

# マテリアルズ・インフォマティクスによる 潜熱蓄熱材料の開発

大学院先導機構 フロントデータサイエンス  
化血研寄附講座

特任准教授 沈 君偉

目的とするSDGsゴール



## 1. 取組・プロジェクトの概要

持続可能な社会の実現に向けて、未利用熱エネルギーや再生可能な熱エネルギーの有効利用技術が注目されている。そのため、様々な蓄熱材や熱変換材料等の高機能の熱マネージメント部材の創出が期待されている。本プロジェクトでは、材料インフォマティクスの手法を用いて革新的な高蓄熱材の分子設計を行うための基盤技術の構築を行う。

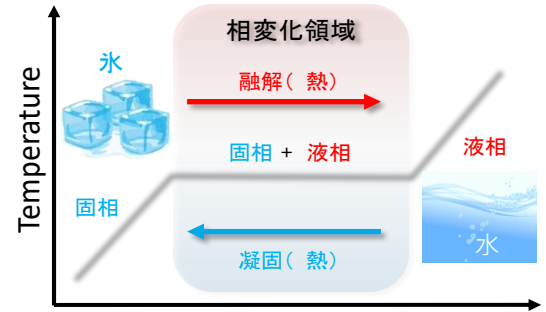


図1 物質の固-液相変化と潜熱

## 2. 取組・プロジェクトの目的

有機分子系の潜熱蓄熱材（相変化材料、Phase Change Material: PCM）の領域に焦点をあて、計算科学技術と機械学習を融合した手法に基づいて材料の熱特性、特にその蓄熱密度の評価をモデル化することにより、高い蓄熱特性を持つPCM素材の発見を目的とする。

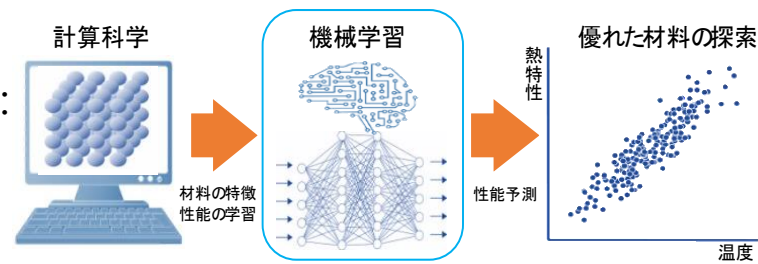


図2 計算科学と機械学習の融合により材料探索

## 3. 今年度実施した取組・プロジェクト

### ・本年度中のプロジェクトの取組

1. 研究論文や書籍などの文献に散在している価値がある潜熱蓄熱剤の物理特性データ（融解温度、融解熱、熱伝導率など）の収集、分別、統合、分析を行い、独自の有機系PCMのデータベースを構築した。
2. PCM化合物群の分子構造から物性を学習するため、密度汎関数計算と統計熱力学モデルと組合わせて分子の特徴を表す記述子（表面電荷密度など）を求め、融解熱を目的変数とした特徴量セットの作成を行った。
3. 学習モデルとして2つの隠れ層を持つディープニューラルネットワーク（DNN）で教師あり学習を行った。モデルの汎化性能を評価するために、交差検証法を適用した。

### ・上記の取組によって生まれた成果

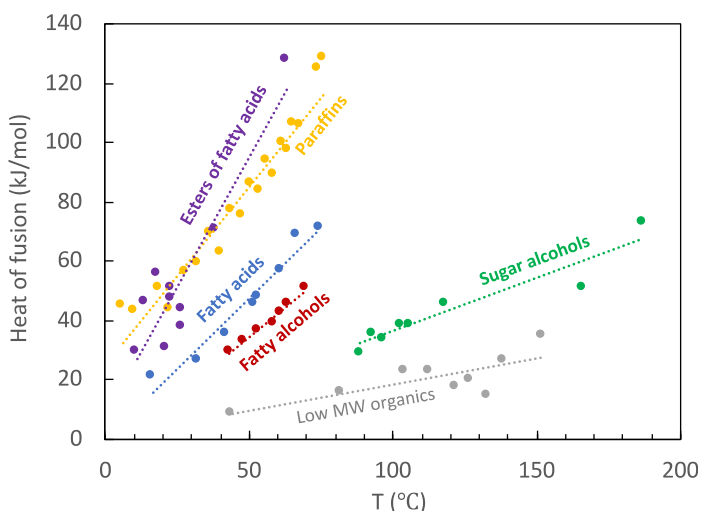


図3 様々な有機PCMの融解熱 vs. 融点

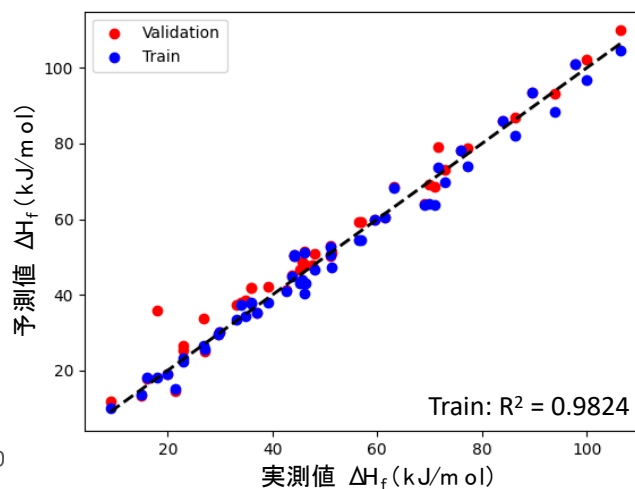


図4 モデルの性能評価: 予測 vs 実測値

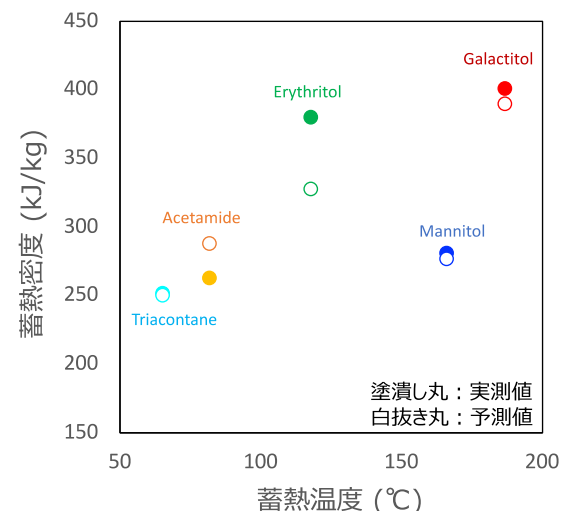


図5 蓄熱密度の上位5化合物

分子特性に基づく予測モデルは広い温度領域における多様な有機系PCMの熱特性を正確に再現できた。

### ・今後の展望

- 本年度中は主に有機分子系PCMの熱特性に着目し検討を行ってきたが、それ以外にも無機塩や塩水和物、低融点合金系、高分子系など様々な種類がある。また、共晶系PCMも今後の検討課題の一つである。
- 本プロジェクトの成果を踏まえて、ベイズ推論等のアルゴリズムに基づく「逆分子設計」手法を用いて所望の蓄熱特性に見合った仮想的な分子構造を生成し、実証する。
- 材料からデバイス、システムまで企業と実用化に向けた共同研究を進める。