

マルチフィジックスシミュレーションを用いた 研究成果の社会実装促進 ～マイクロ波化学プロセス分野での事例紹介～

Accelerating the Social Implementation of Research Outcomes via Multiphysics Simulation: Examples in Microwave Chemical Processing

西岡将輝^{1),2)}, 高橋隼永¹⁾, 小倉賢²⁾

Masateru Nishioka, Junei Takahashi and Masaru Ogura

1) 博(工) みなも株式会社 (〒989-3127 仙台市青葉区愛子東4-22-3, E-mail: masateru_nishioka@minamo.science)

2) 東京大学 教授

Visualization of invisible electromagnetic field distributions is a crucial role of simulation for explaining merits and technical challenges for developing microwave applications. At “minamo corporation”, simulation is integral across various phases, including equipment design, creating explanatory materials for users, and visualizing results. By making complex electromagnetic phenomena understandable, simulation significantly contributes to the social implementation of microwave utilization technology. This presentation will highlight how such visualization and user-friendly simulation tools empower researchers and facilitate the broader adoption of microwave technology in diverse applications.

Key Words: *Electro-magnetic simulation, Multi-physics, COMSOL, COMSOL Compiler, Microwave chemistry.*

1. はじめに

著者は前職の産業技術総合研究所において、2004年より化学プロセスへのマイクロ波利用に関する研究を行ってきた。著者は前職の産業技術総合研究所において、2004年より化学プロセスへのマイクロ波利用に関する研究を行ってきた。当該技術はマイクロ波化学反応装置として凌和電子株式会社から2014年に市販を開始し、大学や民間企業の研究開発部門において導入が進んできた。一方で、マイクロ波照射は対象物質の物性値（誘電率、透磁率、導電率）によって電磁波分布が大きく変わるため、誰でも簡単に再現性の良いマイクロ波実験ができるわけではないという課題があった。

そこで著者は当該成果の社会実装を推進する一つの形として、「みなも株式会社」を2022年に設立し、民間企業として活動を始めた。具体的には、①マイクロ波導入メリットの紹介（プロジェクト化支援）、②実証研究に必要なマイクロ波研究環境の構築（実証試験装置設計・製造、カスタマイズ）、③実証研究から得られた結果の解析と実用化時に必要なデータの整理（研究／解析補助・研究受

託）、④実用化に向けての設備投資等の検討（技術移転コンサル）、⑤運用時のトラブル対策支援（運用時コンサル）の業務を実施している。

これらの業務においては、目に見えない電磁波の照射状況を、ユーザにわかりやすく理解していただくことが重要であり、電磁界解析をはじめとしたシミュレーションを多用している。特に、化学プロセスでは、照射対象が電磁波と相互作用し、温度上昇や、状態変化（固相、液相、気相）や物質変化（化学反応）など、大きく性質が異なるため、伝熱解析、流体解析、反応工学など複数の支配方程式にまたがるシミュレーション（マルチフィジックスシミュレーション）の実施に迫られることも多い。本稿では、みなも株式会社を運営するなかで、マルチフィジックスシミュレーションの活用事例を紹介する。

2. 化学反应用マイクロ波加熱装置

(1) 化学反应用マイクロ波加熱装置の特徴開発

前職で開発したマイクロ波装置は、キャビティと呼ば



図-1 マイクロ波化学反応装置

れるマイクロ波照射空間を円筒型にすること、円筒の内径をマイクロ波の波長をもとに設計し共振現象を利用する技術を用いている[1]。図-1は当該技術をもとに凌和電子株式会社により市販した化学反应用マイクロ波加熱装置である。手前のキャビティは内部が円筒状の空洞になっており、円筒の中心軸に沿って貫通するようチューブ状の反応管を設置できるようになっている。

(2) 反応装置内の電磁界分布シミュレーション

円筒内に励起できる共振状態の電界強度分布をCOMSOL Multiphysics™[2]を用いて可視化した結果を図-2に示す。照射する周波数によって、電界強度分布が大きく異なることがわかる。この中で、特に TM_{010} と呼ばれる共振状態では、円筒中心軸の電界強度が高く、中心軸に沿っては均一な電界強度分布を有していることがわかる。この周波数（共振周波数）は、反応対象物質の誘電率によって変化する。図-1の装置では誘電率による共振周波数変

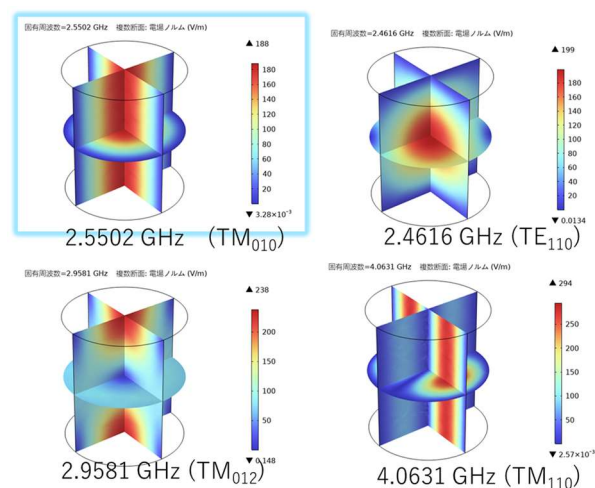


図-2 電界強度分布のシミュレーション結果

化を認識し照射するマイクロ波の周波数を自動的に追従させる機能を有している。これまで、この装置を用い、ナノ粒子合成[3]、水素製造[4]、有害物質分解[5]などの化学反応に応用してきた

(3) アプリ化によるユーザへのシミュレーション環境の提供

本装置を利用したマイクロ波化学反応の研究が、多くのユーザに利用していただけるよう、装置の形状をモデリングしたシミュレーション環境を提供するサービスを行っている。マイクロ波化学反応を解析するには、反応対象物がどのような電磁界にさらされているかが、大きな関心となる。幸い図-1の装置では、反応管に沿って電界が集中するようフィードバック制御が行われているため、

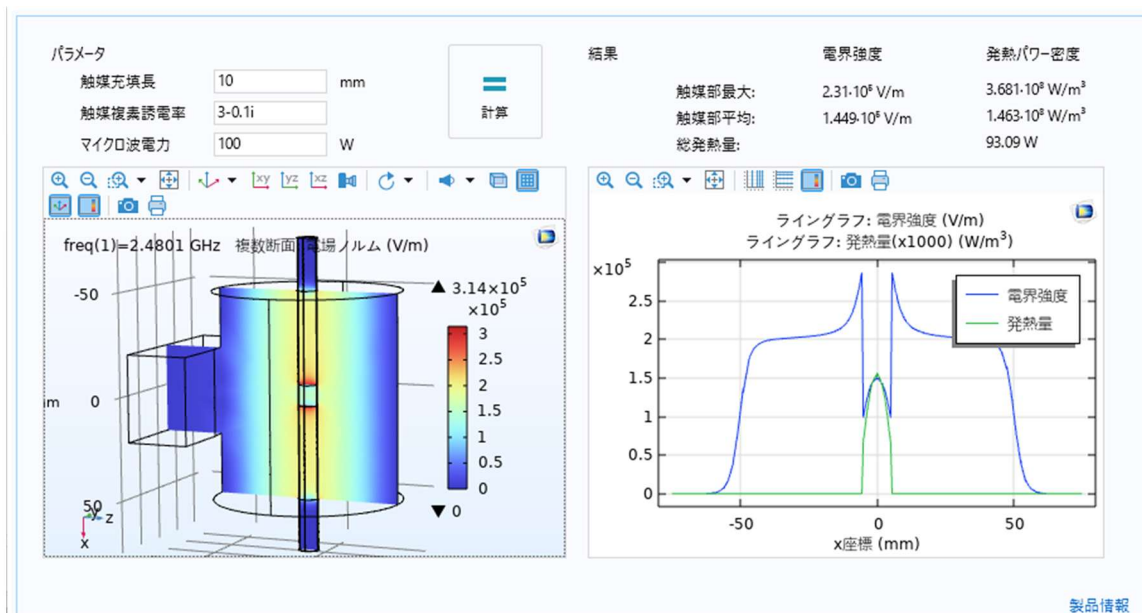


図-3 マイクロ波化学反応装置内の電界強度定量・可視化アプリ

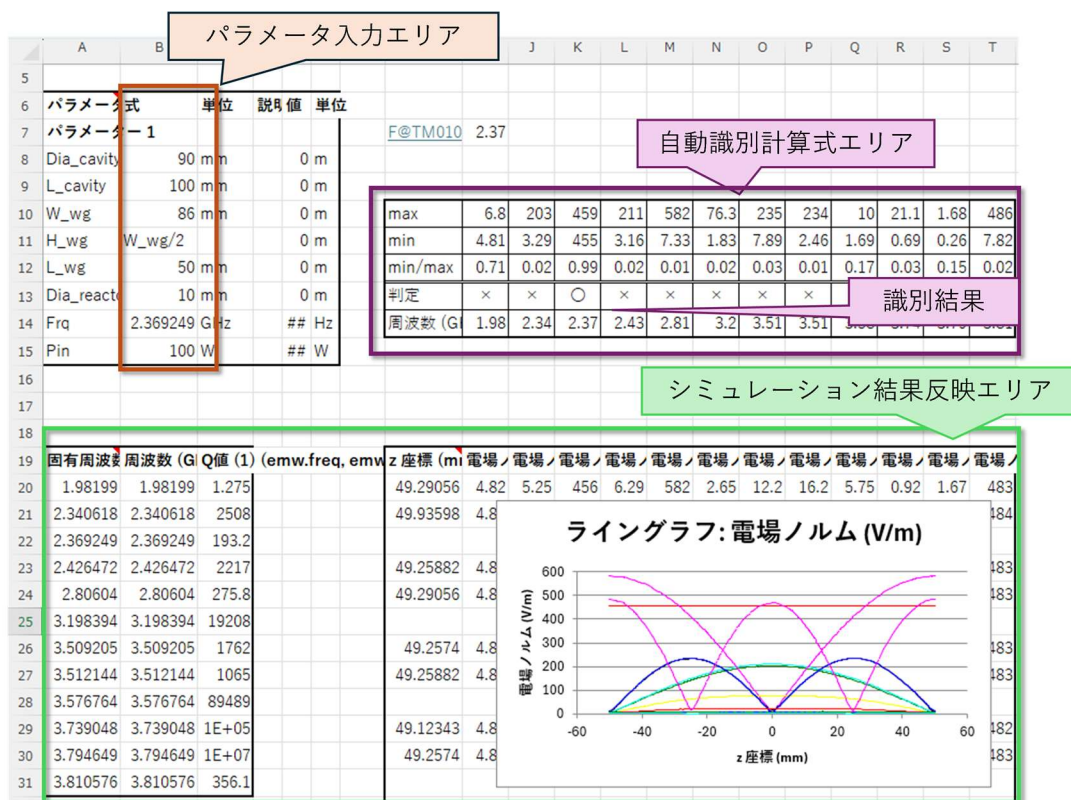


図-4 Excel 連携の活用例（共振モードの自動識別）

電界強度の推測が可能となる。そこで、図-1装置に対し、実験中の反応管内部の電界強度 (E ; V/m) や発熱パワー密度 (Q ; W/m³)を定量化、可視化するツール(PC用アプリケーション)を提供している(図-3)。これは、図-1の装置を運用する際に得られるパラメータ値を入力すると、反応管内に設置した触媒部分の電界強度、発熱パワー密度の数値解と、キャビティ内の電界強度分布や、反応管中心軸に沿った電界強度、発熱パワー密度のライングラフを表示できる。実験結果で得られる、反応率と本アプリの結果を照らし合わせることでマイクロ波による化学反応の制御性など解析が行える。本ツールは、COMSOL Compiler™により、実行形式のアプリとして提供しており、ユーザはシミュレーションソフトを購入することなく、図-1装置の解析が可能である。

3. 外部ツールの活用

(1) EXCEL連携による共振モードの探索

シミュレーションの操作は慣れるまでに時間がかかるため、身近なツールからシミュレーションが実行できる環境があれば活用が広がる。COMSOL Multiphysics™にはExcelから操作できるLive link for Excel™モジュールが提供されており、これを活用した事例を紹介する。マイクロ波は図-2に示すよう、複数の共振モードが存在するため、シミュレーションを行う際どのモードになっているか電界分布を可視化し、あらかじめ目的とするモードになっている識別が必要となっている。人間は容易に認識できるが、シミュレーションソフト単体では容易

に識別できない。たとえば、週末などの複数のパラメータ条件で自動バッチ計算を行う際には、人の介入なしに識別できると便利である。そこで、Live link for Excel™モジュールを用いて、モードの自動識別を実現した。図-4にその例を示す。これは、Excelのセルに計算パラメータを入力すれば、パラメータをもとに得られたシミュレーション結果は自動的にExcelのシートに反映されることを利用し、Excelの表計算機能(最大、平均、標準偏差等)により共振モードの自動識別を行うシートである。自動識別の結果をもとに後続の物理モデルシミュレーション(例えば 伝熱や化学反応モデル)を実行することで、人の介入無しに複数パラメータのマイクロ波化学反応シミュレーションのバッチ処理が実現できる。

4. マルチフィジックスシミュレーションを活用した技術移転活動

みなも株式会社では業務として①マイクロ波導入メリットの紹介(プロジェクト化支援)、②実証研究に必要なマイクロ波研究環境の構築(実証試験装置設計・製造、カスタマイズ)、③実証研究から得られた結果の解析と実用化時に必要なデータの整理(研究/解析補助・研究受託)、④実用化に向けての設備投資等の検討(技術移転コンサル)、⑤運用時のトラブル対策支援(運用時コンサル)を実施している。それぞれのフェーズでのマルチフィジックスシミュレーションの活用例を以下に列举する。

①プロジェクト化支援

- ・マイクロ波の特徴・技術課題のビジュアル資料
- ・提案技術の電磁波分布の可視化（図-2など）
- ・マイクロ波による時間短縮，省エネルギー効果やCO₂削減量の見積など，プロジェクト実施判断に必要な定量データの導出

②実証試験機装置設計・製造，カスタマイズ

- ・装置設計に必要となる各種寸法の導出
- ・装置の仕様決定（マイクロ波電力等）
- ・測定機器選定（精度の見積等）
- ・周辺装置の検討（電磁波漏洩等）

③研究／解析補助・研究受託

- ・実験結果の解析・定量化・可視化
- ・実験装置のシミュレーションアプリの提供（図-3等）
- ・プレゼン資料のビジュアル化

④技術移転コンサル

- ・装置設計に必要となる各種寸法の導出
- ・装置の仕様決定（マイクロ波電力等）
- ・前後工程との整合性（処理時間のマッチング等）
- ・法令順守への対応（電磁波シールド対策等）

⑤運用時コンサル

- ・異常前兆の検出（運用アプリの提供 図-3）
- ・異常原因の特定と状況の可視化

5. まとめ

目に見えない電磁波分布の可視化ができるシミュレーションは，マイクロ波利用技術の開発を進めるにあたって重要なツールといえる．マイクロ波化学反応装置をモデル化したアプリは，シミュレーション経験や環境がないユーザでも，実測が難しい電界強度等の定量的な評価が可能となり，実験現場での結果解析のツールとして利

用も期待される．みなも株式会社では，装置設計，ユーザへの説明資料作成，結果のビジュアル化など，様々なフェーズでシミュレーションを活用しており，マイクロ波利用技術の社会実装の推進に繋がっている．

参考文献

- [1] 産業技術総合研究所 プレスリリース、「金属ナノ粒子の連続合成装置を開発ーマイクロ波照射を最適化し、連続合成プロセスの実現に成功ー」, 2010/2/15.
https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2010/pr20100215_2/pr20100215_2.html
- [2] COMSOL Multiphysics™ v. 6.3. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
<http://www.comsol.com>.
- [3] Nishioka, M. et al., Continuous synthesis of monodispersed silver nanoparticles using a homogeneous heating microwave reactor system, *Nanoscale*, 3, 2621-2626, 2011.
DOI: [10.1039/c1nr10199d](https://doi.org/10.1039/c1nr10199d)
- [4] Sato, K, et al., Rapid control of hydrogen permeation in Pd membrane reactor by magnetic-field-induced heating under microwave irradiation, *International J. of Hydrogen Energy*, Vol. 46, 38, Pages 20213-20221, 2021
DOI: [10.1016/j.ijhydene.2020.02.147](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.147)
- [5] Ohnishi, T. et al., , Direct decomposition of NO on metal-loaded zeolites with coexistence of oxygen and water vapor under unsteady-state conditions by NO concentration and microwave rapid heating, *Catalysis Today*, Vol. 281, Part 3, Pages 566-574, 2017
DOI: [10.1016/j.cattod.2016.07.012](https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.07.012)