

1. 氏名	矢地 謙太郎
2. 所属機関	大阪大学 大学院 工学研究科
3. 研究題目	レドックスフロー電池の流路構造と電極構造の同時最適設計法

4. 研究の目的:

風力や太陽光といった自然エネルギーを貯蔵するための次世代の大規模蓄電システムとして、レドックスフロー電池(RFB: redox flow battery)が注目を集めている。世界各国において RFB に関する研究が盛んに行われているものの、実用化にはさらなる充放電性能の向上が求められている。本研究では、巨視的かつ数理的な視点からのアプローチとして、RFB の性能を左右する電解液流路の構造と電極構造を対象とした最適設計法を構築する(レドックスフロー電池の概略については図 1 を参照)。これにより、RFB の超高性能化に繋がる革新的な設計案をコンピュータによって自動的に求めることを目指す。

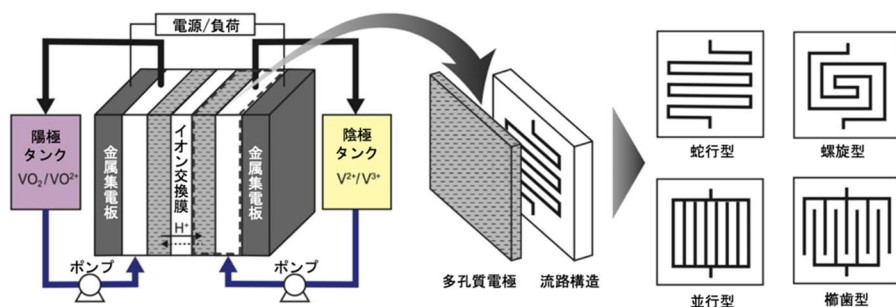


図 1: レドックスフロー電池の概略図

5. 研究の内容(手法、経過、評価など。書ききれない場合には、同一様式のページを追加してください。):

本研究では、流路構造の自動生成手法として、トポロジー最適化を採用する。トポロジー最適化はもともと応用数学分野の研究者を中心にその理論が構築され、構造力学分野を中心に工学的応用が成されてきた。研究代表者の矢地はこのトポロジー最適化を流体分野へ展開するための方法論を専門としており、図 2 に示すように、RFB の流路構造を対象としたトポロジー最適化法を世界に先駆けて提唱した。図からわかるように、トポロジー最適化によって植物の葉脈や生物の血管を彷彿とさせるような構造が得られることを明らかにしており、具体的な工学的応用に向けて取り組んだのが本申請研究となる。

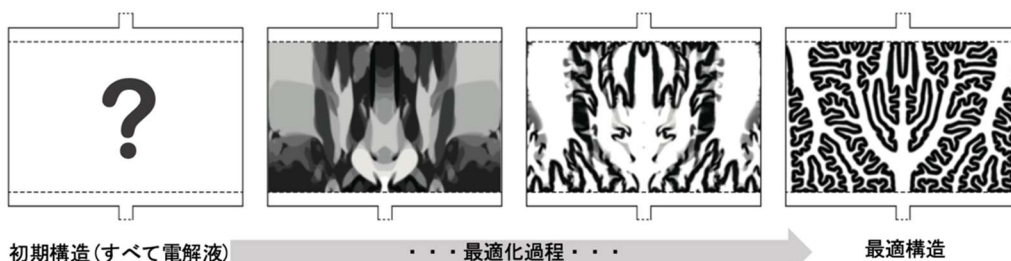


図 2: レドックスフロー電池の充放電性能最大化を目的としたトポロジー最適化

図 2 で提唱した方法論を実際の工学設計に応用していくにあたり重要となるのが、電極構造のレパトリーも含めた多様な解候補を用意した上で、実現を反映した高精度の電気化学反応モデルを用いて各解候補を数値シミュレーションにより評価し、試作器による実験的評価を実施することとなる。本研究では、この計画の前半部分である解候補の生成とそれらの数値的評価について研究を実施した。

6. 研究の成果と結論、今後の課題：

・研究の成果と結論：

本研究では、まず電極構造は固定した上で、多種多様な解構造を網羅的に生成する枠組みの構築に着手した。多様な解候補を生成するには、対象とする最適化問題をトレードオフ関係のある複数の評価関数に対する多目的問題として定式化した上で、その目的関数の重みに関するパラメータを振れば良い。そこで、RFB を設計する上で重要となる充放電性能に直結する電気化学反応率と、圧力損失の二目的問題として定式化し、最適化アルゴリズムを開発した。ここで、充放電性能の指標として電気化学反応率を用いた理由は、これまでの経験上、過電圧や電流密度を直接的に評価関数に据えると、解空間の多峰性により有望な解を得ることが困難になることがわかっているためである。したがって、最適化自体は簡略化したモデルを採用した上で、得られた最適化構造を詳細なモデルでもって評価するというアプローチを採用した。本研究は、このようにモデルの忠実度(フィデリティ)を階層的に使い分けることで、間接的に有望な解の獲得を目指すマルチフィデリティ設計法に基づく。

提案する枠組みによって、多種多様な解候補を生成し、高精度の電気化学反応モデルによる評価を行う準備を行える段階に到達した。具体的には、二次元の簡略化モデルから、多種多様な流路構造パターンを網羅的に生成し、それらを三次元の RFB モデルにマッピングするところまでの最適化アルゴリズムは開発済みであり、現在は高精度の電気化学反応モデルの実装に取り組んでいる。枠組み全体としては概ね上手く機能することは確認済みであることから、電気化学反応モデルの実装が済み次第、電極構造のレパートリーも含めた最適化を実施する予定である。

当初は、電極構造をも含めた RFB のより包括的な最適化を構想し、期間中に実際の RFB との比較を含めた検証まで実施する予定であったが、COVID-19 によるパンデミックも相まって、RFB の高精度モデルの開発に予想以上の時間を要している。実際の工学応用を考えると、高精度の数理モデルの正しい実装、つまり実現象を反映した高精度のモデルを組み込むことは必須となるため、引き続き地道に実装に専念する予定である。また、本研究を通して明確になったこととして、RFB の数理モデルは未だ十分に確立されておらず改善の余地が大いにある、ということが挙げられる。これまでに幾つかの数理モデルが世界中で提唱されているものの、実際に幾つかの代表的なものを実装してみると、数値安定化のために非現実的なパラメータを用いたり、適用範囲がごく一部に限られたものなど、様々な仮定を介在させる必要があることがわかった。トポロジー最適化で得られる構造は前述の通り、生物を彷彿とさせるような複雑な形状となるため、それらの評価をも可能とするより汎用的な数理モデルの開発が望まれる。これは換言すると、トポロジー最適化に適した新しい数理モデルの開発が必要とも言える。この副次的な結論に至ることができたのは、今後、本研究を進展させていく上で重要な成果の一つと言える。

・今後の課題：

前述の通り、まずは高精度の数理モデルの実装が近々の課題となるが、その後の展望としては、当初の予定通り電極構造の同時最適化が挙げられる。昨今の製造技術の発展も相まって、微細な電極構造であっても、その構造を自在にコントロールできる時代になりつつある。空隙率やファイバー直径だけを設計パラメータにするのではなく、例えば電極材料の適切な量や配向を局所的にコントロールした上でマルチスケールの考え方のもと、電極構造の最適化を実施することも考えられる。こういった技術により、既存の RFB の性能をどこまで押し上げることができるかを、数値シミュレーションのみならず、将来的には実験を通して検証していきたい。

7. 成果の価値

7.1_学術的価値:

RFB の分野では、材料科学的アプローチが主流であり、数値解シミュレーションを駆使して高性能化を図った研究はほとんど成されていないのが現状である。また、トポロジー最適化も含む最適化技術自体、最近になって活用されてきたのが現状であり、高性能化を目指した際の伸び代は計り知れない。また、矢地らの研究グループが 2018 年に発表した論文を皮切りに、最近になって電池デバイスを対象とした研究論文が増えつつある。本申請研究では、流路構造と電極構造をも考慮した方法論を提唱するものであり、当該分野において極めて先駆的な試みと言える。

7.2_社会的価値:

自然エネルギーの有効活用は世界各国で重要視されていることから、高性能な蓄電池の開発は急務の課題である。RFB は次世代の大規模蓄電池として注目を集めており、場合によっては世界の電力情勢をも変革し得る。このような社会的背景を踏まえると、本研究は自然エネルギーを有効活用した新社会の構築に向けたアプローチの一つと位置づけても過言ではない。無論、RFB の高性能化のみに着手してこのような社会が実現できるわけでは無いが、蓄電池の高性能化は今後重要な課題であることは紛れもない事実であることから、本研究で得られる成果は今後の社会において価値あるものになると期待できる。

7.3_研究成果:

研究論文(解説記事) : 1 件

○矢地謙太郎, トポロジー最適化によるレドックスフロー電池の新規な流路構造の創成, 計算工学, Vol. 25, No.4, pp. 4156–4159, 2020.