

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 14 日現在

機関番号：32613

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17500

研究課題名(和文) 生物の形状を意図的に進化させることによる電気化学反応界面の新しい機能デザイン

研究課題名(英文) Innovative function design of electrochemical reaction interface through intentional shape evolution of living things

研究代表者

須賀 一博 (Suga, Kazuhiro)

工学院大学・工学部・准教授

研究者番号：30408992

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：電気化学反応界面の機能を化学的に制御することが困難な場合への対応、さらに制御方法の自由度を広げるために界面形状を工夫することで機能を制御することが期待されている。本研究では、多様な機能を発現する生物の形状を計算機内で意図的に「進化」させることにより、電気化学反応界面の機能をデザインする手法の開発を試みた。本研究により、(1)生物形状の形状組み合わせシステム、(2)界面の流動特性および電気化学反応速度評価システム(3)界面形状の進化システムを構築することができた。当初予定していた実験による有効性検証が完了していないため、今後も目的を達成するよう研究を継続する。

研究成果の概要(英文)：It is expected to control functions on the electrochemical interface without chemical approaches, and to develop new design method of the interface shape in order to achieve the function control. This study tried to establish new shape design approach by in silico intentional evolving the living's shapes. The following three numerical systems are developed in order to establish the design approach: (1) system for combination of living shapes, (2) system for evaluation of fluid and electrochemical properties, (3) system for evolution of interface shape. The validation of the proposed approach through electrochemical experiments has not been finished, it is continued.

研究分野：計算科学

キーワード：電気化学 バイオミメティクス 計算科学 最適化

1. 研究開始当初の背景

環境調和、低環境負荷のエネルギー開発、環境浄化技術、高精度センサーシステムの開発など様々な分野で、電気化学反応を利用した研究開発が行われている。革新的エネルギー変換場の実現、超高精度めっき技術の創成、高感度バイオセンサー開発などを旨として電気化学反応速度を制御することが求められている。従来、電気化学反応速度は、触媒を用いた化学的な方法で制御されてきた。しかし、食品プラント、取水ポンプなどでは、配管の腐食といった電気化学反応を化学的方法で制御することが困難な場合も少なくない。

申請者は、反応界面近傍における流動特性と腐食速度（電気化学反応速度）の関係を解明するための実験的な研究を進めてきた。その結果、腐食反応速度を決定する分極曲線を反応界面近傍の壁せん断応力の関数としてモデル化した。さらに、モデル化した分極曲線と流体解析を組み合わせ、流れ場における腐食予測手法の高度化を達成した。また、階層的な表面テクスチャリング技術を用いて表面のトライボロジー特性を改善する共同研究に参加した。これらの経験から、反応界面の幾何形状を制御することで電気化学反応特性を制御するという着想を得た。

一方、動植物の幾何形状やシステム等から着想を得て工学的な機能を創出しようとするバイオミメティクス(生体模倣)に関する研究が、革新的な材料や技術の開発に成功している。蓮の葉表面の幾何形状を模倣した超撥水性表面やサメ肌を模倣した抵抗低減表面は、その成功例である。このような生物の幾何形状は、ある環境にて適応するために長年の進化により獲得した形状である。しかし、「現在の生物の形が進化の最終形態なのだろうか?」という疑問を抱いた。また、「既存の形状をうまく組合せることで新しい機能を実現できないか?」と考えた。すなわち、従来の模倣するアプローチから一歩進んで、生物の形状を意図的に「進化」させることができれば、機能をデザインできるのではないかと考えた。以上の背景から、電気化学反応速度を制御するための界面形状をデザインする手段として、生物の幾何形状を意図的に「進化」させることを着想した。

2. 研究の目的

電気化学反応界面の機能を化学的に制御することが困難な場合への対応、さらに制御方法の自由度を広げるために界面形状を工夫することで機能を制御することが期待されている。本研究では、多様な機能を実現する生物の形状を意図的に「進化」させることにより、電気化学反応界面の機能をデザインすることを目的とする。異なる機能を有する生物の形状をブレンドすることで、新たな機能を発現する形状へと進化させる。まず、計算機上で形状を進化させるシステムを

開発する。次に、進化させた形状の有効性を電気化学実験により検証する。検討結果を基に、進化システムを改善する。その結果、電気化学反応速度を制御した形状を獲得する。さらに、形状の設計指針を確立する。本成果を革新的エネルギー変換場の実現や高精度センサー開発などに応用する。

3. 研究の方法

(1) 形状生成システムの開発 異なる機能を発現している界面形状を幾何的にブレンドすることで、新しい機能を有した界面形状を生成する。図1に超撥水性表面と抵抗低減表面をブレンドした例を示す。ブレンドの仕方を変えて多様な形状を生成する。

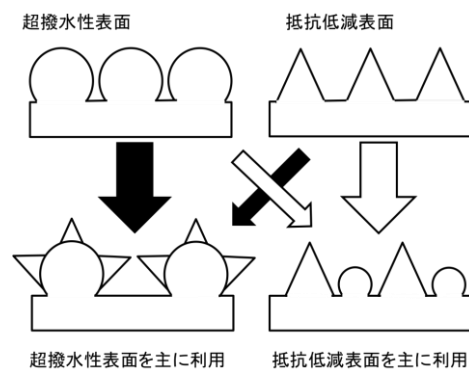


図1 形状のブレンド

(2) 有効性予測システムの開発 生成された幾何形状が電気化学反応速度を加速あるいは減速させるのかを判断するために、界面近傍の「反応物質濃度」と「電位」を決定する数値シミュレーションを行う。例えば、反応速度を加速させる場合には、「反応物質濃度」と「電位」がともに高くなるような形状を有効な形状となる。そこで、簡便に形状の有効性を評価するためのシミュレーション手法を開発する。

(3) 界面形状の進化 (1)の成果で、生物の進化プロセスで重要な「多様性の増大」を意図的に発生させる。次に、(2)の成果で、意図的な環境による「個体の選択」を再現する。以上により、形状の意図的な進化を実現する。進化した形状は、(4)で電気化学反応特性を評価する。

(4) 電極作成および評価 進化させた形状を有する電極を3Dプリンタにより作成する。導電性粉末を混ぜた光硬化性樹脂を用いて、3Dプリンタで造形することで導電性を持つ電極を作成する。作成した電極の反応特性を測定する。

(5) 設計指針の提案 測定によって有効と判断された電極の幾何学的特徴量を算出する。幾何学的特性と反応速度間の関連を数理モデルで表現することで設計指針を確立する。

得られた設計指針を(1)の評価へフィードバックすることで、形状進化プロセスの精度を向上させる。

上記の5つの実施課題と研究の流れを図2に示す。

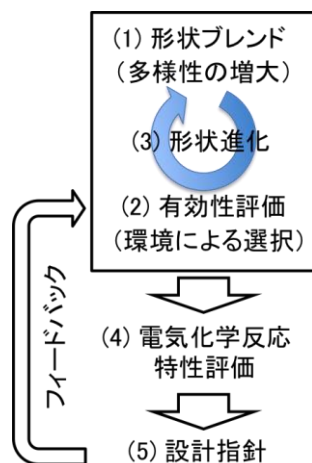


図2 研究の流れ

4. 研究成果

(1) 形状生成システムの開発 生物形状を模擬した STL 形式のデータに、幾何学的論理演算と拡大・縮小演算を適用することで、任意の形状を作り出すことを試みた。本開発では、汎用 3D モデリングソフトウェアである Blender の機能を Python スクリプトで制御することで、目的を達成した。

一例として、トンボの翅の表面にサメ肌のリブレットを組み合わせて作成した形状を図3に示す。(a)に全体形状を(b)に(a)の囲み部分の拡大図を示す。

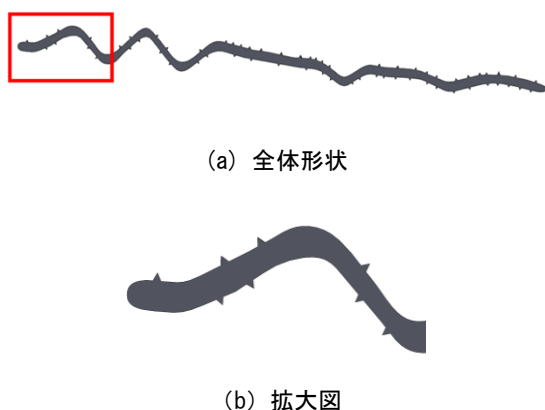


図3 トンボの翅にサメ肌リブレットを組み合わせて生成した新形状

(2) 有効性予測システムの開発 生成された形状の特性を評価するために、GCIBM: Ghost Cell Immersed Boundary Method を用いて流体解析と電場解析するシステムを構築した。これにより、様々な新形状の特性評価を簡便

に実行できるようになった。図4に球の表面に突起をもつ形状の流動特性を評価した結果を示す。カラーマップは流速の大きさ分布を表している。また、流線から物体の後方に渦が発生する様子が確認できる。

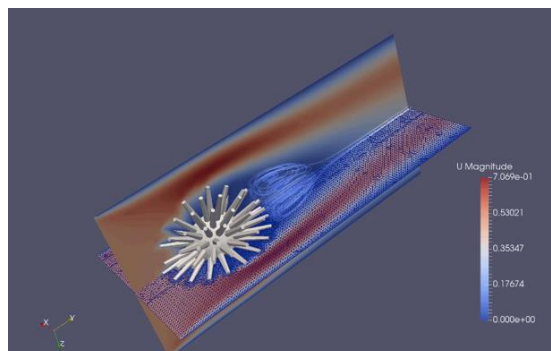


図4 GCIBMによる流体解析システム

GCIBM を拡張して電気化学反応を解析できるようにした。分極曲線を反応界面の境界条件として解析領域全体でラプラス方程式を解くことで反応速度を評価する。

(3) 界面形状の進化 生成した形状を意図的に進化させるための基礎システムを開発した。界面形状をレベルセット関数を用いて表現し、界面の位置を界面の物理量に応じて変化させることができるようにした。

図5は、電気化学反応速度に応じて界面形状を変化させた例である。(a)に初期形状、(b)に進化後の形状を示す。(b)で凹んだ部分が反応速度が速い場所に対応している。

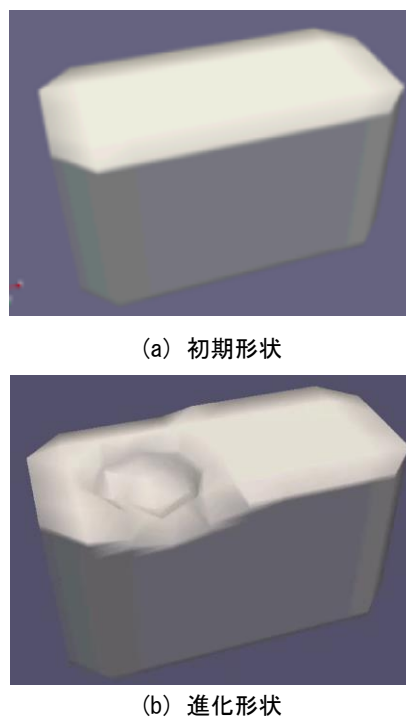


図5 形状の進化

現在のシステムでは、界面に物理状態（流速，反応物質濃度，電気化学反応速度など）を最適化できるような界面形状に進化させることは実現できていない。

界面上の物理量を目的関数として，最適化問題を解くことで，目的とする機能をもつ界面形状に進化させるシステムの開発を進めている。

(4) 電極作成および評価 生成した形状を3Dプリンタで生成できるか3Dプリンタを利用して検討を行なった。図3のように全体形状のスケールに対して，界面の形状変化が小さい場合には，造形が困難であった。積層方向の工夫と全体の絶対スケールを大きくして造形することで，ある程度造形が可能になった。これにより，流動特性の評価の有効性は，風洞実験等で確認することが可能である。

一方，実際に電極を作成し，電気化学反応速度を評価するには至っていない。全体形状を3Dプリンタで作成，界面の小さな形状変化をMEMS技術等を用いて造形する方法等の検討を引き続き進めている。さらに，電気化学分野の研究者と共同で研究をすすめることで効率的な評価システムの構築し，当初の目的を達成する。

(5) 設計指針の提案 (4)の評価が進行中のため，設計指針の提案に至っていない。しかし，今後のデータ蓄積により指針の提案を実現する。

本研究を進めてきた中で，実験による評価結果をシミュレーションにフィードバックして，シミュレーション精度の向上する手法の開発や，機械学習支援による新形状生成など新たな研究の方向性を発見することができた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 0 件)
準備中

[学会発表] (計 8 件)

- ① 住谷和樹，須賀一博，生物形状の組合せによる新形状設計システムの開発と流動特性制御への応用，日本機械学会 関東学生会第 57 回学生員卒業研究発表講演会，電気通信大学，(2018/3/16).
- ② Kazuhiro Suga，A Fluid Interface Design using Topology Blending of Biomimetic Surfaces，The 10th International Conference on Numerical Analysis in Engineering (NAE2017)，Banda Aceh，Indonesia，(24-25，August，2017).

- ③ Kazuhiro Suga，Modeling of time evolution of corroding interface in flow field，EuroCorr 2016，Montpellier，France，(11-15，September，2016).
- ④ 須賀一博，生物に学ぶ電気化学反応特性設計のためのシミュレーション，日本機械学会 第 29 回計算力学講演会，名古屋大学，(2016 年 9 月 22 日 ~ 9 月 24 日).
- ⑤ Kazuhiro Suga，A Simulation Framework for Bio-inspired Shape Design on Electrochemical Reaction，WCCM XII & APCOM VI，Seoul，Korea，(24-29，July，2016).
- ⑥ 須賀一博，反応制御を目指した流れ場の電気化学反応に及ぼす表面形状の影響評価，日本機械学会 第 28 回計算力学講演会，横浜国立大学，(2015 年 10 月 10 日-12 日).
- ⑦ Kazuhiro Suga，Numerical Prediction of Flow Accelerated Corrosion with Surface Topology Change，EuroCorr 2015，European Corrosion Congress，Graz，Austria，(6-10，September 2015).
- ⑧ Kazuhiro Suga，Fluid-Electrostatic Simulation with Topology Change for Corrosion Control in Flow，NAE 2015，Batam Island，Indonesia，(28-29，August).

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等
なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

須賀一博 (SUGA, Kazuhiro)
工学院大学・工学部・准教授
研究者番号：30408992

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

なし