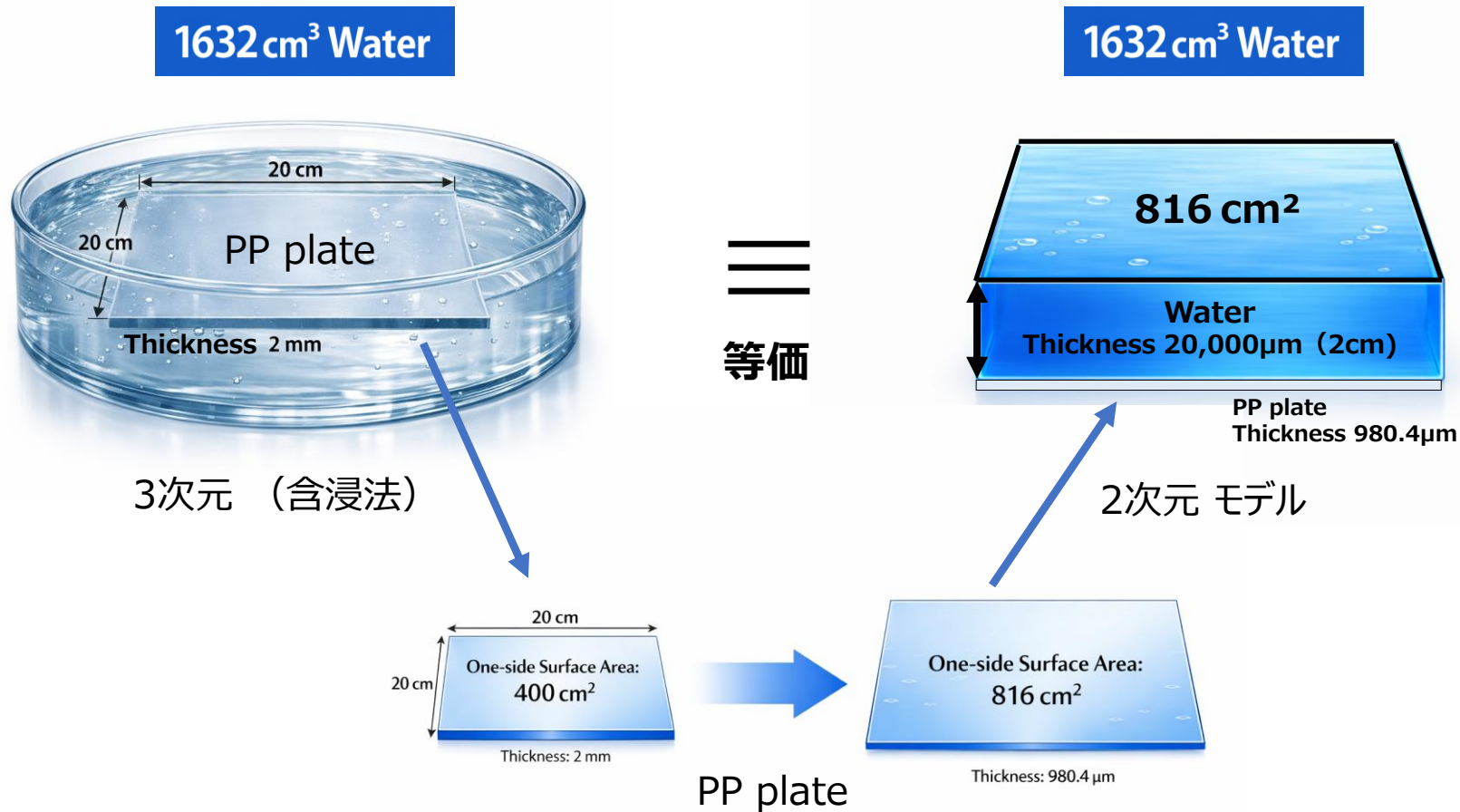


Repeated-Use は、飲料水に接触する製品を繰り返し使用した際に、製品から溶出する物質の濃度がどのように変化するかを評価するためのシミュレーションです。複数回の使用後に想定される蛇口での濃度（Ctap）を算出し、その値がEU規制値（MTCtap）を超えるかどうかを確認します。



本来は 3 次元の立体の中で拡散が起きていますが、移行量を決めているのは「厚み方向だけの動き」です。

そのため、3D の形をそのまま使わなくても、2 次元として『表面積』と『厚み』を正しく設定すれば、3 次元と等価な結果が得られます。

シミュレーションでは、この等価な「2 次元モデル」を用いて計算しています。

20×20 cm の PP プレートは表面が 400 cm² あります。含浸法では、水に触れるすべての面を接触面積として扱いますが、一般的なサンプルは非常に薄いため、側面の面積は無視できるほど小さく、通常は計算に含めません。しかし、今回のサンプルは厚みが 2 mm あるため、側面 4 本（合計 16 cm²）も接触面として考慮しています。その結果、表面 400 cm²、裏面 400 cm²、側面 16 cm² を合計し、接触面積は 816 cm² となります。

sml

Predictions

Temperature Profiles

Iso Non-Iso Step Modulated Shock Worldwide STANAG Customized **Repeated Use**

Isothermal Conditions

Temperature = 20 °C

ΔT = 20 °C

Number of Isotherms = 1

Final Temperature = 20 °C

Time Max 10 day

Without Statistics

Monte Carlo Runs

Number of Runs 10

Include Sobol Runs

Fast Distribution

Save... Load...

Number of steps for this output: 100

OK Cancel

Repeated useを選択

①の Predefined Cycles を選択すると、②水の温度域（Cold/Warm/Hot）を指定できます。
この事例では Cold を設定しています。
さらに、③ Product groups と ④ Dimensions を選択すると、それに基づいて自動的に Conversion Factor が決定されます。
最後に [OK] をクリックすると、シミュレーション結果（8ページ目）が表示されます。

Predictions

Temperature Profiles

Iso Non-Iso Step Modulated Shock Worldwide STANAG Customized **Repeated Use**

Repeated Use

User Defined Cycles **Predefined Cycles** Infinite Cycles

② Predefined Cycles: Cold

③ Product groups: E) Storage systems (reservoirs)

④ Dimensions: 1) In domestic installations, buildings, water volume < 10 l

Conversion factor CF: 4 d/dm

Tests according to Commission Implementing Decision (EU) 2024/368

Without Statistics
Monte Carlo Runs
Number of Runs: 10
Include Sobol Runs
Fast Distribution

Save... Load...

Number of steps for this output: 100

OK Cancel

5

Conversion Factor（換算係数）詳細は次ページで

Conversion Factor (換算係数) とは

Conversion Factor とは、試験条件と実際の使用条件の違いを補正するための係数です。

実際の使用では、水との接触時間が長くなり、接触する表面積も大きくなります。
そこで、試験で得られた濃度に Conversion Factor を掛けて実使用時の濃度 (Ctap) に換算します。

パイプの場合、内径が小さいほど水に対する表面積の割合 (Surface / Volume) が大きくなるため、Conversion Factor も大きくなります。

次のページでは、EU 2024/368 Annex I に掲載されている Conversion Factor の一覧を示しています。

Table 5

Product groups and their conversion factor (CF)

	Product group	CF (in d/dm)
A	Pipes and pipe linings	
1	ID < 80 mm (domestic installations, buildings) ⁽¹⁾	20
2	80 mm ≤ ID < 300 mm (service piping)	10
3	ID ≥ 300 mm (mains piping)	5
B	Fittings, ancillaries ⁽²⁾	
1	ID < 80 mm (domestic installations, buildings)	2
2	80 mm ≤ ID < 300 mm (service piping)	1
3	ID ≥ 300 mm (mains piping)	0,5
C	Components of fittings, ancillaries ⁽²⁾	
1	ID < 80 mm (domestic installations, buildings)	0,2
2	80 mm ≤ ID < 300 mm (service piping)	0,1
3	ID ≥ 300 mm (mains piping)	0,05
D	Small Components of fittings, ancillaries ⁽⁴⁾	
1	ID < 80 mm (domestic installations, buildings)	0,02
2	80 mm ≤ ID < 300 mm (service piping)	0,01
3	ID ≥ 300 mm (mains piping)	0,005

E	Storage systems (reservoirs)	
1	In domestic installations, buildings, water volume < 10 l	4
2	In domestic installations, buildings, water volume ≥ 10 l	2
3	In water supply	1
F	Components of storage systems ⁽²⁾	
1	In domestic installations, buildings, water volume < 10 l	0,4
2	In domestic installations, buildings; water volume ≥ 10 l	0,2
3	In water supply	0,1
G	Small Components storage systems ⁽⁴⁾	
1	In domestic installations, buildings; water volume < 10 l	0,04
2	In domestic installations, buildings; water volume ≥ 10 l	0,02
3	In water supply	0,01

⁽¹⁾ If from a series of different diameter pipes made from the same pre-product under the same manufacturing process (a so-called product family) the smallest diameter pipe is assessed and approved, then the whole series of different diameter pipes is allowed to be used for all application areas within the product group without further testing.

^(2,3,4) Components (sum of components made of same main polymer or same composition) of assembled products with a wetted surface fraction

⁽²⁾ ≥ 10 % of the assembled product

⁽³⁾ < 10 % of the assembled product

⁽⁴⁾ < 1 % of the assembled product

Conversion Factor (略 : CF、換算係数) は、試験条件を実際の使用条件に換算するための係数です。
EU 2024/368 Annex I / Table 5 に製品グループごとの固定値として定義されています。

例 : PP plate (Example 1) → Group E (<10) → CF = 4 d/dm (本例ではこの値を使用)

Article	<input type="checkbox"/> PP	<input checked="" type="checkbox"/> Contact Me...
	POLYPROPY...	Water
Thickness (μm)	980.4	2E04
<input checked="" type="checkbox"/> 1. BHT	2,6-DI-tert-B...	8.527E05
		193.3

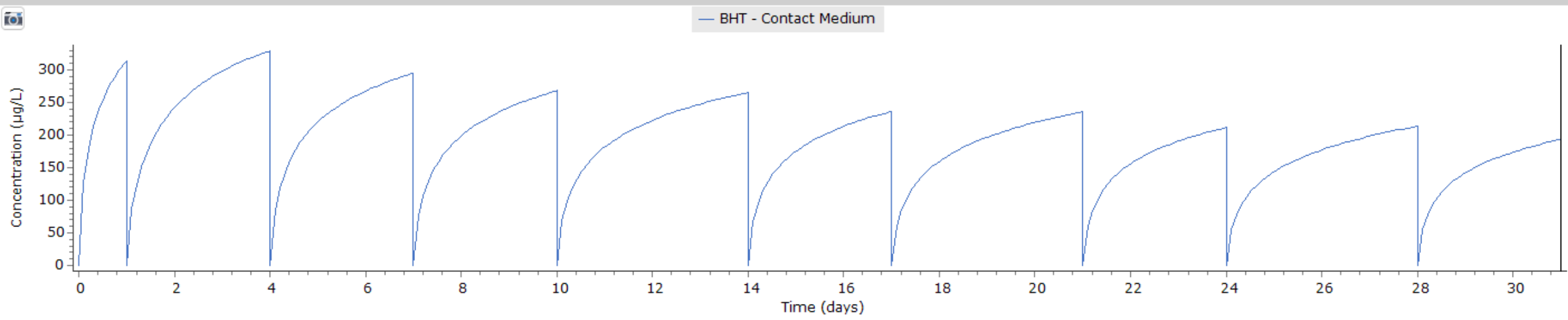
Concentration | Diffusion Coefficient | Partition Coefficient | Solubility

Legislation (COMMISSION IMPLEMENTING DECISION (EU) 2024/368)

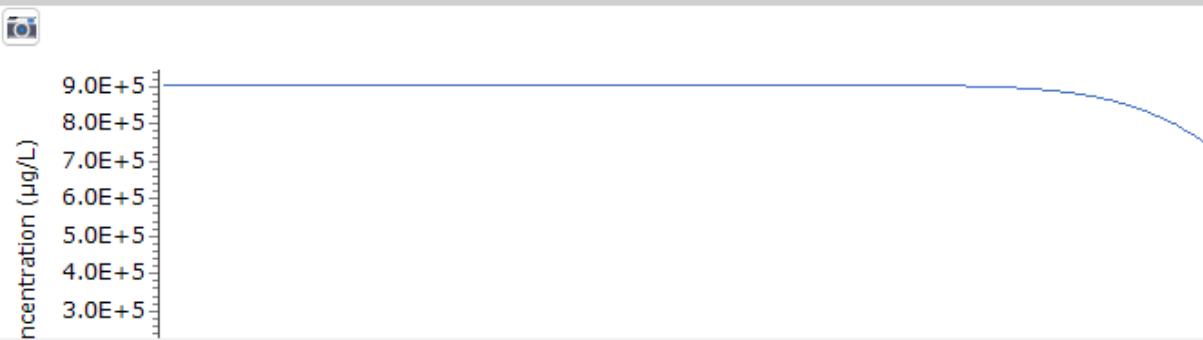
Migrant	Ctap 10 days	Ctap 21 days	Ctap 31 days	Limit MTCtap	Ctap < MTCtap	Ctap trend (10-21 Days)	Ctap trend (21-31 Days)
BHT	71.619	47.168	51.557	150	Pass	Pass	Fail

Disclaimer: Conformity is indicated for the relevant substances with known MTCtap. All other substances are considered as 'unexpected substances' with a MTCtap of 1 μg/L.

c(t) - 31d_23°C - Repeated use predefined cold (23°C, 10 cycles, 31d)



c(x,t) - 31d_23°C - Repeated use predefined cold (23°C, 10 cycles, 31d)



シミュレーション画面には Ctap の結果が表示されます。

- Ctap : 製品 (配管・部品) からの溶出量を「蛇口での濃度」に換算した計算値
- MTCtap : EU が定める規制上限値 (これを超えると不適合)
※MTCtap は “Maximum Tolerable Concentration at the tap ” (蛇口での最大許容濃度) の略です。

詳しくは次ページで解析結果、判定方法について説明しています。

シミュレーション画面には Ctap の結果が表示されます。

- Ctap : 製品 (配管・部品) からの溶出量を「飲料水の濃度」に換算した計算値という意味です。
- MTCTap : EU が定める飲料水規制の規制上限値です。これを超えると不適合な飲料水といえます。

Ctap の判定は以下のように行います

① まず 10 日目で判定する

$Ctap (10 \text{ 日目}) \leq MTCTap \rightarrow \text{適合 (Pass)}$

今回の例では、規制値 $MTCTap = 150 \mu\text{g/L}$ に対し、シミュレーション結果は 10 日目で $71.619 \mu\text{g/L}$ となり、適合 (Pass) です。

② 10 日目で不適合の場合、延長試験 (31 日目) へ (10 日目で MTCTap を超えた場合 \rightarrow 31 日目まで試験を継続)

$Ctap (31 \text{ 日目}) \leq MTCTap \rightarrow \text{適合 (Pass)}$ Δ 最終判定には増加傾向の確認が必要です。

10 日目の Ctap が判定対象となり、この値が MTCTap を超えて不適合となった場合は、試験を 31 日目まで延長し、31 日目の Ctap に基づいて最終判定を行います。

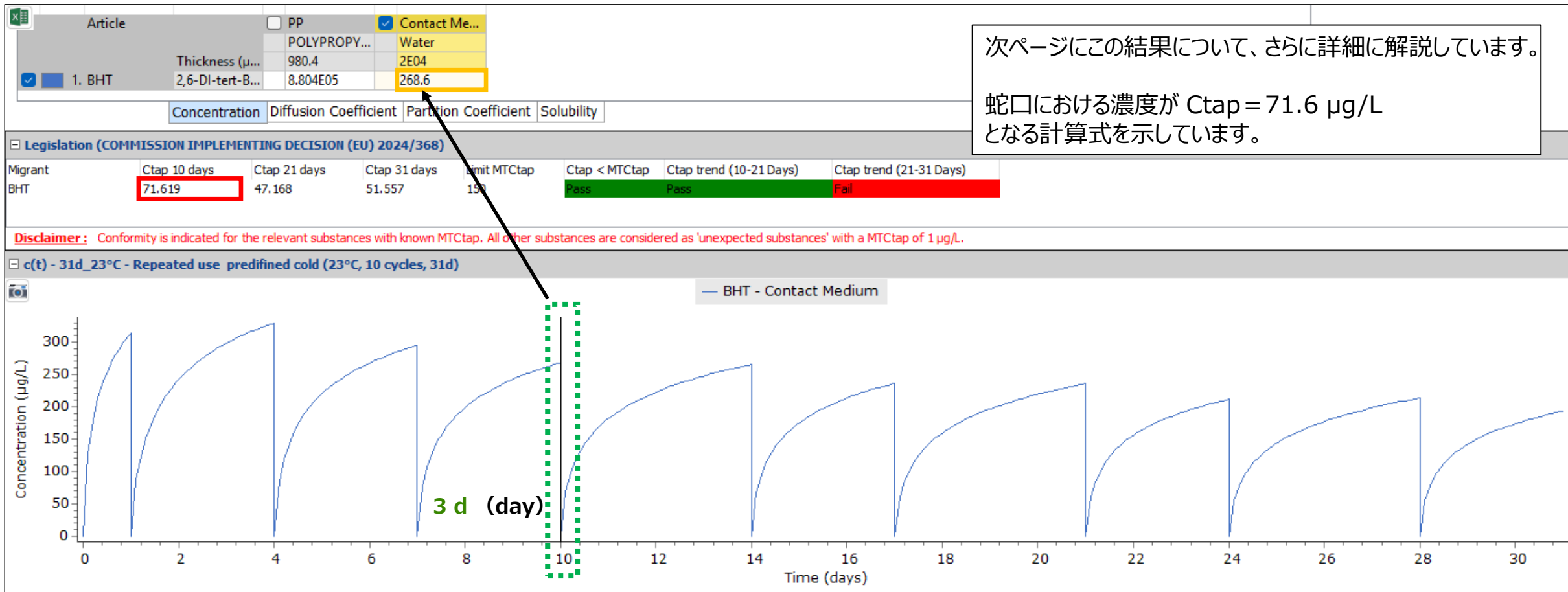
EU 2024/367 Annex I には「**Ctap が時間とともに増加する傾向を示さないこと**」という要件があります。
しかし、増加傾向 (トレンド) の具体的な評価方法については規制上明確に定義されていません。

そのため、最終的な判定のために以下の方法で増加傾向を判断します。

- 10 日目で判定する場合 : 10 日~21 日の Ctap の変化を確認
- 31 日目で判定する場合 : 21 日~31 日の Ctap の変化を確認

例えば、31 日目の Ctap が MTCTap を下回っており数値上は適合していても、21 日目より高い値を示している場合は「増加傾向」が認められるため、不適合となる可能性があります。

※ 例外があり、該当する移行期間の Ctap が MTCTap の 1/10 未満であれば、このようなトレンド評価は不要になります。



次ページにこの結果について、さらに詳細に解説しています。
 蛇口における濃度が $C_{tap} = 71.6 \mu\text{g/L}$ となる計算式を示しています。

C_{tap} の算出はすべてSML7.0ソフトウェアが自動で行うため、計算式は覚える必要はありませんが、概念の理解のために説明します。

- 濃度 : 268.6 μg/L (試験で得られた10日目の濃度)
- 補正係数 CF : 4 d/dm
- 最後の移行時間 t : 3 d (day) ※ 8~10日目
- 表面積/体積比 (S/V) : 5 dm⁻¹

$$C_{\text{tap}} = \frac{4 \frac{\text{d}}{\text{dm}} \times 268.5 \frac{\mu\text{g}}{\text{l}}}{5 \text{ dm}^{-1} \times 3 \text{ d}} = 71,6 \mu\text{g/l}$$

接触媒体 (水) の体積 (Volume of Contact Medium) : 1,632 cm³

接触表面積 (Contact Surface) : 816 cm²

EU規則では、面積や S/V をすべて「dm (デシメートル)」表記するルールがあります。

表面積/体積比 (S/V) をわかりやすく算出するためには、まず、接触表面積 816 cm²を「dm² (平方デシメートル)」

接触媒体 (水) の体積 : 1,632 cm³を「dm³ (立方デシメートル)」に変換する必要があります。

※この“dm”は本来「長さ」ですが、EU独自の簡略表記として“面積 (dm²)”の意味で使われることがあります。

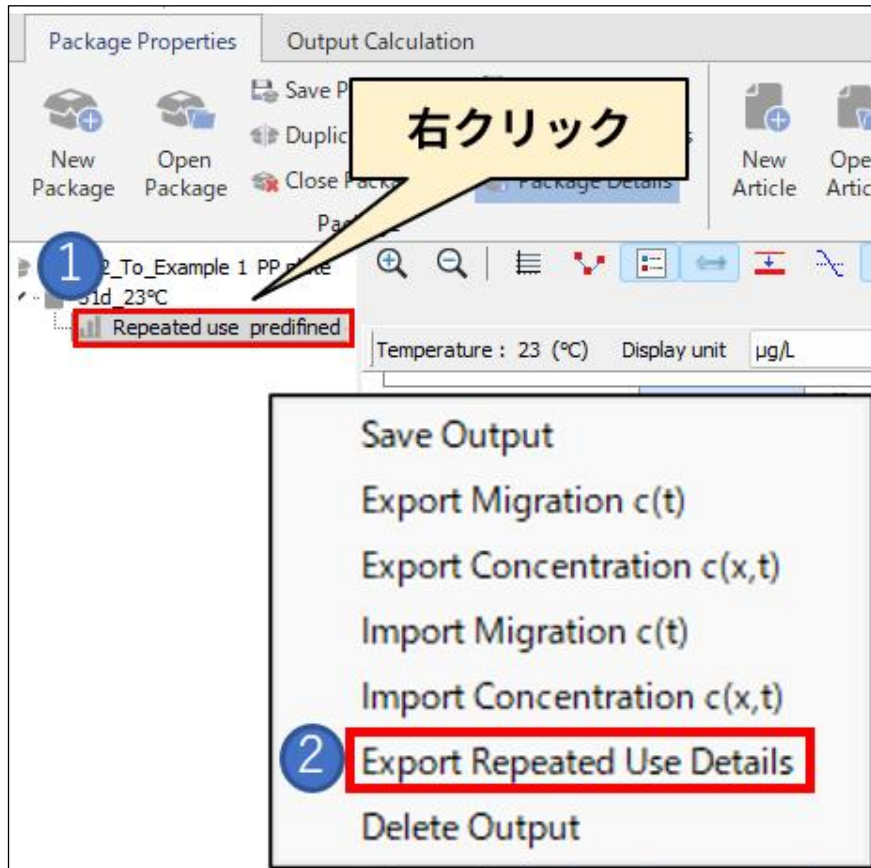
接触表面積 : 816 cm² → 8.16 dm²

接触媒体 (水) の体積 : 1,632 cm³ → 1.632 dm³

表面積/体積比 S/V : 8.16 dm² / 1.632 dm³ = 5 dm⁻¹ となります。

表面積/体積比 S/V は「1リットルの水に対して、何 dm² の材料表面が接触しているか」を表す値になります。

つまり、5 dm⁻¹ とは 1 L の水に対して 5 dm² (500 cm²) の表面積が接触していることとなります。



SML Ver.7.0は、繰り返し使用（Repeated-use）条件における移行モデルの精度を確認できます。

②の Export Repeated Use details をクリックすることにより、シミュレーション終了時の質量偏差を計算した.txt ファイルが出力可能です。

次ページに示すデータは、PPプレート中の BHT が時間とともにどれだけ溶け出すかを計算したものです。

Time(days)	m(PP)(mg)	m(Contact Medium)(mg)		c(Contact Medium)(mg/kg)		c(Contact Medium)(mg/l)		c(Contact Medium)(microg/l)		c(Conta
		m(Contact Medium)(mg)(sum)								
0E+0	72.4005792	0E+0	0E+0	0E+0	0E+0	0E+0	0E+0	0	0E+0	
1E+0	71.8885351035	5.12044097E-1	3.1375251041E-1	3.1375251041E-1	313.7525104147	6.2750502083E-2	6.2750502083E+1	-0.5120440985	5.12044097E-1	
4E+0	71.3515871449	5.36894796004E-1	3.2901223042E-1	3.2901223042E-1	329.0122304178	6.5802446084E-2	6.5802446084E+1	-1.0489920551	1.048992057	
7E+0	70.8694896617	4.8209748455E-1	2.9540287043E-1	2.9540287043E-1	295.4028704327	5.9080574087E-2	5.9080574087E+1	-1.5310895383	1.5310895416	
1E+1	70.4311843245	4.3830533853E-1	2.6856944763E-1	2.6856944763E-1	268.5694476274	5.3713889525E-2	5.3713889525E+1	-1.9693948755	1.9693948801	
1.4E+1	69.997554652	4.3362967419E-1	2.6570445722E-1	2.6570445722E-1	265.7044572226	5.3140891445E-2	5.3140891445E+1	-2.403024548	2.4030245543	
1.7E+1	69.6118418633	3.8571279012E-1	2.3634362139E-1	2.3634362139E-1	236.3436213942	4.7268724279E-2	4.7268724279E+1	-2.7887373367	2.7887373444	
2.1E+1	69.2269524396	3.8488942542E-1	2.3583910871E-1	2.3583910871E-1	235.839108714	4.7167821743E-2	4.7167821743E+1	-3.1736267604	3.1736267698	
2.4E+1	68.8813346577	3.4561778317E-1	2.1177560243E-1	2.1177560243E-1	211.7756024296	4.2355120486E-2	4.2355120486E+1	-3.5192445423	3.519244553	
2.8E+1	68.5325901936	3.4874446584E-1	2.1369146191E-1	2.1369146191E-1	213.6914619144	4.2738292383E-2	4.2738292383E+1	-3.8679890064	3.8679890188	
3.1E+1	68.2170611457	3.1552904917E-1	1.9333887817E-1	1.9333887817E-1	193.3388781708	3.8667775634E-2	3.8667775634E+1	-4.1835180543	4.183518068	
Loss of migrant mass by layers at end of simulation : -4.1835180543 (mg)										
Gain in migrant mass by simulant at end of simulation : 4.183518068 (mg)										
Mass deviation at end of simulation : -3.2728867295E-7 (%)										

Loss of migrant mass by layers at end of simulation : -4.1835180543 (mg)
Gain in migrant mass by simulant at end of simulation : 4.183518068 (mg)
Mass deviation at end of simulation : -3.2728867295E-7 (%)

添付のテキストデータは、PPプレートから BHT が水へ移行するシミュレーション結果を示しています。
Version 7.0では、繰り返し使用 (Repeated-use) シミュレーションの数値精度を直接検証できる機能が追加されました。
本バージョンでは、シミュレーション終了時に材料側の質量減少量とシミュラント側の質量増加量を比較し、質量収支のズレ (mass deviation) を自動的に計算して txt 形式で出力が可能です。

Repeated-use シミュレーションは計算ステップが多く、通常は数値誤差が蓄積しやすい条件ですが、Version 7 では誤差がほぼゼロに近い値に収まり、質量収支が良好に維持されていることが示されました。
これらの結果は、本バージョンの数値計算が非常に安定しており、高い数値精度を達成していることを明確に示しています。