

事業区分	経常研究(基盤)	研究期間	令和3年度~令和5年度	評価区分	事前評価
研究テーマ名 (副題)	マルチスケール概念に基づく膜透過シミュレーションの研究 (膜分離プロセス向上のための解析)				
主管の機関・科(研究室)名	研究代表者名	工業技術センター・工業材料科 重光保博			

## &lt;県総合計画等での位置づけ&gt;

長崎県総合計画 チャレンジ2020	戦略7 たくましい経済と良質な雇用を創出する (2) 地域経済を支える産業の強化 企業の技術力向上
ながさき産業振興プラン	基本指針(1) 生産性/競争力を高める 施策の柱 技術力の向上 重点施策(ア) 工業技術センター及び窯業技術センターによる県内企業 の技術力向上支援と産学官連携による研究開発の支援

## 1 研究の概要

研究内容(100文字)	
マルチスケールシミュレーション(マイクロ分子レベルからマクロ流体レベルを横断するシミュレーション)を活用して膜透過現象を解析し、膜分離プロセスの技術改善を行う。水処理関連技術の県内企業と連携して、マルチスケールシミュレーション知見を活用するとともに、シミュレーション技術全般の底上げを支援する。	
研究項目	マルチスケールシミュレーション基盤環境の整備 マルチスケールシミュレーションの実装と有効性検証 マルチシミュレーションによる県内企業の技術問題解決と市場開拓

## 2 研究の必要性

1) 社会的・経済的背景及びニーズ
シミュレーション技術は材料設計・創薬・半導体・乗用車といった製造業全般にわたって着実に浸透し、将来のものづくりにおいて必要不可欠な技術と考えられている。長崎県は、その地理・産業構造特性に沿った海洋関連工学や再生可能エネルギー分野の振興が推進中であり、材料物性解析・構造物解析・流体解析等の諸分野で最先端のシミュレーション技術の活躍が期待されている。
本研究では、海洋・水処理分野にターゲットを絞り、従来のシミュレーション手法では解析が困難である膜分離プロセスの解析に取り組む。濾過・海水淡水化技術は日本が技術的強みを有する分野であるが、他の化学プラントと比較して、膜分離の動作機序は不明な部分が多く、膜材料やプラント設計は各社の経験的ノウハウに左右されているのが現状である。マルチスケールシミュレーションの活用によって、集積経験知としての膜分離技術を体系化し、高性能な濾過・海水淡水化装置の実現につなげる。
2) 国、他県、市町、民間での実施の状況または実施の可能性
マルチスケールシミュレーションの基礎技術およびソフトウェア開発は大学や国立研究所で進んでいるが、現状では普及段階に至っていない。たとえば九州地区においては、福岡・熊本・大分・佐賀の各公設試で汎用シミュレーション技術は導入済であるが、シミュレーション技術の高度化は行っていない。長崎県においては、他県に先駆けて高度なマルチスケールシミュレーション技術を開発導入し、水処理関連産業・海洋再生可能エネルギー産業の県内での展開が望まれる。

## 3 効率性(研究項目と内容・方法)

研究項目	研究内容・方法	活動指標	R					単位
			3	4	5			
ハードウェア設置・ソフトウェア導入設定		計算環境構築	目標	1	1			件
			実績					
アルゴリズム考案・ソフトウェア実装・膜透過現象のテスト計算		ソフト開発	目標		1	1		件
			実績					
膜分離プロセスの改善および新製品開発の支援		技術支援	目標	2	3	3		件
			実績					

1) 参加研究機関等の役割分担

工業技術センター； シミュレーション構築・実装・実行、各参画機関との連携調整  
 学術機関(東大生研、長崎大、大阪大、大分大)； シミュレーションの学術基礎・応用技術の開発  
 国立研究機関(理化学研究所)； スーパーコンを用いた大規模シミュレーションの技術検討  
 県内企業・県外企業； シミュレーションを活用した水処理システムの開発・新規膜材料の開発

2) 予算

研究予算 (千円)	計 (千円)	人件費 (千円)	研究費 (千円)	財源			
				国庫	県債	その他	一財
全体予算	13,676	7,176	6,500				6,500
3年度	4,892	2,392	2,500				2,500
4年度	4,392	2,392	2,000				2,000
5年度	4,392	2,392	2,000				2,000

過去の年度は実績、当該年度は現計予算、次年度以降は案  
 人件費は県職員人件費の単価

(研究開発の途中で見直した事項)

4 有効性

研究 項目	成果指標	目標	実績	R	R	R	得られる成果の補足説明等
				3	4	5	
	シミュレーション システム構築	2件					分子動力学解析用専用計算機の開発 膜分子シミュレーション用ソフトの開発
	シミュレーション 関連の対外発表・特許	4件					対外発表、特許出願
	県内企業への技 術支援活動	2件					膜分離技術開発支援、国プロ共同申 請・推進

1) 従来技術・先行技術と比較した新規性、優位性

従来の CAE (Computer Aided Engineering)シミュレーション技術は、構造体・流体・材料が独立して解析されてきた。そのため、構造力学・流体力学・化学的劣化が複雑にからむ現象、たとえば潮流発電・化学プラント・触媒・リチウム電池といった事象のシミュレーションは困難であった。本研究で導入するマルチスケールシミュレーション技術は、膜分離プロセスは分子レベルのマイクロシミュレーション、プラント流路プロセスは CAE マクロシミュレーションと、それぞれの領域をフレキシブルにカバーすることで、解析精度の向上を狙うものである。

プラント流路プロセス解析については県内水処理企業との共同研究を通じて水処理性能の定性的予測を行った実績があり、分子シミュレーションに関しては学術論文・競争的資金獲得等のエビデンスを有している。本研究では、両技術を連携して、従来では実現困難であった膜透過シミュレーションの実現をねらう。

2) 成果の普及

研究成果の社会・経済・県民等への還元シナリオ

社会的還元： 連成シミュレーション技術を開発することで、従来では予測が困難であった複雑現象(構造変形・流れ・熱伝導・化学反応が同時進行する対象)を解析することが可能となる。

経済的還元： マルチスケールシミュレーションの県内関連企業への普及支援を通じて、県内解析ニーズの確保・県外解析ニーズへの積極的進出に貢献する。また、関連ソフトウェア技術を商用化することにより、ビジネス展開を図る。

研究成果による社会・経済・県民等への波及効果(経済効果、県民の生活・環境の質の向上、行政施策への貢献等)の見込み

県内企業数社にマルチスケールシミュレーション技術を導入促進し、県外からの解析受注件数を増やすことを狙う。

(研究開発の途中で見直した事項)

種類	自己評価	研究評価委員会
事前	<p>(2年度) 評価結果 (総合評価段階: S )</p> <p>・必要性 S 長崎県では、海洋関連工学・再生可能エネルギー分野の発展が推進されており、シミュレーション構造解析・流体解析は重要な役割を果たす。シミュレーション解析を受託ビジネスとする県内関連企業は、このような県内市場の確保に加えて、県外市場への積極的な発展を実現するため、従来の技術では解析困難な複雑事象を扱うことができる高度なシミュレーション技術を必要としている。日進月歩で進歩しているシミュレーション技術の競争力維持の観点からも必要性は高い。</p> <p>・効率性 S シミュレーション技術の3層(材料、構造、流体)に関して、産学官から各専門家が参加する。技術強化・県内企業支援の両面に対応できる研究開発チームを構築しており、効率的な取組が期待できる。</p> <p>・有効性 A 3層を統合した連成シミュレーション技術を開発・導入することで、他県が未だ追従できない複雑事象の解析を可能とする。講習会・セミナーを通じて、高度な連成シミュレーション技術の県内企業への普及を後押しすることで、技術競争力の向上が期待される。</p> <p>・総合評価 S 従来のシミュレーション技術では解析困難な複雑事象に対して、マルチスケールシミュレーション技術による解析を実現する。新たな解析ニーズの掘り起こしを通じて、県内解析企業の県内市場確保・県外市場獲得に貢献することが期待される。</p>	<p>(2年度) 評価結果 (総合評価段階: A )</p> <p>・必要性 A 本研究の目的は膜分離プロセスの解明を目的としているが、非常に高度なシミュレーション技術である。シミュレーション構造解析、流体解析のニーズはエネルギー分野、海洋分野等で必要である。</p> <p>・効率性 A 基礎研究としては有用で、材料、構造、流体の連成シミュレーション技術を融合し同時並行の解析を実施することにより効率性が高まる。</p> <p>・有効性 A 水処理における膜分離のニーズは高く、その問題点解決に有益なシミュレーションといえる。またその技術が他の研究に応用できる可能性もあることから有効性は高いと判断できる。</p> <p>・総合評価 A 研究としては有益であり、様々な膜分離の問題解決に貢献できる可能性がある。材料、構造、流体の連成シミュレーションにより機能性膜透過シミュレーションが可能となり、開発した手法によりエネルギー分布、海洋分野にもシミュレーション適用が広まる。</p>
	対応	<p>対応</p> <p>膜分離に関する基礎プロセス解明と並行して、水処理プラントの効率化・新商品開発に向けたアウトプットを意識しつつ、研究を推進する。</p>
	(年度) 評価結果	(年度) 評価結果

途中	(総合評価段階: ) ・ 必要性 ・ 効率性 ・ 有効性 ・ 総合評価	(総合評価段階: ) ・ 必要性 ・ 効率性 ・ 有効性 ・ 総合評価
	対応	対応
事後	( 年度) 評価結果 (総合評価段階: ) ・ 必要性 ・ 効率性 ・ 有効性 ・ 総合評価	( 年度) 評価結果 (総合評価段階: ) ・ 必要性 ・ 効率性 ・ 有効性 ・ 総合評価
	対応	対応