

# 機械学習による次世代型燃料電池材料の熱膨張率予測プログラムの開発

材料物性工学専攻 辻川 皓太

## はじめに

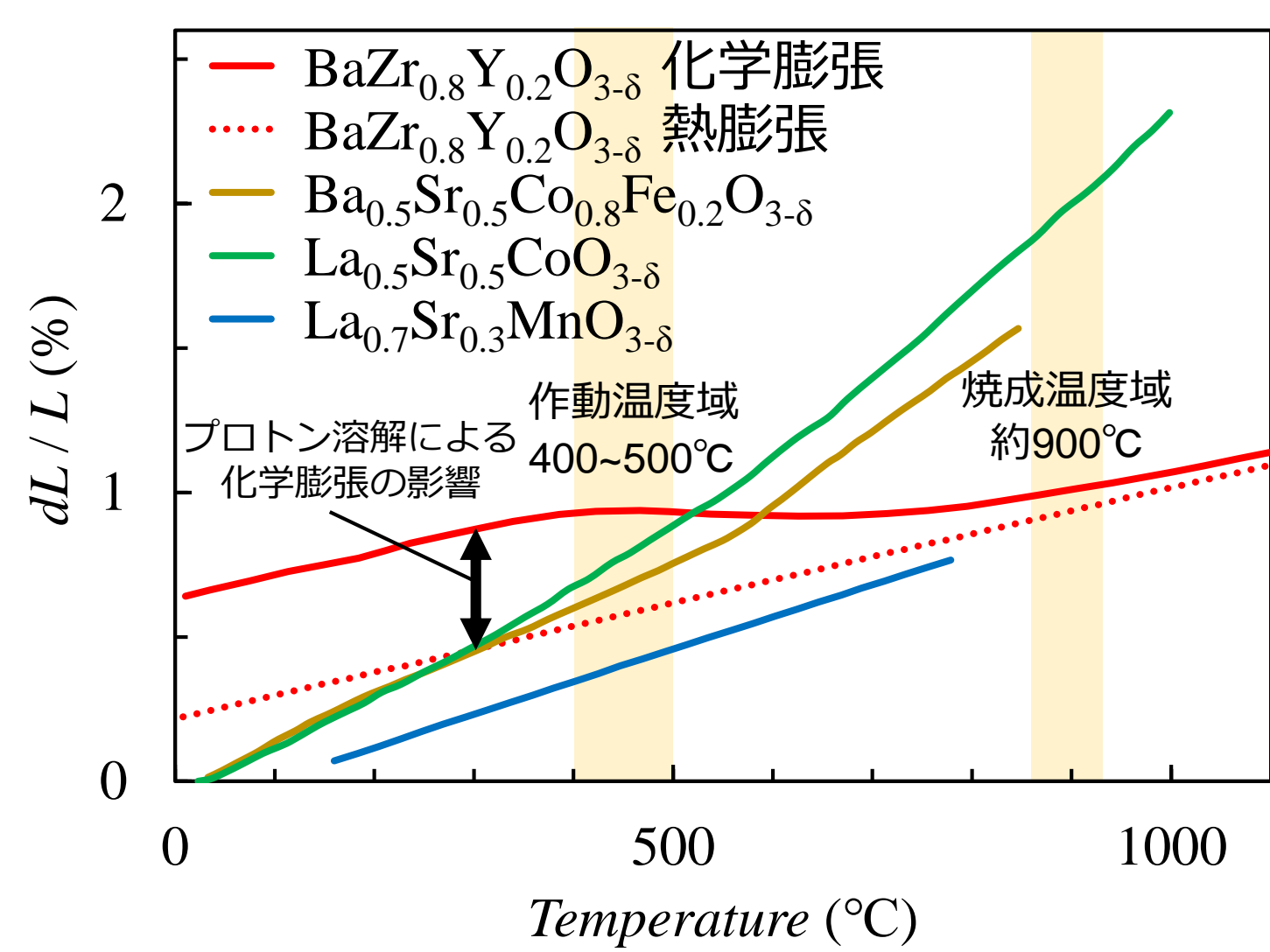
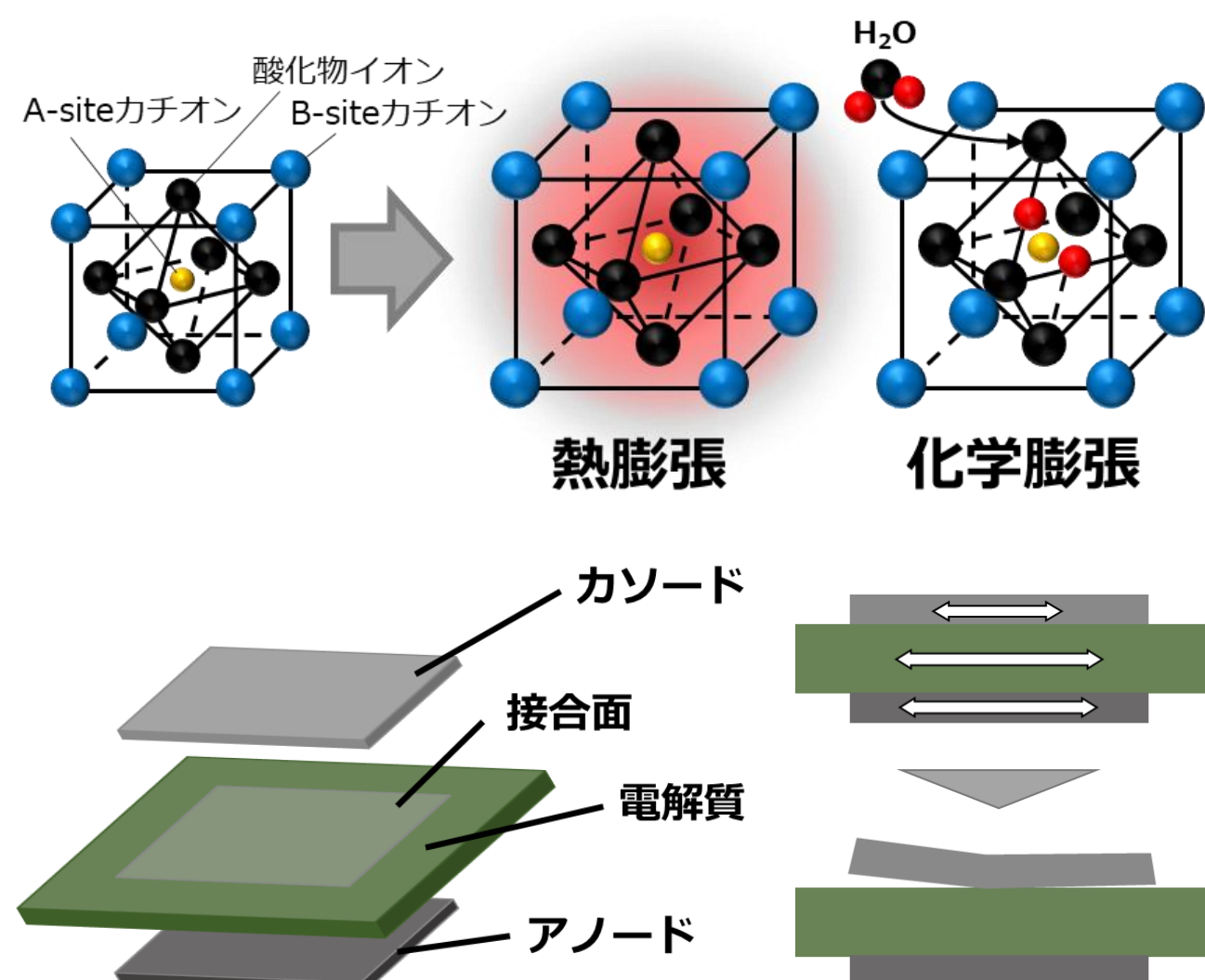


プロトン導伝性固体酸化物形燃料電池(PCFC)は400~500°C付近での中温動作が可能である。白金触媒や、耐熱材料が不要なことから注目を集めている。

燃料電池は電解質、電極の2つの固体を接合させた構造をとっており、両材料の相性が重要である。電解質材料と電極材料の膨張率(dL/L)の差は、昇温・降温時に接合面の剥離を発生させ著しく電池性能を劣化させてしまう。

本研究では、機械学習により未知材料の熱膨張を予測する手法を開発することで材料間の相性を考慮した材料探索システムを開発した。

### 酸化物結晶の膨張



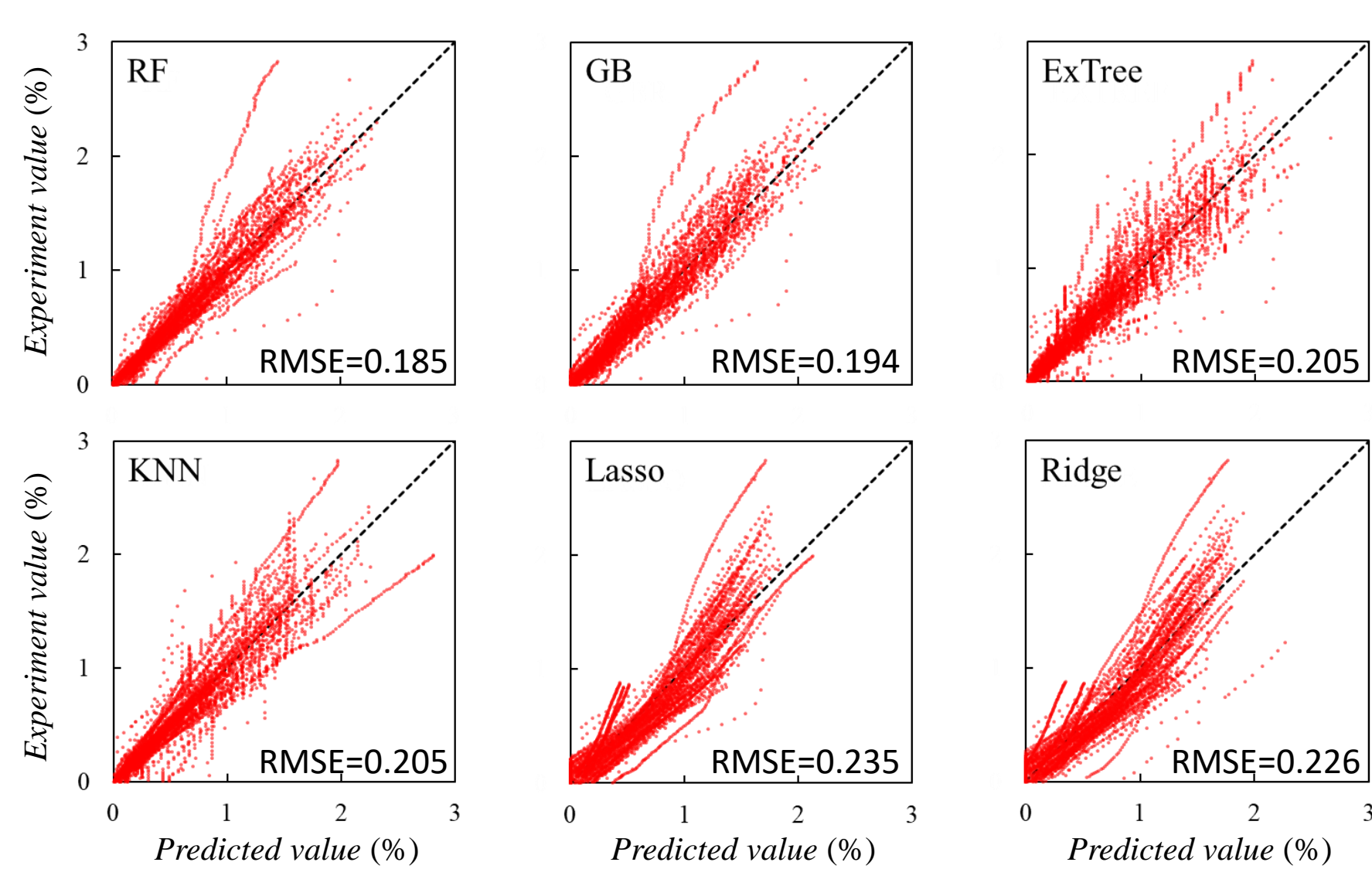
材料間の膨張差により電極・電解質間の剥離が発生

## 研究目的

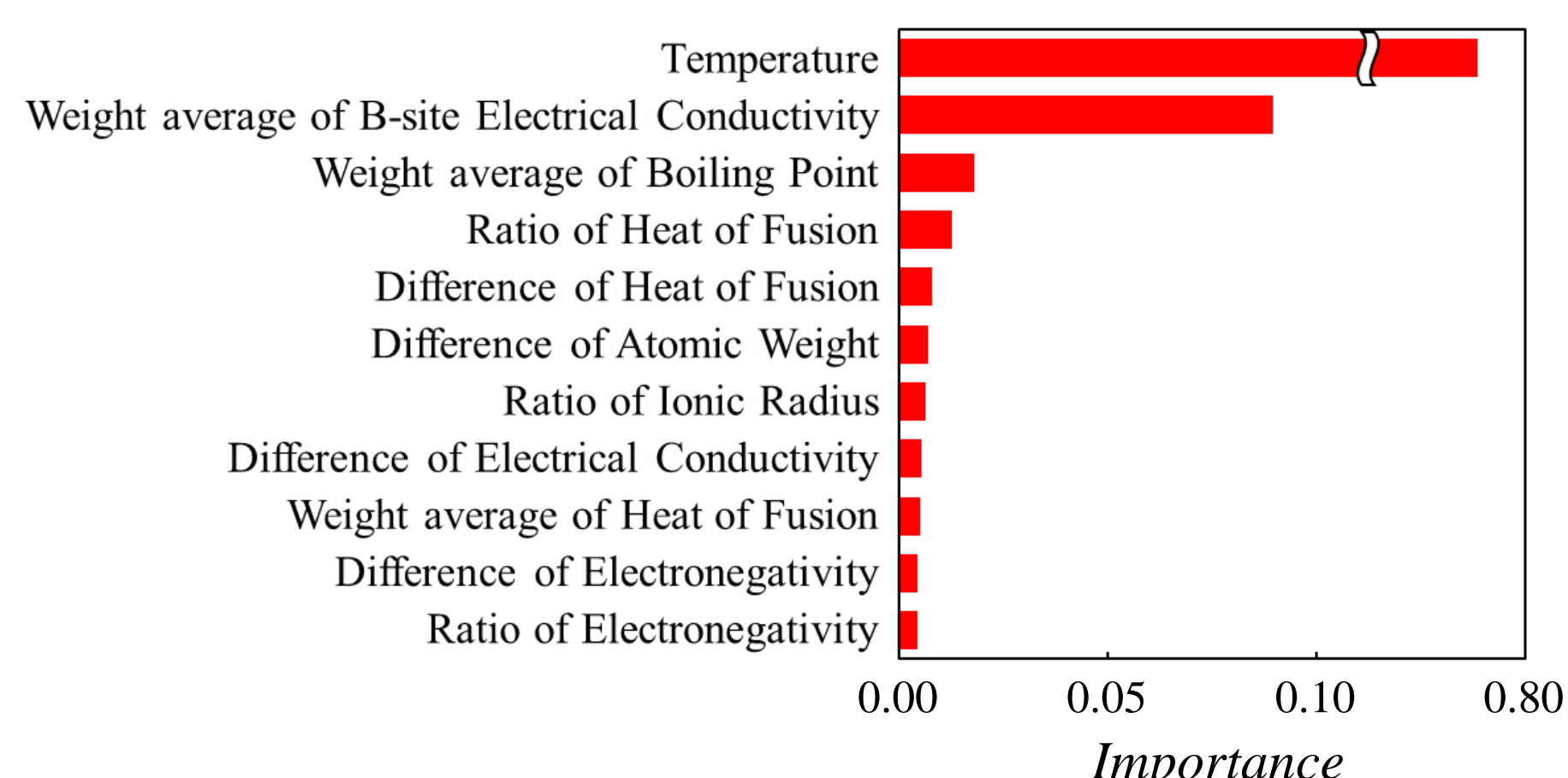
機械学習を用いてカソード材料の熱膨張率を予測し、 $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ 電解質材料と膨張率が近いカソード材料の探索を行った

## 実験結果

### 予測モデルごとの予測精度の検証



### 重要度の高い記述子



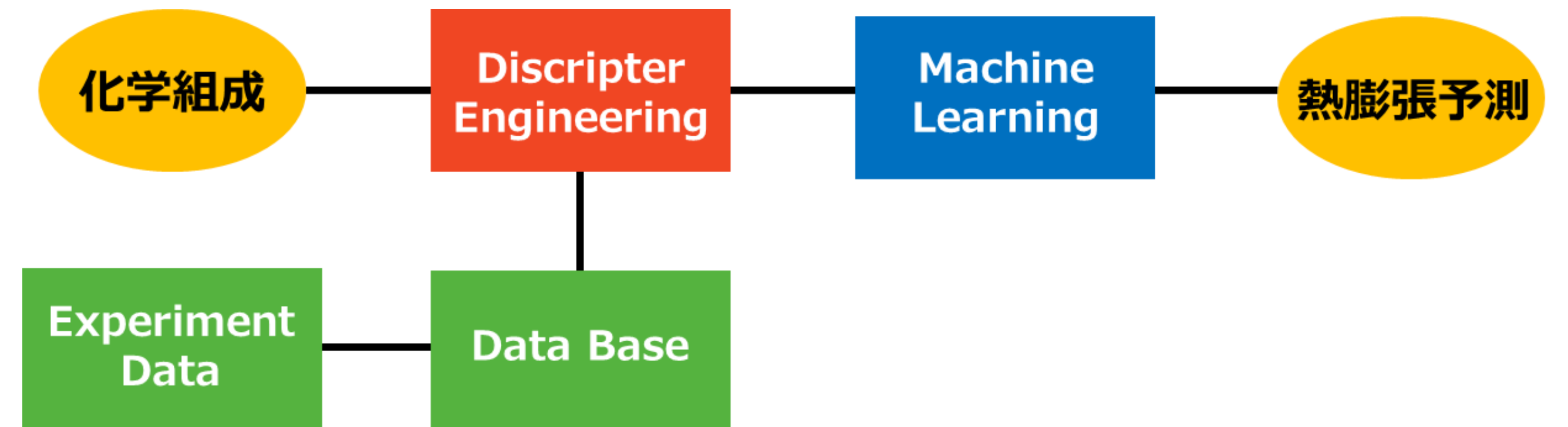
熱膨張率の予測モデルは熱膨張の温度依存性を認識しており、その他B-site元素の電気伝導度など様々な元素情報が熱膨張に起因していると判断していることが確認できた

## まとめ

102個の熱膨張率の報告データを用いて予測モデルを構築し、約140万組成のカソード候補材料の熱膨張率予測を機械学習により行った。予測した仮想組成の中から、①作動温度・焼成温度においてPCFCの電解質材料として使用される $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ と近い熱膨張率と予測された仮想組成、②重要度の高い記述子空間において内挿領域に存在する仮想組成を抽出することにより、効率的に電解質材料と膨張率の近いカソード材料の探索が可能システムを構築することに成功した。

## 実験方法

機械学習による材料探索



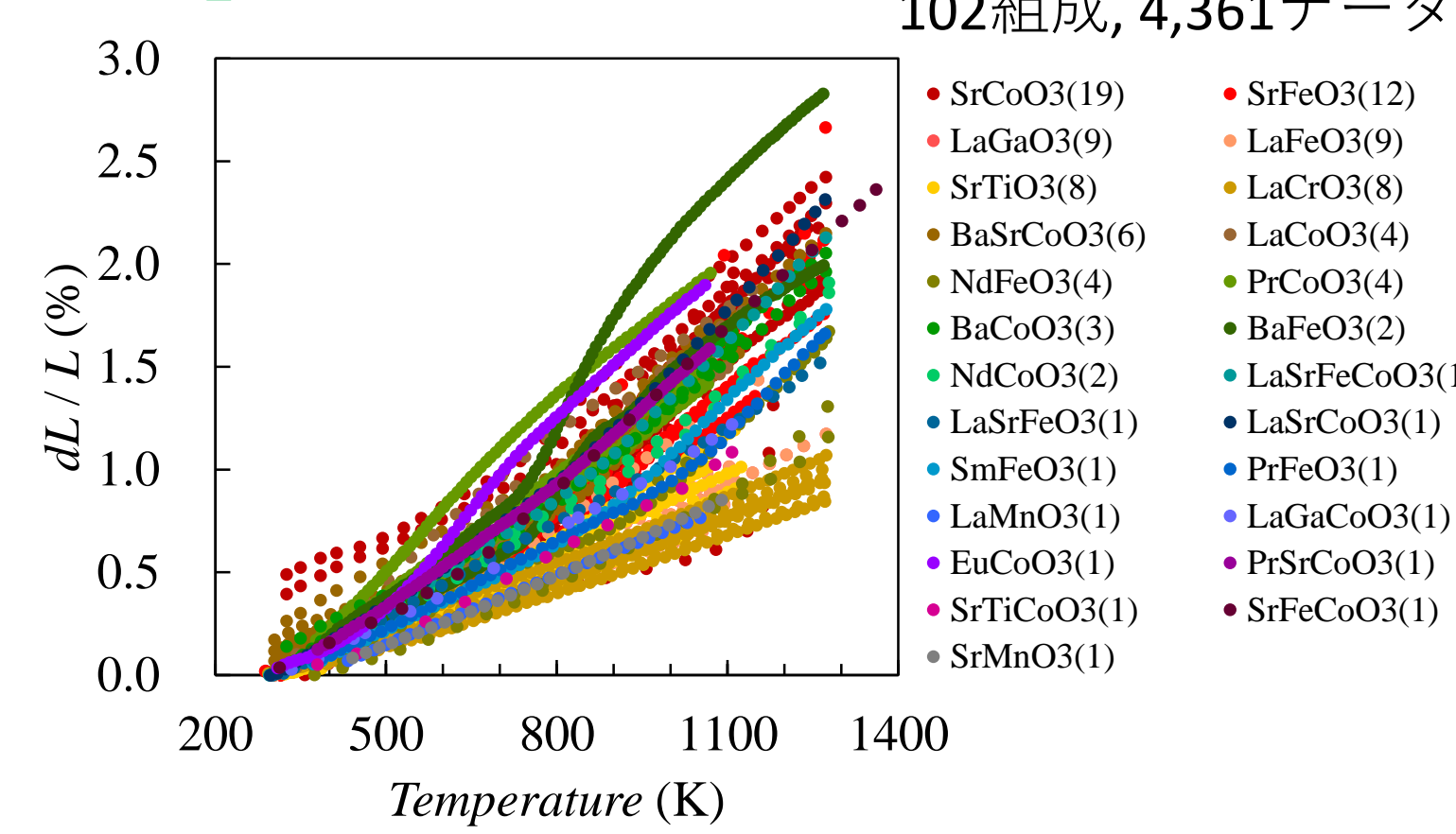
### Descriptors Engineering

Atomic Weight, Electrical Conductivity, Atomic Radius, Thermal Conductivity, Melting point, 1st Ionization Energy, Boiling point, Heat of Vaporization, Heat of Fusion, Electronegativity, Ionic Radius  
A-siteとB-siteの差, 割合など計148種類

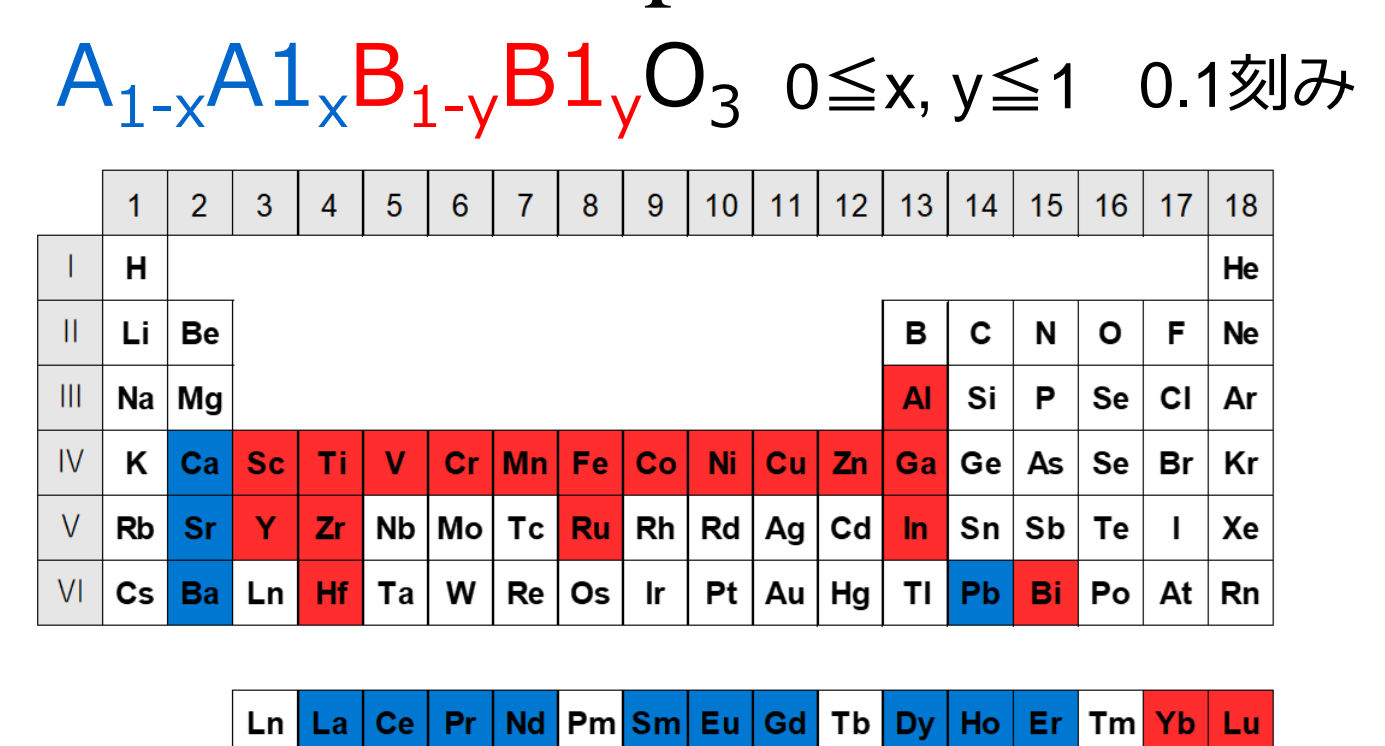
### Machine learning Model

Random Forest Regression (RF), Gradient Boosting Regression (GB), Extra Tree Regression (ExTree), K Neighbors Regression (KNN), Lasso Regression (Lasso), Ridge Regression (Ridge)

### Experiment Data



### Candidate composition



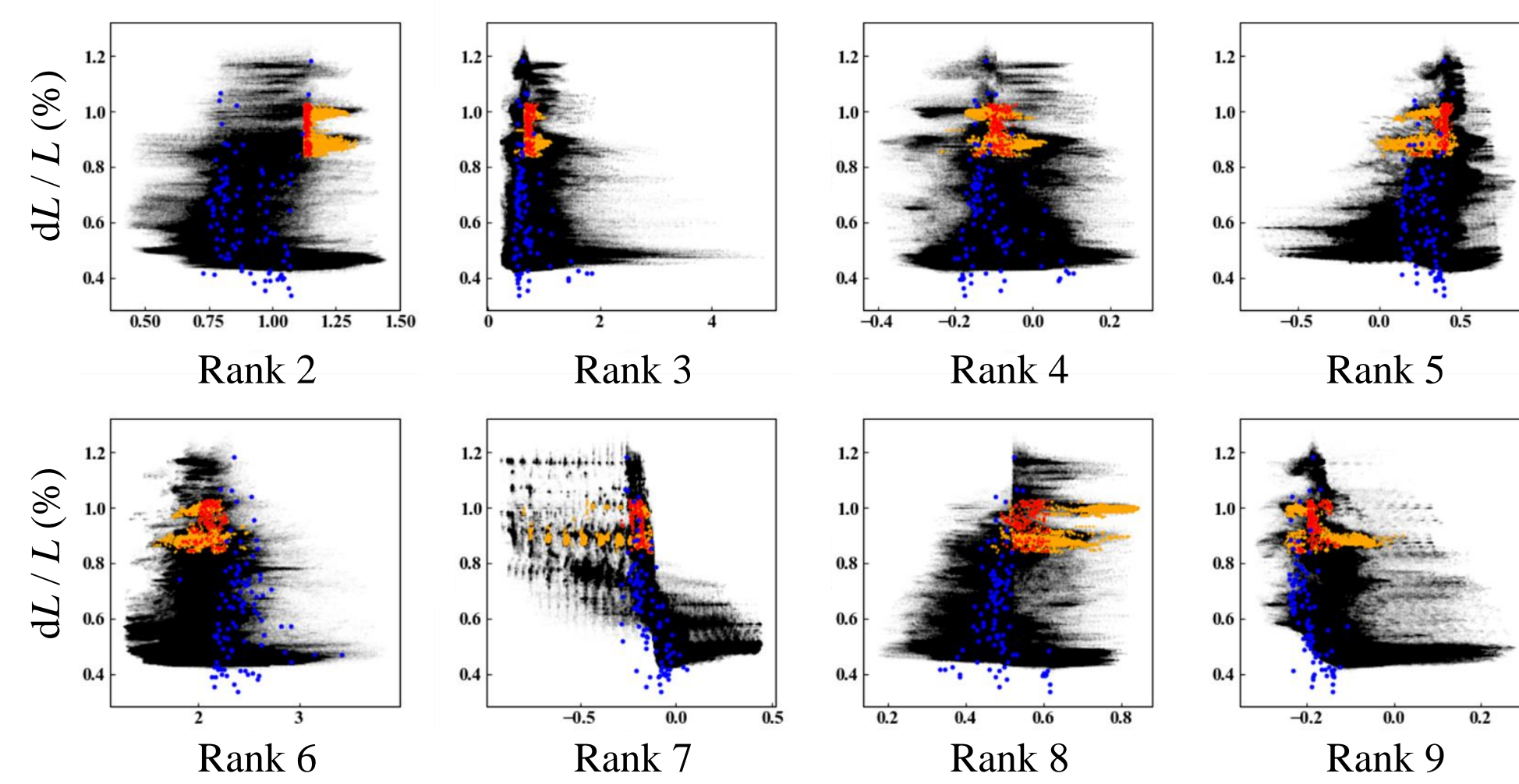
1,400,490組成の熱膨張率を予測し

- ①  $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ と膨張率が近い予測組成
- ② 訓練データの記述子空間内の予測組成の条件からカソードの候補組成を探索

### 大量の候補組成から有望組成を抽出

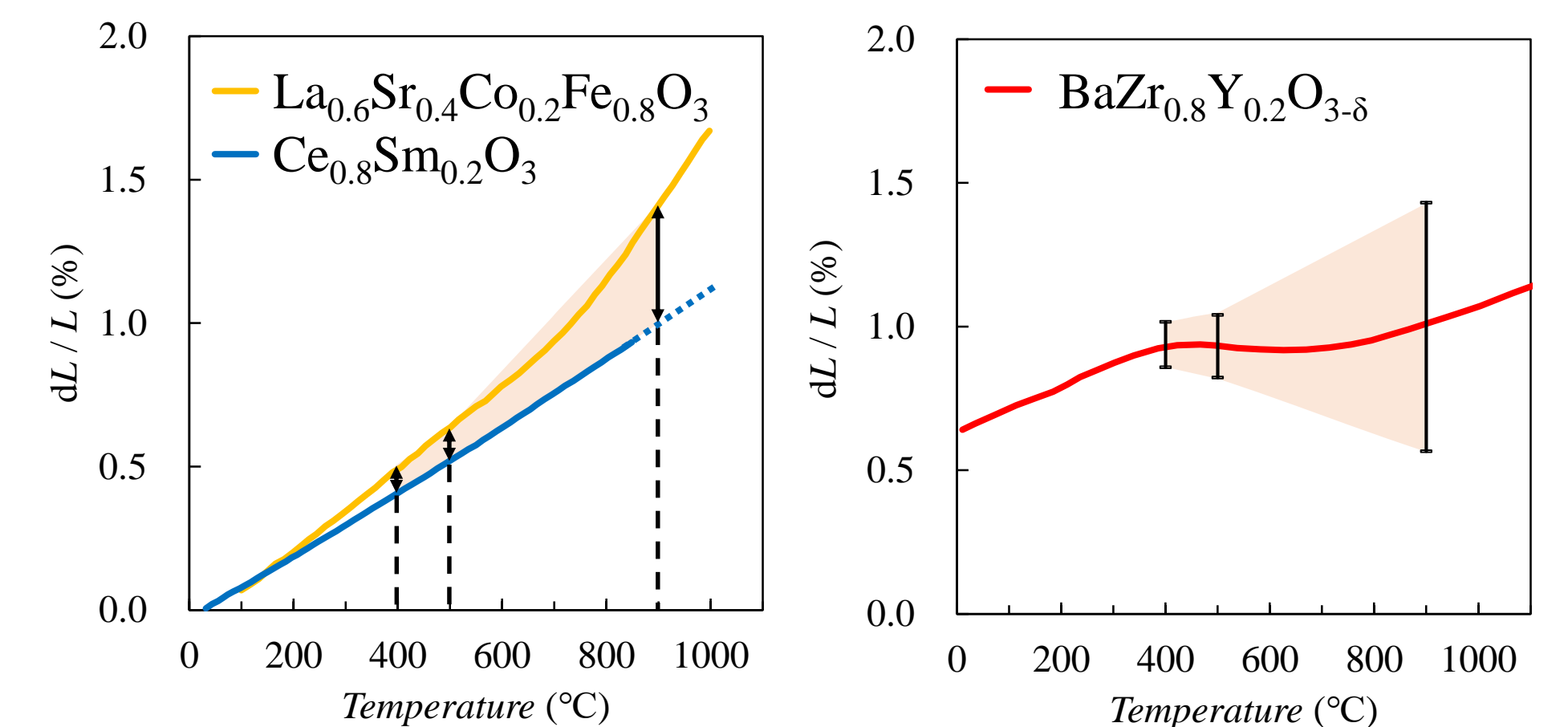
- ① 400, 500, 900°C (燃料電池の作動温度, 作成温度)で $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ に近い熱膨張率と予測された組成
  - ② 重要度の高い8種の記述子空間において内挿領域に存在する組成
- ➡ 1,400,490組成から251組成を抽出

#### ①記述子空間による抽出



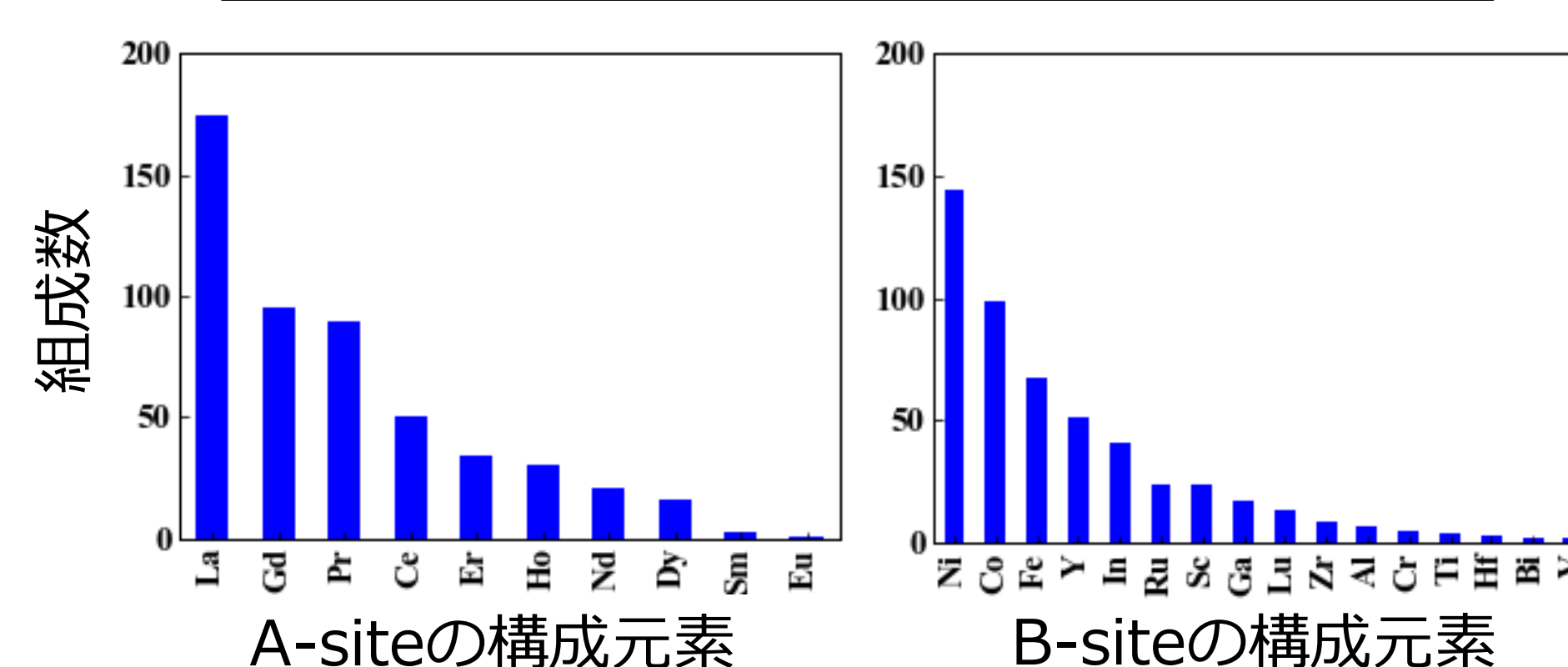
- 訓練組成 ● 条件①を満たす候補組成 ● 条件①と②を満たす候補組成
- 予測組成

#### ②探索する熱膨張率の域値



固体酸化物型燃料電池の電解質材料として使用される $Ce_{0.8}Sm_{0.2}O_3$ とカソード材料の一つである $La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_3$ の熱膨張率の差を閾値に設定

### 抽出した候補組成の構成元素



機械学習により、予測した候補組成から $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ と近い熱膨張率であると予測される候補組成を効率的に探索することができた