

NEDO水素・燃料電池成果報告会2023

発表No.A2-9 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官 連携研究開発事業/共通課題解決型基盤技術開発/ **固体酸化物形燃料電池スタックの高度評価・解析技術の研究開発**

発表者名 堀田照久
団体名 国立研究開発法人産業技術総合研究所
発表日 2023年7月14日

- (委託先)** 国立研究開発法人産業技術総合研究所、一般財団法人電力中央研究所、国立大学法人東京大学、
国立大学法人京都大学、国立大学法人九州大学、国立大学法人東北大学、イムラ・ジャパン株式会社
- (共同実施先)** 京セラ株式会社、森村SOFCテクノロジー株式会社、株式会社デンソー、
大阪ガスマーケティング株式会社、東京瓦斯株式会社、東邦ガス株式会社、日産自動車株式会社
- (再委託先)** 千葉工業大学、慶應義塾大学

連絡先：堀田照久
国立研究開発法人産業技術総合研究所
(E-mail: t.horita@aist.go.jp, TEL: 029-861-9362)

事業概要

1. 期間

開始 : 2020年8月

終了 (予定) : 2025年3月

2. 最終目標

固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の普及・適用性拡大に必要な、高度なスタック評価・解析技術を確立する。具体的には、SOFCスタックの13 時間超の長期寿命・運用、65%を超える高効率運転、再エネ調整力応用としての負荷変動や急速起動など、スタック運用限界に近い状態を的確に評価し、長期寿命や運用性限界を予測する高度な評価・解析技術を開発・提供する。

3. 成果・進捗概要

固体酸化物形燃料電池 (SOFC) スタックの高効率運転 (燃料利用率85%)において、1.5万時間以上の長期耐久試験を複数スタックで達成し、その主たる抵抗増大成分がオーム損と空気極過電圧であることを解明、長期運転での燃料極劣化傾向も観測した。スタックの長期寿命を予測するため、各部材や材料の劣化メカニズムの時間依存性や複合効果を整理し、総合的な評価のための基礎データを集積した。スタック劣化を示すためのマルチスケールシミュレーション技術を進めた。さらに、急速起動や負荷変動に対応するための評価装置を完成させ、その基礎データを収集し、スタック評価プロトコル構築を進めた。電極微構造変化を予測するために、画像解析に機械学習を適用し、その教師データを集積し、燃料極微構造の変化やその性能変化を予測するための基礎データを集積した。

1. 事業の位置付け・必要性

1) 事業の背景と目的：

- SOFCシステムは、家庭用が普及段階、業務・産業用が導入段階で、本格普及・産業競争力強化には、高効率・耐久などの性能向上が必要。
- 電源設備としての耐久年数15年、分散電源としての最高効率65%以上を同時に満たし、負荷変動や起動停止などの運用性を向上させる必要。
- 上記の性能を満たす長寿命・高効率SOFCスタックを的確・適正に評価できる方法・解析法はまだなく、**先進的な評価・解析法、寿命予測法を開発することが目的**。評価・解析法を開発する中で、開発企業のセルスタック開発が同時に促進されることも視野に。

2) 事業の意義・必要性：

- 企業が開発中の先進スタック(性能目標：耐久15年、効率65%以上、負荷変動・起動などの運転可能)を的確に評価する方法はまだなく、スタック開発企業が必要としている。
- 出荷前や長期運転時の適正評価や高性能システム設計が容易になり、生産性向上、適用性拡大・普及促進に寄与。
- 本事業を推進することでSOFCシステムの本格普及と適用性・市場拡大、社会実装に寄与し、評価・解析法をリバーシブルセルや電解セルなどにも適用することで、低炭素社会、脱炭素社会へとつながる重要な技術を提供できる。

2. 研究開発マネジメントについて

1) 研究開発の目標と目標設定の考え方（根拠）

脱炭素に向けたトランジェント及び水素利用への高効率発電として、SOFCが重要。

電力設備としての定置用燃料電池の寿命は15年以上が必要、また集中火力の大型ガスタービンの効率は65%程度で、その効率を分散電源で実現し、大幅な温室効果ガス削減に寄与する。

長寿命・高効率SOFCスタックを評価するための高度評価・解析法はまだまだなく、共通課題として進め、評価法・解析法を確立する。

2) 研究開発のスケジュール

2020年～2021年： 評価・解析法構築のための基礎データの収集・解析

2021年～2023年： 長寿命・高効率スタックの寿命予測法、診断法などの基礎技術開発、基盤完成

2024年： 開発技術の検証、知財・標準・規格への展開検討

3) 研究開発の実施体制

産学官連携の総合的なプロジェクト体制：実スタック、評価・解析、改良のサイクルを回す

7 委託機関（2研究機関、4大学、1企業）、7共同実施(スタック開発企業、ユーザ)、

2再委託（2大学）

4) その他：

研究開発進捗は、テーマごと及び個別技術課題に対応するワーキンググループで推進

全体会議を3か月ごとに開催し、進捗と技術開発の向上を図っている。

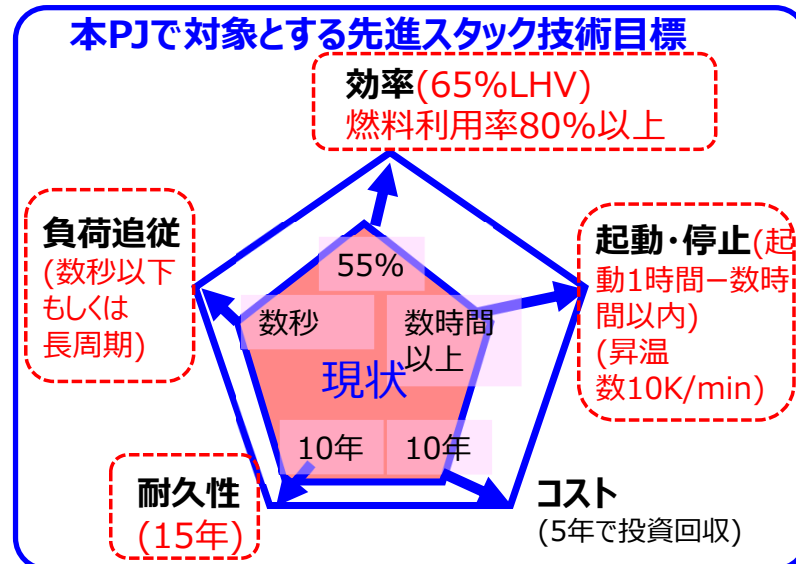
研究データ・知財管理の知財運営委員会で新規発表などを管理して研究データの適正管理

2. 研究開発マネジメント (1) 目標と設定根拠

目標：スタック開発企業が使える劣化評価・解析法の確立 (13万時間耐久、急速起動)

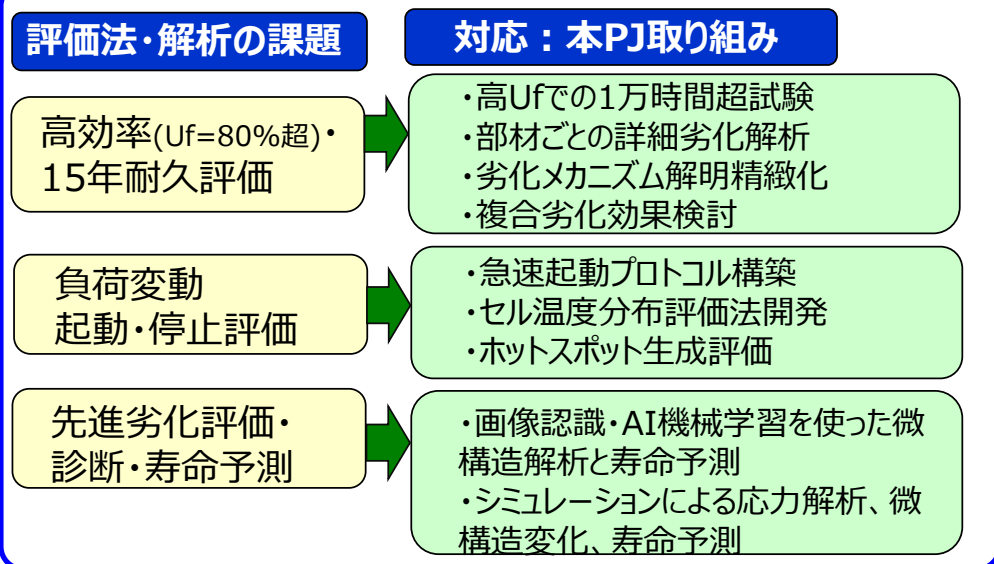
- 燃料電池ユーザーニーズ：カーボンニュートラルに向けたトランジェントでの低炭素化、高効率発電が必要
- SOFC開発企業ニーズ1：高効率・長寿命スタックの高効率・長期運転時の耐久評価法が必要
- SOFC開発企業ニーズ2：先進スタックの動特性や負荷変動、急速起動などの運用性に関する評価法・新規劣化診断法が必要
- これまでの取り組み：部材ごとの劣化機構解明、9万時間耐久予測法の確立 各部材・要因の劣化機構解明、スタック運転で劣化10%の見通し
- **中間目標(2022年6月)**：ニーズを満たす先進スタックに適用するための評価法の基礎データ収集
- **最終目標(2024年度末)**：ニーズを満たし、先進セルスタック開発に寄与できる高度な評価・解析法の確立

(現状)世界で実現しているSOFCシステム：
システム効率55~60%以上、耐久10年

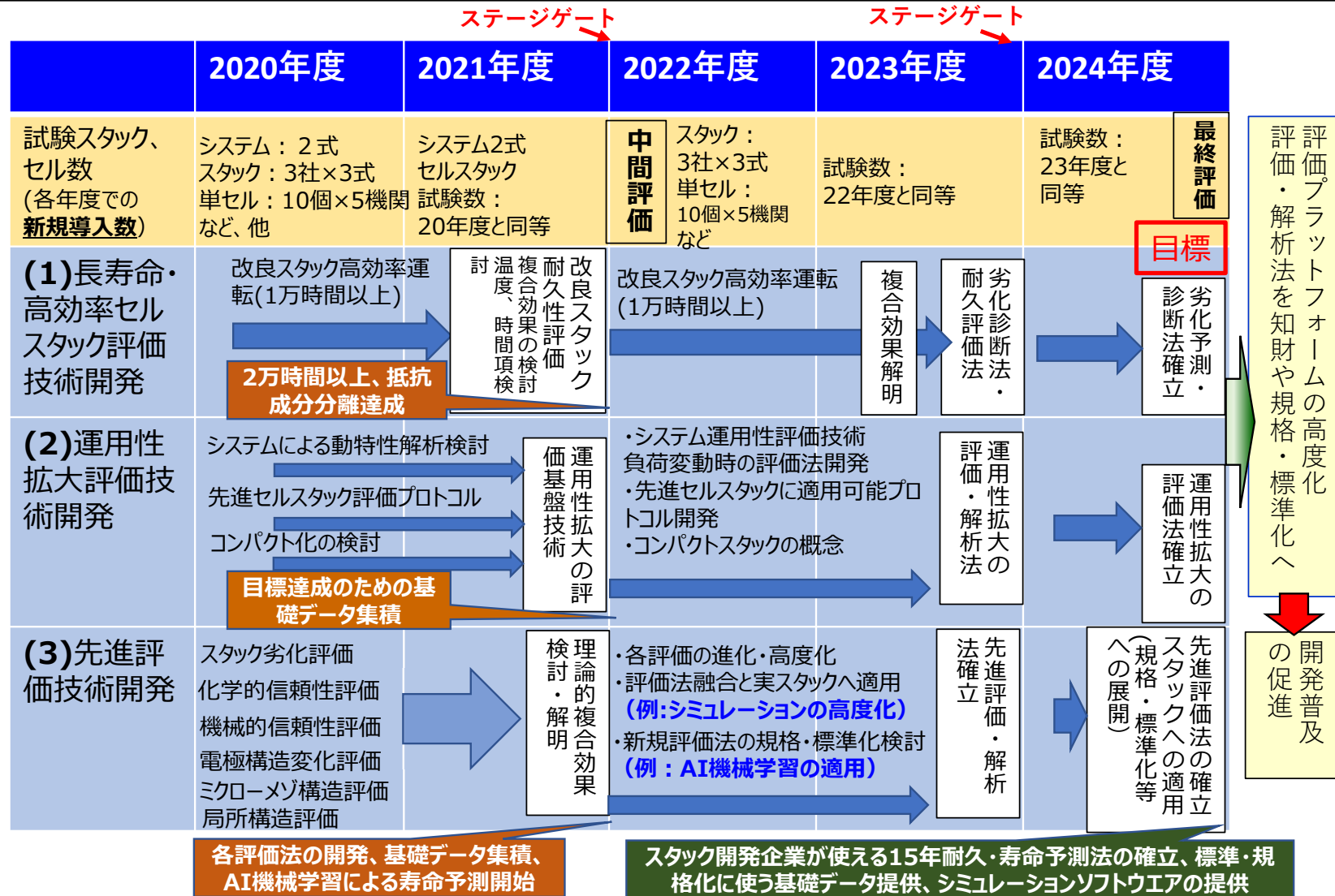


急速起動の意義：再エネの変動調整、DSS対応、モビリティ展開

先進スタック評価法・解析への課題と取り組み

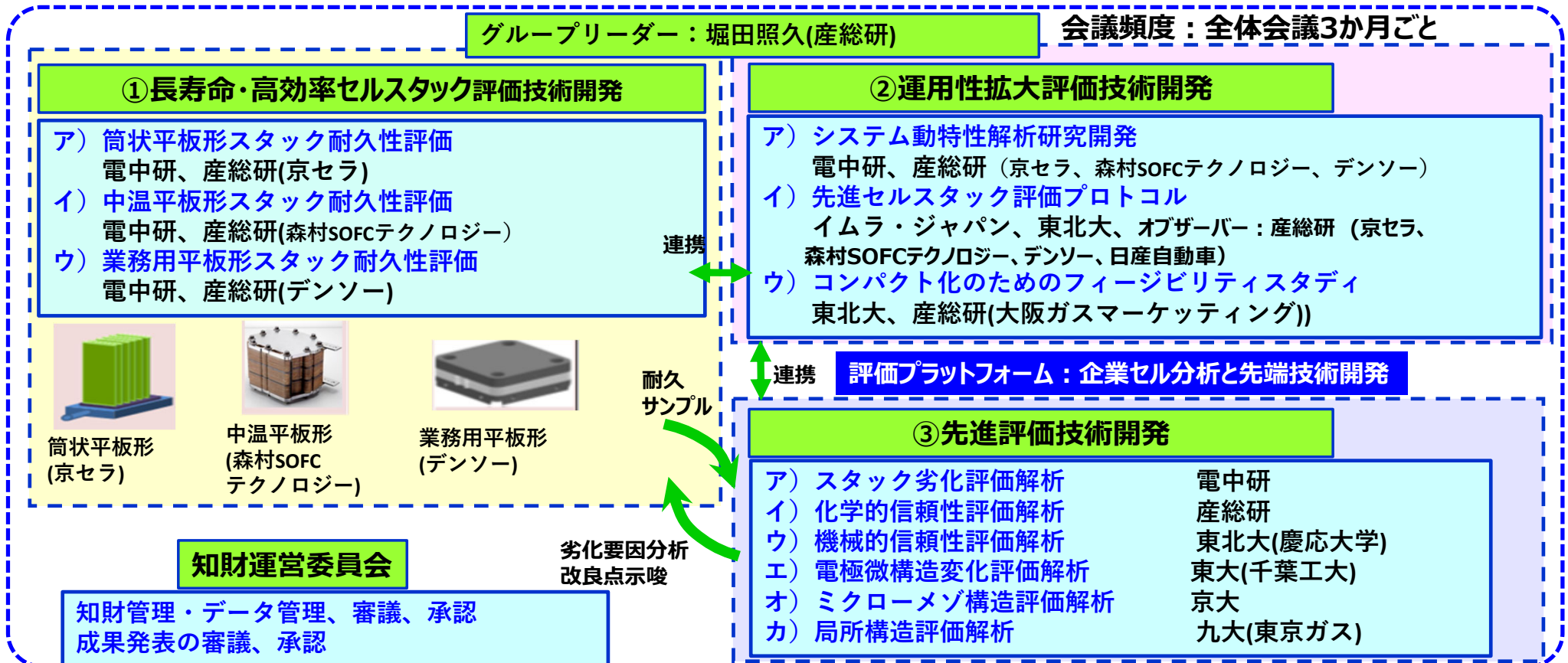


2. 研究開発マネジメント (2) 研究開発スケジュール



2. 研究開発マネジメント (3) 実施体制

- 13万時間耐久・高効率スタックの評価技術・劣化診断法を確立するため、産学官連携体制構築
- 7委託機関、3スタック開発企業・4ユーザー企業(共同実施)、2再委託先(2大学)
- 3つのテーマの評価技術開発が連携して、次世代スタック・システム開発に役立つ評価技術を開発



技術課題解決のために、テーマを超えて取り組みワーキンググループを構築し活動

2. 研究開発マネジメント (3) 実施体制

スタックの耐久・寿命を高度に評価にできる解析技術確立のため、機動的な研究推進体制を整備：ワーキンググループ(WG)を構築して目標達成のための取り組みを推進

WG1. スタック耐久・寿命予測のためのシミュレーション：京大・岩井教授

●目標：スタックの13万時間耐久・寿命予測のシミュレーションを実現。複数基盤機関の連携による各劣化要因・要素の積み上げ、開発企業が使える寿命予測シミュレーション技術の確立。

WG2. 電気化学データの機械学習アプローチ：東大・鹿園教授

●目標：スタックの長期寿命予測のため、セルスタックの過電圧とIR損の電気化学データを集積し、長期劣化をAI 機械学習で予想、短時間データからの寿命予測確立。

WG3. 電極微構造の機械学習アプローチ：東大・鹿園教授

●目標：セル部材の長期寿命予測のため、電極の初期微構造から長期寿命への予測確立。

WG4. 電極微構造の劣化変化説明：東北大・久保教授

●目標：電極微構造変化での構成材料、雰囲気、電圧などの関数として機構解明し、劣化寿命予測に必要なパラメータの精度向上。

WG5. 急速起動評価プロトコル構築に向けた戦略的取り組み：東北大・川田教授

●目標：急速起動が可能なセルスタック評価法構築のため、評価条件の項目や水準を明確化するとともに高性能セルの実用化指針などを示し、規格・標準化構築のための技術データの提供。

WG6. スタックと単セルの抵抗成分分離に関する説明：京大・松井准教授

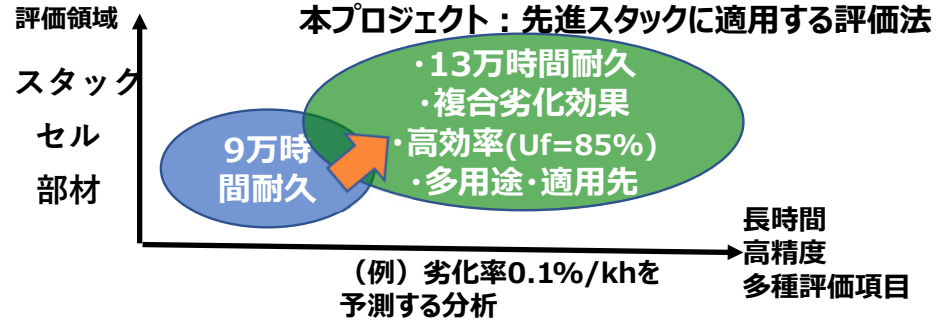
●目標：スタックと単セルでの電気化学的評価法の特徴説明、耐久予測へ。

3. 研究開発成果：（1）開発している評価・解析法とその検討状況

全体目標： 先進SOFCスタックの高効率かつ長期運転を予測する
高度な評価法を確立

成果発表： 企業とのコンフィデンスを守りながら成果をアピール



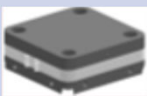
● 基盤技術については成果を学会、論文等で発表。知財化なども検討中。
2022年度： 口頭発表：26件、論文発表：6件、特許出願：1件



劣化評価・解析法	開発項目	進捗・達成内容
セルスタックのシミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 各部材・複合劣化の時間依存性を考慮 応力・破壊シミュレーションのセル～スタックへのマルチスケール化 	<ul style="list-style-type: none"> 劣化要素反応データの集積：IR、過電圧増大 SOFC信頼性デジタルツイン構築、代理モデルによるマクロレベル化
性能表示式法	<ul style="list-style-type: none"> 高効率運転(高燃料利用率)対応、高Ufでの抵抗分離 温度項、時間項を取り入れた改良型性能表示式 	<ul style="list-style-type: none"> Uf=85%で1.5万時間以上耐久運転の抵抗成分分離に適用可能、各項目の追加検討
加速試験法	<ul style="list-style-type: none"> サイクリック電流変化による局所熱加速 	<ul style="list-style-type: none"> 数十回のサイクリックが温度上昇に相当するかの加速劣化相当量を検討
高精度劣化分析法	<ul style="list-style-type: none"> 微量元素移動：酸化物インターコネクト中の酸化物イオン電導、電解質中のプロトン電導 ボタンセルDRT解析や微構造変化の高度化 	<ul style="list-style-type: none"> 主たる伝導種でないものの挙動解明：長期劣化に対する影響度解明 ボタンセルでの解析、モデル材の解析を実セルの局所分布に適用
急速起動停止評価法	<ul style="list-style-type: none"> 急速起動、負荷変動を適正に評価 動特性モデルを構築したシステム解析 	<ul style="list-style-type: none"> 試験テスト装置完成、プロトコル構築中 単セルレベルの動特性モデル完成
革新評価・解析法	<ul style="list-style-type: none"> 電極微構造や電流・電圧特性の機械学習による画像解析、性能予測 	<ul style="list-style-type: none"> 2次元画像からの3次元予測、酸化還元変化予測などが可能に。今後数万時間後の電極微構造変化予測

3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

- 先進スタック長期運転試験： 燃料利用率 $U_f=85\%$ （効率 65% 以上）で1万時間を超える耐久試験達成
- 先進スタック劣化機構解明： 大学・研究機関と連携して高 U_f での評価法開発とその劣化機構解明
- 判明劣化状況： IR抵抗と空気極が主要因、複合的な劣化メカニズムを検討、高 U_f での燃料極過電圧増

スタック形状 (企業名)	劣化主要因 (抵抗増大因子) 最大運転時間	劣化現象	劣化時間 依存性	評価プラットフォーム取組： メカニズム解明・複合化への 取り組み	・判明した高 U_f での劣化率 ・前PJとの相違
筒状平板形 (京セラ) 	<ul style="list-style-type: none"> ・IR抵抗 ・空気極過電圧 (通常運転と同じ) <p>$U_f=80\%$ 20,000h $U_f=85\%$ 20,000h</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・電解質電導度低下 ・空気極/電解質界面絶縁層生成 ・電極組成・微構造変化 ・酸化物ICの酸素リーク 	直線+ $1/2$ 乗速+指数関数	<ul style="list-style-type: none"> ・高U_fで燃料極微構造変化小(産総研) ・不純物蓄積Sは影響小(産総研) ・IC中の酸素透過量評価(産総研) ・製造時セル欠陥検出法開発中(東北大) 	<p>$U_f=80\%$で0.32%/kh $U_f=85\%$で0.37%/kh 通常運転より劣化率上昇</p> <p>・高U_fでの燃料極過電圧上昇観測</p>
中温平板形 (森村SOFCテクノロジー) 	<ul style="list-style-type: none"> ・IR抵抗 ・空気極過電圧 (通常運転と同じ) <p>旧型で1.8万時間 新型</p> <p>$U_f=80\%$ 18,325 h $U_f=85\%$ 17,365h</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・電解質電導度低下 ・空気極/電解質界面絶縁層生成 ・電極組成・微構造変化 ・金属ICの抵抗増大 ・温度分布、変形・シール 	直線+ $1/2$ 乗速+指数関数	<ul style="list-style-type: none"> ・電極劣化評価：燃料下流での燃料極活性点減少も一部あり(京大) ・ボタンセルDRT解析(京大) ・不純物蓄積:S、Si確認影響小(産総研) 	<p>$U_f=80\%$で0.30%/kh $U_f=85\%$で0.35%/kh 通常運転と同等レベル 新型で $U_f=80\%$で0.31%/kh $U_f=85\%$で0.34%/kh</p>
業務用平板形 (デンソー) 	<ul style="list-style-type: none"> ・IR抵抗 ・燃料極過電圧 <p>$U_f=75\%$ 7,400h $U_f=80\%$ 9,000h</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・電解質電導度低下 ・電極/電解質界面絶縁層生成 ・電極組成・微構造変化 ・セルの変形・シール性 ・金属ICの抵抗増大 	直線+ $1/2$ 乗速+指数関数	<ul style="list-style-type: none"> ・ボタンセル電極劣化評価：DRT解析(京大) ・応力機械的評価(東北大) ・燃料極の不純物分析、金属ICの酸化・抵抗増(九大) 	<p>$U_f=75\%$ 0.63%/kh $U_f=80\%$ 0.68%/kh 燃料極過電圧で劣化率増大</p>

3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

- スタック劣化による抵抗増分 ΔR , $\Delta \eta$ を記述する経験式構築：各成分の足し合わせ(暫定劣化予測)
- 劣化記述の精緻化：各劣化要因・メカニズム足し算、掛算、逐次・並列反応などの複合効果を検討中

部材、部位	抵抗種	劣化現象・要因	メカニズム	時間依存性(暫定)
空気極	分極抵抗	不純物(例 S)による被毒、Srの移動、組成変化、Co析出	絶縁層SrSO ₄ などの生成と表面反応失活速度低下	活性表面積現象・拡散：時間の1/2乗、指数関数
電極/電解質界面	オーム損	SrZrO ₃ 等絶縁層生成	絶縁層生成 電極・電解質成分反応	拡散現象：時間の1/2乗
電解質	オーム損	相変態：正方晶の生成 Ni固溶による正方晶誘発	原子再配列によるイオン電導度低下	正方晶化への緩和時間解明：時間の対数
燃料極	分極抵抗	Ni凝集、移動、蒸発によるTPB長減少	YSZのアンカー効果が作用せずNi粒子の移動、凝集、酸化還元	時間の1/2もしくは急激な劣化
インターコネクト	オーム損	金属表面での酸化皮膜厚膜化 酸化物中の酸素透過	Cr蒸発を防ぐ酸化皮膜の成長、酸化物中のイオン拡散	時間の1/2乗
スタック・セル集合体	オーム損	部材の変形や応力集中	変形による接触面積変化、シール性変化で抵抗増	時間の1乗ほか。破壊的劣化になる可能性

作動電圧： $E = E^1 - (I\Delta R(t) + \Delta \eta(t))$

(E^1 :初期電圧)

これまでわかっている劣化要因の時間依存性を考慮：単純和での経験式

抵抗増大経験式

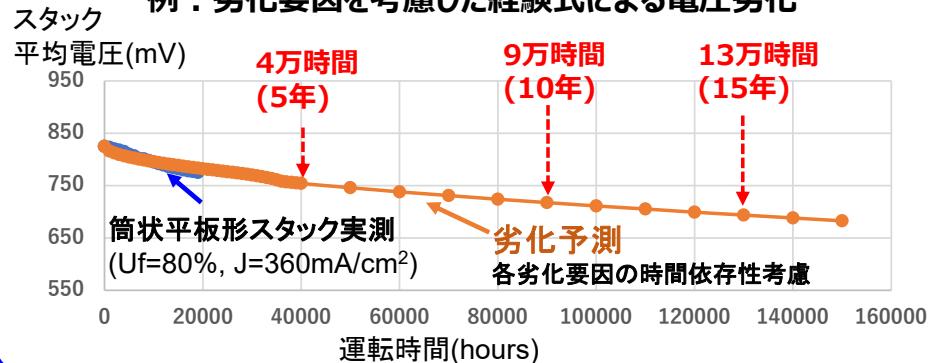
$$\Delta R + \Delta \eta = A(t) + B\sqrt{t} + C\exp(-t) + \dots,$$

変形
シール

被毒、微構造変化、
絶縁層、IC酸化

相変態

例：劣化要因を考慮した経験式による電圧劣化



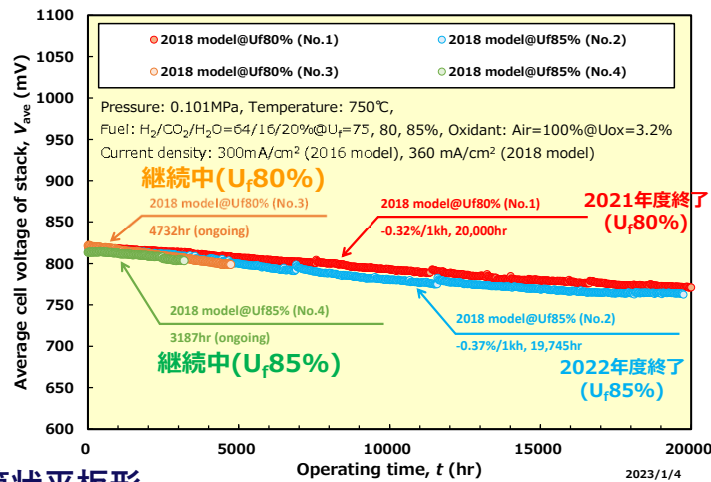
今後劣化複合効果を検討
開発企業の寿命予測へ

3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

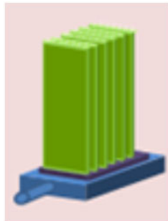
ア) 筒状平板形スタック耐久性評価：電力中央研究所、産業技術総合研究所(京セラ)

- 高効率スタック試験：燃料利用率 $U_f=80\%$ 、 85% で2万時間の耐久時間達成
- 高燃料利用率試験でも安定に作動、抵抗成分分離に成功：IR損と空気極過電圧が主たる劣化要因
- $U_f=85\%$ での劣化加速、燃料極過電圧増大を観測：高効率長期運転時の劣化変化を初めて観測

平均セル電圧時間推移

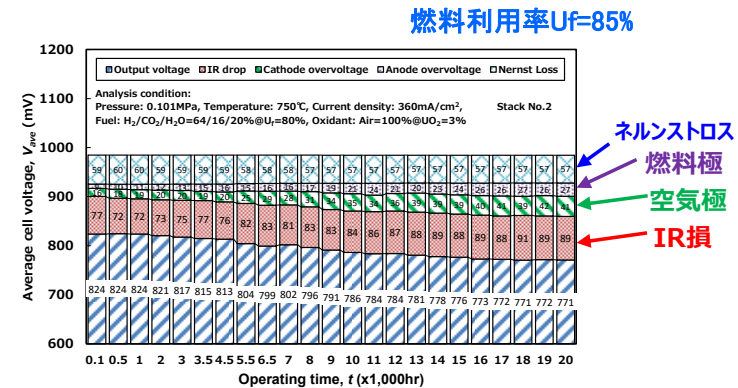
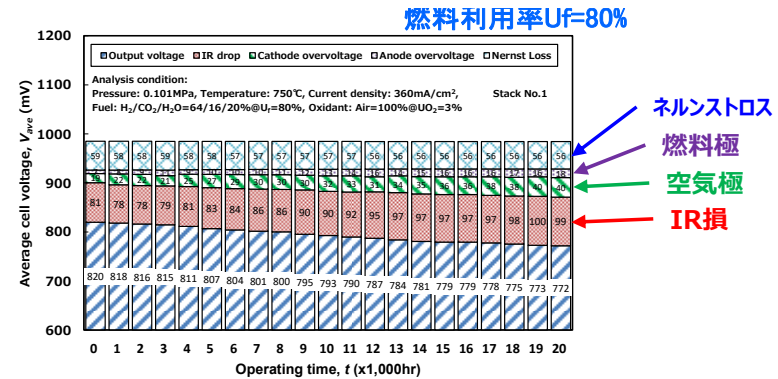


筒状平板形
スタック外觀



高 U_f で
燃料極過
電圧上昇
傾向

性能表示式による経時的な性能要因分析

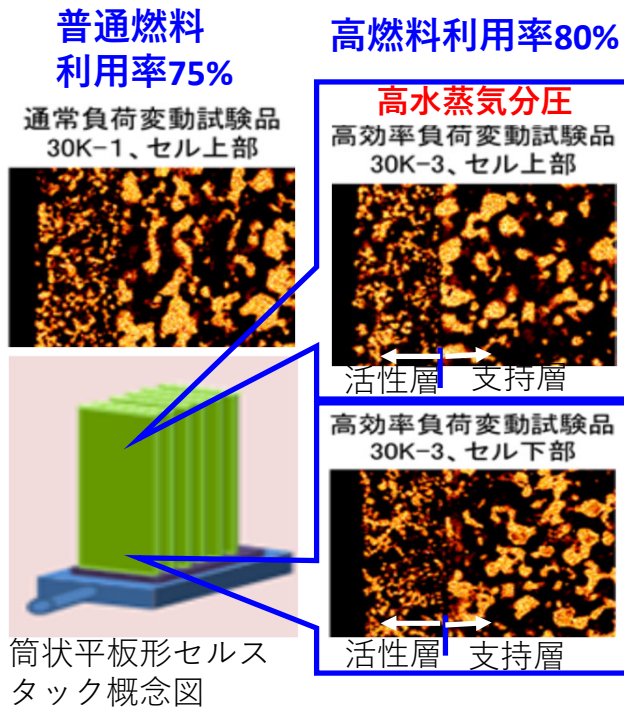


3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

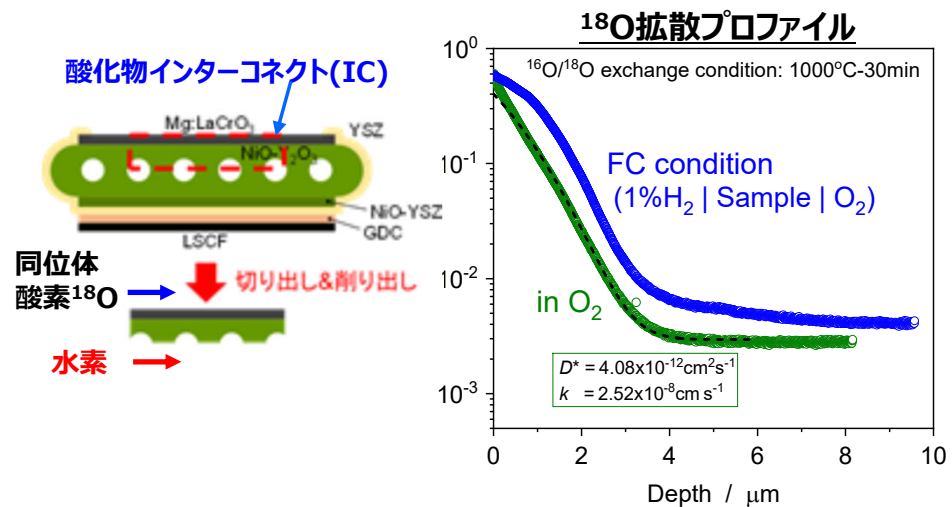
ア) 筒状平板形スタック耐久性評価 (解体分析、部材劣化解析：産業技術総合研究所(京セラ))

- 高燃料利用率運転後の燃料極微構造解析：Ni粒子凝集、移動は検出されず = 燃料極性能の維持
- 実機酸化物インターコネク特(IC)材料の酸素透過量評価：同位体酸素($^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$)交換法適用
- 運転条件でのIC中酸素透過量：同一雰囲気での酸素透過量より増大 (酸素空孔量増大により)

微構造分析：高燃料利用率運転後の燃料極中Ni粒子の分布(SEM-WDS像) (産総研)



IC中の酸素透過量評価
SOFC環境下での新たな評価(産総研)



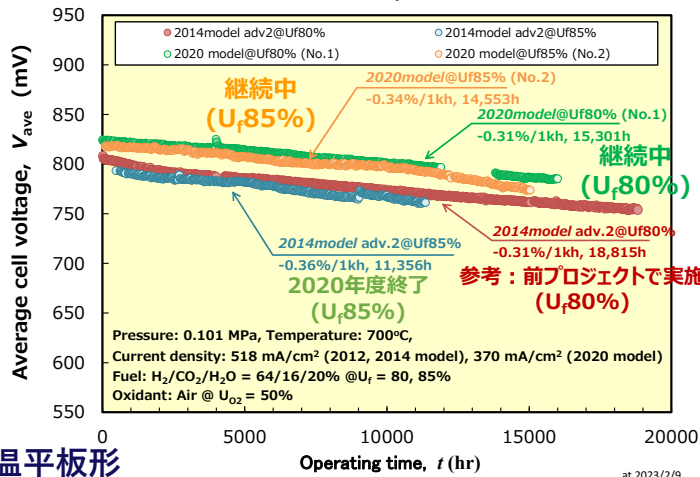
- 両側 O_2 の通常同位体交換後に比べ、より多くの ^{18}O が内部に侵入
- Ni-YSZサーメット燃料極への劣化影響度などを解明予定

3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

イ) 中温平板形スタック耐久性評価：電力中央研究所、産業技術総合研究所(森村SOFCテクノロジー)

- 高効率スタック(新モデル)試験：燃料利用率 $U_f=80\%$ で1.6万時間、 $U_f=85\%$ で1.5万時間の耐久達成
- 新モデルでの高効率運転耐久性を確認。前モデルと同等の劣化率で推移。
- 高燃料利用率試験でも安定に作動、抵抗成分分離に成功：IR損と空気極過電圧が主たる劣化要因

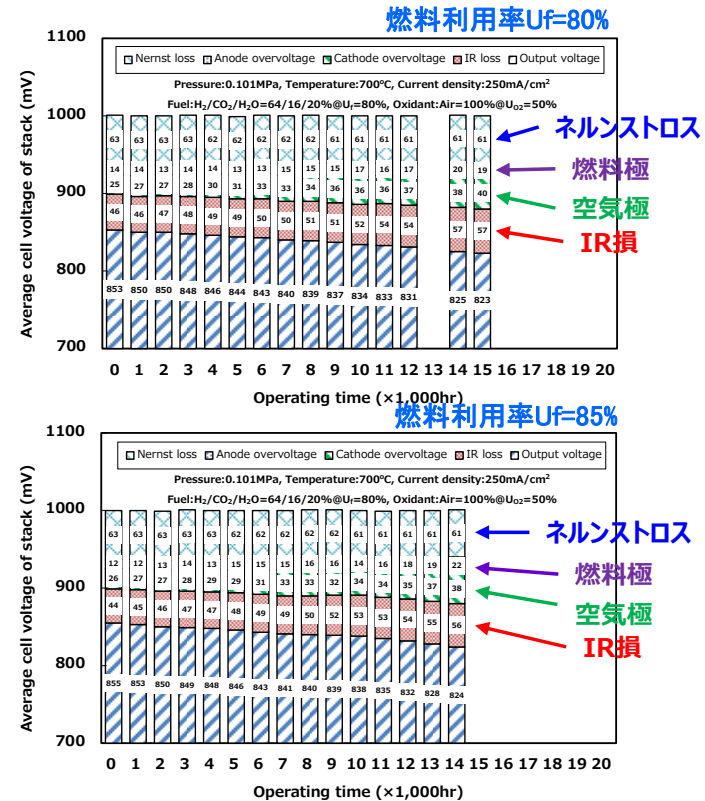
平均セル電圧時間推移
(参考 前PJ： $U_f=80,85\%$)



中温平板形
スタック外観
(新型スタック)



性能表示式による経時的な性能要因分析



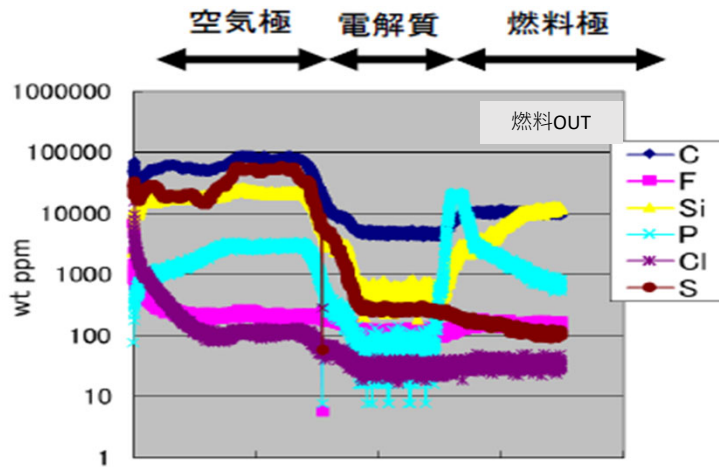
3. 研究開発成果： (2) スタック耐久性評価及び評価プラットフォームでの取組

イ) 中温平板形スタック耐久性評価 (解体分析：産業技術総合研究所(森村SOFCテクノロジー)、京大)

- 旧スタック(Uf=80%, 1.8万時間運転)の解体分析：電極での不純物蓄積増大はなく性能良好
- セル材料、スタックハウジング、ガス供給などからの不純物抑制を確認
- 高燃料利用率試験での燃料極微構造変化：FIB-SEMによる三相界面量評価で変化小
- IR損、電極過電圧の増大に関し、劣化要因を複合させた効果を検討中

解体分析・部材劣化解析：旧型スタック Uf80%, 1.8万時間耐久

旧スタックの不純物分析例 SIMSによる深さ方向分析(産総研)

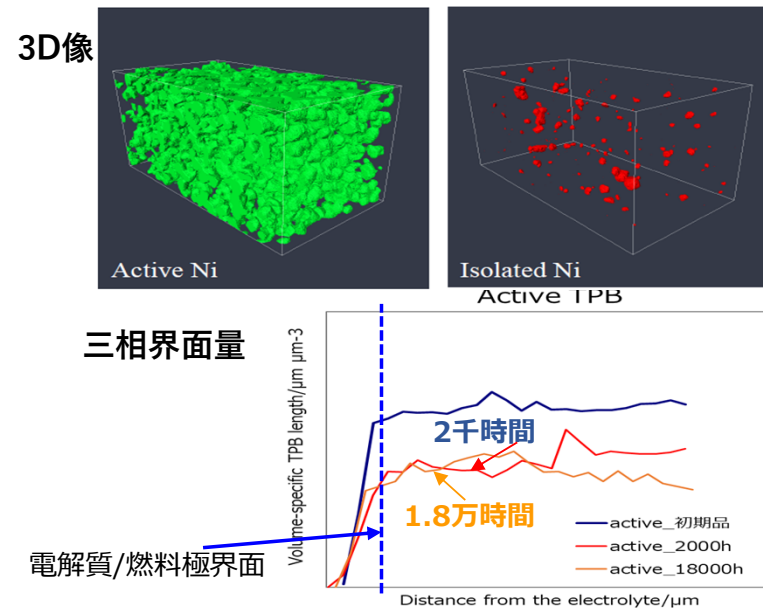


電極の不純物量は、1万時間耐久品と同程度

旧セルスタックでP濃集や微構造変化有
→改良して新型セルスタック構築

燃料極微構造の分析例(京大)

2000h以降、燃料極三相界面長の変化は小



→ 2千時間以上での三相界面長保持

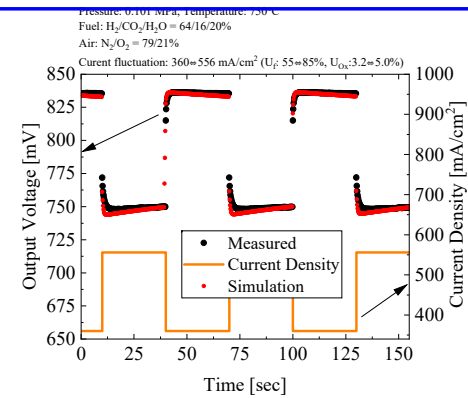
3. 研究開発成果： (3) 運用性拡大評価技術開発 システム動特性解析

ア) システム動特性解析研究開発：電力中央研究所

- 熱移動を考慮した温度計算モデル、ならびに、温度項を有する性能表示式を導入した単セル動特性モデルを開発した。また、これによる解析は実セルの変動負荷試験を定量的に良好に再現可能であることを示した。
- 開発した動特性モデルを用いてガス分圧、電流密度等の分布を解析した。結果、周期的な電流密度分布変化に対する電圧応答特性を解析的に得られたガス分圧や電流密度分布を用いて説明可能であることを示した。

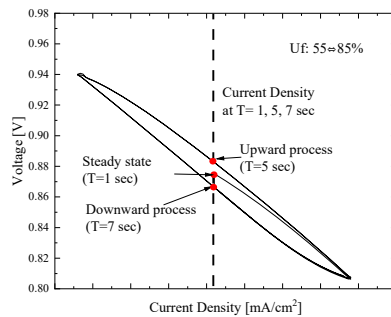
動特性解析を用いた負荷変動試験の電圧応答再現

単セル内で生じうると考えられる各種反応に生じる発熱や燃料／セル／空気間の熱移動を考慮し、ならびに、性能表示式の温度依存項を導入した単セル動特性解析モデルを開発した。開発したモデルを用いて、実SOFCに対して行われた変動負荷試験を再現した。ここでは矩形波状に与えた電流密度(入力、右軸)に対する電圧応答の測定値(黒)と、計算値(赤)を比較した。開発した動特性モデルは、測定結果を定量的によく再現できており、電流密度変化に対するガス置換、セル温度変化による時間遅れの影響を考慮した計算が可能であることを示した。



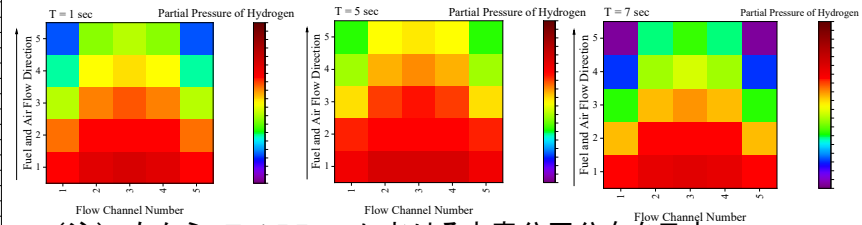
内部状態量の非定常解析を通じたセル応答性評価

負荷変化運転時におけるセル内部の電流密度やガス分圧分布を解析した。結果、非定常時の電流電圧特性のヒステリシスに内部状態量変化の時間遅れが影響していることを解析的に示すことができた。



【下段図の説明】左から

- ①電流密度(入力)とセル電圧(出力)の時間履歴
- ②変動運転下における電流電圧変化のヒステリシス
- ③④燃料・空気並行流セルにおける水素分圧変化
- (③: 電流密度上げ過程 / ④下げ過程)



(注) 左から、T=1,5,7 secにおける水素分圧分布を示す。上方向に燃料・空気が流れる並行流セルを想定している。

3. 研究開発成果： (3) 運用性拡大評価技術開発 評価プロトコル開発

イ) 先進セルスタック評価プロトコル開発 (イムラ・ジャパン, 東北大学)

- 先進スタックに要求される急速起動性を市場ニーズから抽出、プロトコルの手順に反映：21K/min
- 急速起動を実施できる試験装置の完成、プロトコル策定へ前進

イムラ・ジャパン

達成

● 市場ニーズの抽出
⇒ 急速起動・停止
昇温 21°C/分

◆セルスタックの仕様(現状)と市場ニーズの抽出

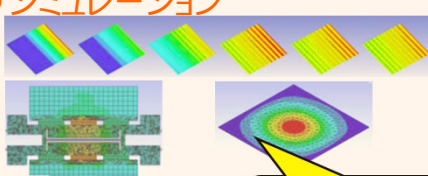
項目	システム仕様	スタック要求仕様
起動性	試験時： 着火遅延40分、発車遅延200分	温向上昇2.8°C/min
ON/OFF	月1回の停止(ガス漏れ検知) 12回×10年×3(安全係数)×360回	665°C-250°C: 3.4°C/min (水素による冷却、250°Cからは空 気による冷却)
シャットダウン	実使用状態を模擬したバースン試験(OC試験)	腐化によるセルの劣化
耐振動性	阪神大震(0.8G以上)	1G(前地盤)、0.6G(補正地盤)
連続耐久性	35W半稼働(空冷時70°C以内)	
負荷変動耐性	ターンダウン100W、アイドリング35W	特になし

項目	市場ニーズ	
第一ステップ	第二ステップ(車載)	
起動性	30分以内	15分以内(車載想定)
ON/OFF	1回/日の停止(5,400回)	5回/日の停止(27,000回)
シャットダウン	1回/月(180回)	-

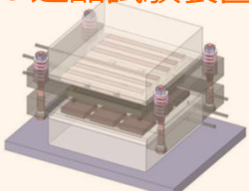
実機で想定される急速起動・停止
プロトコルの手順&条件を反映
(昇温21°C/分以上)

東北大学

● シミュレーション



● 過酷試験装置



項目③ウ) で開発、達成見込み

市販セル
燃料極支持型

急速起動停止を想定した
耐久性評価プロトコルの策定
(評価項目・水準)

高性能セル実用化指針、
セル評価基盤技術の提示

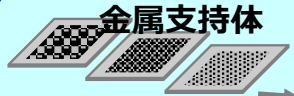
急速起動停止時の
実態把握・課題を明確化

達成

温度を制御変数に設定

開発セル
金属支持型

金属支持体



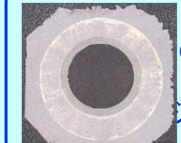
各種孔径,開孔率

● 擬似セル提供

発注済

擬似セル

セラミック
シート接着



● 金属支持型セルの開発

シート成型法の適用

理論起電力発生

=> ● 擬似セルによる局所状態測定

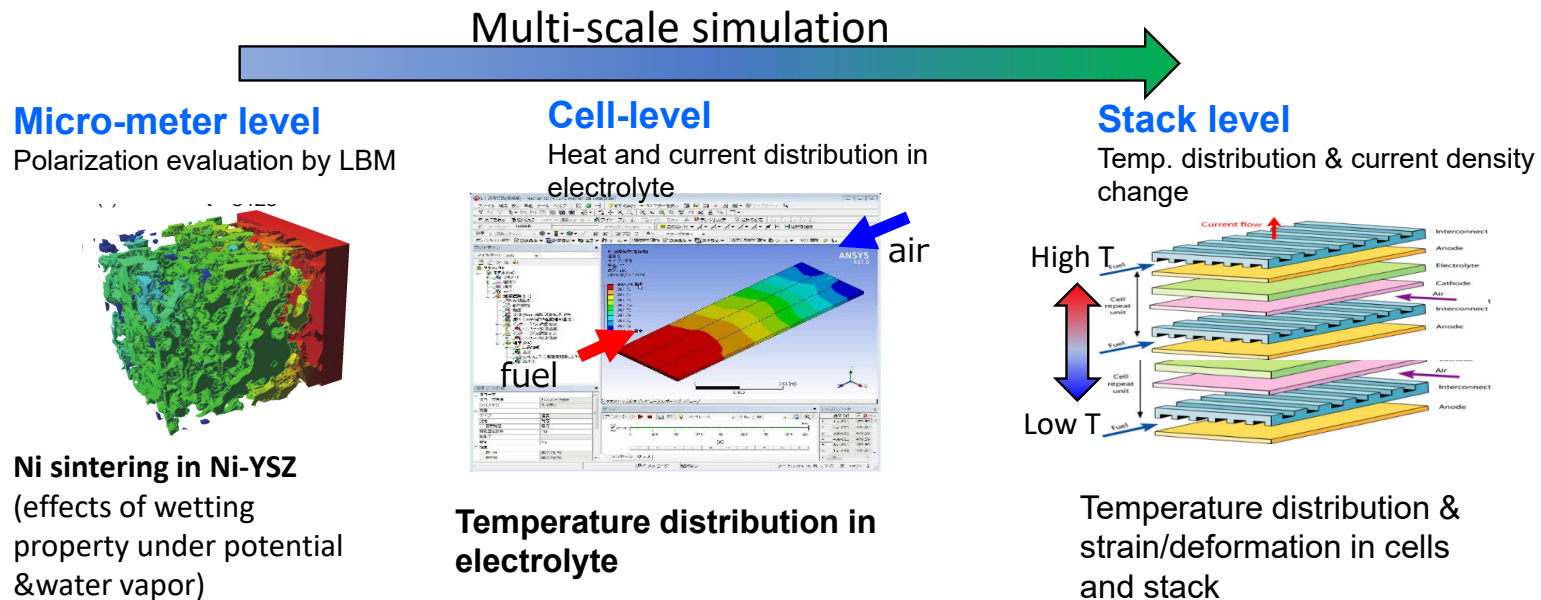
連携の中でアイデアが浮上
共同で検討開始

3. 研究開発成果： (4) 先進評価技術開発

- 基盤研究機関での先進評価解析法を深化：個別・部材での劣化メカニズムを複合化した総合的な劣化メカニズム解明中
- 取り組むべき個別課題に対し、ワーキンググループを構築して機動的に研究開発を推進
- 重点的な取り組み→温度分布の解明：ガス流配、電気化学反応の不均一性によって発生、スタック内では数10K、セル内で数Kの差
距離スケールはスタック内、セル面内、電極厚さ方向など、数10cm～ μm レベル
定常状態での温度分布→時定数の大きい劣化によって温度分布も変化
非定常・過渡状態の温度分布→急速起動・負荷変動などの温度分布

開発中の高度評価法：スタックの性能表示式、独自コードによる熱流体解析、ANSYS-FLUENTなどの商用ソフトへのシミュレーション展開、マイクロレベルの画像AI劣化予測、分子レベル動力学計算

スタック開発企業が使える高度な評価法、簡便評価・解析技術の提供：開発の促進



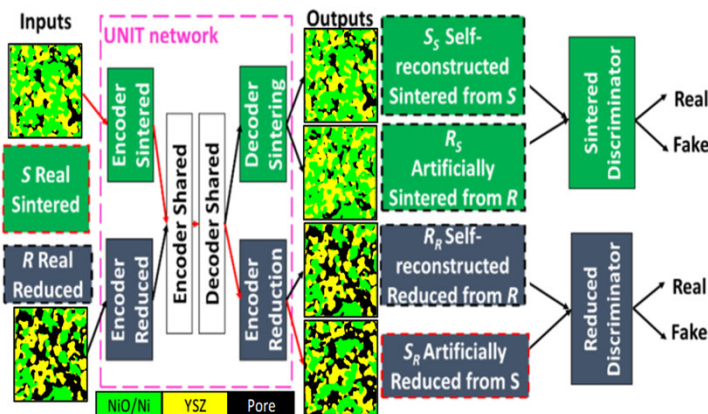
3. 研究開発成果： (4) 先進評価技術開発 AI機械学習の高度化

AI機械学習による電極構造の評価 (東京大学、京都大学)

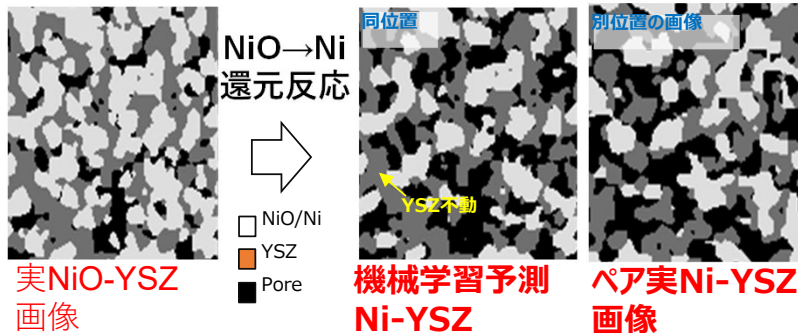
- UNIT, U-netにより電極微構造変化の予測に成功 ⇒ 還元反応, 焼結等による構造変化予測
- 様々な微構造を学習して、電極微構造変化を予測するツールを開発：初期微構造から長期寿命予測へ

UNITによるNiO還元反応後の構造変化予測

NiO-YSZとNi-YSZの実画像ペア(別位置で可)で Unsupervised image-to-image translation (UNIT)を教育し、YSZ不動条件下における還元後のNi構造を予測

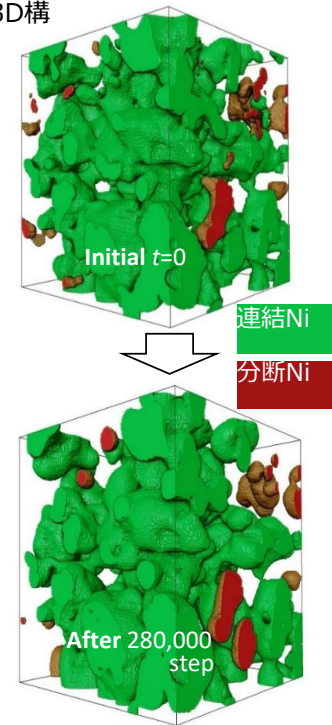
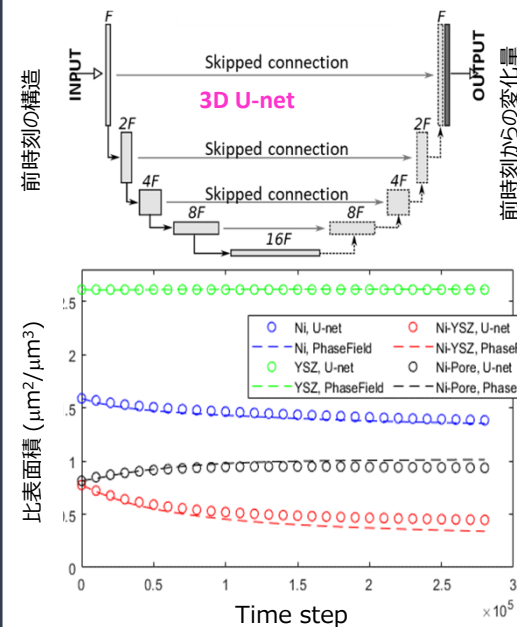


反応(劣化)前後のペア画像で教育すれば、反応後の構造を予測することが可能



U-netを用いたNi焼結3D電極構造変化予測

機械学習(U-net)を用いて、Phase field法Ni焼結3D構造変化を高速かつ良好に再現



3. 研究開発成果： (4) 先進評価技術開発 シミュレーション技術の高度化

シミュレーション技術の高度化 (劣化要素データ複合・3D化) (京大、東北大ほか)

これまでの取り組み及び基本式:1要因の劣化を考慮
電荷移動律速の電気化学一般式: Butler-Volmerの式

$$J = J_0 [\exp(n\alpha f \eta_{act}) - \exp(n\alpha(1-f)\eta_{act})]$$

酸素還元: $O_2 + 4e^- = 2O^{2-}$ J_0 : 交換電流密度、 n : 電子数

燃料酸化: $2H_2 + 2O^{2-} = 2H_2O + 4e^-$

- 劣化現象と関係する交換電流密度 J_0 の時間依存性を検討中。
 - 電極表面の活性点変化、微構造変化などを考慮。
- 空気極表面が失活し、反応機構が変化して関与する電子数などが変化する場合は、その効果も考慮必要

前PJ成果 Cr被毒シミュレーション: 京大 岩井教授グループ

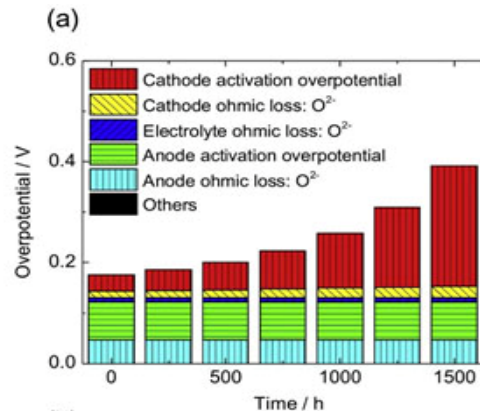
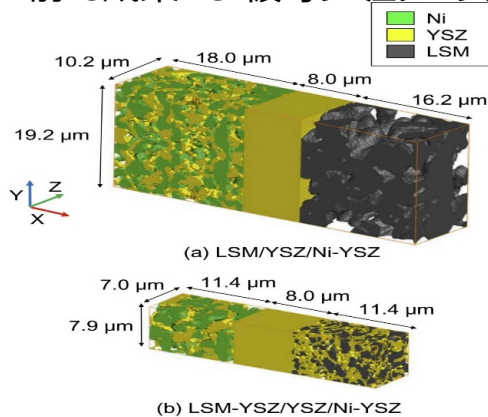


Fig. 1. Schematic image of the calculation domains. (a) LSM/YSZ/Ni-YSZ and (b) LSM-YSZ/YSZ/Ni-YSZ

K. Miyoshi et al. / Journal of Power Sources 326 (2016) 331e340

本PJ: 複数劣化過電圧を考慮

空気極性能劣化

- 空気極被毒
- 空気極内組成変化
- 空気極微構造変化

燃料極性能劣化

- 燃料極被毒
- 燃料極内Ni移動
- 燃料極微構造変化

●セル内の温度分布、電流密度分布を考慮

●さらにスタック内分布を考慮

■ 上記様々な劣化要因の、

- 複合的影響
 - 劣化影響時間
 - 影響場所、面積
- 等を考慮、さらにオーム損分・ガス拡散等も考慮

■ セル、スタックの総合的シミュレーションを検討中
(空気極過電圧、電解質相変態、IC抵抗増を組み込んだ劣化シミュレーションは実施済み)

4. 今後の見通しについて

(1) 実用化・事業化のイメージ（成果がどのように使われるか）

先進評価・解析技術のうち、規格・標準への技術データとして使用できるものは規格策定へ貢献
セルスタック応力解析シミュレーションは、参画企業でカスタマイズ、汎用ソフトに組み込み公開、販売へ
AI機械学習、欠陥判別などの画像解析技術については、企業が持ち帰り生産性向上、一部知財化実施
セルスタック耐久性評価法・診断法は、評価装置などへの開発へ

(2) 実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針

多くの企業が使用できる評価法については、知財化・プログラム化し権利化や実施許諾等を検討
成果を使用した企業での効果をモニタリングし新たな評価法開発にフィードバック

(3) その他の取り組み

本燃料電池プロジェクト事業に参画する他のプロジェクト(プロトン、rSOC)とも連携する
SOFC-ECシステム技術を考慮した関係者との技術的情報交換なども進め、ニーズを把握する
脱炭素に向けたSOFC-ECの役割、商用化・普及への技術的な必要性とその評価も調査する