

令和 5 年 5 月 25 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20H02054

研究課題名（和文）レドックスフロー電池の流路構造設計を対象としたデータ駆動型トポロジー最適化

研究課題名（英文）Data-driven topology optimization for designing of flow fields in redox flow batteries

研究代表者

矢地 謙太郎 (Yaji, Kentaro)

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：90779373

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 15,000,000円

研究成果の概要（和文）：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。これに伴い、RFBに関する研究開発が世界各国で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。この課題に対し本研究では、数理的な最適設計手法を駆使することで、RFBの超高性能化に繋がる革新的な流路構造の創成を目的とした。具体的な取り組みとして、実際に想定した電気化学反応モデルによる評価を組み込んだデータ駆動型トポロジー最適化を開発し、数値実験による例題検証を通して有望な設計解の創成にした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、従来のトポロジー最適化に代わる新しい最適設計法を開発し、それをRFBの流動場設計に展開した点に学術的新規性がある。特に今回構築したデータ駆動型トポロジー最適化については、従来のトポロジー最適化が主に勾配法に基づく最適化法であるのに対し、勾配を一切用いることなく高次元の最適化を実現している点は注目に値する。実社会において価値のある最適化問題は往々にして複雑であり有効な勾配を取り出しにくいことが少なくないことから、RFBに限らず実際の設計問題への展開も今後期待できる。

研究成果の概要（英文）：The next-generation large-scale energy storage system for renewable energies such as wind and solar power is attracting attention, and the Redox Flow Battery (RFB) is being considered as a potential solution. However, further improvements in charge and discharge performance are required for its practical application. In this study, considering that the flow channel structure inside the RFB strongly affects its charge and discharge performance, our aim was to create an innovative flow channel structure that could lead to the ultra-high performance of the RFB by employing mathematical optimization methods. As a specific approach, we developed a data-driven topology optimization incorporating an electrochemical reaction model based on realistic assumptions and conducted numerical experiments to validate the effectiveness of the proposed design solutions.

研究分野：最適設計

キーワード：トポロジー最適化 深層学習 レドックスフロー電池 深層生成モデル

1. 研究開始当初の背景

環境保全が強く求められる現代社会において、風力や太陽光といった自然エネルギーを利用した発電システムの導入は益々加速している。一方で、自然エネルギーは天候や環境の影響を受けるため、各地域に電力貯蔵システムを自立分散的に配備していくことが必要となる。このような背景のもと、レドックスフロー電池(RFB: Redox Flow Battery)が次世代の電力貯蔵システムの有力候補として注目を集めている。

RFB はリチウムイオン電池やナトリウム硫黄電池といった他の蓄電池と比較して、大規模化が容易、稼働寿命が長い(20 年程度)、常温で稼働するため安全かつメンテナンス性が高い、といった特徴を持つ。しかし、今後 RFB を実社会へ広く普及させていくためには、充放電性能の更なる向上が必要不可欠とされており、世界各国で盛んに研究開発が進められている。

RFB の高性能化に向けた研究は、触媒の選定や、多孔質電極およびイオン交換膜の材料物性の改良といった微視的なアプローチによるものが大半を占める。これは、蓄電池の研究者のほとんどが材料科学や電気化学を専門とするためである。一方、最近になって流体解析分野の研究者も参入しはじめていることも影響し、セル内部の流路構造のパターンも RFB の性能を左右する重要な因子であることが実験的・数値的研究によって明らかにされた。そして、各流路構造と充放電性能の関係を調べた研究によって、稼働条件の違いにより適切な流路構造は全く異なるということが示された[1,2]。このことは RFB の流路構造設計が極めて厄介であることを意味している。つまり、RFB は流体運動と電気化学反応が混在する複雑な現象に支配されていることから、設計者の勘や経験だけで最適な流路構造を見出すことは事実上不可能であるということである。

この課題に対し、研究代表者は自身の最近の研究によって、RFB の流路構造を対象としたトポロジー最適化の方法論を構築した[3]。トポロジー最適化とは、設計者の試行錯誤に依存することなく、設計対象物の最適な形態を導き出す最適設計手法である。図 1 は RFB の充放電性能の最大化を目的として得られた最適化結果である。この研究では多孔質電極を挟んで互いに接続されていない、いわゆる櫛歯型の流路構造を最適解として自動的に導出することに成功した。

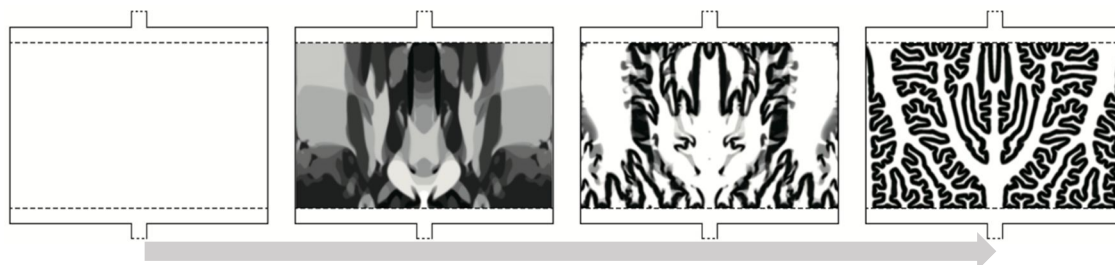


図 1 : RFB のトポロジー最適化の様子(白:電解液、黒:多孔質電極)

一方で、図 1 の研究では簡略化した解析モデルを用いているため、実現象を定性的に再現するに留まっている。さらに、その後の研究によって、高精度の解析モデルを用いて最適解を得るためには、結局様々な仮定や近似処理を介在させなければならないことがわかった[4]。その結果、将来的に実施したい試作実験と同じ稼働条件のもとでトポロジー最適化を直接的に実行することは不可能であるとの結論に至った。これはトポロジー最適化の設計自由度が高すぎるが故に生じてしまう強い多峰性(無数の局所最適解の存在)に起因する問題と考えられる。特に RFB の流動場は流体運動と電気化学反応が混在する非線形性の強い物理場によって支配されるため、一つの局所最適解を見つけるだけでも膨大なパラメータスタディを要することがわかっている。

2. 研究の目的

本研究では前述の課題を克服するため、トポロジー最適化を RFB の最適設計に直接的に適用するのではなく、問題を分割した上で最適解を間接的に導出するフレームワークの確立を目的とする。具体的には、1)もとの問題をトポロジー最適化で解くことができるレベルに落とし込んだ擬似的な問題として定式化し、多種多様な設計解候補を大量に生成する。そして、2)各解候補をもとに高精度の解析モデルを用いながら性能評価を行い、その結果を踏まえ、先に定式化した擬似的な問題を逐次改良していくことで所望の最適解を導出する。

本研究では、トポロジー最適化を言わば「設計解候補の自動生成器」として捉え、そこから得られる大量の計算結果をもとにしたデータ駆動型最適設計の確立を目指している。このような研究は、RFB の最適設計に限らず広く工学設計分野への汎用性をも有する非常に特色のある研究といえる。また、以前の研究で得られた図 3 の成果は、解候補生成器としての擬似的なトポロジー最適化問題を定式化する際に活用できる。したがって、あとは提案するフレームワークによってこの既存の成果を実際に解きたい RFB の最適設計問題へ橋渡しすることができれば、真の意味で「RFB の革新的な流路構造設計」が実現することになる。

3. 研究の方法

本研究で提案するフレームワークの概略を以下に示す。

(1)複合領域最適化の一手法であるマルチフィデリティ設計法に基づき最適設計問題を2つの部分問題に分割する。すなわち、忠実度は低い安定して最適化計算を行う低フィデリティ最適化問題と、高精度の結果が得られる高フィデリティ最適化問題について考える。

(2)低フィデリティ最適化では、もとの問題に近似処理を施した擬似的なトポロジー最適化問題を解くことで設計解候補を生成する。ここでは近似誤差を補正するための設計パラメータを導入した上で、多種多様な設計解候補を網羅的に生成する。

(3)高フィデリティ最適化では、低フィデリティ最適化で得られた設計解候補をもとに高精度の解析モデルを用いた最適化計算を実施する。ここでは先に導入した設計パラメータに対するパラメータ最適化によって間接的に所望の最適解を導出する。

本フレームワークを有効に機能させるためには、可能な限り少数の設計パラメータによって多様な設計解候補を生成することが望ましい。この要請はメタヒューリスティクスといった非勾配法に基づく設計探索において、目的関数への影響度が大きい設計パラメータを予め見出したい場合と類似している。

4. 研究成果

本研究で得られた主な成果を以下にまとめる。

(1)前述の通り、従来のトポロジー最適化は人間が思いつきそうにない設計解を自動的に導出できる反面、その自由度が高すぎることに起因して、解探索をまともに行えないことが少なくない。このトポロジー最適化が本質的に抱える課題に対し、汎用的なフレームワークとしてデータ駆動型マルチフィデリティトポロジーデザインを提案した。このフレームワークを適用することにより、従来法では直接解くことが困難であった非線形性の強い問題において、勾配情報に頼ることなく有望な設計解を導出することが可能となる。具体的な例題として、既発表の論文ではミニマックス型の評価関数を考慮した乱流熱伝達問題を解くことに成功した[5]。

(2)上で提案したフレームワークをRFBの流動場設計へ展開し、図2の結果を得た。ここでは二次元モデルで得られた最適化構造を双極板の厚み方向に押し出す形で三次元モデルを作成し、流動場と電気化学反応の数値シミュレーションを実行した図2に参照モデル、提案したフレームワークによって得られた最適化モデルおよび両者の放電時の分極曲線をそれぞれ示す。同じ稼働条件で検証するため、両モデルの圧力損失を固定している。図からわかるように、最適化モデルは参照モデルと比較して高い放電特性を有していることがわかる。

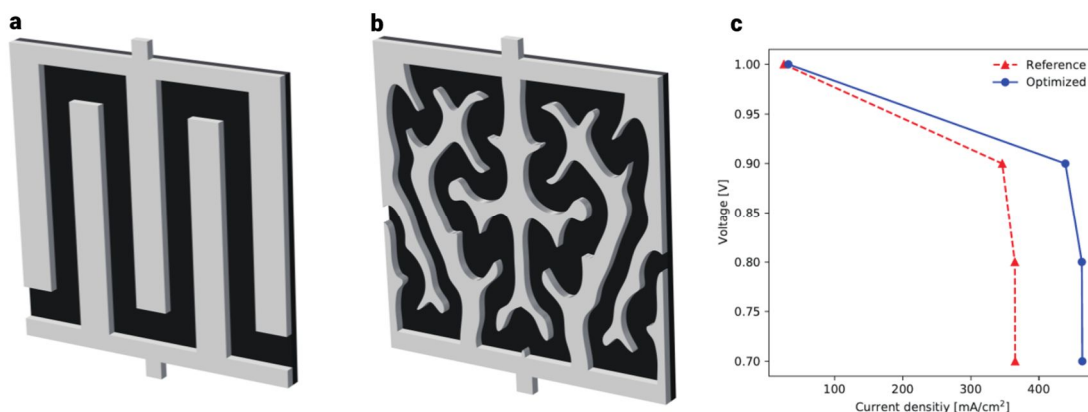


図2 三次元解析モデルによる検証：(a) 参照モデル、(b) 最適化モデル、(c) 分極曲線

< 引用文献 >

- [1] D. You et al., *Electrochim. Acta*, 54, 6827-6836 (2009)
- [2] S. Tsushima & T. Suzuki, *J. Electrochem. Soc.*, 167, 020553 (2020)
- [3] K. Yaji et al., *Struct. Multidiscip. Optim.*, 57, 535-546 (2018)
- [4] C. H. Chen et al., *J Energy Storage*, 26, 100990 (2019)
- [5] K. Yaji et al., *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 388, 114284 (2022)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hiroki Kobayashi, Kentaro Yaji, Shintaro Yamasaki, Kikuo Fujita	4. 巻 63
2. 論文標題 Topology design of two-fluid heat exchange	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Structural and Multidisciplinary Optimization	6. 最初と最後の頁 821-834
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s00158-020-02736-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yaji	4. 巻 86
2. 論文標題 トポロジー最適化の流体問題への展開	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 精密工学会誌	6. 最初と最後の頁 400-404
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2493/jjspe.86.400	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yaji	4. 巻 25
2. 論文標題 トポロジー最適化によるレドックスフロー電池の新奇な流路構造の創成	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 計算工学	6. 最初と最後の頁 4156-4159
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Misato Kato, Taisei Kii, Kentaro Yaji, Kikuo Fujita	4. 巻 未定
2. 論文標題 Tackling an exact maximum stress minimization problem with gradient-free topology optimization incorporating a deep generative model	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2023 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference	6. 最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Taisei Kii, Kentaro Yaji, Kikuo Fujita, Zhenghui Sha, Carolyn C. Seepersad	4. 巻 未定
2. 論文標題 Data-driven multifidelity topology design with a latent crossover operation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2023 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

[学会発表] 計6件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Kentaro Yaji, Shintaro Yamasaki, Kikuo Fujita
2. 発表標題 A data-driven framework of multifidelity topology design using variational autoencoder in thermal-fluid problems
3. 学会等名 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kentaro Yaji, Shintaro Yamasaki, Kikuo Fujita
2. 発表標題 Multifidelity design guided by topology optimization
3. 学会等名 TOP webinar (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kentaro Yaji
2. 発表標題 トポロジー最適化に対するデータ駆動型マルチフィデリティ設計の秘める可能性-熱流体問題への展開-
3. 学会等名 研究部会「数理設計」第21回研究集会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kentaro Yaji
2. 発表標題 熱流体場を対象としたトポロジー最適化問題におけるマルチフィデリティ設計
3. 学会等名 MMDSワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kentaro Yaji
2. 発表標題 熱流体場のトポロジー最適化 ~ヒートシンクや熱交換器の新奇設計案の創成~
3. 学会等名 COMSOL カンファレンス
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kentaro Yaji
2. 発表標題 レドックスフロー電池の流路構造設計におけるトポロジー最適化の秘める可能性
3. 学会等名 AIMaP研究会「地域グリッド開発関連技術ワークショップ」（招待講演）
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------