食は金属部品の表面に形成され、白色のパウダー状となり可視の場合もあります（図 1 右上参照）。塗装の膨れ現象（バブリング）やアルミニウムの劣化は、金属イオン交換によって生じ金属の表面を傷つける明らかな兆候です。

異種類金属の化学反応は、環境の影響を大きく受け、異なる反応を起こします。接合技術や材料特性、そして表面の粗さなど数多くの要素が、結合された金属シートやリベット上に生じる化学反応に影響

を及ぼします。そのため、強靱な金属腐食防止策の開発には基本的な電気化学の理解が必要不可欠になります。

迅速な検査やより良い防止策策定に向け、Helmholtz-Zentrum Geesthacht (HZG) および Daimler AG のエンジニア達は、金属腐食防止策の研究・解析を行うためにマルチフィジクス・シミュレーションを活用する共同チームを結成しました。HZG はドイツの研究機関で、材料や医療技術、そして海岸の研究などを重点分野にしています。また Daimler AG は評判の高い自動車メルセデスベンツの製造企業です。この 2 つのチームは、リベットの設計および開発を簡素化し、実際の実験を最小限に抑え、表面処理などの後工程の必要性を低減するなどの方法を得るために努力を重ねています。

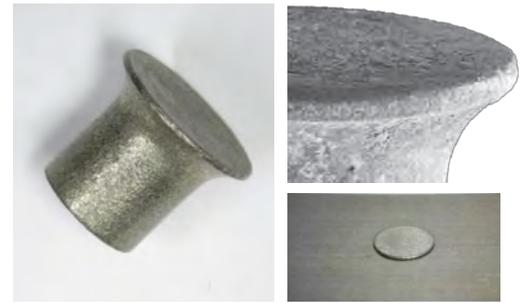


図 1. 左：傷のないリベット 右上：金属腐食のために水酸化マグネシウムの沈着（白色部分の拡大）が生じているリベット 右下：実験用の金属シート内のリベットの拡大図

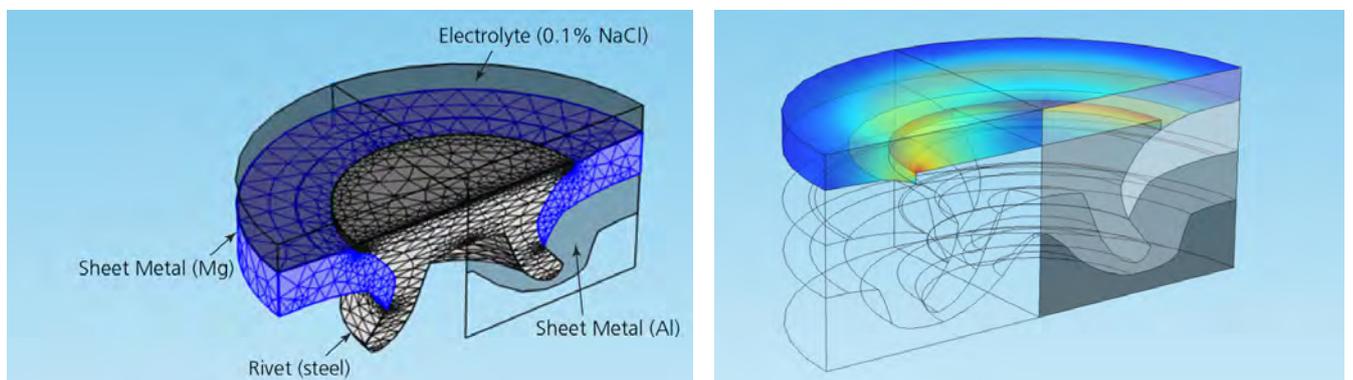


図 2. 左：COMSOL マルチフィジクスソフトウェアで描写されたパンチリベット接合の片側部分のジオメトリ 右：リベットと金属シートの表面における電流密度を示したシミュレーション結果。このシミュレーションは、リベットと金属シートにおける電流を数学的にモデル化したものである。最大の電流密度は鋭角部分（シャープエッジ）で発生している。

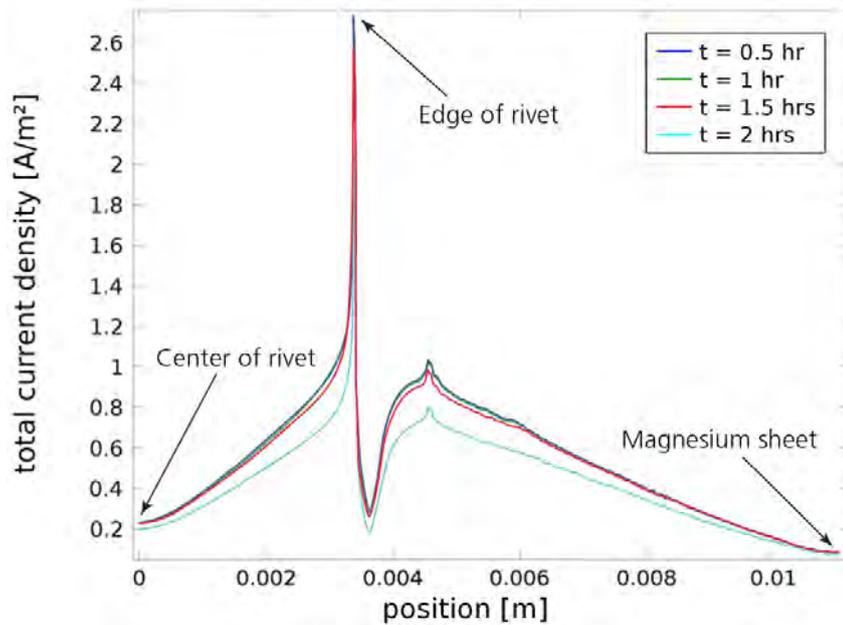


図 3. リベット結合の表面の様々な位置における局所的な電流密度を示す COMSOL ソフトウェアのプロット図

→ 金属腐食反応に関する研究に役立つマルチフィジックスモデル

HZG の科学者 Daniel Höche 博士は、材料損失、表面状態、金属の相互作用などのガルバニック腐食反応を研究するために、COMSOL Multiphysics® ソフトウェアを活用しスチール製のパンチリベット接合のシミュレーションを行いました。このリベットは、陰極防食の役割を担うアルミニウム亜鉛合金でメッキされています。このソフトウェアを使用することで、Höche 博士はリベット表面と端部の電気化学相互作用を解析、随伴金属シートの腐食の進行状態を予測し、金属腐食を最小限に抑えるためのジオメトリ調整を行うことも可能になりました。

彼のモデルは、リベット、アルミニウムとマグネシウムの付着した金属シート、外部環境と接する表面上にある 0.1% の NaCl 電解質層、およびリベットと金属シートの間の接合部分におけるガルバニ対の構成要素から作られています (図 2 参照)。彼はまた、電解質電位の勾配を増加する鋭角部分の状態をシミュレーションするために、リベットジオメトリにリベットの先端部分 (corner bur) を加えました。これにより電流が増加し、ガルバニック腐食の原因となる電気化学反応が加速します。

リベットと金属シートの接触部分に金属腐食が見られ始めると、マグネシウム薄膜が他の金属よりも早く腐食をはじめます。この化学反応は表面に水酸化マグネシウム ($Mg(OH)_2$) を作り出し、薄いバリアフィルムを形成します。実はこの付着層の成長により金属腐食防止力は強化され、この層は腐食の進行を抑える働きを有しています。 $Mg(OH)_2$ が多孔性のために完全に防止することはできませんが、

この成長は金属の内部まで深く浸透し続けます。

電流分布を決定し、その化学反応を分析するために Höche 博士は、 $Mg(OH)_2$ の不均一の生成と、それに影響を及ぼす材料特性を説明する必要がありました。COMSOL® ソフトウェアの 2 つの拡張機能である化学反応工学モジュールおよびバッテリー & 燃料電池モジュールを活用して、リベットと金属シートを 2 つの電極のように扱いました。このことで、アノード・カソード領域比率や電解質暴露時間、そして $Mg(OH)_2$ の蓄積を原因とする電流の変化が、どのようにマグネシウムの劣化に影響するのかを評価することができるようになりました。

“この多孔性はバリアプロパティに直接影響を及ぼすので、この結果、表面のトポロジーは劣化速度と付着層の成長の反対作用の影響を受けます。基本的なガルバニック電流密度の計算は、こうしたバリア層の成長の状況によって修正されます。このことで、私たちは、電極の電気化学反応における時間依存の変化を研究することができたのです” と Höche 博士は述べています。

このモデルには、金属の電気化学物質および 24 時間の暴露時間の時間依存性関数として知られる化学反応速度が含まれています。彼は、リベット結合が電解

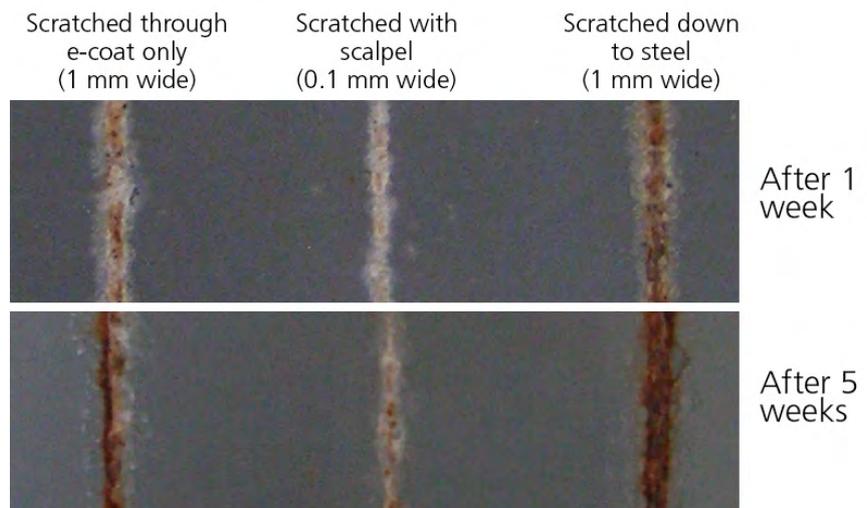


図 4. 損傷した層の中の可視可能な金属腐食を示す亜鉛メッキの施されたスチール製シート上の金属腐食実験 (上から見たもの)。Bösch 氏は、層間剥離プロセスで傷の大きさの影響を分析するために、さまざまな深さと幅の損傷をいくつか作りだした。(上段) 1 週間後の結果および (下段) 5 週間後の結果が示されている。

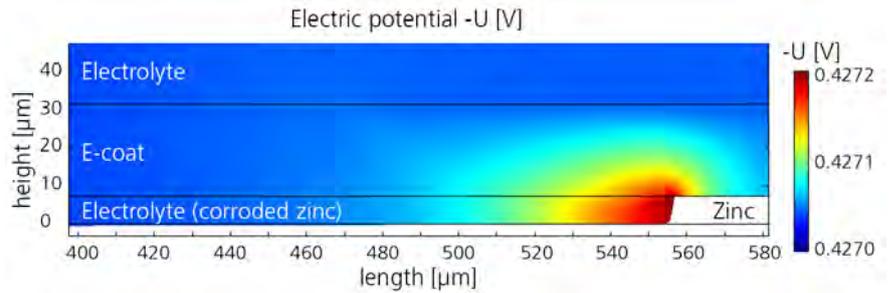
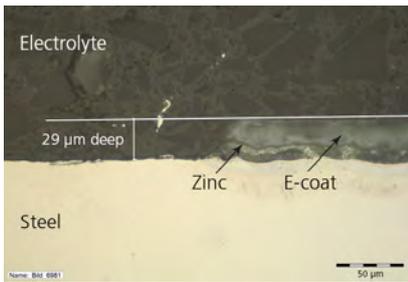


図 5. 左：実験用の金属シートの横断面の拡大図。この金属シートでは、一つの小さな傷が電着および亜鉛層を破損している。右：電着および電解質における電位を示す COMSOL マルチフィジックスソフトウェアの結果。白色の領域は、亜鉛の多くが既に消耗された後に残った亜鉛を示している。

質にさらされ、浸潤が始まった後、さまざまな時間で表面領域 ($\text{Mg}(\text{OH})_2$) に覆われた金属シートおよびリベットの表面の一部が剥がれるときの電位と電流密度の結果を公表しています。この電流密度はリベットの中心からの距離に従って変化し、どこで最も急速に金属腐食が起きるかを示しています (図 3 参照)。

→ さらなる問題の深掘り：層間剥離のリスク

リベットと金属シートの接触部分に生じるガルバニック腐食に加えて、自動車部品では他の要素によって破損が生じる恐れがあります。コーティングやパネルの塗装の表面の傷など、小さくて一見したところ軽微な欠陥にも腐食の可能性があります。湿気など周辺の電解質が導電性の表面に接触する可能性があります。自動車のパネル用材では、小さな損傷がガルバニック偶力を生み出し、金属シートのコーティングが剥がれる層間剥離の原因となります。層間剥離は金属腐食防止に対して重大な弱点となります。



左：Daniel Höche 博士、HZG の科学者
右：Nils Bösch 氏、Daimler AG の技術者

このようなリスクを分析するために、Höche 博士は Daimler AG の研究者 Nils Bösch 氏とともに e-coat と呼ばれるカソード防食塗装の層を電着した亜鉛メッキの鋼製実験用金属シート上で層間剥離の研究を行いました (図 4 参照)。“この鋼表面にまで拡大した傷のために、亜鉛と鋼および亜鉛の腐食の間にガルバニック偶力が発生してしまいます。この結果、e-coat と鋼層の層を通して、垂直ではなく、水平方向に継続的に隙間が成長していました”と Bösch 氏は説明しています。この作用は、2つの表面の間に溝を作り、金属に亀裂を生み出す隙間腐食のプロセスとよく似ています。これらの亀裂の底部を砕く圧力は、明らかな損傷や部品全体の損失は小さく見えるかもしれませんが、いずれ部品の故障の原因となります。

Höche 博士と Bösch 氏は、さまざまな電着バリア物質を利用して、電解質と電着における電位を研究するために COMSOL のパラメトリックスイープを活用しました。彼らのモデルは、亜鉛の消耗に伴って生じる隙間の水平方向への成長について解析しました (図 5 参照)。

これら表面の不良が亜鉛の消耗率に及ぼす影響の解析研究は、現在も進行中です。これまで、このモデルでは、表面不良の幅の方が深さよりもずっと大きな影響を及ぼすことを示しています。より小さなカソード・アノード比率や限定的な拡散は狭い傷の中に見られ、より大きな障害と比べて、腐食の進行は遅くなります。こうして得られた結果は、金属腐食防止

に対し逆効果の影響を及ぼすコーティングの傷などの欠陥を詳細に解析するために活用されています。

→ 長期にわたる組織的サポート基盤の構築

金属腐食は完全に避けることはできず、どこにでも存在する現象ではありますが、専門家による設計や詳細な分析により最小限に抑えることが可能です。Höche 博士と Bösch 氏は、リベット結合の鋭角部分を減らし、機械的な安定性を維持しながら露出部分を最小限に抑えるために、このジオメトリ作成に力を注いでいます。彼らはまた、パラメトリックスタディを使って金属シートのための e-coat の電着、およびパネル材料の中の電流を最低限に抑えることにより、その腐食を最小限に抑えることが出来ることを推奨しています。彼らの COMSOL モデルは、これに関係する電気化学反応において欠くことのできない知識をもたらすとともに、HZG および Daimler AG の技術者たちに、最良の金属腐食防止のリベット結合の最適化ツールを提供します。

“この種のコンピュータ支援分析は、軽量設計の発展に寄与するとともに、設計工程の早い段階でリスクの高い金属腐食問題の特定を可能にします。自動車のリベットの金属腐食は危険な敵ではありますが、知識を基盤にした処理方法や入念なジオメトリの設計により、私たちにとって実現可能なものになってきました”と Höche 氏は結論を述べています。❖

レーザー材料の相互関係のシミュレーション

Lawrence Livermore National Laboratory の研究者たちは、溶解石英光学材料を修理する技術開発のためにマルチフィジックスシミュレーションを使用

執筆者：CHRIS HARDEE 氏

調節可能で精密なレーザーは、一般的な家庭にある様々な装置から最先端研究施設にある装置まで広範囲にわたりありとあらゆるものに使用されています。自動車部品、バーコードスキャナ、DVD プレーヤ、そして光ファイバコミュニケーションなどは、日常生活で使用しているものとして有名です。多分、レーザーは、精密な熱源としてはあまり有名ではありません。しかしながら、この特別な特徴こそがレーザーを材料加工のアプリケーションとして、とても効果的な手段にしているものです。ナノメートルスケールの正確さで、ガラス、金属もしくはポリマーのような特定物質を操作し修正を行います。

様々なアプリケーション用レーザーシステムの設計と最適化を行う上で、レーザーと材料の相互作用の理解は重要なポイントになります。Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) の Materials Science Division のグループ副リーダーであります Manyalibo Matthews 氏は、複雑なレーザー材料相互関係こそがまさに研究すべきものです、と語ります。彼の研究は世界で一番高価なレーザーシステム内の溶解石英光学の修復、保守に関連したものです。

→ ハイパワー光学システム修復にレーザーを使用

カリフォルニアの LLNL の監督下にある National Ignition Facility (NIF) は、世界最大規模かつ最大級のエネルギーを誇るレーザーを保有しています。192 もの個別ビームと 40,000 個の光学が装備され、光線をフォーカス、反射そしてガイドする

ことが可能なその巨大マシンは、放出するレーザーパルスエネルギーを約 10 億倍まで拡大したり、鉛筆についている消しゴムサイズほどの小さなターゲットにまで焦点をあてたりすることができます。このレーザーにより、星、超新星や惑星と同様な中心温度、圧力、密度を生み出すことが可能になります。天体物理学と原子力研究者たちは、宇宙への理解をさらに深めるためこの巨大レーザーを使用しています。この技術は、液体水素燃料を加熱、圧縮し、核融合反応が起こっている瞬間の慣性核融合 (ICF: inertial confinement fusion) に使用されています。

しかしながら、このパワフルなレーザーを連続的に使用する場合、システム内に起こる光学ダメージを考慮しなければなりません。“光学系は大変高価なものです”と Matthews 氏は語ります。“NIF により発生されたハイパワーレーザー光線は融合石英にダメージを与えたり、丁度車のフロントに石が衝突した時に出来るくぼみのような小さなくぼみが表面に出来てしまったりします。そのダメージを修復、リサイクルするなど、私たちが出来ることは全て行い修復します。” 図 1 は、ダメージを受けた 2 種類の光学表面の修復前後の例を紹介しています。

連続的にレーザーを使用することで蓄積されたエネルギーは、徐々に光学系に損傷を与えていますが、レーザー自身でも修復段階でその修復をサポートします。フットボールフィールド 3 個分のサイズを誇る NIF の巨大なレーザーシステムが活躍する一方で、ダメージを受けた部分を光学修復するために使用されるレーザーは小さ

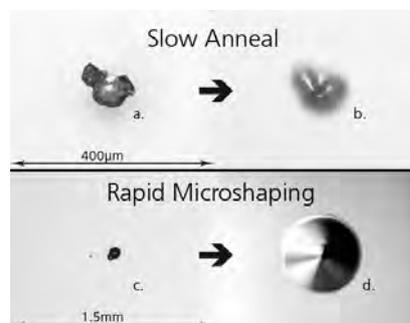


図 1. ハイピーク出力のレーザーパルスに連続的に接触することで生じる光学ダメージの例。光学表面のダメージを (a) と (c) に示します。またそれに伴って生じた修復サイトは (b) と (d) です。ゆっくりとした中間アニーリングは (a) の部分を修復する際に使用され、最近になって NIF で採用開始した素早いミクロ形状技術は (c) の箇所の修復に使用されました。これにより光学的に安全なものになります。

くて卓上サイズのシステムです。それは、ダメージ緩和システムを作り出している光線とパルス状の部品が組み合わせられたものです。LLNL における Matthews 氏の最新の研究は、光学修復のための最新技術に重点的に取り組むこと、そして融解シリカやガラスとレーザーとの相互関係を更に幅広く研究することです。

→ レーザーガラスの相互関係をシミュレーション

Matthews 氏と彼のチームは、光学ダメージを修復する 3 種類の技術を検証、解析するため、シミュレーションを使用しました。それらは：赤外線 (IR) パルス

状レーザマイクロシェイピング / マイクロマッチング、スローアニーリング、そしてレーザ化学蒸着 (L-CVD)² です。

最初の研究サイクルでは、彼らは基本的なフィジックスを中心に検証し、また様々な温度に設定されたレーザ光線に接触した時に融解シリカはどのように変化するかという材料科学についても解析しました。

温度一層プロジェクトには、複数のポイントがありました。最初は 1,300K のガラス転移温度に対する材料の熱弾性反応を理解することです。その温度では、融解シリカは急激に弾性反応を示し、流力抵抗は減少します。続けて彼らはガラス転移点と蒸発点の間である 2,200K 以下における粘性流のガラス分子緩和の実験を繰り返しました。最終的な目標は、

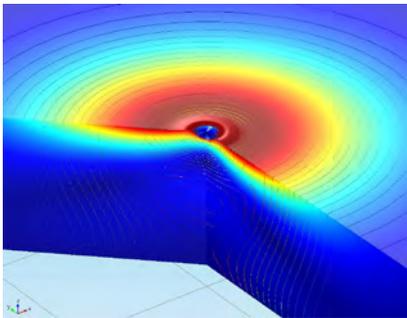


図 2. レーザで加熱されたガラスのマランゴニ流のシミュレーション結果。表面張力レーザ加熱が温度内の勾配を引き起こし、半径方向外側に材料が流れ、さざ波もしくは層のような形を作る場合、この結果が生じます。

2,200K から 3,400 K 度までの間での蒸発と材料の再堆積の解析です。

ダメージを受けた光学修正を行う技術を拡充するために、Matthews 氏は、COMSOL Multiphysics® ソフトウェアに注目しました。“私は、目の前で何が起きているのかをより深く理解するために COMSOL を使うことを決定しました” と Matthews 氏は語ります。“必要なフィジックスは全てそのソフトウェア内に含まれており、私のアイデアを早速試すことが出来ました。それは時間と労力の節約にもなりました。その節約こそ、0 からのスタートであるプログラム開発には必要不可欠なものでした。”

Matthews 氏は、COMSOL は、レーザ光線と融解シリカとの相互関係を理解する手助けになり、またそれと同時に特定の修復方法を精製するツールだと語っています。“ハイパワーレーザシステムは、光学内での表面の粗さへの耐性がありません。高水準な平坦性を調整するためには広範囲なシミュレーションが必要になります。” と Matthews 氏は、語ります。彼のシミュレーションには、液体伝熱、化学反応、そして構造力学、物質移行や液体流量などが含まれています。

→ IR パルスのレーザマイクロシェイピング

ゆっくりとしたアニーリングのシンプルアプローチでは、最初に光学的ダメージを緩和するために使用 (図 1 の上部パネル参照) されると同時に、実験とシミュ

レーションでは、サーモキャピラリーフローやマランゴニせん断応力により作られる表面のさざ波状がレーザ光線内に存在してしまう場合に引き起こされる不必要な軽度の変調を示しています。図 2 では、レーザ誘起温度プロファイルおよびマランゴニせん断応力による材料変位のシミュレーションを示しています。

この結果を軽減するために、Matthews 氏と同僚たちは、レーザシステム内に設置する際に、光変調をダウンストリームする傾向がより少なくなるよう“マシン”を材料から正確に位置させ、より短い (10 分の 1 マイクロ秒) レーザパルス使用を探索しました。Rapid Ablation Mitigation (RAM) 内で IR レーザは、丁度沸点を超えたポイントまで回路基板を加熱するために使用されます。そうすることにより、スムーズで裂け目のない表面になります。この材料のナノアブレーションを 1000 回 ~ 100 万回以上繰り返すことでスムーズな円錐型のくぼみが出来、光変調のダウンストリームがない“光学的に安全”なものになります (図 1 の下部部分参照)。

“シリカ光学の IR レーザ処理の長い歴史に関わらず、プロセス最適化に必要なエネルギー連成と伝熱への理解を深めるための試みはあまりされてきませんでした。私たちは COMSOL を使用して、幅広い材料プロパティとレーザパラメータをシミュレーションし、数多くの疑問を解決することができました” と Matthews 氏は語ります。

より小さくなった領域の温度と材料の特性シミュレーションの結果はチーム実験結果と比較されました。“私たちがこの研究で学んだことは、研究は広範囲にわたるものであること、またハイエネルギーパルスレーザシステム内のダメージ修復は、シリカ表面上¹のレーザ研磨、アニーリング、マイクロシェイピングが必要ないかなるシステムにも適応することが可能だということです” と Matthews 氏は説明します。

→ 広範囲にわたる修復用レーザ化学気相蒸着

LLNL チームが研究している光学的ダメージの修復に関する 3 つ目のアプローチは、レーザベースの化学気相蒸着 (L-CVD) です。この加法過程で、シリカ前駆体ガスはノズルを通り表面に流出します。ウィンドウを通りノズル内で結合された焦点 CO₂ レーザビーム (図 3 参照)

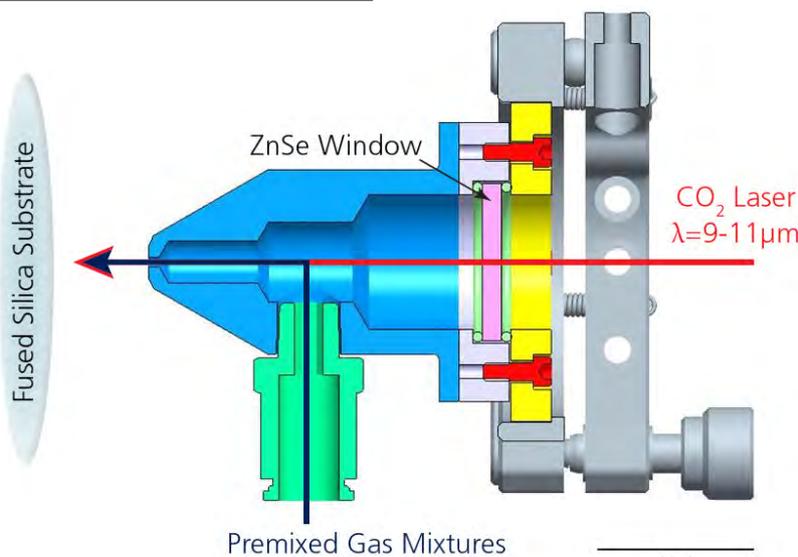


図 3. レーザベースの CVD プロセスに使用された光学結合のガスノズルを示す回路図。ガスフローが外部ポートを介して挿入してくると同時に IR レーザ光線は ZnSe ウィンドウを介して軸方向に挿入されます。

は、先駆体を分解し、ダメージピットの中に SiO₂ 固体ガラスを蓄積します。IR のマイクロシェイピングを使用し、他の負のアプローチにて修復することが難しいとされている光学表面上にある広範囲な欠陥に対して、L-CVD ではナノスケールの正確さでの修復を探索しています。最終的には光学パフォーマンスは、一括修復されます。

“シミュレーションを使用して私たちは、材料のサイズによって光線の強度、位置、パルス持続時間がどのようにして光学の沈着に影響していくのかを実験しました”と Matthews 氏は説明します。シミュレーションは、分解時のシリカ濃度と流れを確定、沈着した材料の位置なども確定します (図 4 参照)。

チームは、レーザパワーに関して次のような発見をしました。“ボルケーノ”特性として知られ、数多くの L-CVD 沈着プロフィールと共通点を保有するあまり好ましくない特徴、これを避けるためにレーザパワーは大変重要なプロセスパラメータだということを発見しました。

“今までは損傷を受けた高品質な材料を再び交換し損傷を付加的に修復するというアプローチを行ってきました。私が知る限りではこの方法以外での修復方法は、他に類がありません”と Matthews 氏は語ります。“この成功したアプリケーションは、プロセスコスト削減を可能にし、光学の寿命を延ばし、一般的には更に強力なハイパワーレーザアプリケーションの損傷—抵抗光学の実現化を可能にします。更に、L-CVD はシリカガラス以外の他の材料を使用したシステムの従来の方法にもメリットを提供します。過度の流量、反応、そして伝熱を含むシミュレーション力は、新しいアプリケーションの拡張にとつて大変重要な役割を担っています。”

→ ガラス修復から製造まで

L-CVD プロセスは、光学修復に対してまだ予備的段階ではありますが、NIF のチームは CO₂ レーザベースの表面マイクロシェイピングを実践し、施設の光学緩和プログラムの一環としてマルチフィジックスシミュレーションを使用し、最適化を行いました。2014 年には、IR マイクロシェイピングや他の技術を使用し、130,000 か所以上の損傷個所が修復され、常用のために光学は継続的に NIF 内にてリサイクルされます。

しかしながら、レーザー材料の相互関係の研究は光学修復で完了したわけ

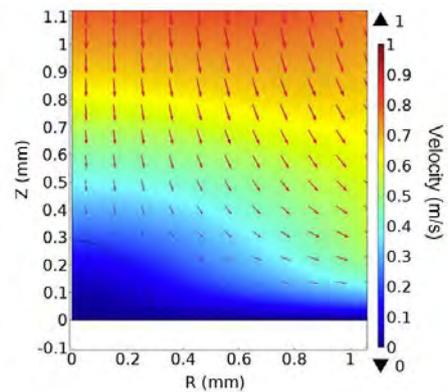
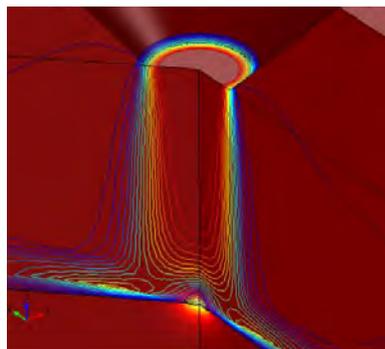


図 4. L-CVD の速度と温度フィールドのシミュレーション。左：速度輪郭は、直径 3mm のノズルからの L-CVD 先駆体フローと空気—ガラスインタフェースのレーザ伝熱により引き起こされた温度フィールドとの関連を示しています。右：蒸発シリカの速度流線型。左下角にガラスの拡散—支配移送を示しています。(濃青)

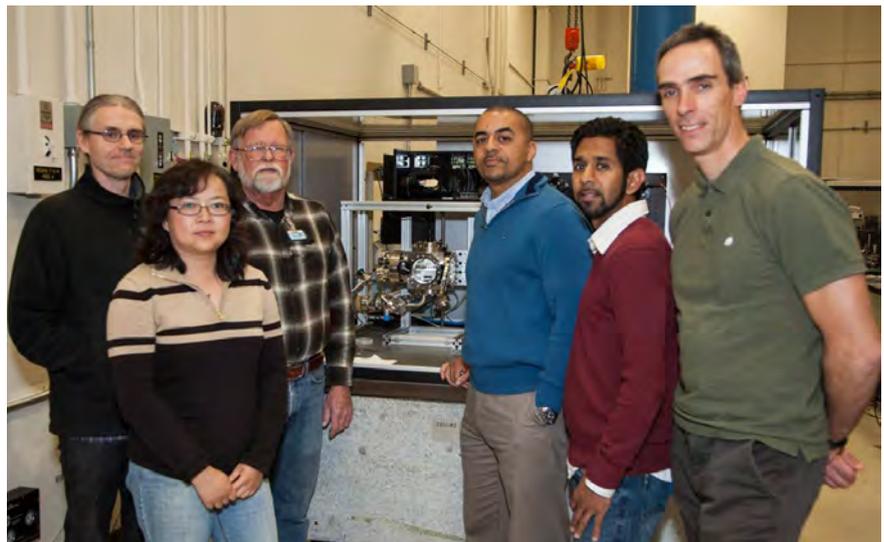
ではありません。Matthews 氏と彼のチームは選択的レーザ溶融 (selective laser melting : SLM)³ として知られる 3D 印刷の追加的プロセスを更に研究開発することにより研究所全体での取組みの付加製造イニシアティブ (Additive Manufacturing Initiative) をサポートしています。“私はこの研究を大変楽しみにしています。”と Matthews 氏は語ります。“3D 印刷技術の最適化方法を解明することは、急速に成長しているこの産業に多大なるインパクトを与えます。試行錯誤していたアプローチから発展したモデルベースのアプローチに対して素晴らしいメリットを与えることができるでしょう。”と Matthews 氏は説明します。❖

REFERENCES

¹M. J. Matthews, S. T. Yang, N. Shen, S. Elhadji, R. N. Raman, G. Guss, et al., “Micro-Shaping, Polishing, and Damage Repair of Fused Silica Surfaces Using Focused Infrared Laser Beams,” *Advanced Engineering Materials*, vol. 17, p. 247, 2015.

²M. J. Matthews, S. Elhadji, G. M. Guss, A. Sridharan, N. D. Nielsen, J.-H. Yoo, et al., “Localized planarization of optical damage using laser-based chemical vapor deposition,” in *SPIE Laser Damage*, 2013, pp. 888526-888526-9.

³N. E. Hodge, R. M. Ferencz, and J. M. Solberg, “Implementation of a thermomechanical model for the simulation of selective laser melting,” *Computational Mechanics*, vol. 54, pp. 33-51



LLNL の光学ダメージ緩和とレーザ材料プロセス研究チーム (左から右) : Gabe Guss 氏、Nan Shen 氏、Norman Nielsen 氏、Manyalibo Matthews 氏、Rajesh Raman 氏、そして Selim Elhadji 氏。背景の装置は、ハイパワーレーザ放射での金属粉溶解の動力学の研究のために使用されます。金属ベースの積層造形 (3D 印刷) の分野で大変重要なトピックです。

ソーラーセルのためのシミュレーション

EMIX は、太陽光発電—高品質シリコン製造の連続鋳造法冷却るつぼの最適化に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。

執筆者: CHRIS HARDEE 氏

巨大な市場を持つ半導体業界は、シリコンの超薄型ウエハの強固な基盤により確立されています。これらのウエハは集積回路 (IC) の基本的構成要素としての役割を担っており、そこでは元素金属の固有伝導性プロパティが近代コンピュータや近代電子機器全ての通信経路を作成しています。

しかしながらシリコンが重要な役割を担っている他の技術は、太陽光発電製造業 (PV) にて使用されています。この成長過程にある代替エネルギーアプリケーションでは、太陽からの光量子を地上の電気へと変換するシリコンウエハベースの太陽電池が使用されています。素晴らしい可能性を秘めている太陽電池はいたるところで見ることが出来ます。しかし、より成熟された化石燃料技術と真剣に競争する前に、太陽光発電メーカーは、まず作られた電源 1 ユニットのコスト削減方法を見つけなければなりません。

「ポリシリコンの価格にもよりますが、太陽電池の最終価格の約 30% は、シリコン自身の価格となっています」と、FerroAtlántica グループのフランス支社、EMIX の研究エンジニアの Julien Givernaud 教授は語ります。Givernaud 教授は、インダクティブ方式の冷却るつぼと太陽光発電用シリコン精製のための関連装置の最適化を研究しています。「この業界ではシリコンの純度を上げつつ、その製造コストを削減することが必要不可欠です」と続けます。

→ 太陽光発電—高品質シリコンの製造

実際、シリコンは地球の地殻内では 2 番目に豊富な要素です。太陽光発電アプリケーションでは、冶金シリコン (純度 99.9%) は、高純度グレードで精製され、不純物が 100 万分の 1 以上含まれてはいけなくなっています (純度 99.9999%)。純度は大変大切です。なぜならば太陽電池が太陽光から変換する発電可能な電力量に直接影響を及ぼすからです—その方法は太陽光発電変換効率と呼ばれています。

シリコンを自然の状態から太陽電池として使用可能に変換する製造プロセスは数多く存在し競合しています。

「PV- 品質のシリコンを製造する連続的冷却るつぼの鋳造、もしくは 4C プロセスは大変革新的な方法です」と Givernaud 氏は語ります。Givernaud 氏は COMSOL Multiphysics® ソフトウェアを製造パラメータの最適化に使用しています。この企業は、この技術に関する複数の特許と全世界での専用実施権を保有しています。

4C プロセス中、誘導的に 1,414 °C の融解温度まで温められて

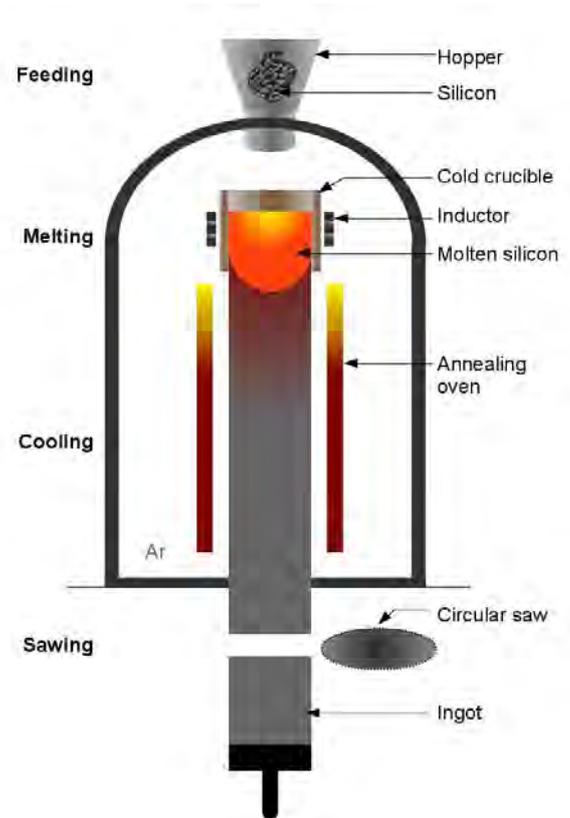


図 1. 回路図は、太陽光発電アプリケーションのシリコン製造時に使用する、継続的に鋳造し続ける冷却るつぼ (4C) プロセスを示しています。材料のシリコンは、上部にあるホッパーに注がれ、加熱、冷却され、その後インゴットにカットされます。フランス、EMIX

いる水 - 冷却るつぼ内にシリコン原料は注がれます。それはるつぼの中で電磁的に攪拌され、またそのるつぼ内では、ローレンツ力によりシリコン溶液がるつぼ本体と接触、溶解することを抑止します。また強力な攪拌は、結晶化条件を強化し、固体 - 流体インタフェースの種濃度を均質にします。そして大変高純度な結果をもたらします (図 1 参照)。

攪拌に続く溶解ではオープン - ボトムな、るつぼを通り引き下げられ下へ移動します。そこで冷却され注意深く管理されたアニーリングプロセスを使用して凝固されます。継続的に製造されるシリコンロッドは、その後インゴットにカットされ、このサイズで PV メーカーに販売されます。メーカーはこれを太陽光発電に

使用するサイズの 200 μm の厚さにスライスします。

→ シミュレーションで太陽光発電製造効率化を向上

EMIX の 4C プロセスは比較的シンプルな概念のその一方で数多くの製造変数が含まれています。

まさにこの時がシミュレーションの出番です。Givernaud 氏は、例えば、冷却方法、引き下げ速度、るつぼやコイルの形そして溶鉱炉の特徴など、広範囲にわたる変数の検証のためにシミュレーションを活用し、数えきれないほどの計算を実践しています。彼はまた、電磁場の影響の解析、固体 - 流体インタフェースの形や結晶化挙動にかかる弾性応力の影響などの研究も行います。

EMIX のエンジニア達は、製造プロセスの解析・評価に彼らが PV シリコンビジネスをスタートしたとほぼ同じほど前からマルチフィジックスシミュレーションを使用し続けています。Givernaud 氏は、「前職で使用していた FEA ツールと比較すると COMSOL Multiphysics の方が簡単に使用することが出来ます。」「COMSOL では、自分のジオメトリを直接 COMSOL 内で作成することが出来ます。モデルは簡単にメッシュにすることができ、フィジックス間を切り換えることも簡単です。ソルバはとても早くそして効率的です。総合的にみると COMSOL は、直感的で、パワフルなツールです」と語ります。

Givernaud 氏の最近のモデリング研究には、マルチスケール電磁気と 3D による継続的鋳造シミュレーションの両方が含まれています。彼は電磁気シミュレーションを使用することで、インダクタンスとインピーダンスを推測することが出来、電気効率改善のためのるつぼ設計を最適化することも出来ました（図 2 参照）。継続的な鋳造シミュレーションを使用し、電磁力、結晶率、るつぼの冷却ゾーンの高さなどのパラメータをインプットすることが可能でした。これらの研究を解析した結果、高生産率とインゴット内の低圧力のバランスを導くことができました。

様々なシミュレーションのうち、COMSOL の Heat Transfer in Fluids and Laminar Flow インタフェースは、るつぼ内に凝固してしまうシリコンの位相変化の計算に使用されます。シリンダテストの計算によると、これが有効な場合、商業的に使用される更に大きなるつぼに適用することが可能です。

「シミュレーションと試験のプロセスの実験では、ほぼ同じ結果を得ることができました。」「シミュレーションにより、正しい結晶化パラメータを得、産業サイズのるつぼの電気効率は改善され、試験的に行う溶鉱炉実験の実験回数を削減することが出来ました」と Givernaud 氏は語ります。更に彼は、最近の一連のシミュレーションでは、理論上、約 15% のエネルギー削減と引下げ速度が 30% 向上する、ということ解析を得、4C の方法の方が一般的なシリコン結晶化プロセスよりもより生産的だという結果を得ることが出来ました。

業界全体では、メーカはシリコンウエハのコスト削減と PV アプリケーションの純度改善に向けた努力が必要です。成長し続けるソーラーエネルギー業界でのシェアを増やすことは、商業的に持続可能なソリューションを兼ね備えている企業に恩恵をもたらすでしょう。「マルチフィジックスシミュレーションは、間もなく業界規模で実験されるプロセスの確立を助けてくれました」と Givernaud 氏は語ります。彼は EMIX が現在進めているイノベーションによって EMIX が新天地を開拓することが出来ると期待しています。❖

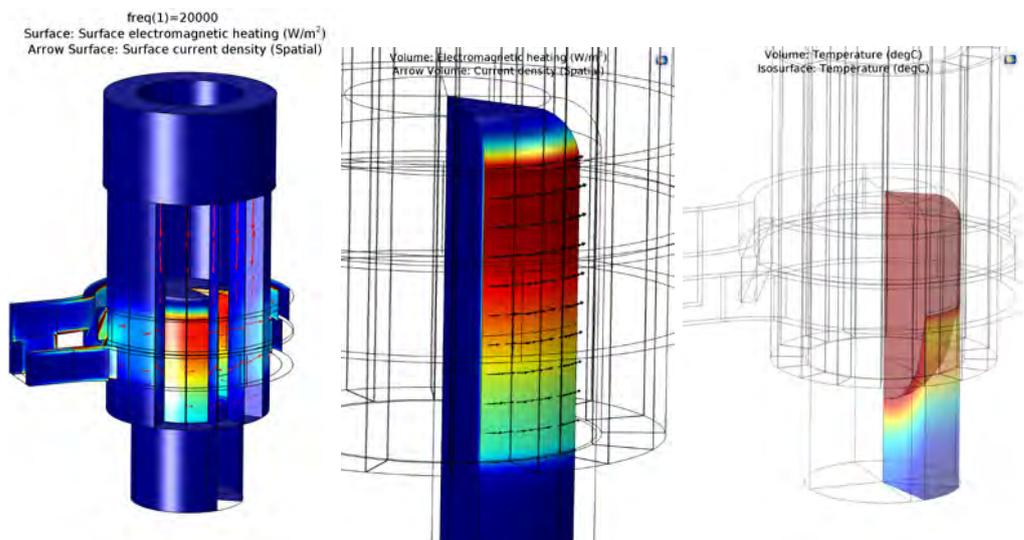


図 2. 冷却るつぼのモデルで、るつぼの電磁加熱（左）、溶解シリコン（中央）とトリプル-ポイント固体/液体/気体インタフェース（右）の予測に使用されています。赤/黄色は溶解を示し、青/緑は固体の状態を意味しています。

「前職で使用していた FEA ツールと比較すると COMSOL Multiphysics の方が簡単に使用することが出来ます。総合的にみると COMSOL は、直感的で、パワフルなツールです。」

—EMIX の研究エンジニア JULIEN GIVERNAUD 氏



EMIX の研究開発チーム シリコン製造溶鉱炉の前で（左から右）Julien Givernaud 氏、Elodie Pereira 氏、Nicolas Pourade 氏、Florine Boulle 氏、Alexandre Petit 氏

3Dプリンタのバーチャルマテリアルデザインによる マルチスケール・モデル化の推進

オランダ応用科学研究機構（TNO）の科学者たちは、マルチマテリアル3Dプリントを研究するためにマルチフィジックス・シミュレーションやマルチスケール・モデリング、トポロジー最適化を活用しています。

執筆者：LEXI CARVER 氏

近年3Dプリンタ（積層造形）が研究・設計・製造業務で大きな役割を担うようになってきました。現在、この技術は、マテリアルデザインの領域でも有望と見られています。近い将来、単一の物体のすべてにわたって、多くの材料や様々な特性を持つプリントを作成することは当たり前のことになるでしょう。これは、すなわち、最適な材料特性を持つ統合された製品の多様な利用方法を生み出す機能です。

積層造形は、通常、原型を作るために繰り返し模型で小型の周期的微細構造を用います。単一の微細構造はユニット・セル（unit cell）と呼ばれ、これらは、三角形もしくはハチの巣状のように単純なもの、あるいは、壁の間に筋かいと複数の空隙のある、より複雑なものです。最近の3Dプリンタの発展は、このような微細構造が結合され、設計者のニーズに適合するマイクロレベルでのマルチマテリアル・プリンティング機能が急成長していることを示しています。技術者たちは、このような微調整によって、含まれている材料の割合や配置を選択することが可能となり、単一材料では実現できない「設計」機能に、自由と柔軟性をもたらすことになるでしょう。

オランダ応用科学研究機構（TNO）の研究者は、どのように特定の材料が3Dプリンタで作成される時に効果的に設計されるかを判断するために、マルチフィジックス・シミュレーションやマルチスケール・モデリングを利用する仮想材料設計技術の研究を開始しています。この研究所における研究対象は、セキュリティ、エネルギー、製造など多くの分野にわたっており、3Dプリンタによる設計において材料やトポロジー最適化のため

に利用されている技術は、メカトロニクス機器の小型軽量化、自由形状太陽電池、照明製品など他の研究分野にまで拡大しています。

→異方性材料における応力(Stress)、歪み(Strain)、剛性(Stiffness)

異方性材料は負荷のかかる方向によって様々な作用を起こしますが、現在の材料生産の方法では、この異方性を完全にコントロールすることには限界があります。それゆえ、どんな優位性も、製品設計の目的のために利用することは困難です。

TNOの研究者のMarco Barink氏は、剛性とトポロジー最適化技術を使って、製造可能な異方性構造を設計するための手法の開発に着手しました。彼はCOMSOL Multiphysics®ソフトウェアを使って、ある平面方向の剛性が他よりも2倍になることを目的とした単一ユニット・セルの研究をしています（図1参照）。

「私たちは、必要とされる剛性マトリクスを目指しており、COMSOLで張引力を加えて、必要とされる応力を得るために、歪みの最適化を図りました。私たちは、ある方向で剛性が他の2倍となる材料を作り、所定のジオメトリのために、この材料の性質を分析しました。この目的のためにCOMSOLが必要でした」と彼は説明しました。彼は、予測される材料の性質を実験したプリントサンプルを使い、シミュレーション結果を検証しました。この結果が正確であったとの結論を下した後、異方性の高い材料の第2の最適化研究を実行しました。このケースでも、シミュレーションは、材料の空間分布だけでなく、異方性繊維の指向性をもコントロールできました。

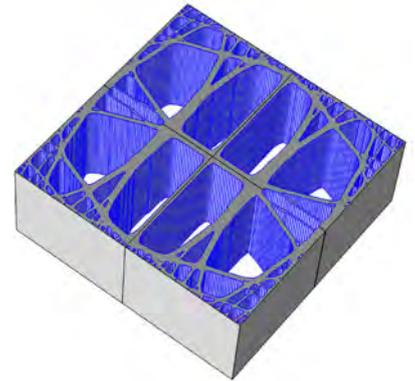


図1. 上：ユニット・セルのジオメトリ中：ある方向では僅かな歪みを生じながら、水平方向で最適化された設計の機械的応力を示すシミュレーション結果
下：3Dプリンタによって作成されたサンプル

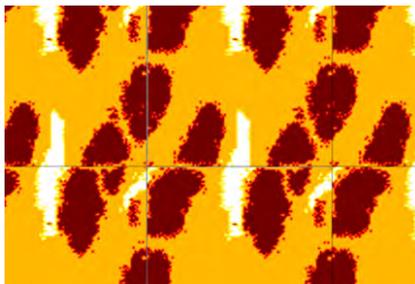


図 2. 求められる異方性熱伝導率のための最適な材料（3種類の材料）構成を示す Barink 氏のシミュレーション結果。このシミュレーションは、高伝導の領域（白）、低伝導の領域（オレンジ）、非導電性材料と空隙の領域（赤）を示しています。いくつかのユニット・セルは周期的に配列されます。

次の段階は、単一物質では入手できない特性の設計を念頭において、より大きな目標を目指し、さまざまな物質の組み合わせ、あるいはマルチマテリアルから成る構造へとシミュレーションを拡大することでした。Barink 氏は COMSOL で異方性マルチマテリアル・セルを定義し、これらのセルのパターンから成る全体構造にわたる材料の局所分布を最適化しました（図 2）。彼は、必要とされる熱伝導率に達するまでの配合と配置を調整するために、このソフトウェアを利用しました。

→ マルチスケール・モデル化と計算力学による均質化法

これらの各ユニット・セルは、実際には、最終的な要素の小さな領域にすぎません。マイクロレベルでの最適化の後、TNO チームはより大規模な装置のための材料最適化の研究を開始しました。「このマイクロスケール戦略は、比較的少量で上手く機能します。しかし、実際の製品を設計するためには、実現可能な計算時間を維持しながら、これらを拡大しなければなりません。この点こそが、いわゆるマルチスケール・モデリングの登場するところであり、これによって設計者は、マイクロ材料のスケールと製品スケールを同時に効果的にシミュレーションするツールを手にするのです。」と TNO の研究エンジニアである Erica Coenen 氏は語りました。

Coenen 氏は、単一のマルチマテリアル・セルの有効な構造作用のパラメータ

を抽出するために COMSOL のツールを実行しました。この有効な作用は、全体装置の実物大モデルあるいはマクロモデルで使用されます。「私たちは、完全連成のマルチスケール・シミュレーションの作成に成功しました。このマクロモデルには、いかなる基礎構造の要素を持たない均質特性が含まれており、マイクロモデルには不均一な複合材料の微細構造が含まれています。多くのマイクロモデルが単一のマクロモデルに拡大します。私たちは一度に複数のマイクロモデルを研究し、マクロモデルからの局所条件に基づいて、高い非線形や温度依存性のある作用について解を求めることができます」と彼女は説明しました。

Coenen 氏と Barink 氏は、この手法の簡易化された方法を、TNO の主要な研究テーマの一つである大型で曲げることのできる有機 LED (OLEDs) の開発に応用しました。有機 LED には、フレキシブル基盤上に有機半導体の沈着が必要となります。この装置には、優れた光の均質性が求められるため、フロントエンドの透明電極に用いられる金属グリッドの慎重な設計が必要となります。光出力における可視光の違いによって、より明るい部分とより暗い部分が発生します。こうした事態は最終製品にとって望ましいことではありません。

しかし、金属グリッドで OLED を直接モデル化することは、様々な部品の高さに大きな違いがあるために、これまで困難を極めていました。グリッドを形成する

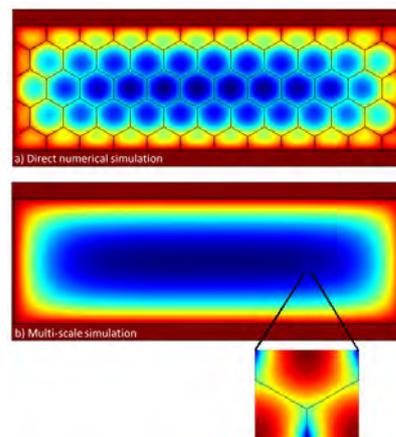


図 3. OLED の光出力を示す COMSOL ソフトウェアのシミュレーション結果。上：六角グリッドを含むモデル 下：均質化された材料特性を持つマクロモデル。

ハチの巣状の形は、僅か数ミリ程度の幅で、その金属エッジは 10 ~ 100 ミクロンの厚さです。比較的大型の完全な OLED (10 センチ幅) の背面に対して、異なる長さの酸化膜が単一モデルの中で構成されることは困難です。

「マルチスケール・モデリングは実際にこの計画を進めるための手段です」と Barink 氏は述べました。新たな COMSOL の研究により、配光を改善する理想的なレイアウトを決定するためにグリッド形状を分析しました。ハチの巣状グリッドのマイクロモデルを完全な OLED のマクロモデルと組み合わせて、効率的な光出力の問題を解決し、間隔の範囲とハチの巣状の大きさの最適化を実現しました（図

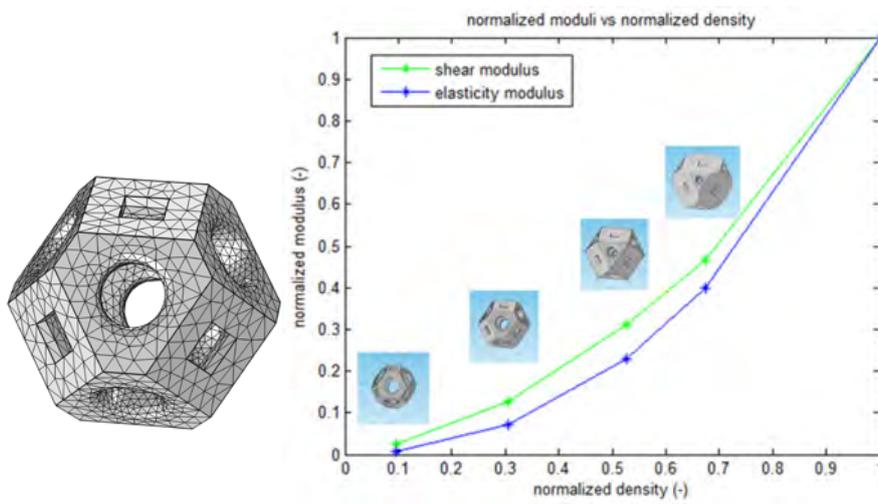


図 4. 左：金属 3D プリンティングの最適化されたセルのメッシュ化モデル 右：様々なセルの設計に対応した均質化材料特性の外観

3 参照)。現行の設計の改訂によって、OLED の効率を落とすことなく、均質性を 12% 改善する結果をもたらしました。

→ 単一セルから完全な部品まで、 全てを一つに

Coenen 氏と Barink 氏は、トポロジー最適化により、これまでの技術では作成することができなかった製品を開発することができるようになり、これは積層造形的设计を生み出すための強力なツールとなることを証明しました。しかし、例え、このような柔軟性の高い製造技術でも、ある程度の限界があります。選択的レーザー溶融法 (SLM) と呼ばれる 3D プリントの一形態では、プリンタが必要な形に粉末剤を溶かし込みます。その後、未使用の粉末は、その対象物から取り除かれ、歪む恐れがあるので、大きな突出部は通常 SLM の設計では回避されなければなりません。この点に矛盾の可能性が生じます。トポロジー最適化が、閉じた空隙や大きな突出部を含む理想的な設計を生み出した時に何が起るのでしょうか？

「この問題を回避するために私たち技術者は、異なる密度のユニット・セルを考え付きました。これらのセルは、剛性で、常にプリントが可能になるように設計されており、粉末を取り除くことができるように穴を含んでいます。さまざまなユニット・セルが、必要とされる全体特性を生み出すために結びつくのです」と Barink 氏は感想を述べました。次に彼らは、COMSOL を使って、材料密度と機械的剛性の関係を分析しました (図 4 参照)。

装置レベルでは、数千の小さな 3D ユニット・セルを持つモデルを扱うことは不可能です。そこで、彼らは実験で得られた技術を融合しました。すなわち、ユニット・セル・タイプの剛性の均質化の後で、より大きなレベルでのトポロジー最適化を行いました。「各ユニット・セルの均質化特性は、装置レベルでのトポロジー最適化で別々の材料として機能します」と Barink 氏は続けて述べました。

金属プリントよりも固く、安価な事例を作るために、ポリマー製のハンマーの柄に、この全ての手順を応用しました (図 5 参照)。最終的な設計は、最小限の材料を用いて正しい剛性を得るために、ソ



図 5. 左：COMSOL ソフトウェアでのトポロジー最適化の結果 中央：ナイロンでプリントされた最適化ハンマーの柄 右：3 種類の異なるセル型を含むパターンをクローズアップ：上部の近くで小さな穴を持つ高密度セルと下部方向に低密度セルがあり、その間に僅かながら中間体がある。

フトウェアによって最適化された様々なセルのタイプの組み合わせで構成されています。「このハンマーの柄は、全ての手順、すなわち設計から最終製品までの能力と多用途性を示すものとして役割を果たしました。ユニット・セルの設計から均質化、トポロジー最適化、プリンタ入力の作成、最後のプリンティングまで、私たちは、全てマイクロレベルの特性を持つ完全な装置を設計するための優れた技術を開発しました。この技術が SLM 設計に応用されれば、金属プリンティングが直面する典型的な製造問題に対処することができるでしょう。そして、そこでは、より強力な

ハイク製品が設計されます」と Barink 氏は述べました。

TNO のチームは、単一セルから初めて、異方性マルチマテリアル微細構造の手法を確立することに成功しました。この技術の TNO の複数の研究分野への応用は、革新的な製品のシミュレーションとマルチスケール・モデリングとの組み合わせの持つ力を示しました。これは未来を垣間見るものであり、そこでは、マルチマテリアル・デザインが積層造形では普通になりましたが、それはシミュレーションなくしては不可能だったことでしょう。❖



TNO の 3D プリンタの前にて Marco Barink 氏 (左)、Erica Coenen 氏 (右)

複雑な建物正面（ファサード）の性能の最適化

マルチフィジックス・シミュレーションを使用し環境や幾何学的・構造的な変数の相互作用を理解することで、Newtecnic 社の技術者たちは革新的な建物のファサードを美しく、そして建築可能に

執筆者：JENNIFER HAND 氏

Federation Square, Melbourne, Australia



図 1. アゼルバイジャン・バクーのヘイダル・アリエフ文化センター (Heydar Aliyev Centre)

ダイナミック、構造、そしてシンボル。重力をものともせず野心的な物であったり、地勢から有機的にそびえたつような物であっても、象徴的建築物は複雑なファサードを持つことが多々あります。設計は単に保護だけではなく、気温や外観の快適性などの変数に対応し調節する機能も備えています。

この分野を専門にしている Newtecnic 社は、斬新なデザインの公共プロジェクトで用いられるファサードシステムを設計、分析するとともに、大胆で流線的な設計構造で知られる Zaha Hadid 建築士と定期的に連携して研究を進めています。Newtecnic 社の創業者で現在の取締役 Andrew Wats 氏と Yasmin Wats 氏は、象徴的なフェデレーション・スクエア（オーストラリア・メルボルン）やアゼルバイジャンのバクーに最近建設されたヘイダル・アリエフ文化センター (Heydar Aliyev Centre) など、著名なプロジェクトの担

当として知られています (図 1 参照)。

Newtecnic 社は特別注文に応じることが普通であり、全てのプロジェクトで概念設計の域をはるかに超える発想が求められます。建築家が建築デザインの芸術的な外観や表面モデルを作成し、Newtecnic 社の技術者達がレイヤ状でファサードを構築します。この時に、そのデザインの創造性がしっかりと生かされているか、また構造的完全性を確認します。

「私たちのお客様は、性能の目標を満たし、周囲の環境に耐えることもでき、そして維持管理も簡単な実現可能で経済的な設計ソリューションを求めています。従って、研究の最も重要な点は、設計したファサードシステムの物理的作用を説明することです」と Newtecnic 研究開発部長 Carmelo Galante 氏は語ります。

冷房負荷の削減と見た目の美しさを最大限引き出すための遮光設計最適化を可能にする太陽光の研究から、断熱性能に

影響を及ぼすレインスクリーン被覆材の固定ブラケットにいたるまで、そこには広範囲にわたる数多くの課題があり、これらはシミュレーションのサポート抜きでは解決不可能です。

→ シミュレーションで概念設計を超える

COMSOL Multiphysics® ソフトウェアは Newtecnic 社の重要なツールとなっています。Galante 氏は次のように説明しています。「私たちは 1 つのシミュレーションソフトウェアで全てを開発することができます。構造物の全体エネルギー効率に対する高伝導素材が断熱材を貫通する経路の熱の逃げ道効果を 3 次元で研究解析するため、また部品の最高温度値をもとめ、最も適切な製品や材料を提案するために COMSOL を活用しています。概略設計段階での建築物の金属皮膜抵抗値の計測や機械的人口換気と自然換気が同時に行われるような複雑なファサードも研究解析



図 2. 2 つの異なる角度からのシェル骨組みレンダリング

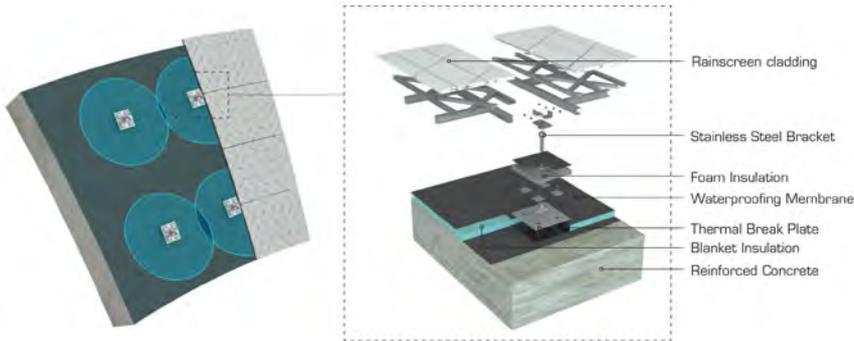


図 3. 固定ブラケットを取り付けたレインスクリーンシステムのハイライトビュー

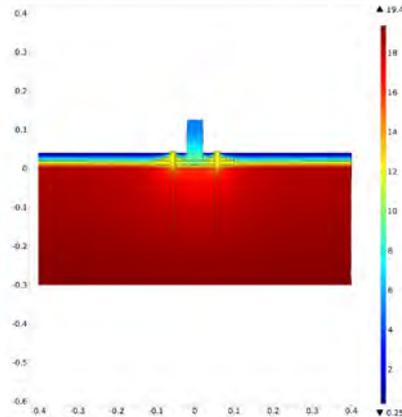


図 4. ブラケットを通した断面の等温分布および温度分布を示すシミュレーション結果

可能です。また、様々な設計形状が及ぼす、ファサードシステムの温度と湿度性能への影響についても解析可能です。」

COMSOL ソフトウェアで可能なインポート機能を使って、Galante 氏は主に Autodesk® の AutoCAD® ソフトウェアや Rhinoceros® ソフトウェアから複合ジオメトリをインポートしています。Newtecnic 社では Autodesk® Revit® ソフトウェアの利用が増加しており、彼は、ユーザのシミュレーションを Revit 環境でインタフェース接続することができ、強力な手段となる COMSOL の拡張機能、LiveLink™ for Revit® の利用を検討しています。また、Galante 氏は、発生アルゴリズムの手法によって複合構造図を作成、分析するために使われるプログラム言語 Grasshopper® などのパラメトリック設計ツールを COMSOL と組み合わせて活用しています。

Newtecnic 社の現在のプロジェクトには、長さ 10 ~ 80 メートル、高さ 30 メートルまでの自立式コンクリートシェル製骨組みなど、現在注目を集めている民間ビル関連ファサードの設計などがあります

(図 2 参照)。

このコンクリートシェル製の骨組みは、ビルジオメトリを正確に再現できるように、セラミック板で作られたレインスクリーン・ファサード・システムで覆われています。それぞれのパネルは、調整可能なステンレス鋼製の固定ブラケットによりそれぞれの角で支えられています。これらのブラケットは、図 3 に示すように 4 箇所の支柱用にあけられた固定装置を通してコンクリートシェル製骨組みに結合されます。このブラケットは断熱層を貫通しており、コンクリートシェル製骨組みよりも伝熱性が高いため、ファサードの薄膜を通して熱の逃げ道を作り出し、熱の影響を大きく減少させています。

COMSOL でシンプルな 2 次元の解析を行い、Galante 氏は、ブラケットが生み出す熱の逃げ道効果によるファサード内の熱分布の影響を研究しました (図 4 参照)。このシミュレーション結果は、Grasshopper® のスクリプトに入れられており、3 つの関連するエリア、すなわち 1

「シミュレーションにより、建設業者に要求される建物の構造を正確に把握することが可能となり、建設コストを最小限に抑えることが可能になります」

—FABIO MICOLL, NEWTECNIC 社副所長

個のブラケットによる影響、2 個以上のブラケットによる影響、そしてまったく影響のない熱の逃げ道効果を数値で解析しています (これらの領域は図 5 に表示されています)。

次に Galante 氏は、構造物の全ての部品を含むシステムの正確なジオメトリを作成することができるようになりました。「2 つのツールを結合することができたことは大きなメリットです。Grasshopper® により、建物全体のジオメトリを大規模解析できるようになりました。そして、システムの実際のフィジクスを把握するためこの情報を基にして COMSOL の中で極めて詳細な 3 次元モデルを作成しました」と Galante 氏は語ります。このアプローチを利用することで、Galante 氏はブラケット内や建築物周辺の熱の逃げ道効果を 3D で研究解析することが出来るようになり (図 6 参照)、またファサードの総熱還流率 (U-value) の計算も可能になりました。

「マルチフィジクス・シミュレーション

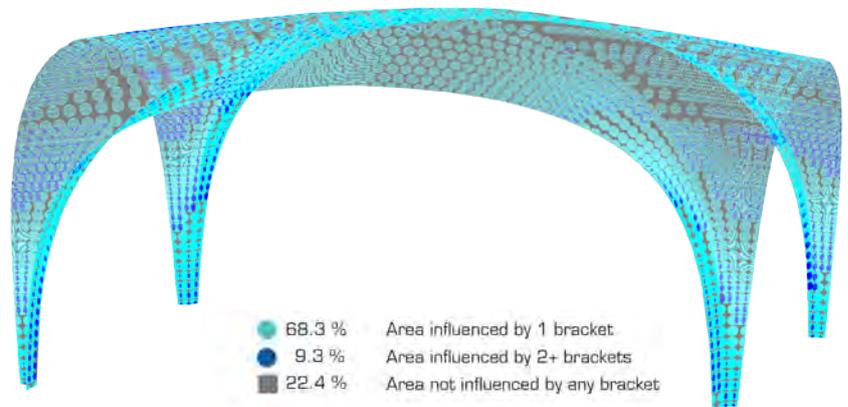


図 5. 1 つのブラケットによる影響、2 つ以上のブラケットによる影響、どんなブラケットにも影響されない、それぞれをハイライトしたエリア 図 2 に表示されたシェル骨組みのモデルの 1 つ

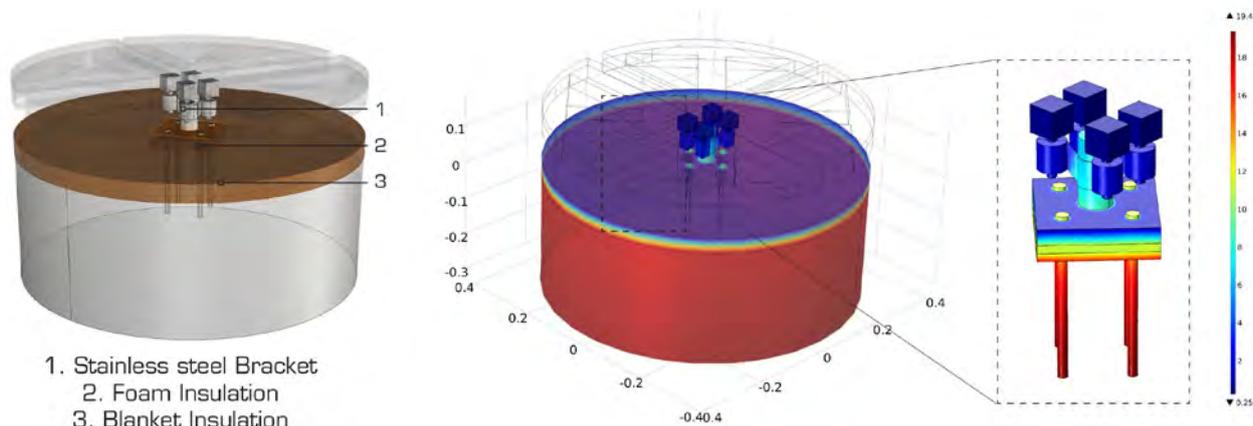


図 6. 左：RhinoCeros® ソフトウェアに組み込まれ COMSOL Multiphysics® にインポートされたブラケットおよび周囲を囲む断熱材の 3次元モデル

を使うことで、実際の反応について理解を深めることができました。流体を、伝導・還流・放熱による熱伝達と結合することが可能になります。すなわちさまざまな物理的効果の相互作用を完全に数値で表し、異なる構造や材料の性能を確認することが出来るのです。」と Galante 氏は述べています。

→ 設計変更への対応

Newtecnic 社の技術者たちは設計変更に対応する必要があり、いかなる更新変更でもその有効性を確認する必要があります。「シミュレーションで、こうした問題を解決することができます。私たちは設計変更がどのような効果をもたらすのか、例えば、エネルギー効率、構造的な性能、金属腐食、部品の耐用年数など関係があるのかどうか、これらを正確に示すことができます」と Glante 氏は述べている。

Newtecnic 社取締役の Andrew Watts 氏は常に下記のような自問自答をしています：「この変更はすべき価値があるのか？あるいは、もしこの変更を行ったとしたらこれに伴い発生する必要業務はどれくらいあるのだろうか？」そして彼は「シミュレーションを使うことで、個々の部品の 1 つの機能だけを研究する伝統的な建築理念から脱皮し、複数の機能部品や建物全体の観点から考えることが出来るようになりました」とコメントしています。

シミュレーションは建物の全ての部品の分析を実行するために活用され、この結果は完全に図面と一体化されるので、

経費予測は正確で分かりやすくなります。Newtecnic 社副所長の Fabio Micoli 氏は、最新のフィードバックを顧客に提供する意義について次のように述べています。

「シミュレーションにより、建築業者に求められる建物の構造を正確に把握することが可能になり、建設コストも最小限に抑えられます。従って、未解決の設計上の問題や緊急予算の解決のための時間を低減するとともに、プロジェクトの納期厳守に集中できるようになります。」

→ 続けられる改善

「シミュレーションソフトウェアなど、私たちが利用するデジタルツールには新たな可能性があり、私たちの設計プロセスを改善することが可能です」と Glante 氏は語ります。Newtecnic 社で今や COMSOL

マルチフィジクス 5.0 版の一部となっている新アプリケーションビルダの利用など、シミュレーションの活用を拡大する可能性を見出すことができます。Micoli 氏が述べたように「例えば、基本的なマルチフィジクス・シミュレーションの詳細を知らなくても、さまざまなパラメータを変更することができ、その設計変更がどのような影響を及ぼすのかを正確に把握できるアプリケーションを作ることにより、お客様とのコミュニケーションを強化することができます。」

結論として、シミュレーションを用いることにより、建物の性能を理解するために Newtecnic 社の顧客に対して情報が提供されるようになり、革新的な建築構造設計の最も良い面が出せると確信しています。❖



英国ロンドンの Newtecnic 社オフィスで最近のプロジェクトについて検討する Carmelo Grante 氏 (左)、Andrew Watts 氏 (中央)、Fabio Micoli 氏 (右)

コスト効率の高い再生可能エネルギーを実現するバイオ燃料技術

米国国立再生可能エネルギー（National Renewable Energy）研究所の技術者たちは、マルチフィジックス・シミュレーションを活用し、植物性バイオ燃料の転換プロセスの理解をさらに深め、最適化を図ります

執筆者：JENNIFER SEGUI 氏

バイオ燃料は、多くの応用分野で化石燃料に替わりうる可能性があり、ビルの暖房や発電、そして輸送産業のエネルギー源の代替になるかもしれません。

一般的にバイオマスといわれ、植物を原料にして生産されるバイオ燃料には多くの恩恵があります。このような燃料は、再生可能で燃焼による汚染が少なく、原料となる植物が取り込んだ以上の二酸化炭素を排出しないカーボン・ニュートラルでもあります。しかし、バイオ燃料の供給力は、最も一般的に使われる車の燃料としてはかなり限界があります。2014年に発表された米国エネルギー情報局の報告書によりますと消費者に販売される燃料のうち、エタノール燃料 E85 は僅か 2% になります。

バイオ燃料の製造プロセスそれ自身が、バイオマスの広範囲使用に対して、経済的な障害となっています。国立再生可能エネ

ルギー研究所（NREL）における研究は、コンピュータ熱分解コンソーシアム（Computational Pyrolysis Consortium）の支援を受け、バイオマス粒子ジオメトリの特徴を現時点で最も正確に表す計算モデルを開発することにより、バイオマス・エネルギー転換の物理的プロセスの理解をさらに深めることを目指しています。また、こうしたモデルは、バイオ燃料を大量に生産するために必要となる化学反応装置の設計や操作を改善するために用いられます。

この研究は、最終的にはこれまでの再生不可能な燃料よりも、コスト効率がよく、競争力のあるバイオ燃料を作り出すことにあります。この結果、再生不可能な燃料の中には僅か十年で激減することになるものもあるでしょう。

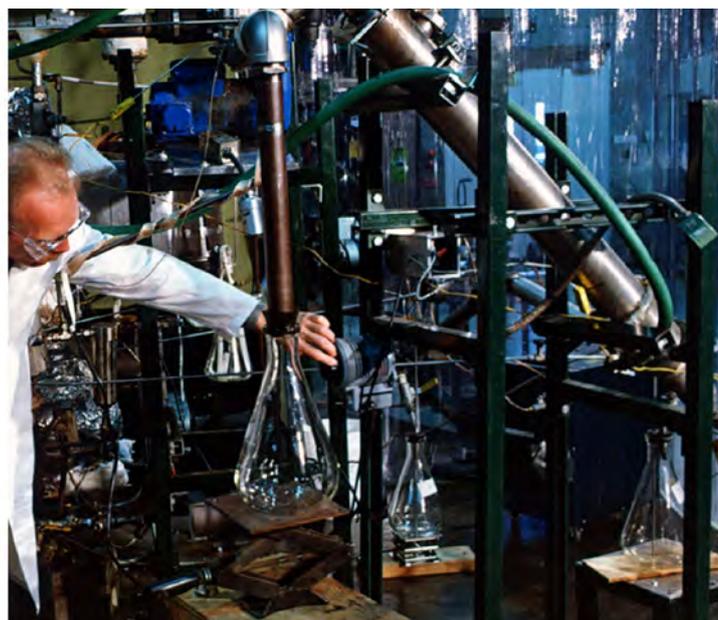


図 1. 熱分解の準備段階において、木質バイオマスは粉碎され（写真左）、さらに化学的処置が施されます。分解の完全なモデルを開発するためには、伝熱、物質伝達、化学反応、相変化などの様々な物理的プロセスを考慮する必要があります（写真右）。この写真は、商用前の化学反応装置における熱分解で生じた圧搾バイオオイルガスを回収するフラスコです。写真提供者：Warren Gretz 氏、NREL 05756（左）、Phil Shepherd 氏、NREL 03677（右）

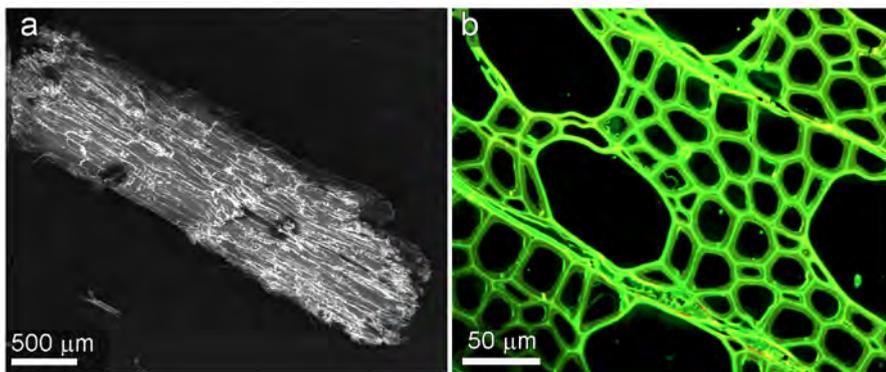


図 2. 左：硬材のバイオマス粒子の形状と構造を明示する走査型電子顕微鏡写真、右：微細構造を示す粒子の横断面の共焦点レーザ走査顕微鏡写真

「COMSOL には、ジオメトリ作成ツール、物理特性、メッシュ、ソルバが搭載されており、私たちはバイオマスモデルを正確に作ることに多くの時間をかけることができます」

—NREL 研究科学者
PERTER CIESIELSKI 氏

→ 植物を原料とする燃料の生産

図 1 に示すように熱分解など熱化学処理プロセスは、バイオマス粒子を高温状態で分解し、日常生活の多くの場面で利用可能な液体バイオ燃料に変換するために用いられます。急速熱分解の改善のために、木質バイオマスに通常利用される商用前の熱化学変換経路は NREL の研究プログラムの目的の一つであり、下記の補足に詳細が記述されています。

NREL 研究科学者の Perter Ciesielski 氏と彼の同僚は、熱・物質伝達をはじめとして、熱分解によるバイオマス変換の基礎的な仕組みを把握するためにマルチフィジクス・シミュレーションを活用しています。

バイオマス粒子を通過する効率の良い熱・物質伝達は、チャー形成を最小化し、転換触媒の浸透や求められる製品のエスケープを進めることにより満足される反応が早く得られます。

Ciesielski 氏の研究は、木の種類や熱処理前に行われる粉碎工程によって決定されるバイオマス粒子の大きさ、形、内部微細構造を考察することです。

→ バイオマスの正確なモデル

バイオマス・エネルギー転換プロセスを理解、最適化を目的としたこれまでのコンピュータによる研究では、内部の微細構造を活用せず常に単純なバイオマス粒子構造図を用いてきました。

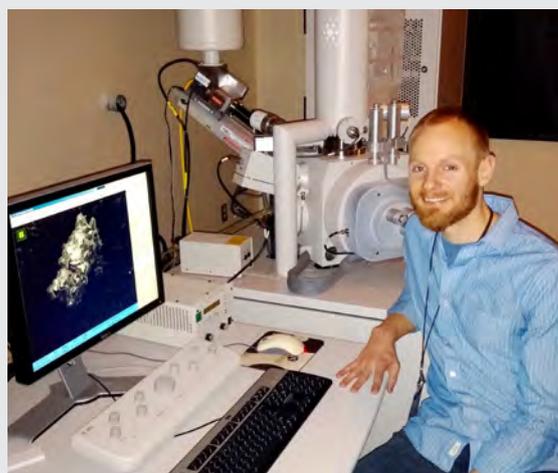
Ciesielski 氏の研究は、内部の微細構造を考慮したモデルを COMSOL Multiphysics® ソフトウェアで開発することにより、バイオマスの熱・物質伝達を理解することを目標としています。「COMSOL には、ジオメトリツール、物理特性、メッシュ、ソルバがすでに搭載しているため、バイオマスモデルを極めて正確に作ることに集中することが可能で、それに多くの時間をかけること

コンピュータ熱分解コンソーシアム

コンピュータ熱分解コンソーシアム (Computational Pyrolysis Consortium) に支援され、アメリカエネルギー省に資金援助されている Ciesielski 氏の研究は NREL、オークリッジ国立研究所 (Oakridge National Laboratory : ORNL)、そしてアメリカ国立標準技術研究所 (National Institute of Standards and Technology : NIST) の共同研究です。この共同研究には、コンピュータモデリング、バイオマス・エネルギー転換、反応器設計や材料特性など熱分解によるバイオ燃料生産の最適化に必要な各分野の専門家たちが集結しています。

熱分解の多大なる貢献に感謝するために一まず、「炎」無しの「火」を想像してみてください。熱分解とは、無酸素で高温状態の容器内にてバイオマス分解を引き起こす熱化学的変換ルートのことです。熱分解の結果は、炭化し、バイオオイルと呼ばれる液体製造となり、化学反応から出来たガス状生成物になります。バイオ燃料はバイオオイルがさらに精製されたものから製造されます。

NREL の熱分解研究では、内部温度が 1 秒間に一気に 500°C 上昇する装置を有し、バイオマスを分析するために極めて高率の伝熱を使用することで、一歩進んだプロセスを実行しています。



NREL 研究科学者 Perter Ciesielski 氏およびエネルギーと燃料 1 に掲載された彼の研究用の木質バイオマス画像を得るために用いられた走査型電子顕微鏡の写真

ができます」と Ciesielski 氏は説明します。

COMSOL シミュレーションで用いるバイオマスの 3 次元モデルを作成するために、それぞれのバイオマスの内部微細構造だけでなく、外的形態とサイズ分布の特性を明らかにするため、画像検査法の重複処理が用いられます。本研究のために取得された画像例を図 2 に示しています。

立体ジオメトリは、COMSOL のプール演算シリーズへの入力データとして、バイオマス粒子の内外の面積を用いて生成され、この画像から決定されます。完成されたジオメトリは、図 3 に示すように 2 つの領域から構成されます。

→ 熱分解のシミュレーション：熱および物質伝達

高速熱分解によるバイオマスの分解は、数秒間、無酸素反応槽で高温（約 500°C）を適用して開始します。これらの条件を適用して、窒素ガスおよびバイオマス粒子で構成される外側の流体領域間（図 3 左に表示）の伝熱をシミュレーションするために COMSOL 共役伝熱インタフェース（Conjugate Heat Transfer interface）が用いられます。流体領域中の伝熱は主に対流によるものですが、界面上やバイオマス粒子を通過する伝熱は伝導によるものです。

このシミュレーションは、64GB の RAM を持つ 24 Intel® Xeon® Ivy Bridge プロセッサから構成される 1 個ないし 2 個の演算ノードを利用する高性能計算（HPC）クラスタにより実行されました。図 3 右の結果は、共役伝熱の過渡シミュレーションでの 0.5 秒の硬材バイオマス粒子の温度分布を示しています。与えられた粒子の大きさ、形状、微細構造に対して、分解の最適温度に達するための、粒子全体、特に中心部での必要時間を決定することが可能です。

別のシミュレーションでは、バイオ燃料への転換前にバイオマス前処理に用いられる化学薬品である硫酸の拡散が測定されま

した。希釈化学種の輸送インタフェース（Transport of Diluted Species Interface）は、周囲の流体が水である微細構造や固体粒子のジオメトリの中の物質輸送の過渡シミュレーションに活用されました。

これらの熱・物質伝達研究の結果、特に球体などの立体モデルでは、バイオ燃料への転換プロセスを評価し、最適化を図るためには、その正確性は不十分であると考えられますが、微細構造モデルの利用では正確であることを示しています。

→ 大規模反応器の設計のための入力

現在の研究はバイオマスにおける熱・物質伝達に注力していますが、高速相変化や化学反応は、高速熱分解によるバイオ燃料の生産を完全に理解し最適化するために必要不可欠です。Ciesielski 氏が現在進めている研究はこれらの課題をシミュレーションに加えることであり、その研究を行うことのできる能力を備えているのが COMSOL であり、COMSOL を選択した重要な理由でもあります。

しかしながら、このチームはコンピュータのモデルを使用してさらに大規模計画を予定しています。バイオマスを使用した輸送の基本的理解を深めるためのシミュレーションを実装することにより、低次モデルでの実際の相互関係はパラメータプロセスの領域とバイオマス原料を確定することが可能です。これらの相関は、バイオ燃料の大量生産のための大規模反応装置の設計と運転を最適化するために利用することができ、このプロセスをより効率的でコスト効果の高いものにすることができます。❖

参考資料

¹ P.N. Ciesielski ほか著 エネルギー燃料（Energy Fuels）、2015 年、29（1）242-254 ページ

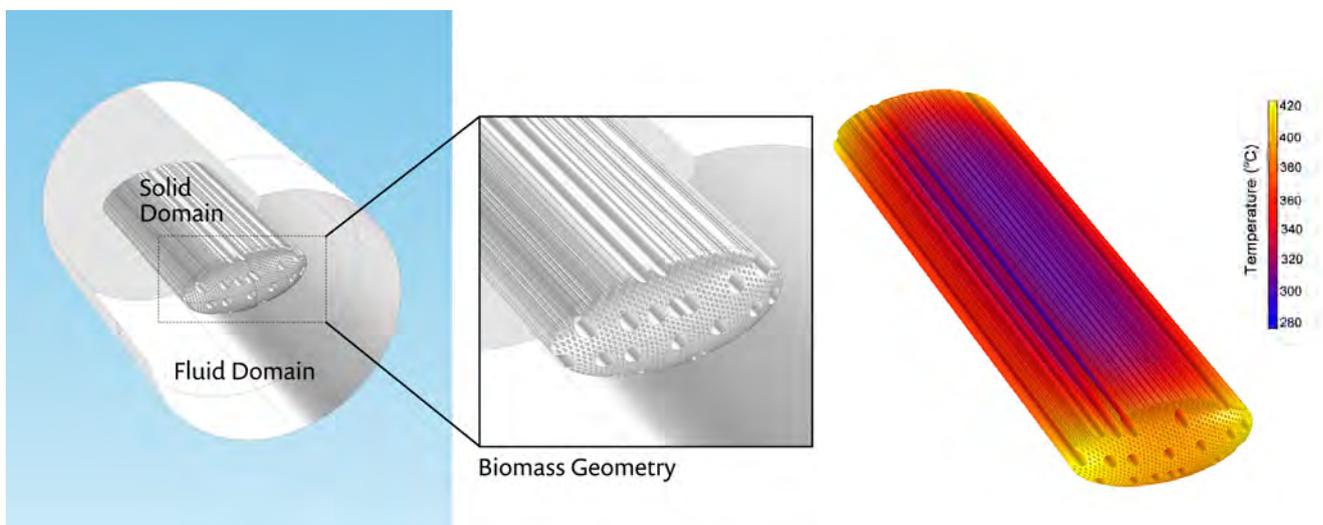


図 3. 左：硬材粒子を囲む流体の特性を表現した COMSOL® ソフトウェアモデルのジオメトリ 右：共役伝熱の過渡シミュレーションが示す温度分布

ビル冷暖房の改善策

フラウンホーファー太陽光エネルギーシステム研究所 (Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems) 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、革新的な太陽光や天然ガス、そして排熱で稼働する吸着式冷却装置、ヒートポンプ、蓄熱ユニットを開発しています。

執筆者: **GARY DAGASTINE** 氏



図 1. 製品化された吸着式冷却装置の例

ビルの冷暖房はヨーロッパのエネルギー消費の約 50% を占めており、研究者達は在来技術の代替装置の開発を急いでいます。

一つの魅力的な可能性は、電気に頼らない熱による吸着式冷暖房システムの利用です。この熱は太陽熱収集器や工場から出る排熱あるいは熱併給発電装置からもたらされているため、電力消費を大幅に低減するとともに、CO₂ 排出を抑える可能性を秘めています。この技術は、ビルに供給される熱を増やすためにガス燃焼ヒートポンプを使用する高効率暖房システムであるばかりでなく、長期間のエネルギーのコンパクトな蓄積にも利用が可能です。

要約すると、この原理に基づく冷暖房システムは、液体の状態が何度も液体から気体になり、また逆に気体が液体になる吸脱着サイクルにおける作動流体を利用するものです (詳細説明は 37 ページ参照)。この技術の活用し、さまざまな温度と圧力の下で吸着物質の加熱と冷却を繰り返すことにより、熱圧縮機として機能する特殊な熱交換器を作ることができます。これらのシステムは、電動機械式コンプレッサーを、従来型の給湯システムを利用して蓄積されるエネルギーの 3 倍までの蓄熱容量を提供できるという大きなメリットを持つヒートポンプや冷却装置に替えることができます。

→ 熱転写と蓄熱の最適化

吸着式暖房システムおよび冷却装置の開発は複雑です。これらのシステムには、不連続な稼働サイクルがあり、さまざまな最大エネルギー流束があります。その動的性質は、複雑な共役熱・物質伝達現象により確定されます。

複数の吸着式システムは既に製品化 (図 1 参照) されていますが、大規模で最大限にその可能性を実現するために、この技術はさらに効率化

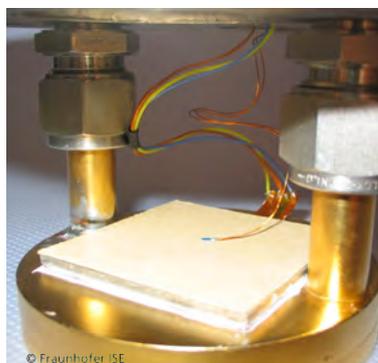
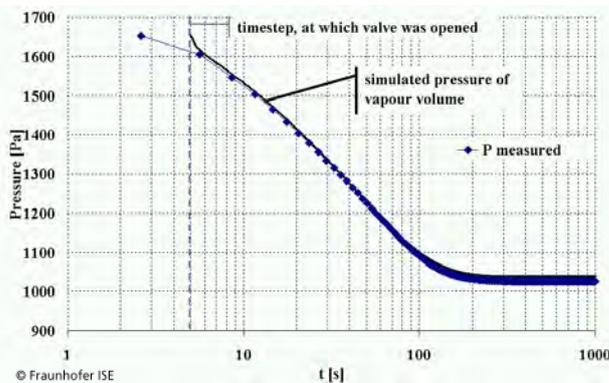


図 2. 左: 吸着反応速度の COMSOL® ソフトウェアモデルを確認するために用いられた実験装置。アルミ製担体上のゼオライト吸着剤 50 × 50mm² の薄い層で構成されており、投薬室内の冷却板上に設置され、温度および熱流束センサでモニターされています。右: フラウンホーファー ISE におけるゼオライト吸着剤実験材料のシミュレーションと計測による水蒸気圧力の完全な一致を示すグラフ



方で温度と物質分布を考慮するために、COMSOL Multiphysics® のような数値ツールを活用する必要があります。このツールを使用することで、シミュレーションが吸着と脱着の動きを正確に捉えることができると確信しています」と Laurenz 氏は述べている。

このチームは、調査対象となる物理特性の実際の複雑な動作を正確に予測することができる大規模なモデルを作成するため、一般的なアプローチでもありますが、シミュレーションと明確に定義された小規模な実験とを併用しています。小型モデルを用いて、詳細な物理的メカニズムを完全にモデル化できると同時に、より大きな規模で複雑さが低減され、計算時間を節約することが可能になります。このアプローチにより、実物大のプロトタイプを実際に作成する必要性を大幅に減らすことができ、時間と資金の節約につながります。

→ 吸着プロセスの検証

吸着式熱交換機の改善目的の一つは、このシステムに使われる薄い吸着剤層の吸収速度と吸収能力を最適化することです。ある研究では、Lena Schnabel 氏と Gerrit Fuldner 氏は吸着層に起こる熱・物質伝達の相互作用を捉えたモデルを作成するためにシミュレーションを利用しました。このモデルを利用して、このグループは、図 2 左に示されている実験装置から得られた測定結果を完全に理解することができました。

「パラメータ予測を用いて実験結果とシミュレーション結果を比較するだけで、直接計測できない輸送係数を確定することができました。システムのより複雑なシミュレーションにて、このデータを使用しました」と Laurenz 氏は述べます。

Schnabel 氏のグループは約 10 年前に最初に COMSOL Multiphysics® を使用し始めました。しかし、最近になってこのグループは、動的に変化する稼働状況の下で、輸送パラメータを予測し完全なシステムの周期作用をシミュレーションするために、様々な詳細度を持つモデルを使い始めています。複雑で動的なシステムにおける連成物理を簡単にシミュレーションする機能は、ブラウンホーファー ISE の多くの研究者たちにとって欠くことのできないものとなっています。

→ 改善された熱交換器の設計

Fugmann 氏は熱交換器構造を最適化する研究の中で、冷却装置やヒートポンプなどの熱交換器の設計に関する基礎研究を行っています。彼のジオメトリのいくつかは、図 3 に示すようなワイヤー構造を用いた伝熱表面領域を拡大するために設計されています。これは従来型のフィンアンドチューブ型熱交換器の設計とは対照的なものです。これら新型の構造では、ワイヤー構造が一連のチューブの周りを覆い、編みこまれていて熱交換器内の 2 つの流体を分離しています。ガス液体燃料のワイヤー熱交換器の実験装置では、温水がチューブ内を流れ、冷風がチューブの間とワイヤー全域に流れます。

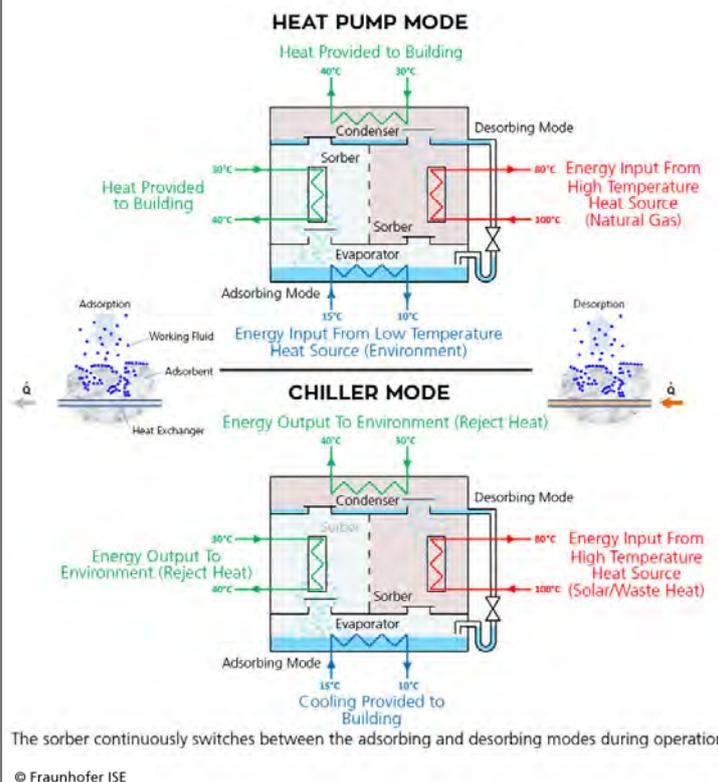
「ワイヤー構造を使用することでより大きな表面でより高い伝熱

冷暖房システムの吸着の活用

吸着式冷却装置およびヒートポンプを設計するために使用される 2 段階サイクルの回路図を下に示しています。まずはヒートポンプモードでは何が起きているのか見てみましょう。このサイクルは、吸着と脱着のプロセスから成り立っています。吸着のとき作動流体は低温状態で蒸発します。同時に作動流体は中温状態で吸収剤に吸収され、そこで放出された熱はビルを暖房するために使われます。

吸収剤が飽和状態になると、このプロセスが反転し脱着プロセスが始まります。吸収剤が加熱されて高温になると作動流体を排出します。次に、この作動流体は中温状態で圧縮され圧縮で放出された熱がビル暖房に利用されます。

総括すると、加熱作用（ヒートポンプ）によってエネルギーが周囲から取り除かれている間にビルが暖房されます。反対に冷却作用（冷却装置）で熱が周囲に放出される間にビルが冷房されます。このサイクルが中断すると吸着の保有熱が失われることなく蓄えられます。求められる作用にもよりますが、吸着はビルの冷暖房に用いられ周囲の空気は熱源として、あるいは放熱板として機能します。



The sorber continuously switches between the adsorbing and desorbing modes during operation © Fraunhofer ISE

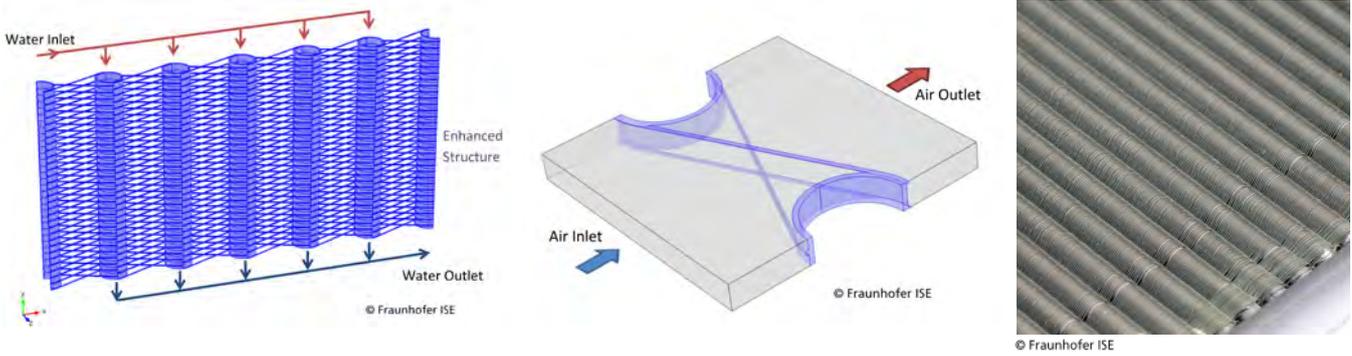


図 3. 左：チューブに注水される温水を示す装置のジオメトリ。冷気は、チューブを通過し、水がチューブを流れる時この水を冷却する。中央：冷気が入り、暖気が出ることを示すシミュレーションジオメトリ。ワイヤー構造およびチューブは紫色で表示されている。右：実験的試験で用いられた装置のジオメトリ

係数を達成することができ、同時に材料の使用量を大幅に削減できます。圧力損失を大幅に増やすことなくこれを実現することができ、ワイヤー構造の柔軟性により、設計の運転パラメータに対応したジオメトリを簡単に適用できます」と Fugmann 氏は語ります。

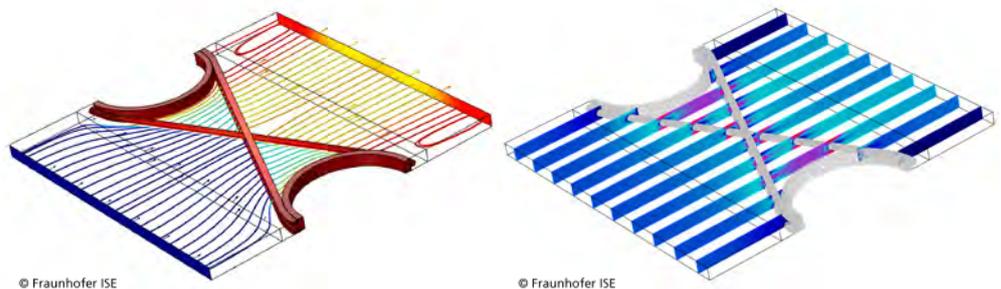


図 4. 左：空気中、チューブ壁、2つのチューブを結合するワイヤーにおける速度流線型および温度分布を示すシミュレーション（赤：暖い；青：冷たい）。右：空気中の速度の大きさを示すシミュレーション

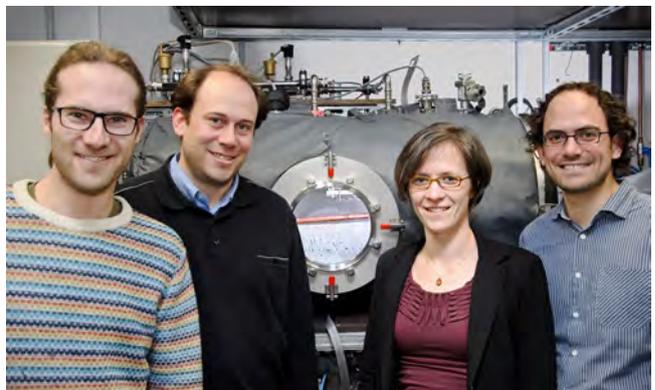
COMSOL® ソフトウェアを活用して Fugmann 氏は、特定の圧力損失、伝熱係数、原料使用量など設計ジオメトリの分析を研究するためパラメトリックスイープを実行しました。図4は、ワイヤー構造とチューブの最適化されたジオメトリの温度分布と速度を示しています。

Fugmann 氏はこの装置について次のように述べています。「この計測により、ワイヤーとチューブの間の結合部分が、高度に優れた耐熱性を生み出していることを発見しました。ワイヤー構造における伝熱の限界を理解することにより、設計の更なる最適化を図ることができます」。

蓄熱内の熱交換器用の吸着剤コーティング構造や表面の拡大化のために、体積当たりの熱交換表面がより高いためワイヤー構造もまたフラウンホーファー ISE で実験と計算の両面で分析されています。

→ 今後の取り組み

「私たちの直近の目標は、これらの分野の知識と能力を高めることであり、これにより私たちの顧客や吸着式温度調整システムを様々な視点で開発しているフラウンホーファー ISE の研究者たちに貢献することができます。より長期的には、このような技術が社会で幅広く利用され、送電網にかかる負担を軽減し、地球資源を守る一助となる日が来ることを期待しています」と Laurenz 氏は語ります。❖



フラウンホーファー ISE チーム (左から) Hannes Fugmann 氏、Gerrit Fuldner 氏、Lena Schnabel 氏、Eric Laurenz 氏。吸着式熱交換器の動的特性を得るための実験用装置を背景にした写真。この装置はシミュレーションに基づくパラメータ予測用の実験データを作成するために活用されています。

参考資料

¹ Fuldner, G & Schnabel, L 2008 年「金属担体上の小型吸着剤層内の水吸着の非等温反応速度」2008 年ハノーバー COMSOL 会議資料 (ハノーバー COMSOL 会議)

最新のマルチフィジックスシミュレーション情報をCOMSOL ブログで紹介

エンジニアリングコミュニティの COMSOL ブログにてマルチフィジックスシミュレーションの Q&A や役立つ情報を紹介

執筆者: **FANNY LITTMARCK** 氏

COMSOL ブログは、マルチフィジックスシミュレーションの頼れるリソースとして世界中のエンジニア達から支持を得ています。読者は COMSOL Multiphysics® ソフトウェアをいつ、なぜ、そしてどのようにして活用するのがベストなのか、専門家たちから直接情報を得、習得することが出来ます。全てのブログはアプリケーションエンジニア達や他の COMSOL スタッフたち、そして時にはゲストブロガーたちにより執筆され、社内にて発行されています。この様々な分野の著者によるブログは、極めて専門的な詳細情報から参考程度の軽いインフォメーションまで広範囲な内容になっています。

→Q&A のサポート情報からリリースニュース、様々な情報が満載

ブログの内容は、40 以上もの話題と分野にわたり、また関連する内容をブラウジングしやすいようにフィジックスごとに整理されています。COMSOL Multiphysics のユーザ達は、一般的に質問されるサポート Q&A、モデリングのコツ、リリースニュース、COMSOL カンファレンスの最新情報などなど COMSOL ブログにて様々な内容を確認することが可能です。

COMSOL® シミュレーションソフトウェアの詳細情報に加えて、トレンドングトピックのジャンルでは有名なサイエンスブログの投稿もあり、読者全員が楽しめる内容になっています。

ブログ投稿の大半が独立した単体の記事ですが、中にはより専門的な内容に踏み込んだものもあり、複数回のブログにわたるシリーズものになる場合もあります。もっとも人気が高いシリーズはソルバ関連のブログで、アプリケーションエンジニアの Walter Frei 氏の執筆によるもので、COMSOL ソフトウェアがモデル解析をしている時に実際に内部では何が起きているのかを説明しています。多くのファンから人気を得ているのは他にも、ポストプロセスのコツ、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)、弱いフォームなど様々なものがあります。これら全てのシリーズは全て右下のサイドバーのタグに整理され、新しいシリーズが始まるとアップデートされます。

→COMSOL ブログを探求しよう

COMSOL ブログは、毎週、月曜から金曜まで様々なトピックで新しい内容が発行され、一人一人に役立つ話題を提供しています。さあ、最新版のマルチフィジックスシミュレーション情報入手するために早速ブログへお越し下さい。www.comsol.com/blogs を直接入力、もしくはフッターのコミュニティを介した COMSOL ウェブサイトからもアクセス可能です。❖

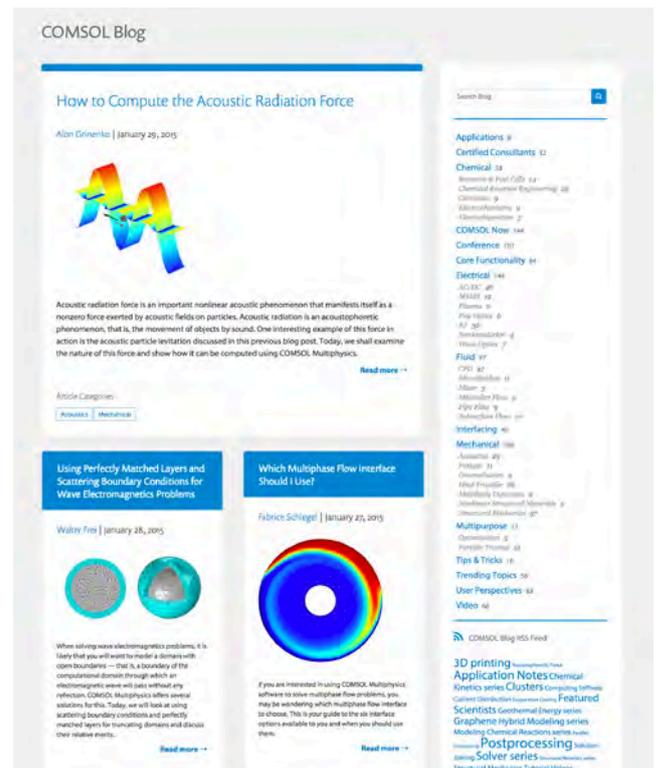


図 1. COMSOL ブログの画面

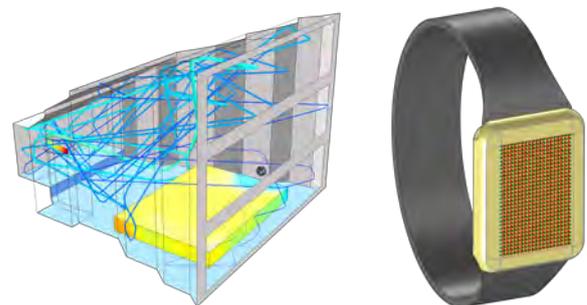


図 2. 左: コンサートホールの光線経路 ブログ投稿“COMSOL Multiphysics を使用した室内音響学のモデリング”より 右: ブログ投稿“コンシューマエレクトロニクスのタッチスクリーン容量解析”より、タッチスクリーンウォッチ

3D printing Acoustophoretic Force
Application Notes Chemical
Kinetics series Clusters Computing Stiffness
Current Distribution Evaporative Cooling Featured
Scientists Geothermal Energy series
Graphene Hybrid Modeling series
Modeling Chemical Reactions series Parallel
Computing Postprocessing Solution
Joining Solver series Structural Materials series
Structural Mechanics Tutorial Videos
Thermoacoustics Weak Form Working with M-files 裏表冷却

図 3. COMSOL ブログシリーズのタグクラウドの特徴

シミュレーションアプリは、火星への近道

執筆者：NASA、マーシャル宇宙飛行センター、JIM KNOX 氏

私が数学的なモデリングやコンピュータシミュレーションに本格的に携わったのは、NASA としてよく知られるアメリカ航空宇宙局で働き始めた 1987 年からです。そのとき、私は国際宇宙ステーション (ISS) 生命維持システムの二酸化炭素 (CO₂) 除去システムの設計をサポートするシミュレーションを開発していました。CO₂ は、人間の代謝廃棄物で、乗組員一人あたり 1 日 1 キログラムの割合で排出されます。CO₂ は急速に乗組員の健康に有害になるので乗務員室から取り除く必要があります。CO₂ を除去するシステムは通常収着過程がベースとなっており、多孔質媒体を介しての伝熱、物質移動、およびガスの流れなど複雑な相互作用を考慮する必要があります。その当時は、偏微分方程式 (PDEs) のような連成数学的モデルの解法のための商用オプションはありませんでした。そこで、熱解析パッケージの中にフィジックスを無理に埋め込むか、離散化、メッシュ、および解法アルゴリズムを含め自分自身でコードを書くかのどちらかの選択肢のみが残されていました。残念ながら、CO₂ 除去プロセスをゼロからコード化する、という選択肢は、チャレンジに値する重要なタスクとし

「Application Builder は多くの利用者にワークロードのシェア方法を提供するでしょう。」

ては考えられておらず、適切な数学的モデルを用いて基本的な物理学を理解し攻略するにはまだ時期尚早な時でもありました。ぎつしり詰まったスケジュールのため、コンフィギュレーション管理は、頻繁に無視されることとなり、結果的には修正変更するよりも書き直した方が速くなるということで、コードの書き直しが行われていました。

2000 年前半においては、組み込まれたメッシュ、ソルバや後処理能力を兼ね備え、ユーザ定義されたマルチフィジックス PDE を解析できたプラットフォームで CO₂ 除去シミュレーションを行うことにしました。これらのニーズを満たすために選ばれたプログラムが COMSOL Multiphysics® ソフトウェアでした。基本的な物理特性に集中している技術者を解放にすると共に、ある程度のコンフィギュレーション管理は一貫したユーザインタフェースによって自動的に実行され、その結果、COMSOL Multiphysics® ソフトウェアのユーザにコンピュータモデルを共有することを可能にしました。私たちのチームは ISS における CO₂ 除去システムに対して既に有効なデバッグ能力を提供するシミュレーションを開発しました。そして、そのシステムに対してアップグレードの道筋を見出すことが出来るでしょう。

NASA の有人宇宙飛行の次のフェーズは、まずは火星付近、そして、最終的に火星表面に目を向けており、強健で効率的なシステムが必要となり、それが大躍進をもたらします。ISS などと異なり補給は利用できず、早期に帰還することも不可能です。そのため、CO₂ 除去システムの設計には吸着剤の選択と吸収剤プロセスを含む最適化が必要不可欠になります。

私の最近の業務の 1 つは、NASA の先端探索システムプログラム向けの宇宙船内 CO₂ 除去技術の成熟化を進めることと並行して、CO₂ の回収と貯留の同時開発が滞りなく進行するよう管理することです。最近の講演にて演説者の話を聞いていて、彼の結論に私は大変衝撃を受けました。というのは、このような複雑な技術において、実績の標準数は、関連するプロセスを最適化することに使われていないからです。むしろ、多孔質媒体の伝熱と物質移動の連成を含むプロセスの主要なフィジックスを得るコンピュータシミュレーションを利用しなければなりません。多くのパラメトリックシミュレーションを最適な解析に収束させることが必

要です。パラメトリックテストは、もちろん使うことができましたが、法外に高価であり、時間もかかり、検索オプション数を大幅に制限することになってしまいます。マルチフィジックスアプリケーションはソルバのロバスト性と高速性で長足の進歩を遂げました。

しかしながら、1D システムシミュレーションを加速し、完全な CO₂ 除去システムの多次元モデル化を可能にするためには、ロバスト性、実行率、およびメモリ使用量における更なる改善は非常に望ましく、輝かしい未来の発展に繋がります。

現在パラメータ研究の実行率増加のために適用している 1 つの特徴が、COMSOL Multiphysics の Application Builder です。テストに対する CO₂ 除去シミュレーション検証後に、パラメータを同時研究している複数のユーザにコンフィギュレーションを整理し公開することができます。パラメータ変数の例として挙げられるのは、吸収剤選択、固定ベッドサイズ、サイクルタイム、そして流量です。Application Builder を活用した最近の開発は、このプロセスをシームレスに実行可能なため、非常にタイムリーになっています。

要約すると、宇宙船内の CO₂ 除去システムの成熟化に向けたパラメータ研究の基盤として使用された COMSOL の初期研究は大変有望だと思われています。Application Builder は多くの利用者にワークロードのシェア方法を提供するでしょう。このアプローチとともに、幅広い分野の有力なオプションのうち、博識な選択肢は CO₂ 除去システムにとっても、火星へ向かい着陸予定のクルーメンバーにとってもベストなソリューション見出すことが可能になります。❖



Jim Knox 氏は NASA の Advanced Exploration Systems (アドバンスドエクスプロレーションシステム / NASA AES) の CO₂ 除去システム成熟化のファンクショナルエリアマネージャです。彼はコロラド大学で宇宙工学の学士号を、アラバマ大学で機械工学の修士号を取得しました。COMSOL Multiphysics® ソフトウェアを使用して吸着プロセスをシミュレーションする研究は、彼が現在取り組んでいる博士号論文の一部です。