未来社会創造事業 探索加速型 「共通基盤」領域 年次報告書(探索研究期間)

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4年4月1日~令和5年3月31日

## §1. 研究開発実施体制

- (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大学院工学系研究科, 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)総括(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. 2022 年度は計算モデルの高速化とモデルに受け渡す時空間分布情報取得の基盤技術構築に集中した. 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目標とする. 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.

(2)「セル試作」グループ(北海道大学)

正極活物質として、粒径の異なる材料を用い電極塗工条件について系統的に検討を実施した. 焼成条件による過電圧や容量ばらつきの状態を制御し、内部特性に差異があるものを複数準備進めた. 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を開始した.

(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て、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の確立を進めた. 充放電に伴う非定常性がある二次電池ではなく、まずは基盤技術構築として電極層に異種構造を含む燃料電池を作製し、その構造特有の抵抗を推定できることを確認した. さらに、異常検出にむけて局所抵抗を導入した等価回路モデルを構築した.

## 【代表的な原著論文情報】

- 1) 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.
- 2) A. Tanaka, K. Nagato, M. Tomizawa, G. Inoue, M. Nakao, Modeling of Relative Humidity-Dependent Impedance of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells, ECS Trans. 109 (2022) 3.
- 3) 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.