

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

研究課題名	グローバルマルチスケールモデルによる無機－有機－地圏環境の強連成評価
研究機関・部局・職名	東京大学大学院・工学系研究科・教授
氏名	石田 哲也

【研究目的】

本研究は、自然地盤および地下水流れから構成される広域地下空間と、様々な気象作用・大気環境の影響を受けるコンクリート構造物・セメント系人工インフラを、ミクロ～メゾ～マクロの各スケールで代表する物理化学モデルにより計算機上に再現し、地圏環境評価、CO₂ 地下貯留安定性評価、ならびに地上・地中インフラ施設の耐久性予測を一括して扱うグローバルマルチスケール解析統合モデルの提案を行うものである。具体的な方法論としては、補助事業者が15年来開発を続けてきた無機複合材料と構造のマルチスケール解析技術を基盤として、新たに有機生化学モデル、鉱物学/地球化学無機平衡・反応モデル、多孔体内熱エネルギー/物質輸送一般化モデル、ならびにマルチスケール気象環境作用モデルを開発し、ナノ～マイクロスケールで展開される微視的事象を出発点とした、数十～数百キロメートルの広域空間スケールを対象とする環境影響評価を行う。従来、各分野で個別に検討されてきた先端的知识をマルチスケール型モデルの形式で大規模解析プラットフォーム上において統合することで、土壌・地盤環境問題、二酸化炭素地下貯留評価、地下空間施設の高耐久化・核種バリア機能保持評価、社会基盤インフラ施設の長寿命化といった工学上の各種課題を一括して取り扱う手法の構築を目指すものである。各研究項目は以下のとおりである。

①まず広域地下環境に対する評価を行うために、鉱物学・地球化学に基づく無機平衡・反応モデル、多種共存イオン平衡・移動モデルの導入を行う。土壌汚染をもたらす重金属の安定性は、土壌内部のpHや酸化還元雰囲気、共存イオンの状態によって大きく左右される。したがって、様々な初期・境界条件のもとで重金属の挙動をシミュレーションするには、地球化学モデルの導入が必須である。したがって本研究課題の第一の柱として、無機一般の平衡、溶解、反応、沈殿を取り扱う数値モデルをシステムに実装することを目指す。ここで重金属による土壌汚染の代表例として、六価クロムに着目し、セメント硬化体ならびに地盤材料中の移動・平衡モデルの構築を重点的に取り組む。

②解析モデルの取り扱う対象空間スケールを、地圏・水圏・大気圏を含む数キロメートルオーダーに拡張した大規模計算アルゴリズムの開発を目指す。セメント系固化地盤・無機複合材料 ($10^{-9} \sim 10^{-4}$ [m] スケール) - コンクリート構造 ($10^{-3} \sim 10^1$ [m]) - 地圏、

水圏、大気圏を含む周辺環境（ $10^2 \sim 10^4$ [m]）の全てを実装可能な大規模数値システムへと拡張を図る。続いて、気象観測データと地形データを組み合わせた既存の数値気象モデルを活用し、コンクリート構造物への環境作用のモデル化について検討を行う。数百メートルから数キロメートルの空間領域で展開されるエアロゾル海塩粒子の大気拡散・沈降と構造物内部への作用・浸透についてモデル化を進めたい。

③二酸化炭素地下貯留施設の安定性を評価するために、超臨界 CO_2 の物性モデルを熱力学連成解析システムに導入し解析検討を行うとともに、超臨界 CO_2 環境におけるセメント系材料の劣化・変性現象に関する機構解明と物性変化（空隙構造、細孔溶液組成、圧縮強度等）について検討を行う。

④微生物による汚染土壌浄化プロセスを定量的に取り扱うために、微生物生化学/有機物分解反応モデルの導入を行う。汚染土の浄化（バイオレメディエーション）、有機物分解および微生物からの酸生成によるセメント系材料の劣化現象を取り扱うために、様々な菌体を対象とした実験的研究と微生物活動を記述するモデル開発および好気分解反応解析システムの構築を行う。さらに、微生物を活用した実フィールドでの適用を見据え、中・大規模実験による有機物分解反応実証試験を行う。

⑤地下空間における物質拡散・移流現象を評価するために、土粒子間液相・気相・イオン移動と、ひび割れを含むセメント硬化体中の物質移動について、両者を一括して評価するモデルの構築を行う。本研究では多孔体の幾何構造、移動場壁面との電氣的・物理的相互作用、ならびに様々な水頭・濃度勾配下での移流拡散則の構築に挑むものである。また構造物のひび割れを物質移動場の特性として与えるのではなく、ひび割れ発生そのものを追跡する手法の開発に取り組む。以上のモデルを駆使しながら、最終的な検証として様々な条件における地下インフラの性能評価解析を実施する。

【総合評価】

	特に優れた成果が得られている
	優れた成果が得られている
○	一定の成果が得られている
	十分な成果が得られていない

【所見】

① 総合所見

本研究課題は、物理化学モデルと生化学モデルに基づき、地球環境評価、二酸化炭素地下貯蓄安定性評価、地上・地中インフラ施設の耐久性予測を一括して扱うグローバルマルチスケール解析統合モデルの構築を目的としている。この統合モデルは世界に類のないシミュレーションを可能とすると評価できる。

しかしながら、採択時の研究計画書の研究目的の中に重要な研究項目として示されている「微生物生化学/有機物分解反応モデル」について、所期の目的どおりに実施されたとは思えない。また、本研究開始以前の項目として記載されている堆肥化プロ

セスに関するタイ・タマサート大学との共同研究が本研究課題でどのように進展したか、また目的であるバイオリメディエーションとどのように関連したのかも不明である。とくに、当初は様々な菌体を対象とした実験的研究を行うことになっていたと思われるが、そのような成果は報告書に見当たらない

このように、「微生物生化学／有機物分解反応モデル」の進展ならびに独自性が不明確であることから、「無機—有機—地圏環境の強連成評価」の視点から本モデルがどのように連成しているかが不明確と感じられる。

② 目的の達成状況

・ 所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

本研究課題の主題であるマルチスケール・マルチケモフィジックス数値解析プラットフォームの構築については、研究が順調に進捗し、所期の目的が達成されたと評価される。また、「六価クロムのコンクリート中での安定性と土中への拡散問題」、「二酸化炭素地下貯留施設の安定性評価」、「地中あるいは陸上構造物の飛来塩分に伴う塩害発生メカニズムの解明」等の個別のテーマについても具体的な目標が設定され、所期の目標が達成されたとと思われる。

一方、採択時の研究計画書では「微生物生化学／有機物分解反応モデル」が重要項目の一つとして位置づけられていた。しかし、この項目については中間報告でほとんど研究が行われていないと指摘した。その後、多少の研究を行ったようではあるものの、計画にあった様々な菌体を対象とした実験的研究などが行われた形跡がなく、「微生物生化学／有機物分解反応モデル」を研究項目として十分に実施し、論文発表などの新規性のある成果が得られたとは思えない。

また、共同研究先であるタイ・タマサート大学で行った研究成果が示されている。内容から判断するとこれは堆肥化である。当初の研究計画では、「これまで・・・堆肥化の開発を行ってきた。これに対して本研究ではバイオレメディエーションを対象とする」と記載してあり、堆肥化は過去の研究であり今回の研究対象とはなっていない。また、堆肥化とバイオレメディエーションは全く別のプロセスである。それにもかかわらず、堆肥化が今回の研究の成果として示されていることは不適切と思われる。

③ 研究の成果

・ これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が
(ある ・ ない)

・ ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が
(創出された ・ 創出されなかった)

・ 当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

一つのプラットフォーム上に、ナノスケールからキロメートルスケールをカバーする 20 の支配方程式、数十の材料化学、熱力学、地球化学、力学モデルを備え、それ

らの相互連成を考慮して、若材齢時の個体形成から、超長期の地圏環境を含む構造物の性能予測を可能とする本システムは先進的な技術と思われる。

材料組成、構造諸元、地盤条件、施工条件、環境条件などを入力するのみで、時々刻々変化する構造性能と地盤環境を予測しうる本システムは、検証と経験を蓄積すれば、社会基盤に関わる技術を変革する潜在力を有すると考えられる。

ただ、スケール横断的なだけでなく、物理プロセスから微生物プロセスまでを含むという当初の意欲的な発想が期待されたが、「微生物生化学／有機物分解反応モデル」部分が欠けていると思われることは期待外れである。

なお、超臨界 CO₂ に暴露したセメント系材料の圧縮強度が通常のものに比べ 2 倍強になることを副次的に見出した。これは新材料開発につながる可能性がある。

④ 研究成果の効果

・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

構造物の性能や地盤環境に対する相互に連成する多数の影響要因を取り入れたモデル、数値解析システムは国内外に無く、学術、技術の体系化に大きく貢献すると期待される。しかし、「微生物生化学／有機物分解反応モデル」部分が不十分であると思われる点は、今後の波及効果が限定されると考えざるを得ない。

また、本補助事業期間終了後も作成した数値解析プラットフォーム構成要素の高精度化や適用範囲の拡張のため、解析結果と実現象との整合性の検証を積み重ねていく作業を行う必要があると考えられる。これが首尾よく進み、高精度化が実現されれば、社会資本形成にかかわる構造物の社会的および経済的な諸課題の解決に大きな貢献が見込まれる。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

・適切なマネジメントが (行われた ・ 行われなかった)

専門知識を有する補助者を 3 名雇用するとともに、国内外の関連する分野の専門家と連携しており、実施体制も整っていると思われる。

助成金は人件費、分析機器、旅費等に活用されており、研究目的、国内外の連携者を考慮すると有効に使われている。

しかしながら、目的として掲げられている「微生物生化学／有機物分解反応モデル」が当初の計画どおりに実行されたとは思えない点は不適切である。