



機械学習を活用した 多孔質材料の最適構造の探索

研究・開発機関 : 株式会社コベルコ科研
 利用施設 : 自社内設備、FOCUSスパコン
 計算規模 : 解析時間 約100時間
 利用ソフトウェア : COMSOL Multiphysics、MATLAB、Python+scikit-learn

Before

- リチウムイオン電池の電極構造は、活物質粒子が凝集した複雑な3次元の多孔質構造であり、与えられた構造での充放電特性は評価できますが、最適な構造の探索は困難でした。
- 機械学習のためのデータ向けに、多数の電極構造を作成して実試験で特性を収集することは膨大な時間・コストがかかり困難でした。

After

- 機械学習(ニューラルネットワーク)で電極製造条件と電極特性の相関モデルを作成することにより、構造を最適化するためのプロセス条件の解析が可能となりました。
- 計算機上で人工的な電極構造を自動作成し、ハイスループット解析により特性評価することで、数千以上の電極構造と特性評価を自動的に高速でデータ収集が可能となりました。

背景と目的

リチウムイオン電池の電極の3次元構造は、電池の充放電特性(抵抗や容量)を決める重要な設計要素です。しかし、電極構造は、活物質粒子、導電助剤、バインダーが混合した複雑な3次元の多孔質構造であり、求められる電池特性を得るための構造最適化は容易ではありません。ここでは機械学習を用いることにより、多数の設計パラメータと多孔質電極構造特性の相関モデルを構築し、求められる電池特性を得るための電極最適構造を探索することにしました。

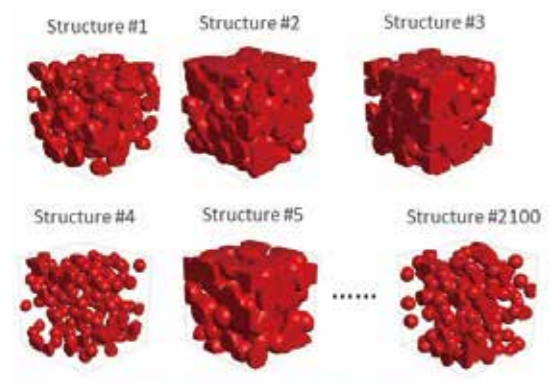


図1 自動生成された電極人工構造の例

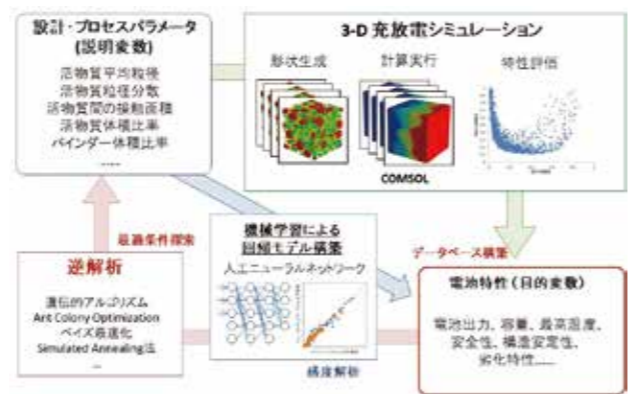


図2 電極構造と電池特性の機械学習解析の流れ

■ 利用成果

自動化による単純作業の効率化

当社では、電極の3次元凝集構造に対し、高速に充放電特性を評価するため、疑似3次元モデル^[1]をはじめとするハイスループットモデルを開発してきました。ここでは、図1に示すように、2100水準に上る、多数の電極構造を人工的に自動生成しながら、ハイスループットモデルにより特性評価し、各電極の充放電特性を蓄積しました。この結果に対し、人工ニューラルネットワーク(ANN)を用いて、電極設計条件と電池特性の相関関係の学習モデルを構築しました。図2に、電極構造作成→電池特性評価→機械学習モデル作成の順方向解析の流れ、および、電池特性→電極設計条件の逆方向解析の流れを示します。

図3に得られたANNのスコア評価および検定結果を示します。横軸はハイスループット解析による電池特性値、縦軸はANNの予測値であり、スコア0.921と良好に学習できたことが分かります。

構築したANNにより、最も高出力(低抵抗)となる電極構造および設計パラメータ、および最も高容量となる構造を最適化解析により探索しました。図4に、活物質体積比、および活物質平均粒子径の二つのパラメータに対する、内部抵抗の分布を示します。青色の領域が最も抵抗が低い電極構造となっています。このように、最も抵抗が低くなる設計パラメータの組み合わせが存在することが示唆されました。図5に、最も低い抵抗になる電極構造および設計パラメータを示します。活物質体積率51%程度で、イオン伝導のための空隙領域を広く確保する構造となり、平均粒子径は8.5μm程度で、HEV用の電池設計に近い設計パラメータとなりました。



図3 ANNのスコア評価(左図)および検定結果(右図)

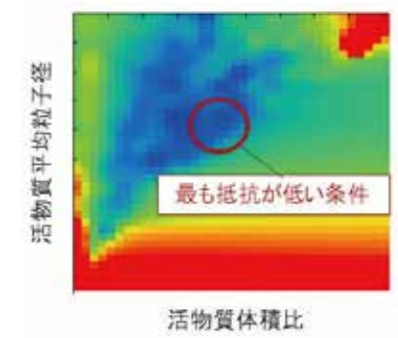
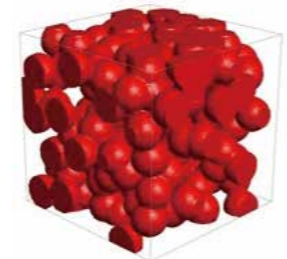


図4 電極内部抵抗の分布図

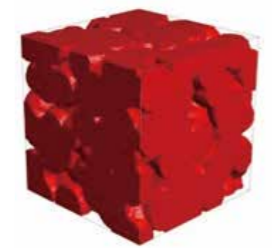
一方、図6に低電流での充放電が可能な範囲で、最も容量が高くなる電極構造を示します。結果は、活物質体積率88%程度と非常に密度が高く平均粒子径も12μmと大きくなり、容量を確保する構造となりました。また、圧縮率の高い構造で、EV用の高容量密度の電池設計に近い設計パラメータが得られました。

このように、設計パラメータ数の多い、複雑な3次元電極の多孔質構造であっても、機械学習を活用した電極特性シミュレーションにより、最適化構造解析が実現できることが分かりました。



Parameter	Value
活物質体積比	0.51
活物質平均粒径	8.50
活物質粒径分散	0.02
プレス圧力	0.01

図5 最も抵抗が低くなる電極構造の最適化解析結果



Parameter	Value
活物質体積比	0.88
活物質平均粒径	12.0
活物質粒径分散	0.01
プレス圧力	0.22

図6 最も容量が高くなる電極構造の最適化解析結果

[1] 山上、高岸：R&D 神戸製鋼技報 Vol.66, No.2 (2017) p.120-125.