

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ
ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК НАТРИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ,
В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СОСТАВА МАТЕРИАЛА КАТОДА**

Фомкина А.С. (Университет ИТМО), Разливина Ю.С. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – доктор химических наук, Виноградов В.В.

(Университет ИТМО)

Введение. Практически все современные гаджеты объединяет одна деталь — в них есть аккумуляторная батарея. Аккумуляторы являются основой будущих устойчивых источников энергии для электромобилей и различных интеллектуальных электронных устройств. Лидером на рынке в данный момент являются литий ионные аккумуляторы, однако мы живем в эру мобильности, и требования к аккумуляторам растут с каждым годом и к 2030 спрос на них может вырасти примерно в 9 раз. Источники Li сильно рассредоточены по миру и производство литиевых аккумуляторов в необходимых промышленных масштабах в скором времени станет серьезной проблемой, поскольку ресурсы данного металла крайне ограничены, и его добыча является дорогостоящим процессом. Таким образом, для замены литий-ионных аккумуляторов необходимы альтернативные исследования.

Натрий-ионные аккумуляторы являются одними из наиболее привлекательных аналогов из-за потенциально существенного снижения затрат, обусловленного коммерческой доступностью, широким распространением его компонентов. Ион Na всё ещё пребывает в стадии разработки и исследователи трудятся над поиском оптимальных характеристик для различных режимов работы аккумуляторных систем, увеличением гравиметрической емкости и более экспрессным процессом зарядки [1].

Основная часть. Основной структурной единицей, в большей степени влияющей на энергетические характеристики аккумулятора и его стоимость, является катод, представленный слоистыми оксидами или полианионами. В литературе встречается достаточное количество исследовательских работ, посвященных перспективным катодным материалам, однако данные весьма неопределенные и неструктурированные, в них невозможно найти закономерности для рационального дизайна материала, поэтому мы предлагаем использовать методы машинного обучения для предсказания важнейших аккумуляторных характеристик – гравиметрической емкости, рабочего напряжения и циклируемости. Используя данные Material Studio, ChemDataExtractor и ручной парсинг исследовательских статей, сформирован датасет для 385 уникальных химических структур. Были выгружены 17 дескрипторов для описания кристаллической структуры матрицы (используя картотеки ICDD) и миграционной способности рабочего иона и 8 дескрипторов для характеристики 3d или 4f элемента допанта. В качестве дескрипторов использовались характеристики элементарной ячейки, площадь поверхности, параметры элемента переходного металла в соединении (электроотрицательность, количества валентных электронов, энергии ионизации). Для оценки регрессионных моделей ML и сравнения алгоритмов между собой были выбраны метрики R², MAE, MSE, RMSE, для улучшения которых проводилась оптимизация гиперпараметров. Было доказано, что ансамблевые модели с градиентным усилением обладают наилучшей способностью к прогнозированию по сравнению с тестовым набором и достигают по кросс-валидации R² = 0.95, MAE < 10 для аккумуляторной емкости и R² = 0.87, MAE < 8 для рабочего напряжения.

Ввиду определения зависимости количества циклов от внешних условий и составных элементов аккумулятора, для предсказания оптимального циклирования (с сохранением 80% от своей первоначальной емкости) собран отдельный датасет, куда вошли данные заряд-разрядных кривых, условия синтеза оксидной структуры, электролит, тип связующего и

проводящего вещества. Наилучшей оказалась модель ансамблевого метода машинного обучения Extra Tree Regressor с метриками $R^2 = 0,79$, $MAE < 10$.

Выводы. Согласно полученным результатам показано, что разработанный алгоритм способен прогнозировать различные энергетические характеристики натрий-ионных аккумуляторов, что позволяет подбирать наиболее эффективный электродный материал для реализуемого режима работы. Подобный подход позволит значительно сократить время и ресурсы на экспериментальный скрининг возможных катодных структур.

Список использованных источников:

1. Souvik Manna, Diptendu Roy, Sandeep Das, Biswarup Pathak. Capacity prediction of K-ion batteries: a machine learning based approach for high throughput screening of electrode materials // Mater. Adv., 2022,3, 7833-7845
2. Sayahpour, B., Hirsh, H., Parab, S. et al. Perspective: Design of cathode materials for sustainable sodium-ion batteries // MRS Energy & Sustainability 9, 183–197 (2022)
3. Stanislav S. Fedotov, Natalya A. Kabanova, Artem A. Kabanov, Vladislav A. Blatov, Nellie R. Khasanova, Evgeny V. Antipov, Crystallochemical tools in the search for cathode materials of rechargeable Na-ion batteries and analysis of their transport properties // Solid State Ionics, Volume 314, 2018, Pages 129-140
4. Saubanère, M., Yahia, M., Lebègue, S. et al. An intuitive and efficient method for cell voltage prediction of lithium and sodium-ion batteries. Nat Commun 5, 5559 (2014)
5. M. Weil, J. Peters and M. Baumann, The Material Basis of Energy Transitions, A. Bleicher and A. Pehlken, Academic Press, 2020, pp. 71–89