

	やまなか たくみ
氏 名	山中 拓己
学位(専攻分野)	博士 (工学)
学 位 記 番 号	博乙第 209 号
学 位 授 与 の 日 付	令和 4 年 3 月 25 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 2 項該当
学 位 論 文 題 目	リチウムイオン電池設計のための数値モデル開発
審 査 委 員	(主査)教授 森西晃嗣 教授 村田 滋 教授 山川勝史 准教授 西田耕介

論文内容の要旨

本論文は、高性能で安全性の高いリチウムイオン電池の設計を支援する数値モデルの開発を目指した一連の研究成果をまとめたものである。リチウムイオン電池は、一般に普及している二次電池の中ではエネルギー密度が高く、現在市販されている電気自動車の殆どがリチウムイオン電池を採用しているが、ガソリン車の航続距離と対比すると、電極性能のさらなる改善が求められている。また、リチウムイオン電池は、破損や温度上昇による発火事故が少なからず報告されており、安全性の担保は必達の課題である。さらに、温度上昇は発火のリスクと共に電池の劣化（容量の減少）も引き起こすため、電池パックの熱管理も重要である。そこで、電極性能、安全性、および、熱管理をリチウムイオン電池の最も重要な設計課題として、それぞれの課題の解決を目指した数値モデルの提案と検証を行っている。

安全性の評価モデルとして、釘刺し試験での内部短絡の時間進行や発火燃焼の程度が評価できる数値モデルを提案し、様々な設計条件により作成した仮想電池に対して仮想釘刺し試験を実施し、得られたデータベースから安全性を考慮した設計仕様に対して最適な設計条件を機械学習により求めている。

電極性能は、電極を構成する多孔質構造に依存するが、最適な多孔質構造の探索には、電極の試作と試験を繰り返す必要があり、莫大な時間とコストを要する。そこで、材料の物性値や体積分率、加工のプレス圧などから仮想的に多孔質構造を作成し、その性能を素早く予測する数値モデルを提案し、多数の多孔質構造に対するデータから設計仕様を満たす最適な設計条件を機械学習により求めている。

電気自動車に搭載される電池パックは、電池の最小単位であるセルを多数積層した複数のモジュールから構成されており、電池の劣化や発火リスクを最小限にするためには熱管理が重要となる。そこで、熱管理と電池の劣化評価を組み込んだ電池パックの数値モデルを構築し、仮想電気自動車を WLTC モードで長時間走行させた際の電池パック内の各セルの温度分布やサイクル劣化割合、走行中に一部のセルに内部短絡が生じた場合の発火リスクなど、実用性の高い予測評価に成功している。

論文審査の結果の要旨

本論文では、カーボンニュートラルを目指した電気自動車の普及には、充電ステーションと共に二次電池の性能や安全性のさらなる改善が求められており、電極性能、安全性、および、熱管理をリチウムイオン電池の設計における重要課題と位置づけ、それぞれの課題を解決する数値モデルを提案している。

リチウムイオン電池に限らず、多くの電池の性能は電極を構成している多孔質構造の優劣に大きく依存する。最適な多孔質構造の探索には、電極の試作と性能試験を繰り返す必要があり、莫大な時間とコストを要するが、本論文は、材料の物性値や体積分率、加工のプレス圧などを与えて仮想的に多孔質構造を作成し、その電極性能を素早く予測する数値モデルを提案し、多数の仮想電極に対するデータベースを短時間で構成し、機械学習により要求仕様を満たす最適な電極設計を可能にしており、工学上の意義が大きい。

安全性の評価試験である釘刺し試験における内部短絡の時間進行や燃焼の程度を評価できる数値モデルを提案し、様々な設計条件で作成された仮想電池に対する仮想試験のデータより安全性を含めたセルの要求仕様に対して最適な設計条件を機械学習により求める手法を確立した点は工学上高く評価できる。

実際の電気自動車に搭載されている電池パックを模した数値電池パックモデルを提案し、仮想の電気自動車を WLTC モードで長時間走行させた際の発熱による電池パック内の温度分布や発火リスク、さらには電池の寿命までも予測に成功した点は工学においても実用においても価値が非常に高い。

本論文は、査読制度を有する学術雑誌に掲載された下記に示す 6 編の学術論文を基に構成されている。

- 1) T. Yamanaka, Y. Takagishi, Y. Tozuka, T. Yamaue, Modeling lithium ion battery nail penetration tests and quantitative evaluation of the degree of combustion risk, *Journal of Power Sources*, 416 (2019) 132-140.
- 2) T. Yamanaka, Y. Takagishi, T. Yamaue, A Framework for Optimal Safety Li-ion Batteries Design using Physics-Based Models and Machine Learning Approaches, *Journal of The Electrochemical Society*, 167/10 (2020), Article No. 100516.
- 3) Y. Takagishi, T. Yamanaka, T. Yamaue, Machine Learning Approaches for Designing Mesoscale Structure of Li-Ion Battery Electrodes, *Batteries*, 5/3 (2019), Article No. 54.
- 4) Y. Takagishi, T. Yamanaka, T. Yamaue, Quasi-3D modeling of Li-ion batteries based on single 2D image, *SN Applied Sciences*, 3/6 (2021), Article No. 633.
- 5) T. Yamanaka, D. Kihara, Y. Takagishi, T. Yamaue, Multi-Physics Equivalent Circuit Models for a Cooling System of a Lithium Ion Battery Pack, *Batteries*, 6/3 (2020), Article No. 44.
- 6) T. Yamanaka, Y. Takagishi, T. Yamaue, An Electrochemical-Thermal Model for Lithium-Ion Battery Packs during Driving of Battery Electric Vehicles, *Journal of The Electrochemical Society*, 168/5 (2021), Article No. 050545.