

機械学習を活用したリチウムイオン二次電池有機正極活物質の性能予測モデルの構築と進化

(慶大理工¹・筑大院シス情²・ソフトバンク³) ○山本 里夏¹・五十嵐 康彦²・宮川 絢太郎³・坂田 大成³・吉崎 志乃³・齊藤 貴也³・今井 宏明¹・緒明 佑哉¹

Construction and Advance of Performance Prediction Models for Organic Cathode Active Materials of Lithium-Ion Battery (¹*Fac. of Sci. and Tech., Keio Univ.*, ²*Grad. Sch. of Sys. and Info. Eng., Univ. of Tsukuba*, ³*SoftBank Corp.*) ○Rika Yamamoto¹, Yasuhiko Igarashi², Shuntaro Miyakawa³, Taisei Sakata³, Shino Yoshizaki³, Takaya Saito³, Hiroaki Imai¹, Yuya Oaki¹

Organic energy storage has attracted much interest to save resources and achieve higher energy density. Our group has reported the performance prediction models for organic cathode active materials of lithium-ion battery based on the small data using sparse modeling combined with the chemical insights. In the present work, the improved prediction models for the performances, such as capacity, potential, and energy density, were constructed with the addition of the training data. The validity of the descriptors and accuracy of the predictors were studied by data-scientific manner.

Keywords : materials informatics; lithium-ion battery; organic cathode active materials; machine learning; sparse modeling

蓄電池の資源リスクフリー化と高性能化の両立のためには、有機正極の高エネルギー密度化が必要である。当研究室では、小規模データに対するマテリアルズインフォマティクスとして、機械学習と化学的考察を融合することで、リチウムイオン二次電池有機正極活物質の性能予測モデルの作成を行ってきた¹⁾。しかし、第1世代のモデルAでは、訓練データは38化合物であり予測精度が十分ではない。また、反応部位が既知の分子のみに適用される記述子を含んでいるため、新規骨格の探索が困難である。本研究では、訓練データを60化合物に増やし、12個の説明変数を準備し、新たに容量(C)、電位(P)、エネルギー密度(E)について第2世代のモデルBを作成した(Fig. 1)。このとき、Exhaustive search with linear regression (ES-LiR)とBayesian model averaging(ES-BMA)を用いることで記述子を抽出した。構築したモデルを用いて直近10年程度で報告された12個の化合物の性能を新たなテストデータとして用い、予測精度の検証を行った。また、訓練データを増やしたことによる予測精度の向上について検証した。

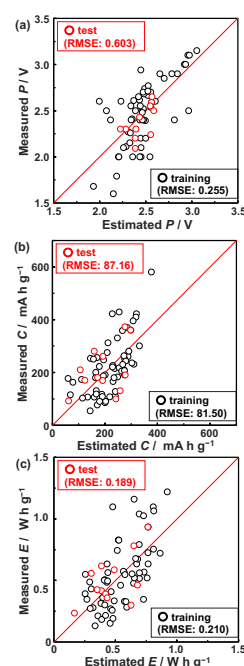


Fig. 1 電位(a), 容量(b), エネルギー密度(c)予測モデルの予測値と実測値の関係。

- 1) K. Sakano, Y. Igarashi, Y. Oaki *et al.* *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 2, 2074–2082