

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

終了報告書（探索研究）

令和 3 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:井上 元]

[九州大学 大学院工学研究院・教授]

[研究開発課題名:非破壊計測・時空間逆解析・モデリングの融合による
マルチスケールデジタルフィードバックの構築]

実施期間：令和 3 年 10 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日

§1. 研究実施体制

(1)「統括」グループ(九州大学)

- ① 研究開発代表者:井上 元(九州大学大学院工学研究院、教授)
- ② 研究項目 研究統括、モデル開発

(2)「セル試作」グループ(北海道大学)

- ① 主たる共同研究者:松井 雅樹(国立大学法人北海道大学大学院理学研究院、教授)
- ② 研究項目 セルの試作評価

(3)「測定手法開発」グループ(東京大学)

- ① 主たる共同研究者:長藤 圭介(国立大学法人東京大学工学系研究科、准教授)
- ② 研究項目 非破壊測定手法の開発

§2. 研究開発成果の概要

逆解析による時空間分布情報取得と反応輸送モデリングによる要因解明を目指し、(1)モデル開発、(2)セル試作、(3)測定手法開発(時間分布情報取得)の3項目で推進した。非破壊計測(空間分布情報取得)は(1)に含まれる。特にモデルベース開発への本技術の実装を念頭に、探索研究期間内で電極内反応輸送計算の高速化を図った。各項目の詳細を下記に記す。

(1)「統括」グループ(九州大学)

非破壊計測による時空間分布情報を入力として、その内部特性を推定するモデルの構築を進めた。電極層内では粒子の膨張収縮により動的な構造変形が生じると予想され、そこで予めこれら微細構造の動的変化と伝導性や接触率の相関を取得し、さらに機械学習と組み合わせることで、電流分布と各種構造の相関マップをデータ群として整備した。これにより各セパレータ構造を用いた場合の Li 析出確率を推定することができた。さらに電極層構造内の反応輸送計算について、新たな計算モデルを提案し、計算高速化を達成した。また粒子幾何形状から電極層の有効イオン伝導度を推定する技術や、幾何学解析を応用し、電極構造情報からイオン伝導特性を推定する新たな手法を考案した。

(2)「セル試作」グループ(北海道大学)

試作サンプルとして内部特性に差異がある電極を複数作製した。事前の低電流充放電試験で可逆容量が再現性良く得られ、粒径が異なる材料で同様に再現性を確認したため、シミュレーションと解析用サンプル電池として提供した。

(3)「測定手法開発」グループ(東京大学)

電気化学インピーダンス計測と等価回路モデルを組み合わせ、緩和時間分布解析法による時間情報としての異常検出手法を確立した。これまでの燃料電池を用いて開発した技術を拡張し、充放電に伴う非定常性がある二次電池でも抵抗要因を推定する手法確立を進めた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) X. Liu, K. Park, M. So, S. Ishikawa, T. Terao, K. Shinohara, C. Komori, N. Kimura, G. Inoue, Y. Tsuge "3D generation and reconstruction of the fuel cell catalyst layer using 2D images based on deep learning", J. Power Sources Advances, 14 (2022) 100084.
- 2) S. Ishikawa, T. H. Noh, M. So, K. Park, N. Kimura, G. Inoue, Y. Tsuge, "Simulation to Estimate the Correlation of Porous Structure Properties of Secondary Batteries Determined Through Machine Learning", J. Power Sources Advances 15 (2022) 100094.
- 3) A. Tanaka, K. Nagato, M. Tomizawa, G. Inoue, K. Nagai, M. Nakao, "Advanced impedance modeling for micropatterned polymer electrolyte membrane fuel cells", J. Power Sources 545 (2022) 231937.