(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2020年9月24日(24.09.2020)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2020/189730 A1

(51) 国際特許分類:
G06F 30/20 (2020.01) *H01M 6/50* (2006.01)
H01M 6/36 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2020/012068

(22) 国際出願日： 2020年3月18日(18.03.2020)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2019-051225 2019年3月19日(19.03.2019) JP

(71) 出願人: 株式会社ＧＳユアサ (**GS YUASA INTERNATIONAL LTD.**) [JP/JP]; 〒6018520 京都府京都市南区吉祥院西ノ庄猪之馬場町１番地 Kyoto (JP).

(72) 発明者: 岡部 洋輔 (**OKABE, Yosuke**); 〒6018520 京都府京都市南区吉祥院西ノ庄猪之馬場町１番地 株式会社ＧＳユアサ内 Kyoto (JP). 榎本 博之 (**ENOMOTO, Hiroyuki**); 〒6018520 京都府京都市南区吉祥院西ノ庄猪之馬場町１番地 株式会社ＧＳユアサ内 Kyoto (JP). 山手 茂樹 (**YAMATE, Shigeki**); 〒6018520 京都府京都市南区吉祥院西ノ庄猪之馬場町１番地 株式会社ＧＳユアサ内 Kyoto (JP).

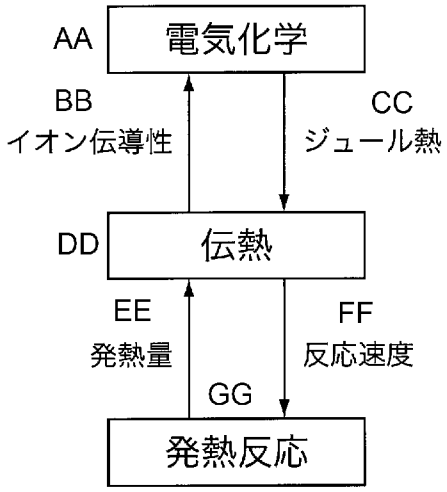
(74) 代理人: 河野 英仁，外 (**KOHNO, Hideto** et al.); 〒5400035 大阪府大阪市中央区釣鐘町二丁目４番３号 河野特許事務所 Osaka (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS,

(54) **Title:** SIMULATION METHOD, SIMULATION DEVICE, AND SIMULATION PROGRAM

(54) 発明の名称： シミュレーション方法、シミュレーション装置、及びシミュレーションプログラム



AA Electrochemistry
BB Ion conductivity
CC Joule heat
DD Heat transfer
EE Calorific value
FF Reaction speed
GG Exothermic reaction

(57) **Abstract:** The present invention provides a simulation method, a simulation device, and a simulation program. A method for simulating a cell in which the electrolyte is a molten salt, the simulation method involving simulating the behavior of the cell and including a process for raising the temperature of the molten salt.

(57) 要約： シミュレーション方法、シミュレーション装置、及びシミュレーションプログラムの提供。 溶融塩を電解質とする電池のシミュレーション方法であって、溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする。

［続葉有］

MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

一　国際調査報告（条約第21条(3)）

明　細　書

発明の名称 ：

シミュレーション方法、シミュレーション装置、及びシミュレーションプログラム

技術分野

[0001]　本発明は、シミュレーション方法、シミュレーション装置、及びシミュレーションプログラムに関する。

背景技術

[0002]　電池の一種として、溶融塩を電解質とした熱電池が知られている（例えば、特許文献１を参照）。熱電池は、貯蔵型の一次電池であり、製造時や貯蔵時には溶融塩は固体である。溶融塩では、電解質が溶融しない限り、電池反応は進行しない。このため、熱電池は、５～１０年またはそれ以上の期間が経過した場合であっても、製造直後と同じ電池特性を発揮することができる。一方、熱電池の電解質は、高温に加熱されることによって溶融状態となり、良好なイオン伝導性を示す。熱電池は、高温において活性化し、外部へ電気を供給することができる。そのため、温度分布と電流電圧特性との間には密接な関係があり、熱電池の設計や品質管理において温度分布を把握することは非常に重要である。高温に加熱して使用開始するという製品の特性から、個々の製品の性能確認を事前に行うことができないため、シミュレーションを用いた設計や品質管理がとりわけ重要である。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：特開２００１－１７９３３６号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004]　このような熱電池の開発において、熱電池の温度と電流・電圧に関する挙

動をシミュレートすることは重要である。特に、電池内部の温度をセンサで計測することは大変に難しく、シミュレーションの活用は不可欠である。しかしながら、溶融塩を昇温させるための発熱反応を含む各種の反応を考慮して、熱電池の挙動をシミュレートした事例は存在しない。

[0005] 本発明は、斯かる事情に鑑みてなされたものであり、発熱反応を含む各種反応を考慮して、熱電池の挙動をシミュレートするシミュレーション方法、シミュレーション装置、及びシミュレーションプログラムを提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0006] シミュレーション方法は、溶融塩を電解質とする電池のシミュレーション方法であって、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする。

[0007] シミュレーション装置は、溶融塩を電解質とする電池に関して、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートするシミュレーション実行部と、前記シミュレーション実行部によるシミュレーション結果を出力する出力部とを備える。

[0008] シミュレーションプログラムは、コンピュータに、溶融塩を電解質とする電池に関して、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする処理を実行させるためのコンピュータプログラムである。

発明の効果

[0009] 上記構成によれば、発熱反応を含む各種反応を考慮して、熱電池の挙動をシミュレートすることができる。

図面の簡単な説明

[0010] [図1]本実施の形態に係るシミュレーションシステムの全体構成を説明する模式図である。

[図2]サーバ装置の内部構成を説明するブロック図である。

[図3]電池テーブルの一例を示す概念図である。

[図4]クライアント装置の内部構成を説明するブロック図である。

[図5]熱電池の構成を説明する縦断面図である。

[図6]典型的な溶融塩のイオン伝導率の温度依存性を示すグラフである。

[図7]シミュレーション手法の概略を説明する説明図である。

[図8]典型的な正極材料における固相中の電荷担体濃度と開回路電位（ＯＣＰ）との関係を示すグラフである。

[図9]クライアント装置に表示されるユーザインタフェース画面の一例を示す模式図である。

[図10]サーバ装置及びクライアント装置が実行する処理の手順を説明するフローチャートである。

[図11]サブモデルの回路図である。

[図12]シミュレーション結果の表示例を示す模式図である。

[図13]実施の形態２における計算オプションを説明する説明図である。

[図14]実施の形態３における計算オプションを説明する説明図である。

[図15]実施の形態４における通電開始条件の入力画面である。

[図16]熱電池、電気回路及び熱回路を含む回路シミュレーションの例を示す回路図である。

[図17]実施の形態６における発熱密度の与え方を説明する説明図である。

[図18]実施の形態７における結果表示画面の一例を示す模式図である。

[図19]実施の形態８における結果表示画面の一例を示す模式図である。

発明を実施するための形態

[0011] シミュレーション方法は、溶融塩を電解質とする電池のシミュレーション方法であって、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする。

この構成によれば、溶融塩を昇温させる過程を含むような電池についての挙動をシミュレートできる。

[0012] 前記溶融塩のイオン伝導率は温度の関数であり、前記イオン伝導率は、第１の閾値温度以下で絶縁性の値を示し、第２の閾値温度以上で導電性の値を示してもよい。この構成によれば、イオン伝導率が温度の関数であり、第１

の閾値温度以下で絶縁性の値を示し、第２の閾値温度以上で導電性の値を示すような溶融塩を有する電池について挙動を推定できる。

[0013] 前記溶融塩を昇温させるための発熱反応に基づき、前記電池の挙動をシミュレートしてもよい。この構成によれば、溶融塩を昇温させるための発熱反応に基づき、電池の挙動をシミュレートするので、電池内部で起こっている現象を的確に反映させて電池の挙動をシミュレートすることができる。例えば、本シミュレーション方法は、発熱反応やジュール発熱の時間推移を反映させた電池内部の抵抗、電流、端子電圧等の時間変化、並びに、電池内部の電流密度分布、電位分布及び温度分布を計算することができる。

[0014] 前記発熱反応とジュール発熱との連成解析により前記電池の挙動をシミュレートしてもよい。連成とは、複数の物理現象を相互に関係付けることである。例えば、ジュール発熱は伝熱と電流との連成現象である。電池の発熱反応及びジュール発熱は独立した物理現象ではなく、伝熱といった物理現象を介して相互に関連しながら進行するので、連成解析を行うことにより、電池内部で起こっている現象を的確に反映させて電池の挙動をシミュレートすることができる。

[0015] 前記電池は、発熱源と、前記発熱源の燃焼により発熱が開始する発熱体と、正極層、電解質層及び負極層を積層してなる発電セルとを含み、前記電池は、前記正極層、前記電解質層及び前記負極層の積層方向に沿って、前記発熱体及び前記発電セルが積層されたバイポーラ型の熱電池であってもよい。本明細書において、バイポーラ電池とは、筐体内に構成された複数の電極が電気的直列に接続されている電池のことを指す。この構成によれば、発熱体と発電セルとが積層されたバイポーラ型の熱電池をシミュレーションの対象とすることができる。

[0016] シミュレーション方法は、前記発熱源の充填量と温度とに基づき、前記発熱反応における発熱量を計算してもよい。この構成によれば、本シミュレーション方法は、例えば、アレニウス反応式を用いて、発熱反応における発熱量を計算することができる。

[0017] 各層の物性値から算出した等価物性値を用いて、伝熱を計算してもよい。ここで、各層は、正極、電解質、負極、発熱体などの複合材料からなる。この構成によれば、各層毎に熱伝導率などの物性値を計算する必要がないので、計算要素数を低減することができ、計算負荷を軽減できる。

[0018] シミュレーション方法は、前記発熱反応における発熱密度を位置と時間との関数として与えてもよい。この構成によれば、本シミュレーション方法は、実験結果又は別のシミュレーション結果として得られた発熱密度の値を用いることによって、計算負荷を軽減できる。

[0019] シミュレーション方法は、選択した一部の層を代表層として用いて各層の電流分布を計算してもよい。この構成によれば、本シミュレーション方法は、選択した一部の層を用いて電流分布を計算するので、計算負荷を軽減できる。

[0020] シミュレーション方法は、前記積層方向の電流密度のみを用いて各層の電流分布を計算してもよい。この構成によれば、本シミュレーション方法は、電流計算における次元数を減らすことができるので、計算負荷を軽減できる。

[0021] 前記積層方向及び前記積層方向と交差する交差方向にメッシュ分割した要素を用いて各層の電流分布を計算してもよい。この構成によれば、例えば直交メッシュを用いることにより、計算を安定化できる。

[0022] シミュレーション方法は、前記電池の起電力を計算する手順と、前記電池の内部抵抗を計算する手順と、前記電池の外部負荷抵抗、並びに、計算した起電力及び内部抵抗の値に基づき、次の計算ステップにおける電流値を計算する手順とを繰り返すサブモデルを用いて、電流計算を実行してもよい。この構成によれば、本シミュレーション方法は、上記サブモデルを用いて、電流境界条件を決定することができる。

[0023] シミュレーション装置は、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートするシミュレーション実行部と、前記シミュレーション実行部によるシミュレーション結果を出力する出力部とを備える。

この構成によれば、本シミュレーション装置は、溶融塩を昇温させる過程を含むような電池についての挙動をシミュレートできる。例えば、本シミュレーション装置は、発熱反応やジュール発熱の時間推移を反映させた電池内部の抵抗、電流、端子電圧等の時間変化、並びに、電池内部の電流密度分布、電位分布及び温度分布を計算することができる。

[0024] 前記シミュレーション実行部は、前記電池に接続された電気回路及び熱回路の少なくとも一方をシミュレートしてもよい。この構成によれば、溶融塩を電解質とする電池を含んだ電気回路又は熱回路の全体をシミュレートできる。

[0025] 前記シミュレーション実行部は、温度分布、電圧分布、電流密度分布、電流値又は端子間電圧の経時変化のうち少なくとも２つのグラフを生成し、前記出力部は、生成した前記２つのグラフを同一画面に表示させるべく、前記グラフのデータを表示装置へ出力してもよい。この構成によれば、直感的に電池内の各物理量を把握でき、これらの物理量間の複雑な関係を理解しやすくなるような情報を提供できる。

[0026] シミュレーションプログラムは、コンピュータに、溶融塩を電解質とする電池に関して、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする処理を実行させるためのコンピュータプログラムである。

この構成によれば、本コンピュータプログラムは、溶融塩を昇温させる過程を含むような電池についての挙動をシミュレートできる。例えば、本コンピュータプログラムは、発熱反応やジュール発熱の時間推移を反映させた電池内部の抵抗、電流、端子電圧等の時間変化、並びに、電池内部の電流密度分布、電位分布及び温度分布を計算することができる。これらの発熱に加えて、電気化学反応による反応熱を加味することもでき、その場合はより精緻なシミュレーションを実施できる。さらに、「融解潜熱による吸熱」、或いは「エントロピーによる吸発熱」を考慮してもよい。

[0027] 前記電池に接続された電気回路及び熱回路の少なくとも一方をシミュレートしてもよい。この構成によれば、溶融塩を電解質とする電池を含んだ電気

回路又は熱回路の全体をシミュレートできる。

[0028] 温度分布、電圧分布、電流密度分布、電流値又は端子間電圧の経時変化のうち少なくとも２つのグラフを生成し、生成した前記２つのグラフを同一画面に表示させるべく、前記グラフのデータを表示装置へ出力してもよい。この構成によれば、直感的に電池内の各物理量を把握でき、これらの物理量間の複雑な関係を理解しやすくなるような情報を提供できる。

[0029] 以下、本発明をその実施の形態を示す図面に基づいて具体的に説明する。

（実施の形態１）

図１は本実施の形態に係るシミュレーションシステムの全体構成を説明する模式図である。本実施の形態に係るシミュレーションシステムは、通信網Ｎを介して互いに通信可能に接続されるサーバ装置１００とクライアント装置２００，２００，…，２００とを備える。サーバ装置１００は、クライアント装置２００からの要求に応じて、熱電池１０（図５を参照）の挙動をシミュレートし、シミュレーション結果をクライアント装置２００へ提供する。

[0030] クライアント装置２００は、ユーザによって利用されるパーソナルコンピュータ、スマートフォン、タブレット端末などの端末装置である。クライアント装置２００には、サーバ装置１００にアクセスするためのソフトウェア（アプリケーションプログラム）がインストールされているものとする。サーバ装置１００は、クライアント装置２００からのアクセスを受付けた際に例えばユーザＩＤ及びパスワードに基づくユーザ認証を行い、ユーザ認証に成功した場合、クライアント装置２００に対して適宜のサービスを提供するようにしてもよい。

[0031] 本実施の形態に係るサーバ装置１００は、クライアント装置２００のユーザによる各種入力を受付けるためのインタフェース画面をクライアント装置２００へ送信する。このインタフェース画面には、例えば、シミュレーション条件を受付けるための受付画面が含まれる。サーバ装置１００は、受付けた条件に基づいて実行したシミュレーション結果をクライアント装置２００

へ送信する。

[0032] サーバ装置１００がクライアント装置２００に対して送信するシミュレーション結果は、シミュレーションの実行結果として得られる数値データ、グラフ等のデータを含む。サーバ装置１００がクライアント装置２００に対して送信するシミュレーション結果は、シミュレーションの実行結果として得られる数理モデルやシミュレーションプログラムを含んでもよい。

[0033] 本実施の形態では、クライアント装置２００においてシミュレーション条件を受付け、受付けたシミュレーション条件等をサーバ装置１００へ送信してシミュレーションを実行する構成とした。代替的に、サーバ装置１００において、シミュレーション条件を受付け、受付けたシミュレーション条件等に基づきシミュレーションを実行し、サーバ装置１００にてシミュレーション結果を表示する構成としてもよい。

[0034] 図２はサーバ装置１００の内部構成を説明するブロック図である。サーバ装置１００は、制御部１０１、記憶部１０２、通信部１０３、操作部１０４及び表示部１０５を備える。

[0035] 制御部１０１は、ＣＰＵ（Central Processing Unit）、ＲＯＭ（Read Only Memory）、ＲＡＭ（Random Access Memory）などにより構成される。制御部１０１が備えるＣＰＵは、ＲＯＭ又は記憶部１０２に記憶されている各種コンピュータプログラムをＲＡＭ上に展開して実行することにより、装置全体を本願のシミュレーション装置として機能させる。サーバ装置１００は、シミュレーション装置の一実施形態に過ぎず、クライアント装置２００と通信可能に接続された任意の情報処理装置であればよい。

[0036] 制御部１０１は、上記の構成に限定されるものではなく、複数のＣＰＵ、マルチコアＣＰＵ、ＧＰＵ（Graphics Processing Unit）、マイコン、揮発性又は不揮発性のメモリ等を備える任意の処理回路又は演算回路であってもよい。制御部１０１は、計測開始指示を与えてから計測終了指示を与えるまでの経過時間を計測するタイマ、数をカウントするカウンタ、日時情報を出力するクロック等の機能を備えていてもよい。

[0037] 記憶部１０２は、ＨＤＤ（Hard Disk Drive）、ＳＳＤ（Solid State Drive）等を用いた記憶装置を備える。記憶部１０２には、制御部１０１によって実行される各種コンピュータプログラム、及びコンピュータプログラムの実行に必要なデータ等が記憶される。記憶部１０２に記憶されるコンピュータプログラムは、熱電池１０の挙動をシミュレートするシミュレーションプログラムを含む。シミュレーションプログラムは、例えば実行バイナリである。シミュレーションプログラムの元となる理論式は、熱電池１０の挙動を表す代数方程式又は微分方程式によって記述される。シミュレーションプログラムは、シミュレーション対象の挙動毎に用意してもよく、１つのシミュレーションプログラムとして用意してもよい。

[0038] シミュレーションプログラムは、ＭＡＴＬＡＢ（登録商標）、Ａｍｅｓｉｍ（登録商標）、Ｔｗｉｎ　Ｂｕｉｌｄｅｒ（登録商標）、ＭＡＴＬＡＢ＆Ｓｉｍｕｌｉｎｋ（登録商標）、Ｓｉｍｐｌｏｒｅｒ（登録商標）、ＡＮＳＹＳ（登録商標）、Ａｂａｑｕｓ（登録商標）、Ｍｏｄｅｌｉｃａ（登録商標）、ＶＨＤＬ－ＡＭＳ（登録商標）、Ｃ言語、Ｃ＋＋、Ｊａｖａ（登録商標）などの市販の数値解析ソフトウェア又はプログラミング言語によって記述されてもよい。数値解析ソフトウェアは、１Ｄ－ＣＡＥと称される回路シミュレータであってもよく、３Ｄ形状で行う有限要素法や有限体積法などのシミュレータであってもよい。代替的に、これらに基づいた縮退モデル（ＲＯＭ：Reduced-Order Model）を用いてもよい。

[0039] 記憶部１０２に記憶されるプログラムは、当該プログラムを読み取り可能に記録した非一時的な記録媒体Ｍにより提供されてもよい。記録媒体Ｍは、例えば、ＣＤ－ＲＯＭ、ＵＳＢ（Universal Serial Bus）メモリ、ＳＤ（Secure Digital）カード、マイクロＳＤカード、コンパクトフラッシュ（登録商標）などの可搬型メモリである。この場合、制御部１０１は、不図示の読取装置を用いて記録媒体Ｍからプログラムを読み取り、読み取ったプログラムを記憶部１０２にインストールする。記憶部１０２に記憶されるプログラムは、通信部１０３を介した通信により提供されてもよい。この場合、制御部

１０１は、通信部１０３を通じてプログラムを取得し、取得したプログラムを記憶部１０２にインストールする。

[0040] 記憶部１０２には、シミュレーションの結果として得られる数理モデルが記憶されてもよい。数理モデルは、例えば、プログラミング言語又は数値解析ソフトウェアにより実行される実行コードである。数理モデルは、プログラミング言語又は数値解析ソフトウェアにより参照される、定義情報若しくはライブラリファイルであってもよい。

[0041] 更に、記憶部１０２は、熱電池１０の構成に係る情報をユーザＩＤに関連付けて記憶する電池テーブルを有していてもよい。図３は電池テーブルの一例を示す概念図である。電池テーブルは、例えば、熱電池１０を識別する電池ＩＤ、ユーザを識別するユーザＩＤ、及び電池情報を関連付けて記憶する。電池テーブルに登録される電池情報は、例えば、正極及び負極の情報、電解質の情報などを含む。正極及び負極の情報とは、正極及び負極の活物質名、厚み、直径、開回路電位、融点、耐熱温度などの情報である。電解質の情報とは、イオン種、輸率、拡散係数、伝導率などの情報である。熱電池１０の特性から、イオンの伝導率は温度の関数として与えられることが望ましい。電池テーブルには、熱電池１０の物理的性質、動作状態、回路構成等の情報を参照するリンクが含まれてもよい。電池テーブルに記憶される情報は、サーバ装置１００の管理者によって登録されてもよく、クライアント装置２００を介してユーザによって登録されてもよい。電池テーブルに記憶されている情報は、蓄電デバイスの挙動をシミュレートする際に、シミュレーション条件の一部として利用され得る。

[0042] 通信部１０３は、通信網Ｎを通じてクライアント装置２００と通信を行うためのインタフェースを備える。通信部１０３は、クライアント装置２００へ送信すべき情報が制御部１０１から入力された場合、入力された情報をクライアント装置２００へ送信すると共に、通信網Ｎを通じて受信したクライアント装置２００からの情報を制御部１０１へ出力する。

[0043] 操作部１０４は、キーボード、マウスなどの入力インタフェースを備えて

おり、ユーザによる操作を受付ける。表示部１０５は、液晶ディスプレイ装置などを備えており、ユーザに対して報知すべき情報を表示する。本実施の形態では、サーバ装置１００が操作部１０４及び表示部１０５を備える構成としたが、操作部１０４及び表示部１０５は必須ではなく、サーバ装置１００の外部に接続されたコンピュータを通じて操作を受付け、通知すべき情報を外部のコンピュータへ出力する構成であってもよい。

[0044] 図４はクライアント装置２００の内部構成を説明するブロック図である。クライアント装置２００は、パーソナルコンピュータ、スマートフォン、タブレット端末等であり、制御部２０１、記憶部２０２、通信部２０３、操作部２０４及び表示部２０５を備える。

[0045] 制御部２０１は、ＣＰＵ、ＲＯＭ、ＲＡＭなどにより構成される。制御部２０１が備えるＣＰＵは、ＲＯＭ又は記憶部２０２に記憶されている各種コンピュータプログラムをＲＡＭ上に展開して実行することにより、装置全体の制御を実行する。

[0046] 制御部２０１は、上記の構成に限定されるものではなく、複数のＣＰＵ、マルチコアＣＰＵ、マイコン等を含む任意の処理回路又は演算回路であってもよい。制御部２０１は、計測開始指示を与えてから計測終了指示を与えるまでの経過時間を計測するタイマ、数をカウントするカウンタ、日時情報を出力するクロック等の機能を備えていてもよい。

[0047] 記憶部２０２は、ＥＥＰＲＯＭ（Electronically Erasable Programmable Read Only Memory）などの不揮発性メモリにより構成されており、各種コンピュータプログラム及びデータを記憶する。記憶部２０２に記憶されるコンピュータプログラムは、サーバ装置１００と情報の授受を行うために用いられる汎用又は専用のアプリケーションを含む。汎用のアプリケーションプログラムの一例は、ウェブブラウザである。ウェブブラウザを用いてサーバ装置１００にアクセスする場合、ユーザＩＤ及び認証コードを用いたユーザ認証を行うことが好ましく、ユーザ認証に成功した場合にのみ、サーバ装置１００とクライアント装置２００との間の通信を許可すればよい。

[0048] 通信部２０３は、通信網Ｎを通じてサーバ装置１００と通信を行うためのインタフェースを備える。通信部２０３は、サーバ装置１００へ送信すべき情報が制御部２０１から入力された場合、入力された情報をサーバ装置１００へ送信すると共に、通信網Ｎを通じて受信したサーバ装置１００からの情報を制御部２０１へ出力する。

[0049] 操作部２０４は、キーボード、マウス、タッチパネルなどの入力インタフェースを備えており、ユーザによる操作を受付ける。表示部２０５は、液晶ディスプレイ装置などを備えており、ユーザに対して報知すべき情報を表示する。本実施の形態では、クライアント装置２００が操作部２０４を備える構成としたが、クライアント装置２００にキーボード、マウス等の入力インタフェースが接続される構成であってもよい。

[0050] 以下、シミュレーション対象の熱電池１０の構成について説明する。

図５は熱電池１０の構成を説明する縦断面図である。熱電池１０は、例えば、筐体１１、断熱部材１２、一対の出力端子１３，１３、発熱源１４、点火具１５、発熱体１６、及び発電セル１７を備える。

[0051] 筐体１１は、例えば円筒形状の容器であり、断熱部材１２、出力端子１３、発熱源１４、点火具１５、発熱体１６、及び発電セル１７を収容する。断熱部材１２は、発熱体１６及び発電セル１７を取り囲む。断熱部材１２は、発熱体１６及び発電セル１７を保温する。断熱部材１２は、セラミックファイバなどの低熱伝導率、高耐熱性、及び電気絶縁性を有する材料により形成することができる。

[0052] 出力端子１３は、接続部材１３ａ，１３ｂを介して発電セル１７から電流を外部に取り出すための端子である。接続部材１３ａは、出力端子１３に最も近い発電セル１７の正極層１７ａに接続される。接続部材１３ｂは、出力端子１３から最も遠い発電セル１７の負極層１７ｃに接続される。この接続により、全ての発電セル１７は電気的直列に接続され、電池全体としてバイポーラ電池となる。点火具１５は、電流が供給されると火花を飛ばして発熱源１４に着火する。発熱源１４は、筐体１１の中心軸Ｐに沿って配置される

。発熱源１４は、火薬などの熱源を含み、点火具１５によって着火されると燃焼する。

[0053] 発熱体１６及び発電セル１７は共に円板状に形成され、中心軸Ｐに沿って積層される。発熱体１６は、発熱源１４の燃焼によって中心軸Ｐ側から外側に向けて発熱が開始し、発電セル１７を加熱する。発熱体１６は、例えば金属粉末と酸化剤との混合物により形成される。

[0054] 発電セル１７は、正極層１７ａ、電解質層１７ｂ、及び負極層１７ｃを含む。これらの正極層１７ａ、電解質層１７ｂ、及び負極層１７ｃは、中心軸Ｐに沿って順に積層される。正極層１７ａは、例えば二硫化鉄により形成される。電解質層１７ｂは、例えば塩化リチウムと塩化カリウムとの共融混合物などの溶融塩を含む。負極層１７ｃは、例えばリチウムシリコンにより形成される。

[0055] 図５の例では、簡略化のために、４個の発電セル１７を積層した熱電池１０の構成について示した。代替的に、積層する発電セル１７の数は、仕様や用途などに応じて任意に設定することが可能であり、例えば５０～１００個程度の発電セル１７を積層してもよい。

[0056] 図５では中心軸Ｐに発熱源１４、中心軸Ｐに垂直な面に発熱体１６を仮定したが、電解質層１７ｂの溶融塩を適切に溶融させることができるのであれば、このような配置に限定されることはない。更には、発熱源１４や発熱体１６などの発熱の機構は反応熱や燃焼熱に限定されない。例えば、ヒーター加熱、摩擦熱、断熱圧縮による昇温、マイクロ波加熱、アーク加熱などでもよい。

[0057] 発熱体１６が発熱して高温となり、電解質層１７ｂの溶融塩が溶融すると、イオン伝導率が瞬間的に高くなり、すなわち内部抵抗が瞬間的に下がり、熱電池１０の発電が瞬間的に始まる。図６は典型的な溶融塩のイオン伝導率の温度依存性を示すグラフである。グラフの横軸は温度であり、縦軸は溶融塩のイオン伝導率である。図６のグラフに示すように、電解質層１７ｂのイオン伝導率は、温度がある閾値を超えると急に高くなる。この閾値温度は溶

融塩の融点付近であることが多い。

[0058] 以下、熱電池１０のシミュレーション手法について説明する。

図７はシミュレーション手法の概略を説明する説明図である。本実施の形態に係るサーバ装置１００は、熱電池１０の溶融塩を昇温させるための発熱反応と、ジュール発熱とに基づき、熱電池１０の挙動をシミュレートする。ここで、溶融塩を昇温させるための発熱反応とは、火薬を含む発熱源１４への点火に伴う反応であり、発熱源１４から発熱体１６への発熱の連鎖を、例えば以下のアレニウス反応式で表現することができる。

[0059] [数1]

$$r = k_0 exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)(1-x_f)^p(x_f+C_0)^q(1-x_f)$$

$$Q = \rho H_p r$$

[0060] ここで、ｒは反応速度（１／ｓ）、k_0は反応速度定数（１／ｓ）、E_aは活性化エネルギ（Ｊ／ｍｏｌ）、Ｒは気体定数（Ｊ／ｍｏｌ／Ｋ）、Ｔは温度（Ｋ）、x_fは反応率、ｐ，ｑ，C_0は定数である。Ｑは発熱密度（Ｗ／m^3）、ρは密度（ｋｇ／m^3）、H_pは反応潜熱（Ｊ／ｋｇ）である。

[0061] 上記のアレニウス反応式は、例えば断熱部材１２の構成及び配置などによる火薬燃焼の差異を表現することが可能である。サーバ装置１００は、アレニウス反応式を用いることにより、火薬の充填密度、火薬種、充填総量、周囲への熱の逃げなどを考慮し、特定の時間における発熱量を仮定しない温度シミュレーションを実行できる。発熱源１４と発熱体１６は、通常異なる物質が利用され、発熱源１４の方が発熱速度が速いことが多い。そのため、発熱源１４及び発熱体１６それぞれの反応定数を指定することが好ましい。アレニウス反応式は反応速度式の一例として挙げたものであって、他の反応式を用いてもよい。

[0062] サーバ装置１００は、電気化学反応に関して、例えばＮｅｗｍａｎモデルを用いることができる。Ｎｅｗｍａｎモデルは、以下において説明するＮｅｒｎｓｔ－Ｐｌａｎｃｋ式、電荷保存式、拡散方程式、Ｂｕｔｌｅｒ－Ｖｏ

Ｉｍｅｒ式、及びＮｅｒｎｓｔ式により記述される。

[0063] Ｎｅｒｎｓｔ－Ｐｌａｎｃｋ式は、電解液や多孔電極におけるイオン泳動とイオン拡散とを解くための方程式であり、次式により表される。

[0064] [数2]

$$i_l = -\sigma_{l,eff}\nabla\phi_l + \frac{\sigma_{l,eff}RT}{F}\left(1+\frac{\partial lnf}{\partial lnc_l}\right)(1-t_+)\nabla lnc_l$$

$$\nabla \cdot i_l = i_{tot}$$

[0065] ここで、$\sigma_{l,eff}$は液相伝導率（Ｓ／ｍ）、ϕ_lは液相電位（Ｖ）、Ｒは気体定数（Ｊ／（Ｋ・ｍｏｌ））、Ｔは温度（Ｋ）、Ｆはファラデー定数（Ｃ／ｍｏｌ）、ｆは活量係数、c_lは電解質のイオン濃度（ｍｏｌ／m^3）、t_+はカチオン輸率、i_{tot}は体積当たりの反応電流密度である。液相有効伝導率$\sigma_{l,eff}$は、多孔体中における見かけの伝導率であり、液相バルクの伝導率と固相体積比率ε_sの関数で表すことが多い。液相はイオン伝導部を指し、熱電池１０においては溶融塩部分のことを指す。

[0066] 電荷保存式は、多孔電極や集電体での電子伝導を表す式であり、次式により表される。

[0067] [数3]

$$i_s = -\sigma_s\nabla\phi_s$$

$$\nabla \cdot i_s = -i_{tot}$$

[0068] ここで、ϕ_sは固相電位（Ｖ）、σ_sは固相伝導率（Ｓ／ｍ）、i_{tot}は体積当たりの反応電流密度（Ａ／m^3）である。固相は電子伝導部を指し、熱電池１０においては正極材料の溶融塩以外の部分、負極材料の溶融塩以外の部分、更にはその他の接続部材などの電子伝導体全てを指す。

[0069] 拡散方程式は、活物質粒子中での電荷担体の拡散を表す方程式であり、次式により表される。

[0070]

[数4]

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \nabla \cdot (D_s \nabla c_s)$$

[0071] ここで、c_sは固相中の電荷担体濃度（ｍｏｌ／m^3）、ｔは時間（ｓ）、D_sは固相中の電荷担体の拡散係数（m^2／ｓ）である。D_sは電極中の電荷担体濃度、電極組成、ＳＯＣ（State Of Charge）、又は温度の関数としてもよい。ＳＯＣは充電深度であり、満充電状態を１．０で表し、完全放電状態を０．０で表す。

[0072] Ｂｕｔｌｅｒ－Ｖｏｌｍｅｒ式は、固相と液相との界面で起こる電荷移動反応での活性化過電圧を表す式、Ｎｅｒｎｓｔ式は、平衡電位E_{eq}の定義式であり、それぞれ次式により表される。

[0073] [数5]

$$i_{loc} = i_0 \left[exp\left(\frac{\alpha_a nF\eta}{RT}\right) - exp\left(-\frac{\alpha_c nF\eta}{RT}\right) \right]$$

$$\eta = \phi_s - \phi_l - E_{eq}$$

$$E_{eq} = E_0 + \frac{nF}{RT} ln\left(\frac{a_0}{a_R}\right)$$

[0074] ここで、i_{loc}は反応電流密度（Ａ／m^2）、i_0は交換電流密度（Ａ／m^2）、α_a，α_cは移行係数、ηは活性化過電圧（Ｖ）、E_{eq}は平衡電位（Ｖ）、E_0は標準平衡電位（Ｖ）、ｎは関与電子数、a_0は酸化剤濃度、a_Rは還元剤濃度（ｍｏｌ／m^3）である。

[0075] 数６に活物質粒子の表面における、固相中の電荷担体濃度と電荷移動反応に関わる電荷担体フラックスの関係式を示す。r_0は活物質粒子の半径（ｍ）を表し、J_sは電荷担体のフラックス（ｍｏｌ／m^2 ｓ）である。換言すれば、J_sは電荷移動反応によって消失生成する、単位面積単位時間当たりの電荷担体の量である。

[0076]

[数6]

$$D_s \frac{\partial c_s}{\partial r}|_{r=r_0} = J_s$$

[0077] 数７は、電荷担体のフラックスＪ$_s$と反応電流密度ｉ$_{loc}$との関係を表す式である。

[0078] [数7]

$$i_{loc} = zFJ_s$$

[0079] 数８は、反応電流密度ｉ$_{loc}$と体積当たりの反応電流密度ｉ$_{tot}$との関係を表す式である。Ｓ$_v$は単位体積当たりの比表面積（ｍ^2／ｍ^3）である。Ｓ$_v$は活物質粒子の半径ｒ$_0$の関数であってもよい。

[0080] [数8]

$$i_{tot} = S_v i_{loc}$$

[0081] 図８は典型的な正極材料における固相中の電荷担体濃度と開回路電位（ＯＣＰ）との関係を示すグラフである。θは数８で定義される無次元数であり、電荷担体濃度ｃ$_s$の関数である。ｃ$_{smax}$は電池製造時、すなわち電池が全く劣化していない時点（すなわち０サイクル目）での、放電末期（＝下限電圧時）における固相中の電荷担体濃度（ｍｏｌ／ｍ^3）である。一方、ｃ$_{smin}$は電池製造時、すなわち電池が全く劣化していない時点（すなわち０サイクル目）での、放電初期（＝上限電圧時＝満充電時）における固相中の電荷担体濃度（ｍｏｌ／ｍ^3）である。満充電時はｃ$_s$＝ｃ$_{smin}$なのでθ＝０．０、放電末期はｃ$_s$＝ｃ$_{smax}$なのでθ＝１．０であることから、電池の放電に伴い、θは平均的には０．０から１．０に変化する。このように、正極の開回路電位ＯＣＰは正極θの関数として表される。同じようにして、負極の開回路電位ＯＣＰもまた負極θの関数として表される。負極では、放電初期にθ＝１．０で、放電末期にθ＝０．０であることに注意する。

[0082] 以上はＮｅｗｍａｎモデルの一般的な説明であるが、例えば、カチオン（

正イオン）の輸率$t_+ \fallingdotseq 1.0$であれば、数２第一式の右辺第二項は無視できる。この場合、液相の電流はオームの法則で計算されることになる。非線形性の強い項を無視できるので、計算負荷を低減しつつ計算安定性を向上させることができる。

[0083] 電荷移動反応での活性化過電圧を表す式としてＢｕｔｌｅｒ－Ｖｏｌｍｅｒ式を用いたが、代替的にＴａｆｅｌ式を用いてもよい。さらには、任意のテーブルデータの形式で与えてもよい。交換電流密度は、電極中の電荷担体濃度、電極組成、ＳＯＣ、または温度の関数としてもよい。数４に記載した固相における電荷担体の拡散方程式は、濃度過電圧の影響が無視できる場合または計算負荷を低減させたい場合は、省略してもよい。

[0084] 本実施の形態では、熱電池１０の物理現象を表すモデルの一例としてＮｅｗｍａｎモデルを示した。Ｎｅｒｎｓｔ式は、代替的には、実測データが用いられることが多い。

[0085] 代替的に、電極を単一の活物質粒子によって表現する単粒子モデルが用いられてもよい。単粒子モデルについては、例えば、非特許文献「Single-Particle Model for a Lithium-Ion Cell : Thermal Behavior, Meng Guo, Godfrey Sikha, and Ralph E. White, Journal of The Electrochemical Society ,158 (2) 122-132 (2011)」に開示されたモデルを参照すればよい。

[0086] 代替的に、開回路電圧ＯＣＶと内部抵抗を、温度とＳＯＣのべき乗関数で表す多項式モデルが用いられてもよい。多項式モデルについては、例えば、非特許文献「Modeling the Dependence of the Discharge Behavior of a Lithium-Ion Battery on the Environmental Temperature, Ui Seong Kim,a Jaeshin Yi,a Chee Burm Shin, Taeyoung Han,b and Seongyong Park, Journal of The Electrochemical Society ,158 (5) 611-618 (2011)」に開示されたモデルを参照すればよい。

[0087] 更に代替的には、等価回路モデルなど、熱電池１０の特性を表すモデルが用いられてもよい。

[0088] 熱電池１０の溶融塩は、発熱源１４の燃焼により発熱体１６が発熱した場

合に溶融状態となり、良好なイオン伝導性を示す。このとき、発電セル１７の正極層１７ａ及び負極層１７ｃには電流が流れる。発電セル１７の正極層１７ａ及び負極層１７ｃに電流が流れた場合、ジュール熱が発生するので、アレニウス型反応により発熱反応が更に進行する。発熱反応の進行により昇温すると、電気抵抗が下がり、さらに電流が大きくなる。以上のように、熱電池１０における発熱反応及びジュール発熱は独立した物理現象ではなく、互いに因果となり、伝熱といった物理現象を介して相互に関連しながら、すなわち連成しながら、進行する。

[0089] そこで、本実施の形態に係るサーバ装置１００は、溶融塩を昇温させるための発熱反応と、ジュール発熱とを連成させて解析し、例えば昇温による電気抵抗の変化を考慮して電流計算を行う。

[0090] 伝熱については、次式で表される固体熱伝導方程式を用いる。

[0091] [数9]

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q$$

[0092] ここで、ρは密度（ｋｇ／ｍ^3）、C_pは比熱（Ｊ／ｋｇ／Ｋ）、Ｔは温度（Ｋ）、ｋは熱伝導率（Ｗ／ｍ／Ｋ）、Ｑは内部発熱（Ｗ／ｍ^3）である。Ｑは発熱源１４においては燃焼熱であり、発熱体１６においては発熱反応熱及びジュール発熱であり、発電セル１７においては電気化学反応熱及びジュール発熱であり、電解質層１７ｂの溶融塩においてはさらに融解時の潜熱も含まれる。計算負荷の低減のため、影響が小さいと考えられる発熱要因は、適宜に無視してもよい。

[0093] 外部への放熱は、熱伝達と熱輻射を考慮すればよい。熱伝達は流体の流れによって熱が輸送される現象であり、輻射は電磁波によって熱が輸送される現象である。熱伝達は数１０により表現され、熱輻射は数１１により表現される。ここで、q_{conv}は熱伝達流束（Ｗ／ｍ^2）、ｈは熱伝達係数（Ｗ／ｍ^2 ｓ）、Ｔはシミュレーションの過程で計算される熱電池１０の外表面温度（Ｋ

）、T_0は外気温度（Ｋ）、q_{rad}は熱輻射流束（Ｗ／ｍ^2）、εは黒体率、σはステファン・ボルツマン係数（Ｗ／ｍ^2／Ｔ^4）である。

[0094] [数10]

$$q_{conv} = h(T - T_0)$$

[0095] [数11]

$$q_{rad} = \varepsilon\sigma(T^4 - T_0^4)$$

[0096] 代替的には、熱電池の周囲の流体（主には空気）の流れを考慮した熱流体シミュレーションプログラムを、本シミュレーションプログラムに追加してもよい。これにより、熱電池と熱電池周囲の流体との熱のやり取りを考慮できるようになる。

[0097] 更に代替的には、熱輻射の計算は数１１に依らず、熱電池の周りにある物体もシミュレーションモデルに含み、形態係数を用いた熱輻射シミュレーションをおこなってもよい。

[0098] シミュレーションの実施者は、初期温度を適切に設定することが好ましい。その理由は、温度によって、溶融塩イオン伝導性や、材料の安定性が大きく変わるためである。

[0099] 熱電池１０の各層は、厚み方向の熱伝導率については調和平均を使用し、その他の物性値（半径方向の熱伝導率、比熱、密度）については算術平均を使用してもよい。例えば、各層における厚み方向の熱電度率をk_i、各層の厚みをt_i、各層の物性値をϕ_iとした場合、厚み方向の熱伝導率の調和平均を数１２により表し、その他の物性値の算出平均を数１３により表してもよい。このように複合材料の等価物性値を用いることにより、計算要素数を削減して計算負荷を低減することができる。

[0100]

[数12]

$$k_t = \frac{\sum t_i}{\sum \left(\frac{t_i}{k_i}\right)}$$

[0101] [数13]

$$\phi_{ave} = \frac{\sum(\phi_i t_i)}{\sum t_i}$$

[0102] 連成計算は、非線形性が強く、計算が収束しがたいという側面を有している。そこで、サーバ装置１００は、中心軸Ｐに沿った軸方向（積層方向）と半径方向とにそれぞれ交差する直交メッシュを用いて、各層における電流分布を計算してもよい。サーバ装置１００は、このような直交メッシュを用いることによって、計算を安定化させることができる。

[0103] シミュレーションの形状は、図５に示す熱電池の典型的な形状が円筒型であることから、２次元軸対象モデルを用いることが多いが、形状によっては１次元、２次元あるいは３次元の形状を用いてもよい。

[0104] 以下、サーバ装置１００及びクライアント装置２００の動作について説明する。本実施の形態では、クライアント装置２００からサーバ装置１００にアクセスすることによって、熱電池１０のシミュレーションを実行する。

[0105] 図９はクライアント装置２００に表示されるユーザインタフェース画面の一例を示す模式図である。図９に示すユーザインタフェース画面２１０は、クライアント装置２００からサーバ装置１００にアクセスし、正当なユーザであることが認証された後に、クライアント装置２００の表示部２０５に表示される画面の一例を示している。クライアント装置２００は、サーバ装置１００と通信を行い、サーバ装置１００から表示画面用のデータを取得することにより、図９に示すようなユーザインタフェース画面２１０を表示部２０５に表示させる。ユーザ認証は必須ではなく、自由にサーバ装置１００にアクセスできるようにしてもよい。または、企業、団体、地域、国家単位で

認証を行ってもよい。

[0106] ユーザインタフェース画面２１０は、ユーザインタフェースのコンポーネントとして配置される操作ボタンやチェックボックス等を備えた画面であり、操作部２０４を通じてユーザによる操作を受付ける。

[0107] 表示欄２１１は、ユーザＩＤ、前回のアクセス日時等のユーザ情報を表示するための表示欄である。クライアント装置２００は、サーバ装置１００と通信を行い、ユーザＩＤ、前回のアクセス日時等のユーザ情報をサーバ装置１００から取得することにより、ユーザ情報を表示欄２１１に表示させる。

[0108] 登録ボタン２１２Ａは、新たな蓄電デバイスの情報（電池情報）をサーバ装置１００に登録するための操作ボタンである。操作部２０４を用いて登録ボタン２１２Ａが操作された場合、クライアント装置２００は、電池情報を受付けるための受付画面を表示部２０５に表示させる。電池情報の受付けが完了した場合、クライアント装置２００は、受付けた電池情報をサーバ装置１００へ送信する。サーバ装置１００は、クライアント装置２００から受信した電池情報を記憶部１０２の電池テーブルに登録する。

[0109] 選択ボタン２１２Ｂは、熱電池１０の詳細情報を取得するための操作ボタンであり、熱電池１０の種類や仕様に応じて個別に用意される。操作部２０４を用いて何れかの選択ボタン２１２Ｂが操作された場合、クライアント装置２００は、選択された熱電池１０の詳細情報をサーバ装置１００から取得する。取得した詳細情報は、表示部２０５に表示されてもよい。

[0110] チェックボックス２１３Ａ～２１３Ｆは、シミュレーション対象の挙動を選択するためのボックスである。チェックボックス２１３Ａには「電流の時間変化」というラベルが付されている。すなわち、このチェックボックス２１３Ａは、操作部２０４を用いて選択された場合のシミュレーション対象の挙動が「電流の時間変化」であることを示している。チェックボックス２１３Ｂ～２１３Ｆについても同様である。操作部２０４を用いてチェックボックス２１３Ｂ～２１３Ｆが選択された場合のシミュレーション対象の挙動は、それぞれ「内部抵抗の時間変化」、「起電力の時間変化」、「端子電圧の

時間変化」、「温度分布」、「電流分布」であることを示している。

[0111] オプションボタン２１４は、計算オプションを選択するための操作ボタンである。オプションボタン２１４が操作された場合、シミュレーションの計算に用いるオプションのオン・オフを受付ける。計算オプションには、例えば、代表の発電セル１７を用いて全体を計算するオプション、電流の向きを厚み方向のみに限定して計算するオプション、通電開始条件を指定するオプション、外部回路情報を指定するオプション等が含まれる。これらのオプションについては実施の形態２～５において述べる。

[0112] ダウンロードボタン２１５は、サーバ装置１００からシミュレーション結果をダウンロードする際に操作される操作ボタンである。ダウンロードボタン２１５が操作された場合にダウンロードできるシミュレーション結果は、チェックボックス２１３Ａ～２１３Ｆによって選択された挙動についてサーバ装置１００がシミュレーションを実行し、実行結果として得られる数値データ、グラフ等のデータである。操作部２０４を用いてダウンロードボタン２１５が操作された場合、クライアント装置２００は、通信部２０３を通じて、サーバ装置１００に対してシミュレーション結果の送信を要求し、その応答としてサーバ装置１００から送信されてくるシミュレーション結果を受信する。

[0113] 本実施の形態に係るサーバ装置１００は、シミュレーション結果として数値データ、グラフ等のデータをクライアント装置２００へ送信する構成とした。代替的には、サーバ装置１００は、熱電池１０の特性を代数方程式、微分方程式及び特性パラメータを用いて数学的に記述した数理モデルをクライアント装置２００へ送信してもよい。数理モデルは、単なる理論モデルではなく、選択された熱電池１０についてシミュレーションが実行され、各種のパラメータが調整された後のモデルを表す。本実施の形態において、数理モデルは、例えば、ＭＡＴＬＡＢ（登録商標）、Ａｍｅｓｉｍ（登録商標）、Ｔｗｉｎ　Ｂｕｉｌｄｅｒ（登録商標）、ＭＡＴＬＡＢ＆Ｓｉｍｕｌｉｎｋ（登録商標）、Ｓｉｍｐｌｏｒｅｒ（登録商標）、ＡＮＳＹＳ（登録商標）

、Ａｂａｑｕｓ（登録商標）、Ｍｏｄｅｌｉｃａ（登録商標）、ＶＨＤＬ－ＡＭＳ（登録商標）、Ｃ言語、Ｃ＋＋、Ｊａｖａ（登録商標）などの数値解析ソフトウェア又はプログラミング言語で用いられるライブラリ、モジュール等のフォーマットにより提供される。

[0114] 図１０はサーバ装置１００及びクライアント装置２００が実行する処理の手順を説明するフローチャートである。クライアント装置２００の制御部２０１は、ユーザ認証の後にサーバ装置１００から送信される表示画面用のデータを受信し、シミュレーション対象を選択するためのユーザインタフェース画面２１０を表示部２０５に表示する（ステップＳ１０１）。制御部２０１は、表示部２０５に表示したユーザインタフェース画面２１０を通じて、シミュレーション対象についての選択を受付ける（ステップＳ１０２）。具体的には、制御部２０１は、選択ボタン２１２Ｂを用いた熱電池１０の種別の選択と、チェックボックス２１３Ａ～２１３Ｆを用いたシミュレーション対象の挙動の選択とを受付ける。

[0115] ユーザインタフェース画面２１０のオプションボタン２１４が操作された場合、制御部２０１は、計算オプションを受付けるための受付画面（不図示）を表示部２０５に表示し、計算オプションを受付ける（ステップＳ１０３）。

[0116] 次いで、制御部２０１は、結果ダウンロードの要求を受付けたか否かを判断する（ステップＳ１０４）。例えば、図９に示すユーザインタフェース画面２１０において、ダウンロードボタン２１５が操作された場合、制御部２０１は、結果ダウンロードの要求を受付けたと判断する。要求を受付けていないと判断した場合（Ｓ１０４：ＮＯ）、制御部２０１は、結果ダウンロードの要求を受付けるまで待機する。代替的には、計算後に結果ダウンロードの要求を受付けるように構成してもよい。

[0117] 結果ダウンロードの要求を受付けた場合（Ｓ１０４：ＹＥＳ）、制御部２０１は、通信部２０３を通じて、ステップＳ１０２で選択されたシミュレーション対象の情報、ステップＳ１０３で受付けた計算オプションの情報をサ

ーバ装置１００へ送信し（ステップＳ１０５）、シミュレーション結果のダウンロードを要求する。ステップＳ１０３において計算オプションを受付けなかった場合、制御部２０１は、デフォルトの計算オプションの情報をサーバ装置１００へ送信してもよい。

[0118] サーバ装置１００は、クライアント装置２００から送信されるシミュレーション対象及び計算オプションの情報を通信部１０３にて受信する（ステップＳ１０６）。サーバ装置１００の制御部１０１は、通信部１０３を通じて受信したシミュレーション対象及び計算オプションの情報に基づき、シミュレーションを実行する（ステップＳ１０７）。このとき、制御部１０１は、シミュレーション対象の挙動に対応するシミュレーションプログラムを実行することによって、熱電池１０の挙動をシミュレートする。ユーザによって選択された計算オプションは、シミュレーションプログラムを実行する際に適用される。

[0119] 熱電池１０において、発熱源１４の燃焼により発熱体１６が発熱を開始し、やがて融点を超えると溶融塩は溶融状態となり、発電セル１７の正極層１７ａ及び負極層１７ｃには電流が流れる。制御部１０１は、発熱反応とジュール熱反応とを連成させ、発熱反応における反応速度ｒを数式１に示すアレニウス反応式により計算し、熱電池１０の起電力及び内部抵抗を例えばＮｅｗｍａｎモデルにより計算する。熱電池１０の起電力とは、各電極の平衡電位E_{eq}を電池全体にわたり足し合わせた値であり、無負荷時の正負の出力端子１３間の電圧である。

[0120] 制御部１０１は、熱電池１０の起電力を計算する手順、熱電池１０の内部抵抗を計算する手順、並びに、熱電池１０の外部負荷抵抗、起電力及び内部抵抗を用いて次の計算ステップにおける電流値を計算する手順を繰り返すサブモデルを用いて電流計算を実行してもよい。サブモデルの回路図を図１１に示す。例えば、熱電池１０の起電力をＥＭＦ、電池温度Ｔにおける熱電池１０の内部抵抗をｒ（Ｔ）、外部負荷抵抗をＲ、熱電池１０の端子間電圧をV_e、熱電池１０の電流をI_eとした場合、数１４及び数１５の関係があるの

で、制御部１０１は、数１６より電流Ｉ$_e$を計算することができ、次の計算ステップにおける境界条件とする。

[0121] [数14]

$$V_e = RI_e$$

[0122] [数15]

$$V_e = EMF - r(T)I_e$$

[0123] [数16]

$$I_e = \frac{EMF}{r(T) + R}$$

[0124] 熱電池１０の外部負荷抵抗は、必ずしも抵抗器である必要はなく、キャパシタやインダクタなどの他の回路素子を含んでいてもよい。外部負荷抵抗の値は、実際の負荷の特性を表してもよく、仮想的な値を用いてもよい。

[0125] ここで述べた電流Ｉ$_e$は、熱電池１０から放電可能な電流の最大値であると考えることもできる。よって、代替的に、０．０（Ａ）以上Ｉ$_e$未満の任意の値を熱電池１０に流れる電流として、次の計算ステップにおける境界条件としてもよい。

[0126] シミュレーションが完了した場合、制御部１０１は、通信部１０３を通じて、シミュレーション結果をクライアント装置２００へ送信する（ステップＳ１０８）。ステップＳ１０８で送信するシミュレーション結果は、数値データであってもよく、数値データから生成したグラフ、コンター図及び動画などであってもよい。熱電池１０の特性を表す数理モデルであってもよい。

[0127] クライアント装置２００は、サーバ装置１００から送信されるシミュレーション結果を通信部２０３にて受信する（ステップＳ１０９）。クライアント装置２００の制御部２０１は、受信したシミュレーション結果を表示部２０５に表示させる（ステップＳ１１０）。

[0128] 図１２はシミュレーション結果の表示例を示す模式図である。図１２は、熱電池１０の電流及び内部抵抗の時間変化に係るシミュレーション結果を示している。すなわち、図１２は、ユーザインタフェース画面２１０において、チェックボックス２１３Ａ及び２１３Ｂの双方が選択された場合のシミュレーション結果を示している。シミュレーション結果は、例えば、発熱源１４を点火してからの経過時間（ｓ）を横軸、内部抵抗（Ω）及び全電流（Ａ）を縦軸にとったグラフにより表される。図１２の例では、発熱源１４を点火してから約０．１秒で内部抵抗が低下し、電流が流れ始めることを示している。

[0129] ユーザインタフェース画面２１０において、チェックボックス２１３Ｃ又は２１３Ｄが選択された場合も同様であり、クライアント装置２００の表示部２０５には、発熱源１４を点火してからの経過時間（ｓ）を横軸、起電力（Ｖ）又は端子電圧（Ｖ）を縦軸にとったグラフがシミュレーション結果として表示される。チェックボックス２１３Ｅ又は２１３Ｆが選択された場合、クライアント装置２００の表示部２０５には、熱電池１０内部の各位置における温度（温度分布）又は電流密度の大きさ（電流密度分布）コンター図により表示される。

[0130] 以上のように、本実施の形態では、サーバ装置１００は、熱電池１０の溶融塩を昇温させるための発熱反応と、ジュール発熱とを考慮して、熱電池１０の挙動をシミュレートすることができる。ユーザは、熱電池１０における物理現象について詳しくない場合であっても、クライアント装置２００から熱電池の種類、及びシミュレーション対象の挙動を選択することによって、熱電池１０の詳細なシミュレーション結果を取得することができる。

[0131] （実施の形態２）

実施の形態２では、代表の発電セル１７を用いて全体を計算する計算オプションについて説明する。

[0132] 図１３は実施の形態２における計算オプションを説明する説明図である。上述したように、熱電池１０は複数の発電セル１７を備える。典型的には、

熱電池１０は５０～１００層程度の発電セル１７を備える。これらの全ての層において電流を計算した場合、計算負荷が大きくなってしまうという問題点を有する。そこで、サーバ装置１００は、計算オプションとして、代表の発電セル１７を用いて全体を計算するオプションを用意しておき、ユーザがこの計算オプションをオンにした場合、代表の発電セル１７を用いて電流（電気化学）を計算する。図１３の例では、熱電池１０の構成を簡略化して示し、計算対象の発電セル１７をハッチングにより示している。

[0133] 代表とする発電セル１７は、サーバ装置１００において予め設定される。代替的に、代表とする発電セル１７は、ユーザによって選択される。例えば、連続する５層の発電セル１７のうちの１層を代表の発電セル１７として設定した場合、電気化学の計算負荷は、１／５程度に軽減される。

[0134] （実施の形態３）

実施の形態３では、電流の向きを厚み方向のみに限定して計算する計算オプションについて説明する。

[0135] 図１４は実施の形態３における計算オプションを説明する説明図である。熱電池１０の各層は半径方向と比較して厚みが薄いので、電流密度ベクトルの向きは殆ど厚み方向と一致すると予想される。このため、サーバ装置１００は、計算オプションとして、電流の向きを厚み方向のみに限定して計算するオプションを用意しておき、ユーザがこの計算オプションをオンにした場合、半径方向に流れる電流を無視し、厚み方向に流れる電流のみを用いて電流計算を行う。

[0136] 実施の形態３におけるサーバ装置１００は、電流計算の次元数を１次元まで減らすことができるので、計算負荷を軽減することができる。

[0137] （実施の形態４）

これまで、サブモデルを用いて電流境界条件を決定する方法について述べた。代替的に、サブモデルの値を参考にして、熱電池モデルの境界条件を決定してもよい。

[0138] 例えば、図１１のサブモデルにおいて外部負荷抵抗の値Ｒを非常に大きく

とった場合、外部負荷抵抗での電圧降下は開放時の熱電池１０の端子間電圧となる。ここでいう非常に大きくとは、熱電池１０の溶融塩が溶融している時の内部抵抗よりも十分に大きい値（例えば１００倍）という意味である。換言すれば、このとき外部負荷抵抗は熱電池１０の電圧計となっている。図１５は実施の形態４における通電開始条件の入力画面である。図１５に示すように、熱電池１０の端子間電圧が既定値を超えた場合に通電を開始するとしてもよい。

[0139] 更に代替的には、熱電池１０の温度が所定の温度を超えた場合に通電を開始するとしてもよい。何れの方法を用いる場合であっても、熱電池１０の端子間電圧が負にならないように配慮される必要があるため、計算に際しては注意が必要である。

[0140] （実施の形態５）

ここまで熱電池１０部分のシミュレーションについて述べてきたが、実施の形態５では、熱電池１０に接続される回路（後述する電気回路又は熱回路）をシミュレーションに含む場合について述べる。

[0141] サーバ装置１００が提供するシミュレーションプログラムは、熱電池１０のみではなく、熱電池１０に接続される電気回路を含んでもよい。クライアント利用者はサーバ装置１００上で熱電池１０を含む電気回路シミュレーションを実施してもよい。

[0142] 電気回路は、オーム抵抗の他に、キャパシタ、インダクタ、ダイオード、半導体素子（サイリスタ、ＩＧＢＴ，ＭＯＳＦＥＴなど）などを含んでいてもよい。

[0143] 熱電池１０に与えられる境界条件は、必ずしも受動素子によるものだけではなく、定電流条件、定電圧条件、定電力条件などを含んでもよい。時間的に値が変動してもよいし、放電の過程で境界条件が変化（例えば、定電流境界条件から定電力境界条件になる。）してもよい。

[0144] 電気回路は、スイッチング動作、負荷の切り替え、定値制御及び目標値制御などを行う制御回路を含んでもよい。

[0145] 熱電池１０に接続される回路は、熱回路を含んでもよい。熱回路は、熱容量や熱抵抗を電気回路と同様の微分方程式により表現される。系の温度挙動は、回路シミュレーションのように計算される。

[0146] 熱回路は、熱電池１０以外の熱源、熱容量、熱抵抗、放熱境界および定温度境界を含んでもよい。熱源、熱容量、熱抵抗などの値は時間的に変動してもよいし、放電の過程で境界条件が変化してもよい。

[0147] 図１６は熱電池１０、電気回路２０及び熱回路３０を含む回路シミュレーションの例を示す回路図である。この回路シミュレーションにおいて、熱電池１０は、熱源かつ電流源（または電圧源）として扱われる。熱電池１０は、起電部１０ａ、内部抵抗１０ｂ、熱源１０ｃ、熱容量１０ｄを含む。電気回路２０は、例えば、半導体素子２１、インダクタ２２、ダイオード２３、及び負荷２４を含む。熱回路３０は、例えば、負荷の熱容量３１、熱電池１０と負荷の間の熱抵抗３２、負荷と外気の間の熱抵抗３３、及び外気温度３４を含む。もちろん、負荷や使用条件に合わせて、回路素子は自由に組み合わせてよい。

[0148] （実施の形態６）

実施の形態６では、発熱反応における発熱密度を位置と時間との関数として与える構成について説明する。

[0149] 実施の形態１では、熱電池１０における発熱反応をアレニウス反応式により表現したが、計算負荷が大きくなってしまうという問題点を有している。そこで、実施の形態６に係るサーバ装置１００は、発熱密度の実験結果又はシミュレーション結果を事前に取得しておき、発熱密度を位置と時間との関数として与えることにより、発熱反応の時間推移の計算を省略する。

[0150] 例えば、（１）放電現象の代表時間に比べて発熱源１４や発熱体１６の発熱時間が十分に短い場合、（２）溶融塩の昇温過程がシミュレーションの主な関心の対象でない場合には、実施の形態６による方法が有用である。

[0151] 図１７は実施の形態６における発熱密度の与え方を説明する説明図である。図１７は、熱電池１０を内側（中心軸Ｐ側）から外側に向かって領域１０

Ａ～領域１０Ｅの５つの領域に分割し、領域１０Ａ～領域１０Ｅのそれぞれについて発熱密度の時間依存性を付与した例を示している。例えば、領域１０Ａは、点火開始から０．０３～０．３１ｓｅｃの時間帯に発熱があり、その発熱密度がＨ１（Ｗ／m^3）であったことを示している。領域１０Ｂ～１０Ｅについても同様であり、それぞれハッチングで示す時間帯において、発熱密度がそれぞれＨ２～Ｈ５（Ｗ／m^3）であったことを示している。

[0152] このように、実施の形態６では、サーバ装置１００は、発熱密度を位置と時間との関数として与えることにより、アレニウス反応式を用いた発熱反応の時間推移の計算を省略することができるので、計算負荷を軽減することができる。

[0153]（実施の形態７）

実施の形態７では、シミュレーション結果の効果的な表示方法の例を述べる。

[0154] 熱電池１０においては温度と電流電圧分布とは密接な関係があるため、これらの値の相互の関係は、設計開発の現場において重要な情報である。しかし、溶融塩のイオン伝導率の温度依存性に強い非線形性があること、熱電池１０の半径方向に急峻な温度分布が現れる場合があること、さらには熱電池１０がバイポーラ電池であり１つでも起電が不十分な電極があれば全体の性能が大きく損なわれる可能性があることなどから、温度、電流、電圧の間の関係は、しばしば直感と整合せず、現象を理解することが困難となる場合が多い。

[0155] そこで、温度、電圧および電流が一画面に並べて表示されると、直感的に電池内の各物理量を把握でき、これらの物理量間の複雑な関係を理解しやすくなるため、有益である。図１８は実施の形態７における結果表示画面の一例を示す模式図である。温度、電圧の分布は、コンター図のアニメーションであってもよく、シミュレーションの進行に合わせてリアルタイムで更新されてもよい。図１８では電流はグラフで表示しているが、シミュレーションの進行に合わせてリアルタイムでグラフが描画されてもよい。この他に、端

子間電圧をグラフで表示してもよいし、電圧分布のコンター図に電流分布のベクトル図が重ねて表示されてもよい。本段落に記載した全ての物理量を表示する必要はなく、適宜に選択された２つ以上の物理量を表示してもよい。

[0156] （実施の形態８）

実施の形態８では、シミュレーション結果の効果的な表示方法の他の例を述べる。

[0157] 熱電池１０は電解質を溶融させることで起動するものであるから、過小な発熱量では電解質が溶融せず、通電が開始しないことは言うまでもない。しかし、過剰な発熱を与えると、温度が上がりすぎて、発電セルを構成する材料や接続部材が焼損したり、材料分解反応を起こしたりする懸念がある。そのため、発熱源１４や発熱体１６による昇温の到達最高温度は、溶融塩の融点より高く、且つ各構成部材の耐熱温度より低いことが求められる。これは一般には難しい課題である。

[0158] そこで、融点または耐熱温度を予め入力しておき、シミュレーション過程で得られる温度との差を表示すれば、設計上の温度の安全裕度余裕（Margin of Safety）を把握できる。図１９は実施の形態８における結果表示画面の一例を示す模式図である。例えば、図１９は『（耐熱温度）－（シミュレーション温度）』を示したコンター図であるが、値の小さいところは耐熱温度近くまで温度が上昇しているということであり、設計上の温度の安全裕度余裕が小さいことを示す。

[0159] 今回開示された実施形態は、全ての点において例示であって、制限的なものではないと考えられるべきである。本発明の範囲は、上述した意味ではなく、請求の範囲によって示され、請求の範囲と均等の意味及び範囲内での全ての変更が含まれることが意図される。

[0160] 例えば、実施の形態１ではサーバ装置１００とクライアント装置２００との間の通信によりシミュレーションを実施する形態を例示したが、サーバ管理者が熱電池シミュレーションプログラムをＤＶＤ－ＲＯＭなどの記録媒体の手段でクライアント利用者に提供し、クライアント端末ローカルでシミュ

レーションが実施される形態であってもよい。熱電池シミュレーションプログラムの提供手段として、通信を介したダウンロード形式であってもよい。

[0161] クライアント利用者に提供されるシミュレーションプログラムは、実施の形態の中で主に述べてきた熱電池部分、外部負荷を含む回路部分だけではなく、スイッチング動作や負荷の切り替えなどを行うディジタル制御回路を含んでもよい。

[0162] クライアント利用者に提供されるシミュレーションプログラムは、開発支援装置の提供者の意思により、完全に隠匿（すなわち編集不可）されてもよいし、一部のパラメータのみをクライアント利用者が変更可能なように部分的に隠匿されていてもよい。

[0163] クライアント装置２００はサーバ装置１００に対して、ダウンロードするシミュレーションプログラムの書式を、数値解析ソフトウェアやプログラム言語によって選択できるようになっていてもよい。これにより、クライアント利用者は、自身の所有する数値解析ソフトウェア又はプログラミング言語で本シミュレーションプログラムを使用することができる。

[0164] 実施の形態では、熱電池１０は一次電池として、放電過程のみを述べてきたが、昇温により溶融塩が融解して通電が開始するという特徴をもつ電池であれば、二次電池であってもよい。すなわち、サーバ装置１００（若しくはクライアント装置２００）は、放電過程及び充電過程の双方を含んだシミュレーションを行ってもよい。放電過程を考える場合も、実施の形態において記載した計算モデルで、電流境界条件の符号を反転させるだけでよい。

符号の説明

[0165] １００ サーバ装置

１０１ 制御部

１０２ 記憶部

１０３ 通信部

１０４ 操作部

１０５ 表示部

２００　クライアント装置

２０１　制御部

２０２　記憶部

２０３　通信部

２０４　操作部

２０５　表示部

Ｎ　通信網

請求の範囲

[請求項1] 溶融塩を電解質とする電池のシミュレーション方法であって、

前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする

シミュレーション方法。

[請求項2] 前記溶融塩のイオン伝導率は温度の関数であり、

前記イオン伝導率は、第１の閾値温度以下で絶縁性の値を示し、第２の閾値温度以上で導電性の値を示す

請求項１に記載のシミュレーション方法。

[請求項3] 前記溶融塩を昇温させるための発熱反応に基づき、前記電池の挙動をシミュレートする

請求項２又は請求項３に記載のシミュレーション方法。

[請求項4] 前記発熱反応とジュール発熱との連成解析により前記電池の挙動をシミュレートする

請求項３に記載のシミュレーション方法。

[請求項5] 前記電池は、

発熱源と、

前記発熱源の燃焼により発熱が開始する発熱体と、

正極層、電解質層及び負極層を積層してなる発電セルと

を含み、

前記電池は、前記正極層、前記電解質層及び前記負極層の積層方向に沿って、前記発熱体及び前記発電セルが積層されたバイポーラ型の熱電池である

請求項１から請求項４の何れか１つに記載のシミュレーション方法。

[請求項6] 前記発熱源の充填量と温度とに基づき、前記発熱反応における発熱量を計算する

請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項7] 各層の物性値から算出した等価物性値を用いて、伝熱を計算する
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項8] 前記発熱反応における発熱密度を位置と時間との関数として与える
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項9] 選択した一部の層を代表層として用いて各層の電流分布を計算する
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項10] 前記積層方向の電流成分のみを用いて各層の電流分布を計算する
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項11] 前記積層方向及び前記積層方向と交差する交差方向にメッシュ分割した要素を用いて各層の電流分布を計算する
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項12] 前記電池の起電力を計算する手順と、
前記電池の内部抵抗を計算する手順と、
前記電池の外部負荷抵抗、並びに、計算した起電力及び内部抵抗の値に基づき、次の計算ステップにおける電流値を計算する手順と
を繰り返すサブモデルを用いて、電流計算を実行する
請求項５に記載のシミュレーション方法。

[請求項13] 溶融塩を電解質とする電池に関して、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートするシミュレーション実行部と、
前記シミュレーション実行部によるシミュレーション結果を出力する出力部と
を備えるシミュレーション装置。

[請求項14] 前記シミュレーション実行部は、前記電池に接続された電気回路及び熱回路の少なくとも一方をシミュレートする
請求項１３に記載のシミュレーション装置。

[請求項15] 前記シミュレーション実行部は、温度分布、電圧分布、電流密度分布、電流値又は端子間電圧の経時変化のうち少なくとも２つのグラフ

を生成し、

前記出力部は、生成した前記２つのグラフを同一画面に表示させるべく、前記グラフのデータを表示装置へ出力する

請求項１３又は請求項１４に記載のシミュレーション装置。

[請求項16] コンピュータに、

溶融塩を電解質とする電池に関して、前記溶融塩を昇温させる過程を含む前記電池の挙動をシミュレートする

処理を実行させるためのシミュレーションプログラム。

[請求項17] 前記コンピュータに、

前記電池に接続された電気回路及び熱回路の少なくとも一方をシミュレートする

処理を実行させるための請求項１６に記載のシミュレーションプログラム。

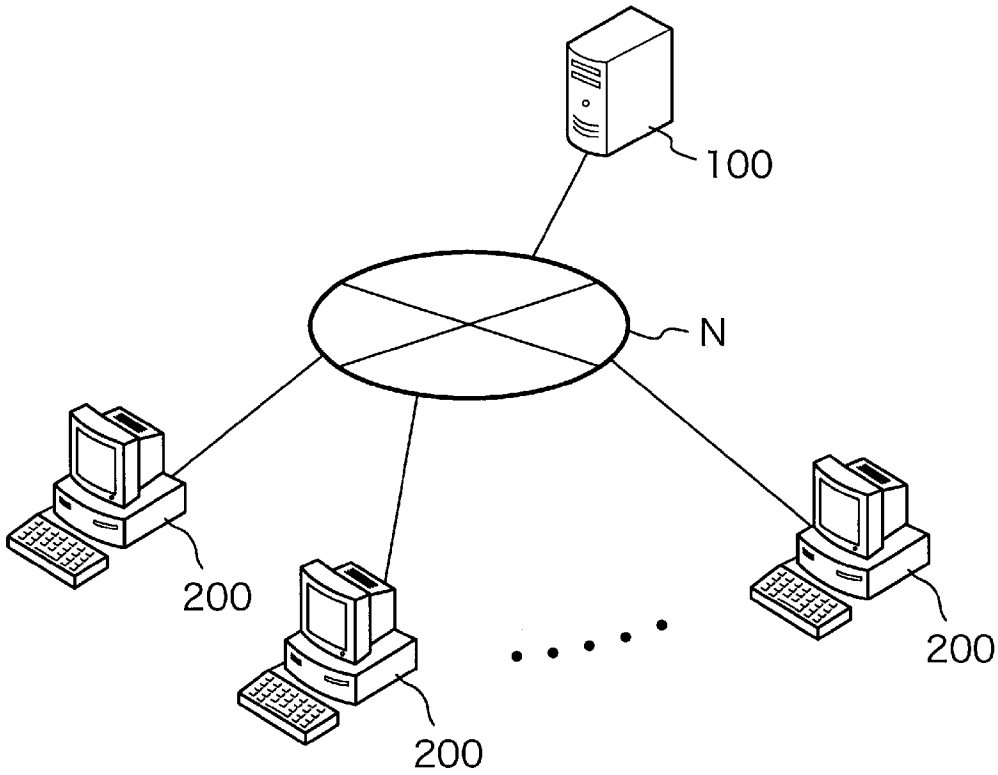
[請求項18] 前記コンピュータに、

温度分布、電圧分布、電流密度分布、電流値又は端子間電圧の経時変化のうち少なくとも２つのグラフを生成し、

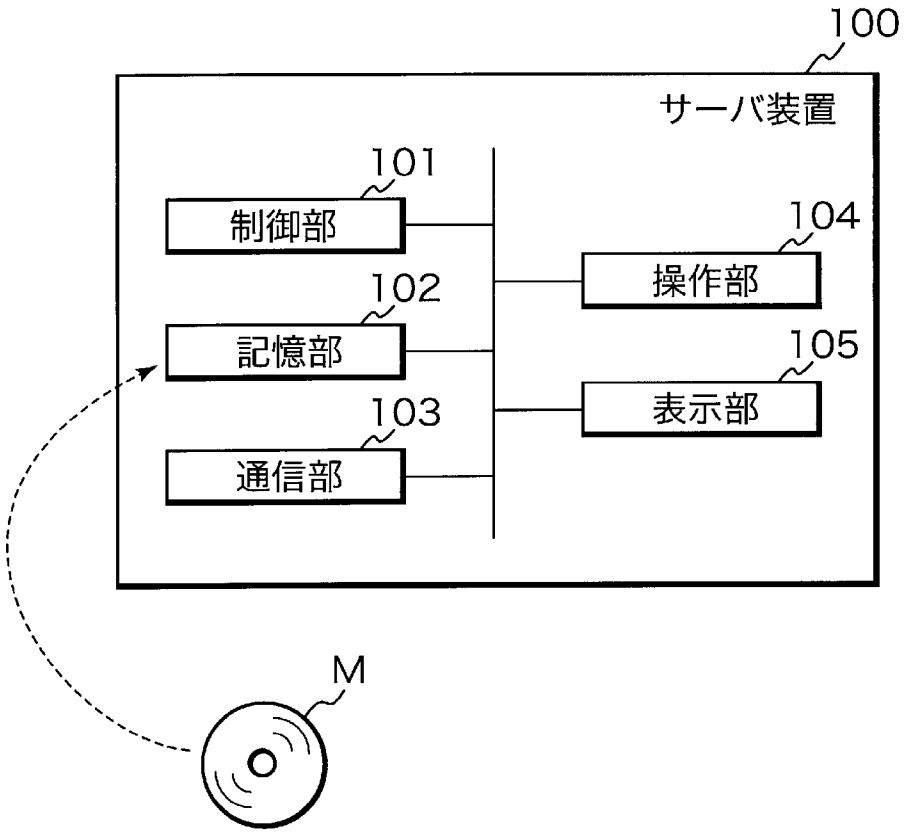
生成した前記２つのグラフを同一画面に表示させるべく、前記グラフのデータを表示装置へ出力する

処理を実行させるための請求項１６又は請求項１７に記載のシミュレーションプログラム。

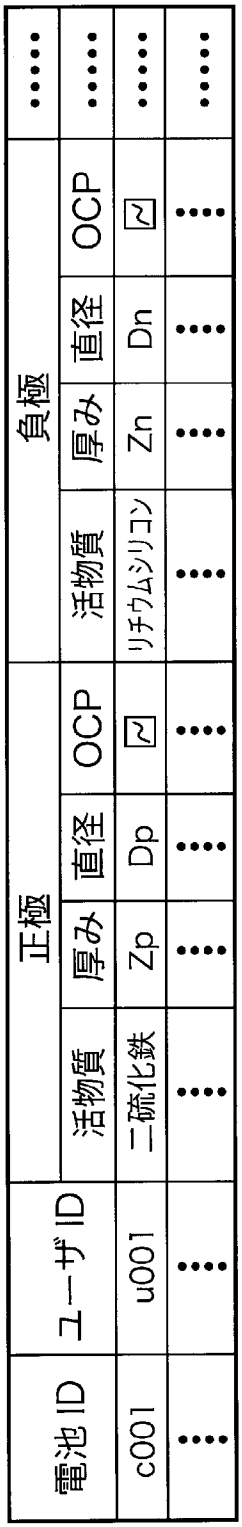
[図1]


100
N
200
200
200

[図2]

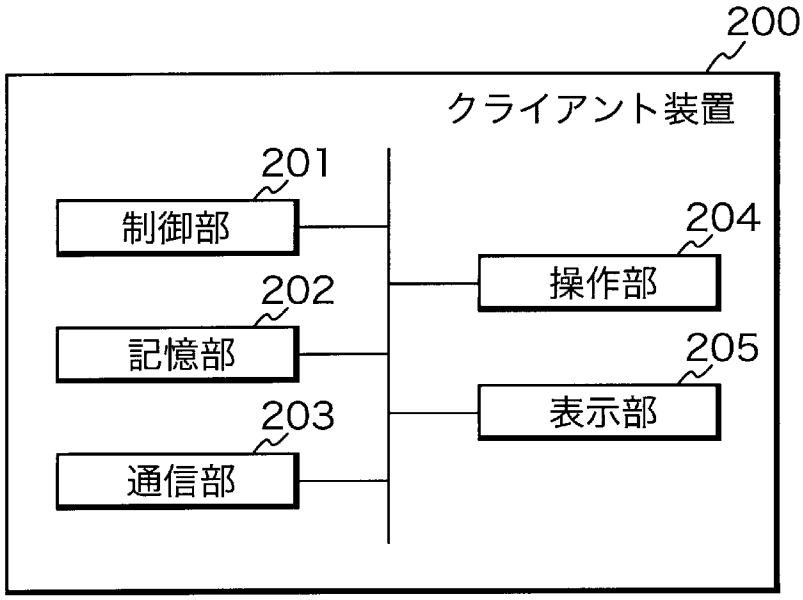

100
サーバ装置
101
制御部
102
記憶部
103
通信部
104
操作部
105
表示部
M

[図3]

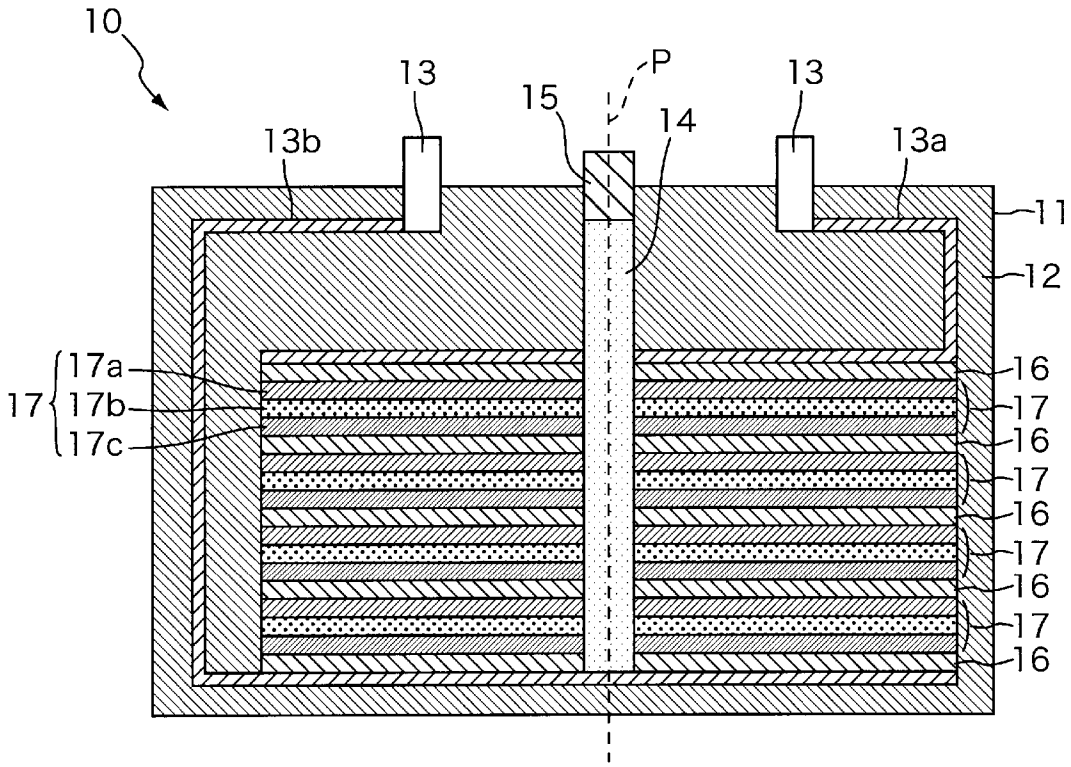


電池ID	ユーザID	正極					負極				
		活物質	厚み	直径	OCP		活物質	厚み	直径	OCP	
c001	u001	二硫化鉄	Zp	Dp		・・・・	リチウムシリコン	Zn	Dn		・・・・
・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・	・・・・

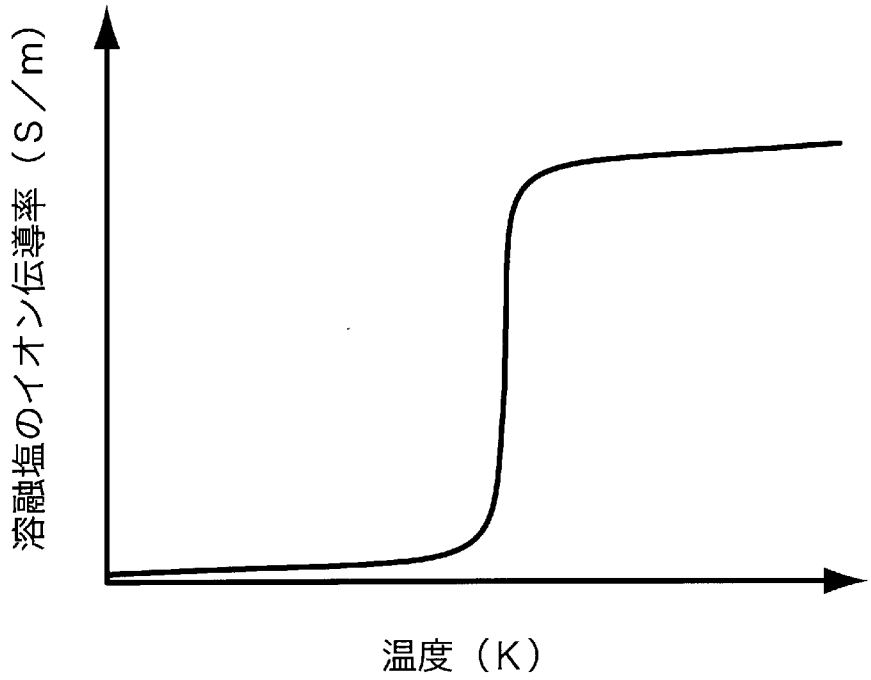
[図4]


200
クライアント装置
201
制御部
202
記憶部
203
通信部
204
操作部
205
表示部

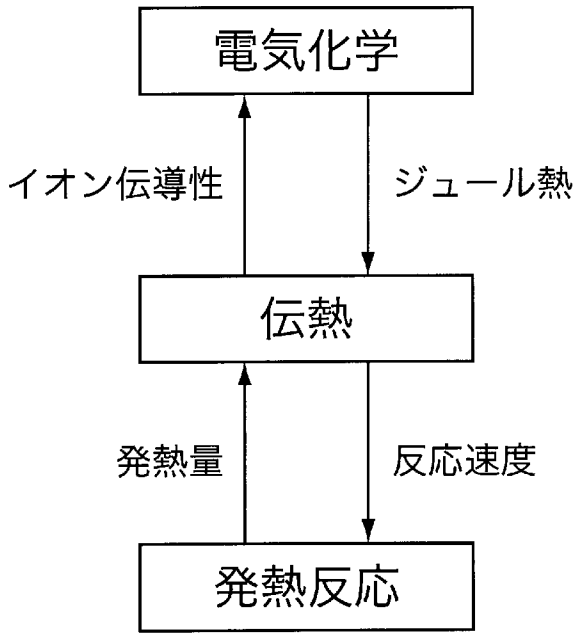
[図5]


10
13
15
P
13
14
13b
13a
11
12
17
17a
17b
17c
16
17
16
17
16
17
16
17
16

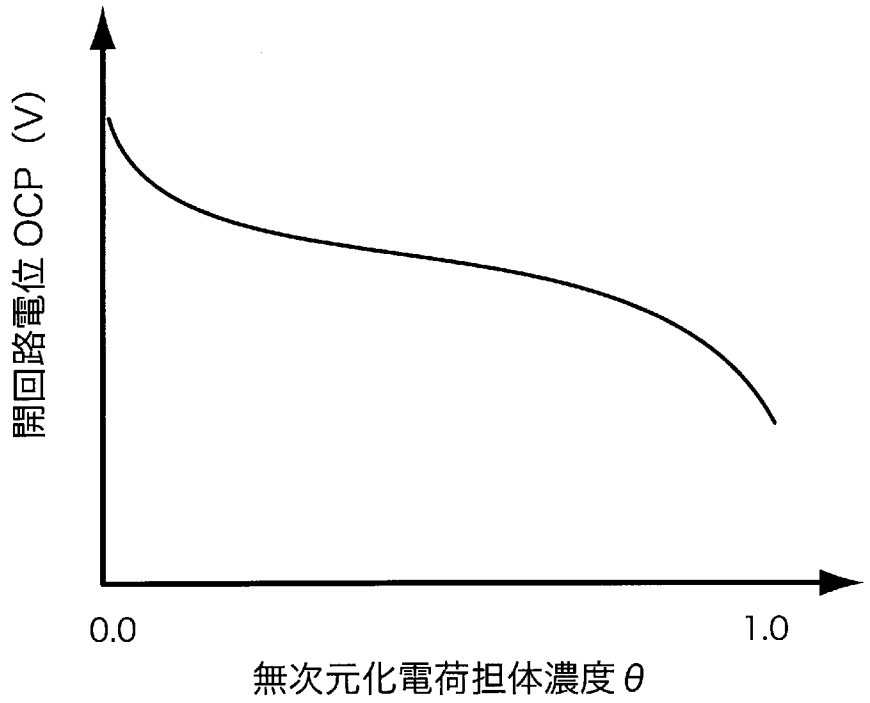
[図6]



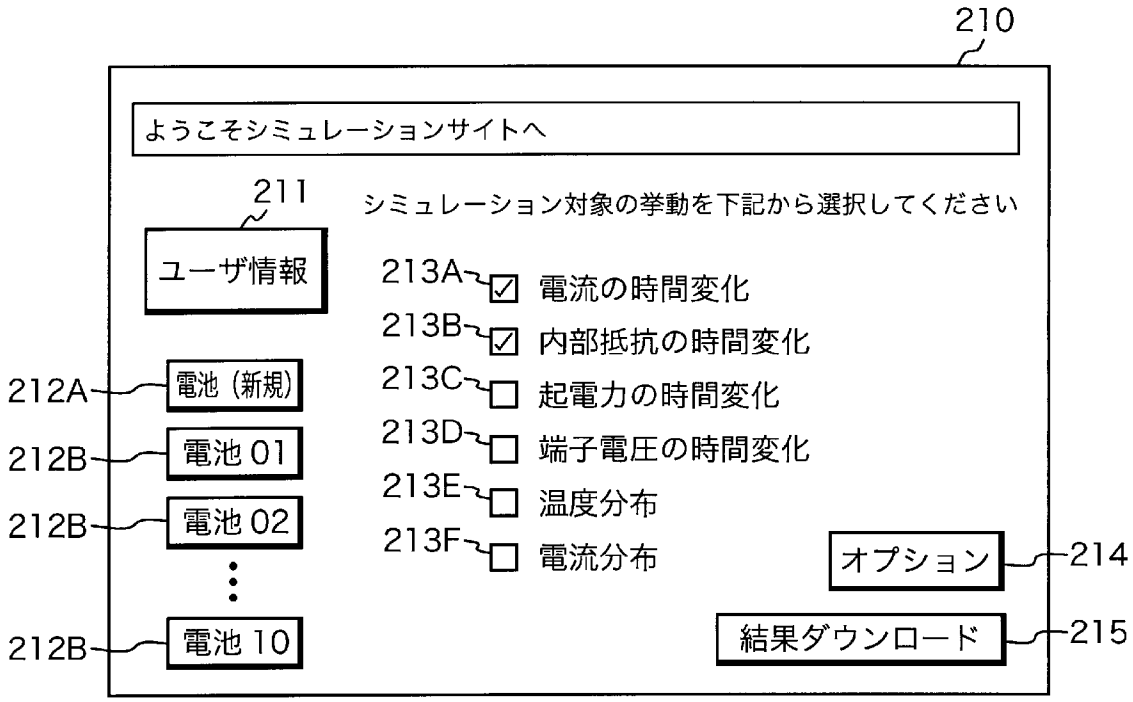
[図7]



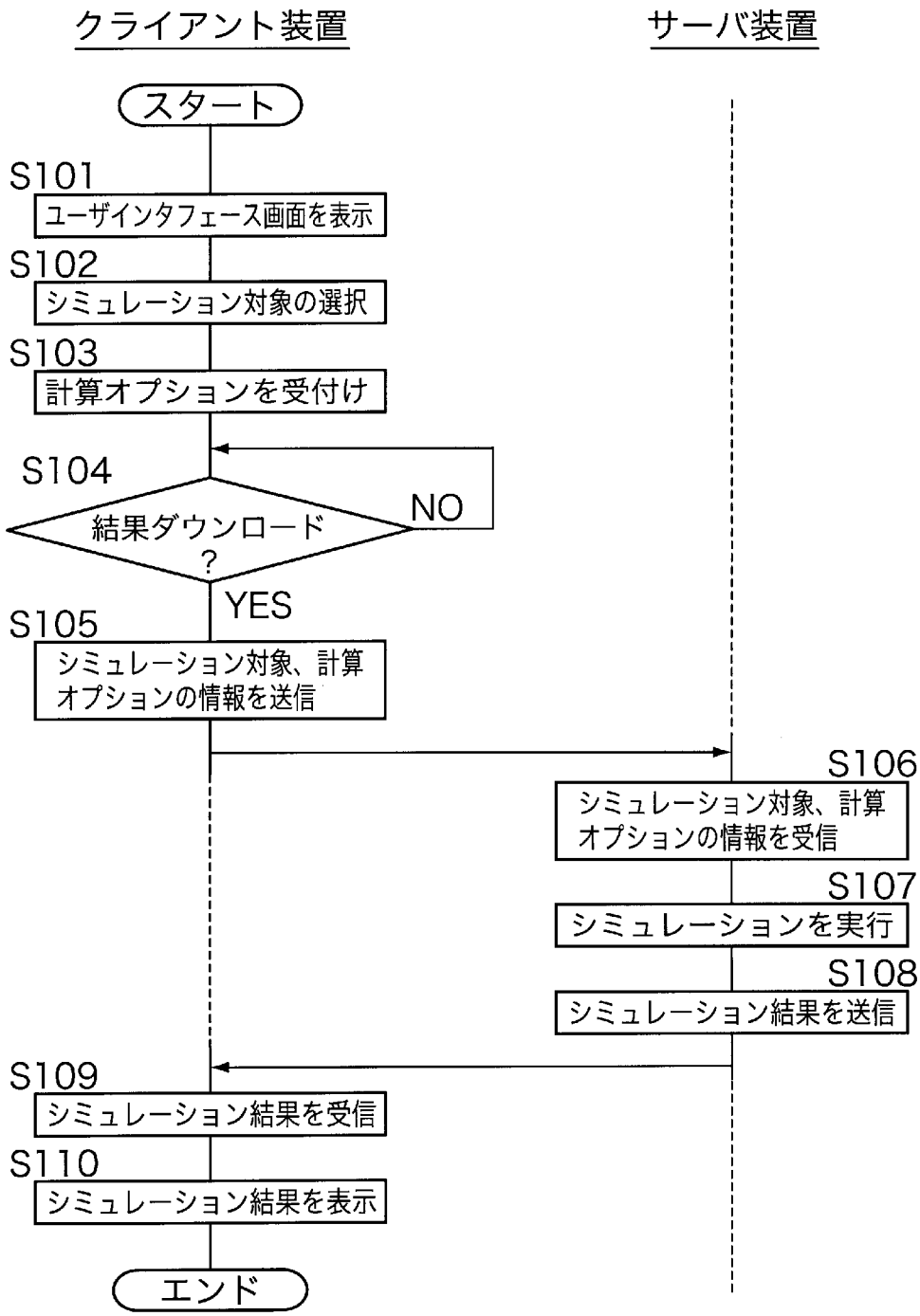
[図8]


開回路電位 OCP (V)
0.0
1.0
無次元化電荷担体濃度 θ

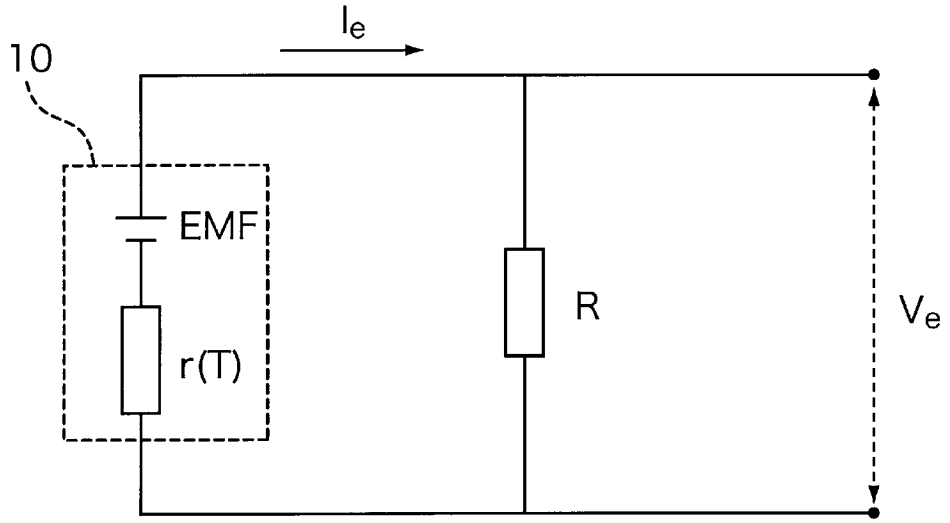
[図9]


210
ようこそシミュレーションサイトへ
211
ユーザ情報
シミュレーション対象の挙動を下記から選択してください
213A
電流の時間変化
213B
内部抵抗の時間変化
213C
起電力の時間変化
213D
端子電圧の時間変化
213E
温度分布
213F
電流分布
212A
電池 (新規)
212B
電池 01
212B
電池 02
212B
電池 10
オプション
214
結果ダウンロード
215

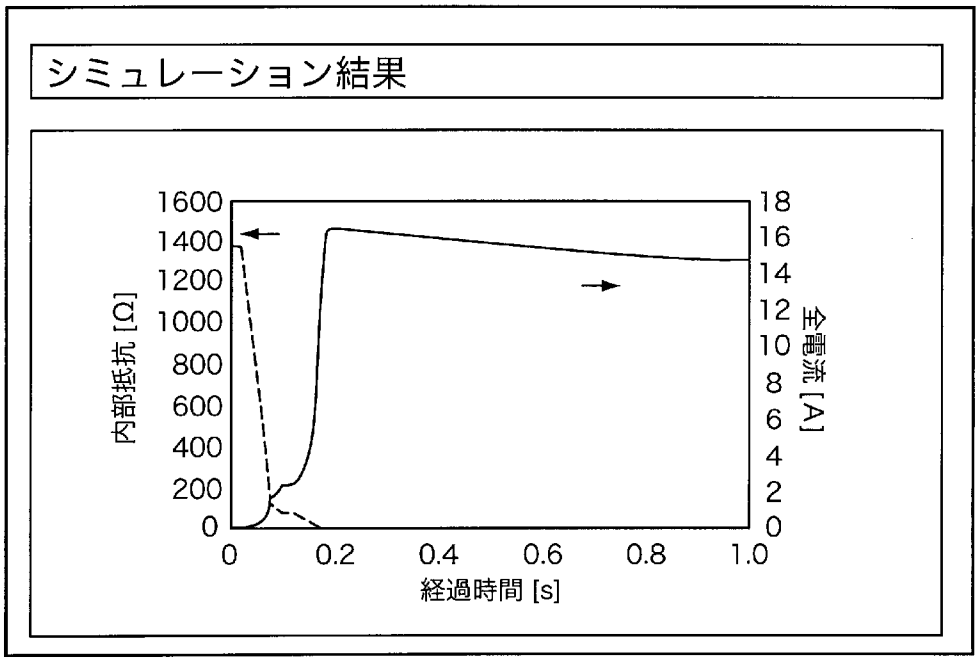
[図10]


クライアント装置
サーバ装置
スタート
S101
ユーザインタフェース画面を表示
S102
シミュレーション対象の選択
S103
計算オプションを受付け
S104
結果ダウンロード？
NO
YES
S105
シミュレーション対象、計算オプションの情報を送信
S106
シミュレーション対象、計算オプションの情報を受信
S107
シミュレーションを実行
S108
シミュレーション結果を送信
S109
シミュレーション結果を受信
S110
シミュレーション結果を表示
エンド

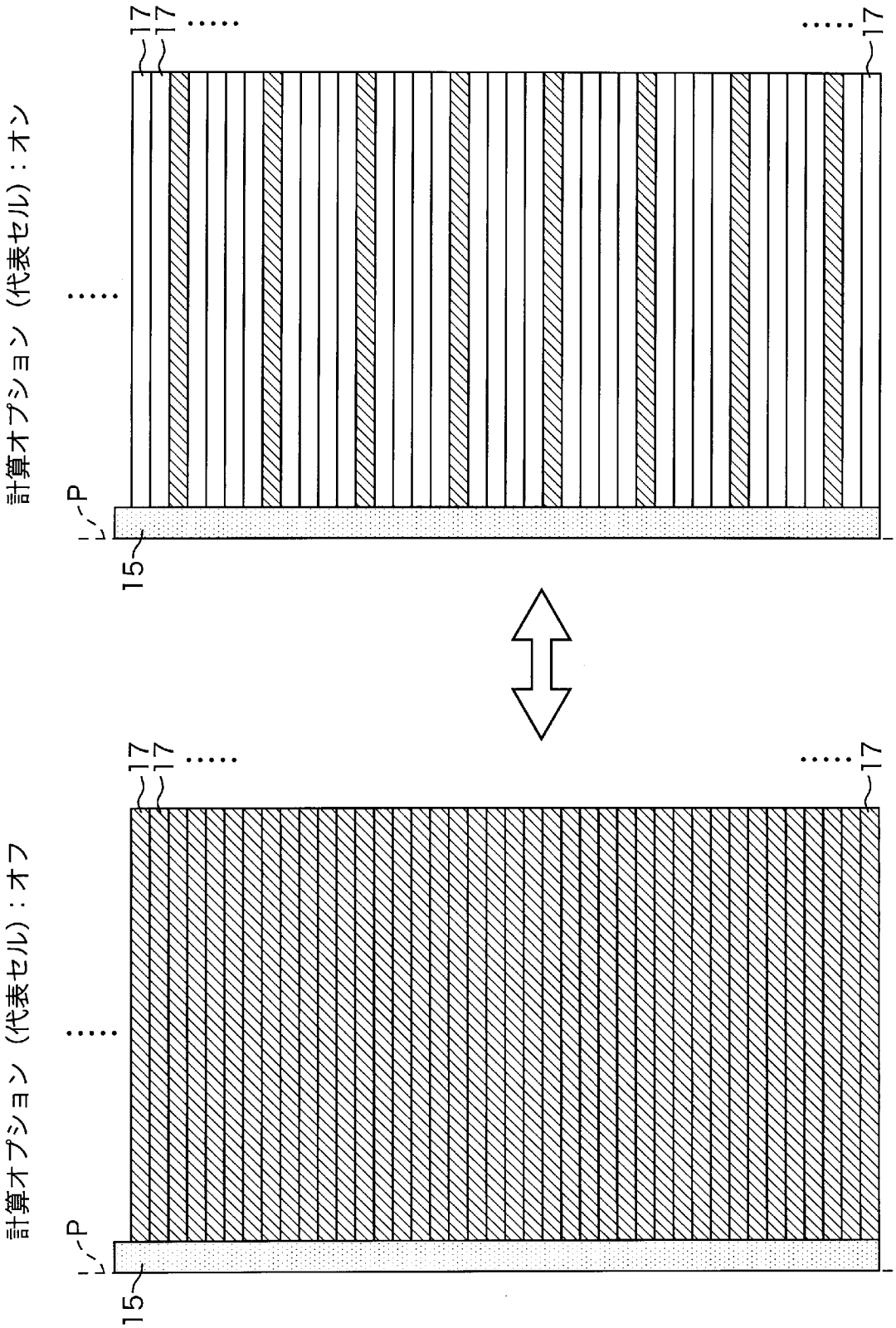
[図11]


10
Ie
EMF
r(T)
R
Ve

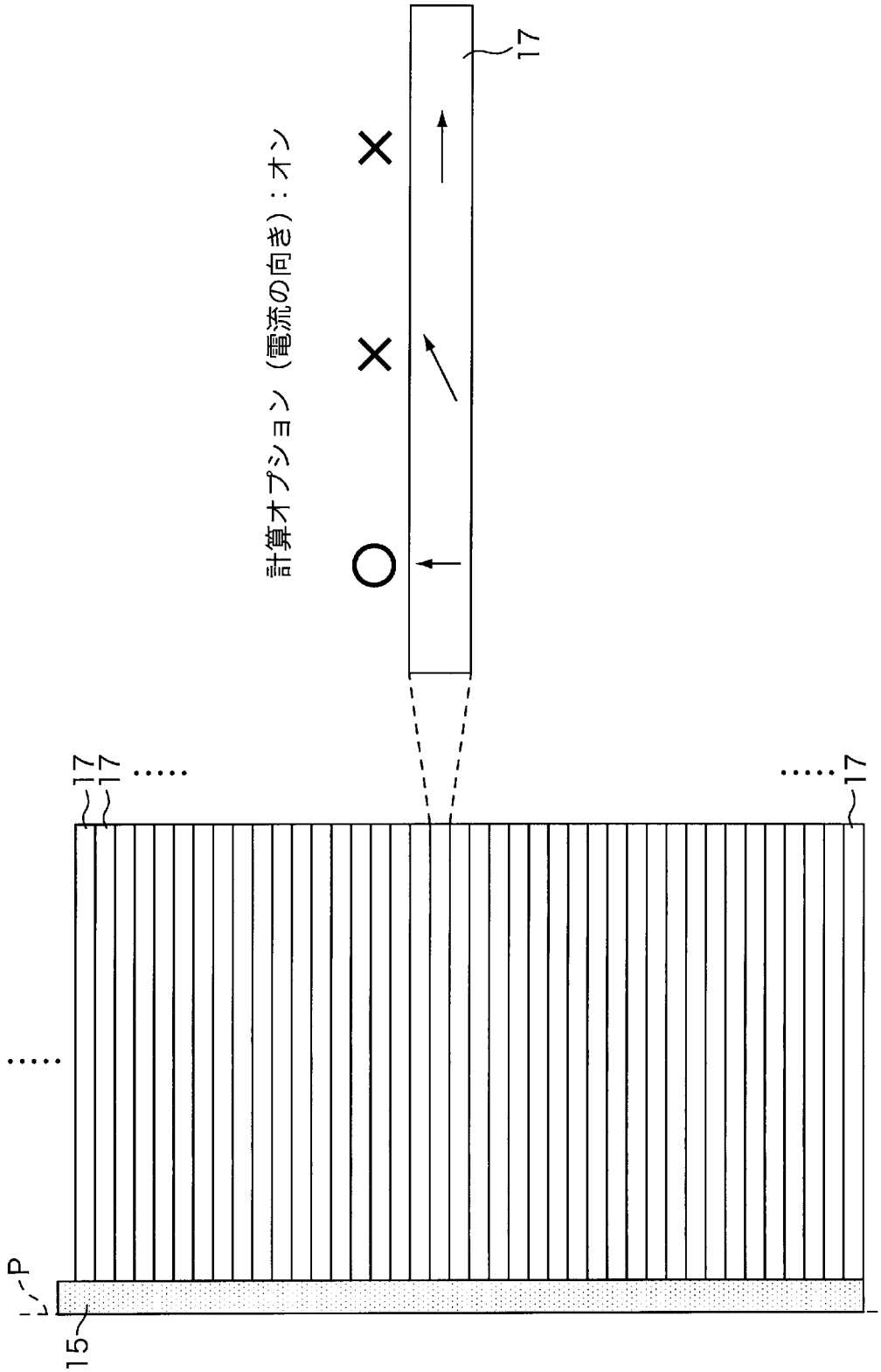
[図12]


シミュレーション結果
内部抵抗 [Ω]
1600
1400
1200
1000
800
600
400
200
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
経過時間 [s]
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
全電流 [A]

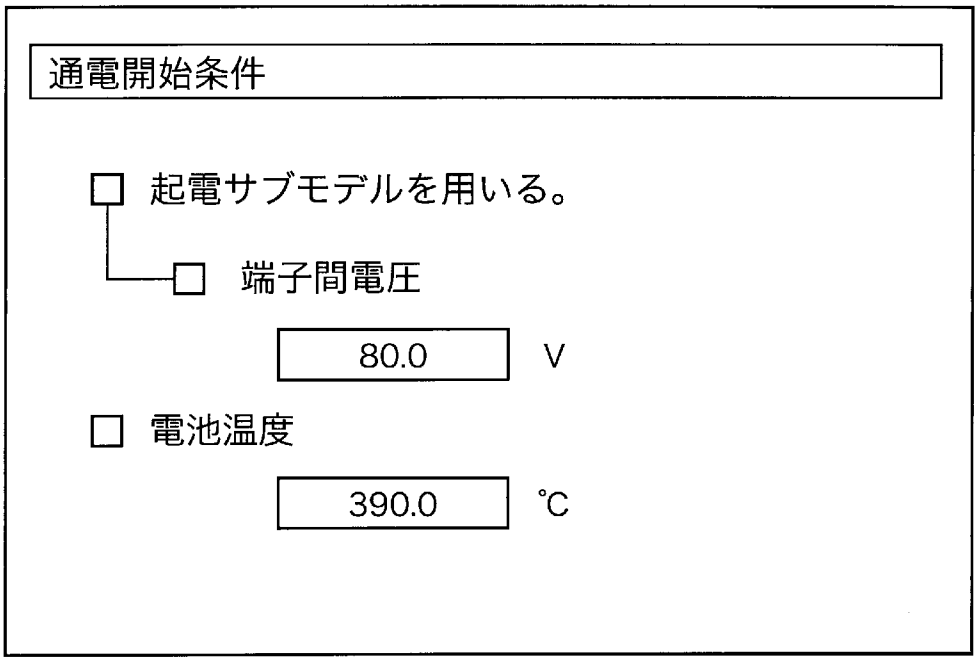
[図13]



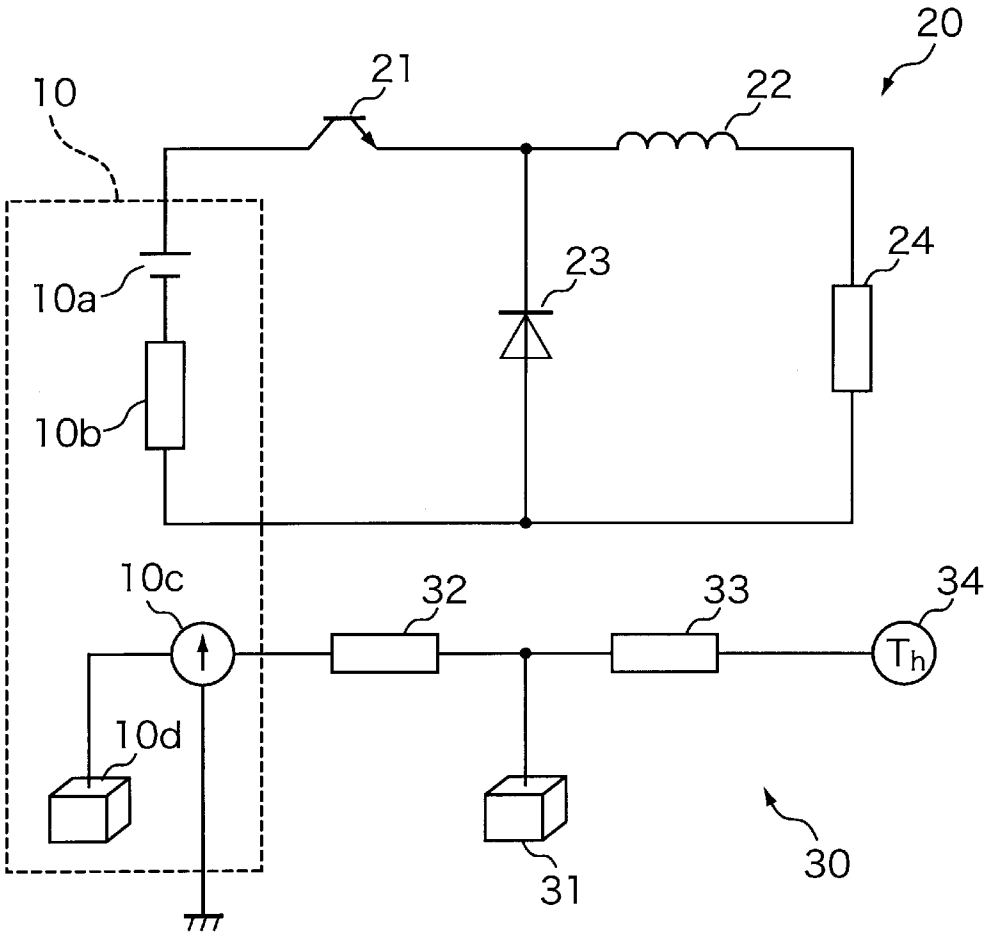
[図14]



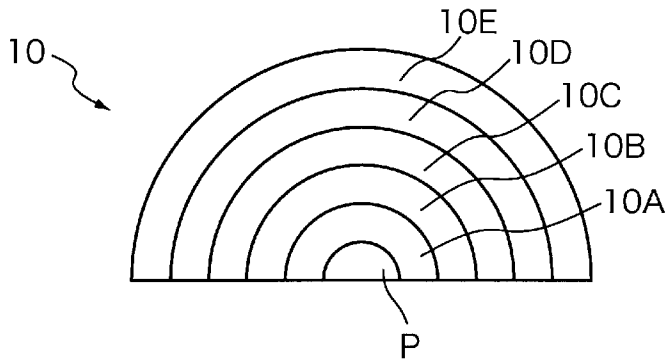
[図15]


通電開始条件
起電サブモデルを用いる。
端子間電圧
80.0
V
電池温度
390.0
℃

[図16]

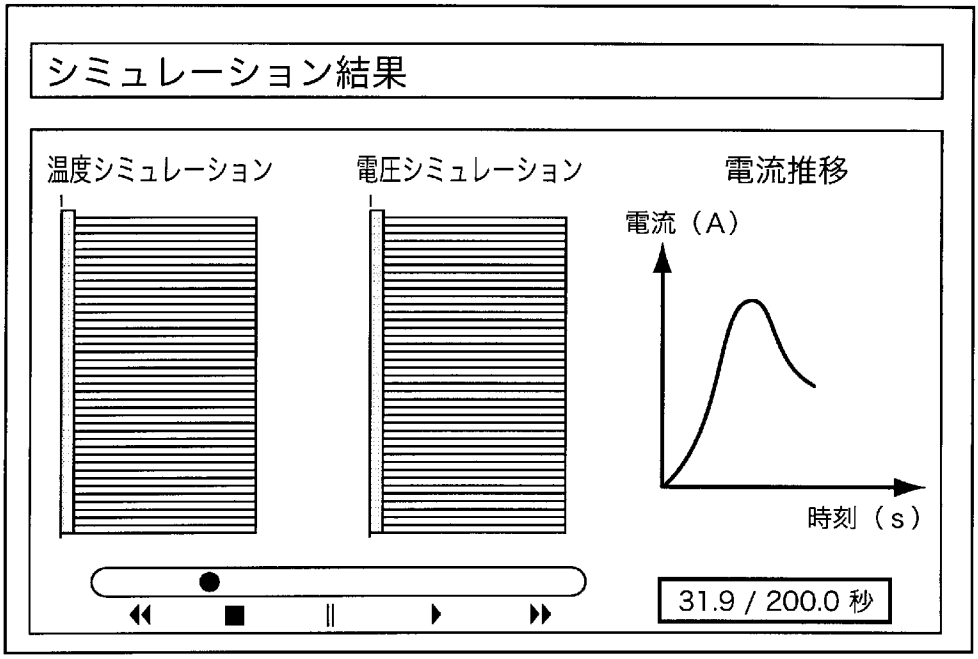

20
21
22
10
24
23
10a
10b
10c
32
33
34
Th
10d
31
30

[図17]

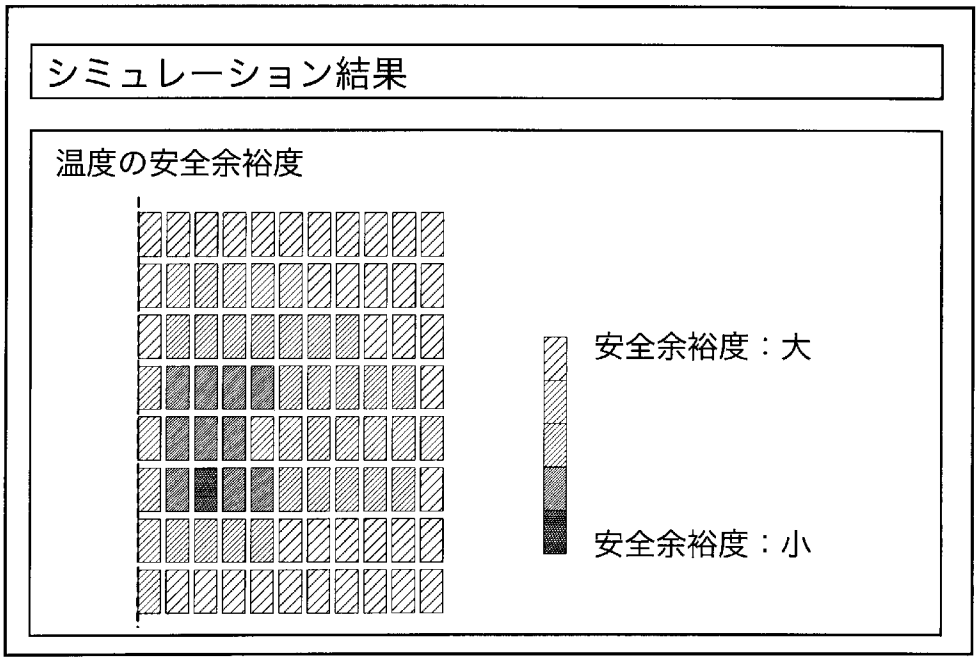


時間推移	領域 10A	領域 10B	領域 10C	領域 10D	領域 10E
0～0.03sec					
0.03～0.05sec	発熱密度 H1				
0.05～0.07sec		発熱密度 H2			
0.07～0.09sec			発熱密度 H3		
0.09～0.11sec				発熱密度 H4	
0.11～0.31sec					発熱密度 H5
0.31～0.33sec					
0.33～0.35sec					
0.35～0.37sec					
0.37～0.39sec					

[図18]


シミュレーション結果
温度シミュレーション
電圧シミュレーション
電流推移
電流（A）
時刻（s）
31.9 / 200.0 秒

[図19]


シミュレーション結果
温度の安全余裕度
安全余裕度：大
安全余裕度：小

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2020/012068

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
G06F 30/20(2020.01)i; H01M 6/36(2006.01)i; H01M 6/50(2006.01)i
FI: G06F17/50 612A; G06F17/50 680Z; H01M6/50; H01M6/36 C
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G06F30/00-30/398; H01M6/36; H01M6/50

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2020
Registered utility model specifications of Japan	1996-2020
Published registered utility model applications of Japan	1994-2020

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
Google Scholar

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	SCOTT, A. R., "Multiphysics modeling of thermal batteries [online]", 2016, [retrieved on 08 June 2020], Retrieved from the Internet <URL:https://creb.umd.edu/sites/all/files/14-Roberts-Multiphysics-modeling-of-thermal-batteries-at-Sandia.pdf> slides 2-16	1, 5, 8, 13-18
Y	slides 2-16	7, 11, 12
A	slides 2-16	2-4, 6, 9, 10
Y	JP 2016-194919 A (NGK INSULATORS, LTD.) 17.11.2016 (2016-11-17) paragraph [0042]	7
A	paragraph [0042]	1-6, 8-18
Y	JP 2001-152397 A (EBARA CORPORATION) 05.06.2001 (2001-06-05) abstract	11
A	abstract	1-10, 12-18

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search 08 June 2020 (08.06.2020)	Date of mailing of the international search report 16 June 2020 (16.06.2020)
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915, Japan	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2020/012068

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	US 5428560 A (AEROSPATIALE SOCIETE NATIONALE INDUSTRIELLE) 27.06.1995 (1995-06-27) column 3, line 50 to column 4, line 2	12
A	column 3, line 50 to column 4, line 2	1-11, 13-18

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2020/012068

Patent Documents referred in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
JP 2016-194919 A	17 Nov. 2016	US 2016/0290943 A1 paragraph [0081] EP 3079087 A2	
JP 2001-152397 A	05 Jun. 2001	US 6542784 B1 abstract EP 1113094 A2 KR 10-2001-0051787 A	
US 5428560 A	27 Jun. 1995	EP 565405 A1 FR 2689986 A1	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2020/012068

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G06F 30/20(2020.01)i; H01M 6/36(2006.01)i; H01M 6/50(2006.01)i
FI: G06F17/50 612A; G06F17/50 680Z; H01M6/50; H01M6/36 C

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

G06F30/00-30/398; H01M6/36; H01M6/50

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２０年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２０年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２０年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

Google Scholar

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	SCOTT, A.R., Multiphysics modeling of thermal batteries [online], 2016, [retrieved on 2020.06.08], Retrieved from the Internet <URL:https://creb.umd.edu/sites/all/files/14-Roberts-Multiphysics-modeling-of-thermal-batteries-at-Sandia.pdf> slides 2-16	1,5,8,13-18
Y	slides 2-16	7,11,12
A	slides 2-16	2-4,6,9,10
Y	JP 2016-194919 A (日本碍子株式会社) 17.11.2016 (2016-11-17) [0042]	7
A	[0042]	1-6,8-18
Y	JP 2001-152397 A (株式会社荏原製作所) 05.06.2001 (2001-06-05) 要約	11
A	要約	1-10,12-18

☑ Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー
"A" 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
"E" 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
"L" 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
"O" 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
"P" 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
"T" 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
"X" 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
"Y" 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
"&" 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
08.06.2020	16.06.2020

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
松浦　功 5H 9181
電話番号 03-3581-1101 内線 3531

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
Y	US 5428560 A (AEROSPATIALE SOCIETE NATIONALE INDUSTRIELLE) 27.06.1995 (1995-06-27) column 3, line 50 - column 4, line 2	12
A	column 3, line 50 - column 4, line 2	1-11, 13-18

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2020/012068

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2016-194919 A	17.11.2016	US 2016/0290943 A1 [0081] EP 3079087 A2	
JP 2001-152397 A	05.06.2001	US 6542784 B1 ABSTRACT EP 1113094 A2 KR 10-2001-0051787 A	
US 5428560 A	27.06.1995	EP 565405 A1 FR 2689986 A1	