

機械学習を用いたリチウムイオン二次電池有機負極活物質の容量予測モデルの構築と進化

(慶大理工¹・筑波大院システム情報工²・東大院理³・東大院新領域⁴)○飛田 春香¹・並内 優樹²・今井 宏明¹・大日方 孝輝³・岡田 真人⁴・五十嵐 康彦²・緒明 佑哉¹
Construction and Improvement of Capacity-Prediction Models for Organic Anode Active Materials of Lithium-Ion Battery (¹Faculty of Science and Technology, Keio University, ²Degree Programs in Systems and Information Engineering, University of Tsukuba, ³Graduate School of Science, The University of Tokyo, ⁴Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo) ○Haruka Tobita,¹ Yuki Namiuchi,² Hiroaki Imai,¹ Koki Obinata,³ Masato Okada,⁴ Yasuhiko Igarashi,² Yuya Oaki¹

Organic electrode active materials are required for development of high-performance energy storage. Our group has reported two capacity-predictors for organic anode active materials of lithium-ion battery on small data using sparse modeling combined with our chemical insights. Here we constructed a new capacity predictor with addition of the training data. The validity of the descriptors and accuracy of the prediction were studied for these three predictors. The latest model had sufficient accuracy and validity in terms of chemical and data-scientific insights even using a limited number of the descriptors.

Keywords : lithium-ion battery; organic anode active materials; small data; sparse modeling

蓄電池の省資源化とさらなる高性能化に向け、高容量有機電極活物質が必要である。当研究室では、リチウムイオン二次電池の有機正・負極活物質に着目し、小規模データに対し、機械学習と化学的考察を融合したマテリアルズインフォマティクスによる性能予測モデルの作成を行ってきた。^{1,2,3}しかし、有機負極の容量予測モデルの第1,2世代(G1,G2)では、訓練データがそれぞれ16, 25化合物であり、妥当な記述子抽出と十分な予測精度に至っていなかった。本研究では、訓練データを36化合物に増やし、17個の説明変数を準備し、新たなモデルG3を作成した(Fig. 1)。また、これらのモデルに対し、抽出記述子の妥当性、データの質や量、用いる機械学習のアルゴリズムなどが予測精度に与える影響を、データ科学的に検討した。これらの検討から、作成したモデルG3は、化学的かつデータ科学的に妥当な少数の記述子から成り、予測精度と汎化性を兼ね備えていることが示唆された。

- 1) H. Numazawa, Y. Igarashi, K. Sato, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory Simul.* **2019**, 2, 1900130
- 2) T. Komura, K. Sakano, Y. Igarashi, H. Numazawa, H. Imai, Y. Oaki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 8990
- 3) K. Sakano, Y. Igarashi, H. Imai, S. Miyakawa, T. Saito, Y. Takayanagi, K. Nishiyama, Y. Oaki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 2074

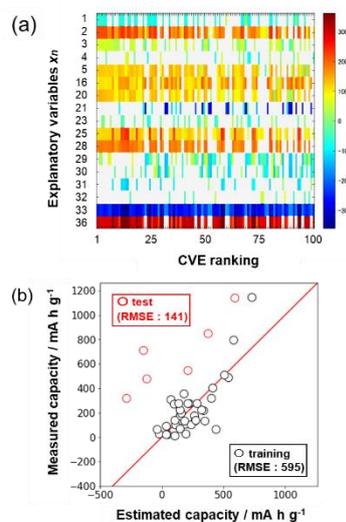


Fig. 1 (a) スパースモデリングによる線形回帰のための全状態探索結果, (b) モデル G3 を用いた予測値と実測値の関係.