

新技術

機械学習手法をもちいた リチウムイオン電池の安全性予測と要因分析技術

① 概要

リチウムイオン電池は、スマートフォンなどの電子機器や電気自動車、住宅をはじめとする蓄電設備など、幅広い分野で使用されており、使用環境下において高い安全性が求められています。リチウムイオン電池は、電極、セパレータ、電解液など多くの部材により複雑に構成され、かつ過充電、劣化、圧壊などさまざまな要因により熱暴走や発火が発生するため、安全性を総合的に評価するためには数多くの条件を想定した安全性試験¹⁾が必要となります。しかしながら、これらの試験は試料調達や試験難度の観点で網羅的なデータの取得が難しいこと、安全性に関するパラメータが多岐にわたるため結果の解釈が難しいことなどが課題として指摘されてきました²⁾。そこで当社では、これまでに報告された公知の文献をもとに電池の安全性に関するデータベースを構築し、機械学習手法を活用することで、電池の安全性の予測や要因を統計的に解析するツールを開発しましたので紹介します。

② データベースと機械学習モデルの構築

機械学習モデルは、収集したデータベースから必要な情報(試料情報、試験条件、試験結果など)を教師データとしてもいすることで予測モデルを構築することが可能となります。データベースは、学術論文や技報などの公知の技術文書、および弊社内で独自に実施した電池の安全性試験の結果から、使用された電池構成(電池形状や電池容量、正極材料、セパレータ、負極材料、電解液など)や試験方法(針刺し速度や釘の情報、加熱温度、充放電試験時のCレート、試験雰囲気、SOCなど)、試験データ(発生イベント、熱暴走の有無、セルの表面温度など)を集約することで構築いたしました(計685試験、データ総数:13,215個)。

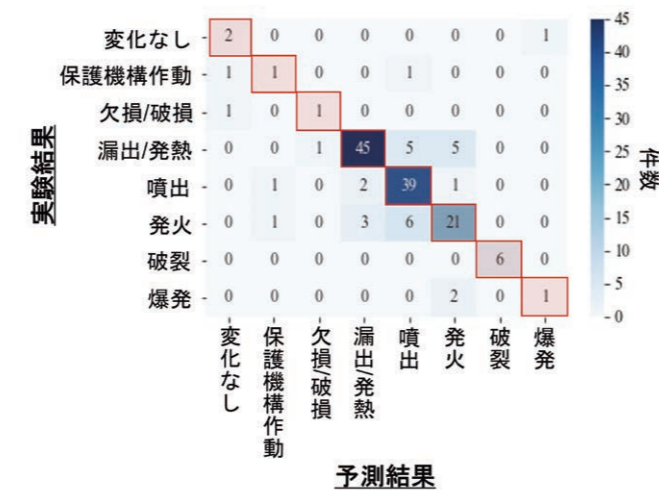
③ 安全性予測と要因分析事例

一例として、電池の安全性試験時の発生イベントやセル表面の最高温度を予測した結果について紹介します。今回の解析では機械学習アルゴリズムとして、非線形な事象を表現できるLightGBM³⁾をもちいました。入力値である説明変数には電池構成や試験条件を採用し、出力値である目的変数は試験時の発生イベントやセル表面の最高温度としました。図1に安全性試験時の発生イベントを予測した結果を混同行列で示します。赤い枠内に記載されている数値が正しく予測が行えた試験数です。電池の安全性試験では、同一試料、同一条件の試験であっても試験結果が異なることがしばしば見受けられますが、イベント予測では正答率約79%、最高温度の予測ではモデルの当てはまりの良さを表す決定係数が0.64程度とおおむね良好な予測モデルが構築できました。また、構築した機械学習モデルがどのように予測を行うかを解釈することで、目的変数に対して重要な説明変数を知ることも可能です。図2は最高温度の予測結果に対する説明変数の貢献度を示しており、どの説明変数が目的変数への寄与が大きいのか、各説明変数が目的変数に対してどのような相関を示すのか(正・負の相関、非線形な関係など)を把握することが可能です。たとえば、セル容量やSOCが高いことやセル形状が円筒型電池であること、Coを含む正極材料をもちいている場合には、最高温度は高く予測されることを示しており、セル温度との間には正の相関があると考えられます。また、加熱温度の大小より加熱すること自体が最高温度を高く予測する要因となっていることから、熱的試験がほかの試験と比較すると厳しい乱用試験であることを示していると考えられます。

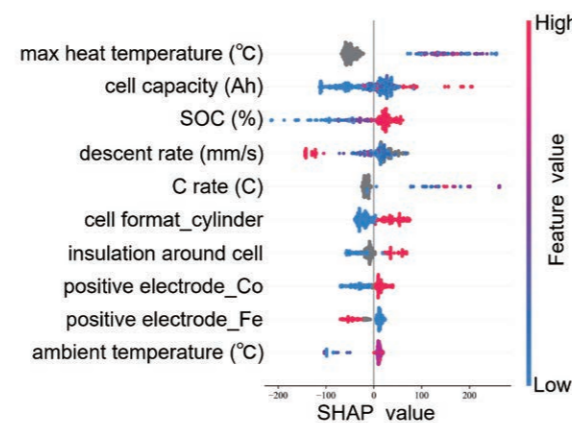
④ おわりに

今回開発したデータベース、機械学習手法を活用することで電池の安全性の予想や評価を統計的に行うことが可能です。データベースとして多種多様な内容をリスト化しておりますので、今回紹介した事例以外にもさまざまな事象を予測する機械学習モデルを構築することが可能です。たとえば、スクリーニング的な使用方法として部材や試験条件の選定を実施したり、これまで試験数が十分ではなく議論が難しいといった課題に対してもデータベースをサポートデータとして加えることで理解を促進したりすることが可能であると考えられます。

■図1 発生イベントの予測結果



■図2 セル表面の最高温度を予測する際の各説明変数の貢献度(上位成分)



1) 栗栖、こべるにくす No.41, p.7 (2014).
 2) 高岸ほか、こべるにくす No.48, p.1 (2017).
 3) G. Ke, et al., LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree, In Advances in neural information processing systems 30, (2017).

新製品

透明体ウェハ貼り合わせずれ検査装置

① 概要

近年、半導体デバイスの製造においてウェハ貼り合わせ技術の適用範囲、重要性が増えています。この中でもパワーデバイス分野では透明な異径ウェハを貼り合わせる技術が注目されつつあり、その貼り合わせずれを測定したいという要求があります。当事業本部では同径ウェハの貼り合わせずれ検査技術を保有しているものの、ウェハの直径が大きく異なる場合には測定が困難でした。このたび、透過式の光学系を採用することにより、直径が大きく異なる透明貼り合わせウェハのずれ測定方法を開発しました。本装置は上下ウェハの中心ずれを1σにおいて3μmの精度で測定できます。市販されている貼り合わせ装置は数十~100μmのアライメント精度であり、一般的に要求される貼り合わせ精度を評価するのに十分な測定精度があります。

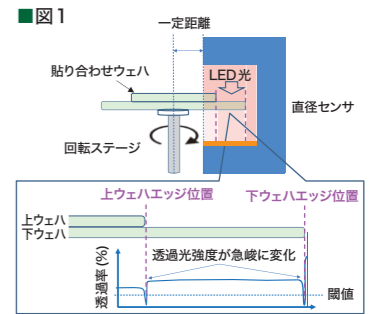
■写真1 貼り合わせ評価機能搭載エッジプロファイルモニター EPB-2000M/T



本技術を当社エッジプロファイルモニター(LEPシリーズ)に搭載することで、1台の装置で「エッジ形状測定」と「貼り合わせずれ測定」が可能になりました(写真1)。(特許出願中)

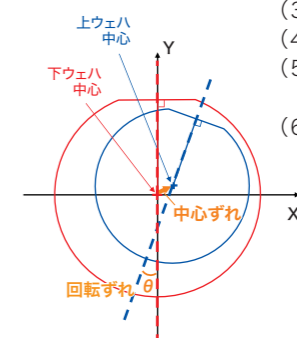
② 測定原理

ウェハ上面から光を照射し、ウェハ下部で透過光強度を測定すると、ウェハのエッジの面取り部では、散乱により光の透過強度が極端に低下します。この箇所を上下ウェハのエッジ先端として検出することで、上下ウェハの輪郭形状を同時に取得します(図1)。



③ 主な仕様

■図2 貼り合わせずれの測定項目



- (1)対象ウェハ：貼り合わせウェハ
- (2)下ウェハの直径：150~300mm
- (3)上下ウェハの直径差：10~50mm
- (4)測定項目：中心ずれ、回転ずれ(図2)
- (5)測定精度：中心ずれ 1σにおいて3μm
回転ずれ 1σにおいて0.10°
- (6)測定時間：ウェハ1枚当たり90秒以下(測定条件)
 ・上下ウェハのエッジ寸法をそれぞれ1点
 ・中心ずれ
 ・回転ずれ
 ・ノッチまたはオリフラ長さ
 ・直径

編集後記

現代社会は、世界規模のさまざまなメガトレンドのうねりの中で、これまでの既成概念が覆されるような大きな転換点にあります。例えば、世界はカーボンニュートラルや循環経済をはじめとする持続可能な社会の構築に向かって急速に進んでおり、我が国においても、グリーン化・デジタル化が国策として掲げられています。また、新型コロナウイルス問題やウクライナ情勢などの影響により、世界中で、環境、エネルギー、材料、食料、医療など幅広い分野に大きな変化をもたらしています。このような目まぐるしい社会の変化によって、産業界でも「ニューノーマル」への対応が求められています。

一方、産業の基礎となる科学技術の発展においては、常に、「分析化学」が重要な役割を果たしてきました。たとえば、物質を原子・分子レベルでの設計し、新しい機能を発現する材料を創出、生産、それらを組み合わせた製品の評価など、いずれの過程においても必ず分析化学は関わっています。また、生産プロセスの改善やトラブル解明、環境影響の評価においても分析化学は必要不可欠なものとなっています。このように、分析化学が科学技術・産業の進歩において果たす役割は非常に大きいです。計測・分析技術関連のノーベル賞受賞件数が現在までに20件をこえることも、社会発展の基盤として長年評価されてきたことをあらわす特筆すべきことといえます。

20世紀に入ると、機器分析の開発が進み、多くの優れた分析技術や装置が生み出されてきました。そして、20世紀後半には、化学、物理学、生命科学、電子工学、コンピューターサイエンスなどあらゆる分野と融合し、急速な発展

を遂げました。特に、近年では、現物を直接分析する従来の分析化学だけでなく、現象を理論で予測するCAEの活用が進み、より効率的かつ多角的な考察やアプローチが可能となっています。

しかし、「現物の分析」、特に「化学分析」が果たす役割は、今後もより一層大きくなると思われます。化学分析とは、化学的または物理的な原理に基づいて化学種の定性や定量を行う最も基本的な分析技術です。例えば、古典的な湿式化学分析は、いまだに多くの分析技術の基準となっており、今後もその必要性が失われることはありません。このように、化学分析は、基本的であるがゆえに、科学の進歩とともにその重要性が再認識される必要があると考えられます。

そこで、本特集号のテーマは、『化学分析』としました。化学分析には、化学反応を駆使した重量分析や容量分析など古典的な手法だけでなく、最新の化学的・物理的な原理に基づく機器分析があり、その対象は広範囲に及びます。今回は、試料に含まれる元素や成分の種類を決定する定性分析、その量を求める定量分析、そして分子や結晶の構造解析に的を絞って、『化学分析』の基礎的解説を中心に、事例を交えつつ紹介します。

最後に、当社では、分析技術を産業の発展には欠かせないマザーツールと認識し、長年培った古典的技術と先端技術を組み合わせながら、お客さまニーズに合わせて発展させ続けることに力を入れていく所存であります。

編集委員 磯尾 賢太郎