

鈴木 耕太

東京工業大学 物質理工学院
助教

合成-情報科学の融合によるリチウムイオン導電体の探索手法開拓

§ 1. 研究成果の概要

全固体型電池への応用が期待されるリチウムイオン導電体の探索が進められているが、物質発見の速度は遅い。本研究では、古典的な固体化学の考え方に基づく物質探索に機械学習を融合させた、新しい材料探索法の開拓に取り組んでいる。昨年度、材料推薦システムの導入による新材料の発見効率向上を実証した。しかし、推薦システムにはイオン導電特性の指標が内包されていないため、高イオン導電特性を示す材料の発見には至っていない。本年度は、推薦システムから予測される物質の合成と並行して、化学組成からイオン導電率を予測する機械学習手法の開拓を行い、推薦システムと組み合わせた手法の構築を目指した。

$\text{Li-M1-M2}\cdots\text{Mn-O}$ ($\text{M}=\text{Li}$ 以外の元素)系材料の組成情報から生成できる、イオン半径、分極率、価数、イオン化エネルギーなどの分散、平均、標準偏差などを説明変数として、目的変数であるイオン導電率を予測する回帰学習を検討した。約200の学習データに対して約400の説明変数を用いてランダムフォレストで回帰学習を行った。学習前および学習過程において、大量に生成した説明変数の削減(<30)を行った。具体的には、組成比と直接関与しない説明変数や、説明変数同士の相関係数の高いものを削除した。ハイパーパラメーターのチューニングにより学習精度は向上し、推薦システムとの組み合わせに十分耐えうる程度の予測が出来ることが分かった。今後は、推薦システム上位かつイオン導電率が高いと予測された新組成を中心に、合成実験と特性評価を展開する。