

データサイエンスを用いた電気二重層キャパシタの容量予測

令和5年2月 柴田 直弥

要旨

目的

電極に活性炭を用いることによって低コストで作成可能な電気二重層キャパシタは、急速充放電が可能、サイクル寿命が半永久的、環境負荷が小さいなどの特長を有している。そのような電気二重層キャパシタの作製には、材料の炭素化・賦活処理等様々な処理が必要であり、多くの時間を要する。そこで、機械学習の一つであるデータサイエンスを用いて静電容量の予測を行い、実験の費用と時間の削減を目標とした。

方法

本研究では、定電流充放電測定より得られる重量比容量を目的変数、比表面積、電圧、孔径、マイクロ孔容積、ラマン、全細孔容積を説明変数と設定し、これらを集約してデータベース化した。さらに KNIME で作製したプログラミングと組み合わせることで、新たに静電容量を予測した。この予測された結果を用いて考察を行った。

結論

本章ではデータサイエンスのアプリケーションの一つである KNIME を用いて、重量比容量の容量予測並びに各因子の重要度を検討した。KNIME のランダムフォレスト（回帰）から求められる容量予測より、決定係数である R^2 の値が 0.5445 となった。これは有意ではあるが、非常に有効なモデルには至らなかった。これより考えられることは、外れ値を排除する必要性が大いにあると考えられる。また、欠損値に適切な処理を行うとさらに精度の高い結果を得られると考えた。次に各説明変数の重要度を KNIME の回帰分析を用いて明らかにした。これより、Specific surface area (m^2/g)は説明変数の中でも結果に大きな影響をもたらす。次に Micropore Volume (cm^3/g) となっており、マイクロ孔容積が孔の中でも重要視されることが分かる。

指導教員 村松 寛之 准教授