

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2024年4月18日(18.04.2024)



(10) 国際公開番号
WO 2024/080171 A1

(51) 国際特許分類:
H01M 10/48 (2006.01) *G01R 31/385* (2019.01)
G01R 31/367 (2019.01) *G01R 31/387* (2019.01)
G01R 31/382 (2019.01) *H02J 7/00* (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2023/035784

(22) 国際出願日: 2023年9月29日(29.09.2023)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2022-163777 2022年10月12日(12.10.2022) JP

(71) 出願人: 株式会社堀場製作所(HORIBA, LTD.)
[JP/JP]; 〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町2番地 Kyoto (JP).

(72) 発明者: 吉田 幸太郎 (YOSHIDA, Kotaro);
〒6018510 京都府京都市南区吉祥院宮の東町2番地 株式会社堀場製作所内 Kyoto (JP).

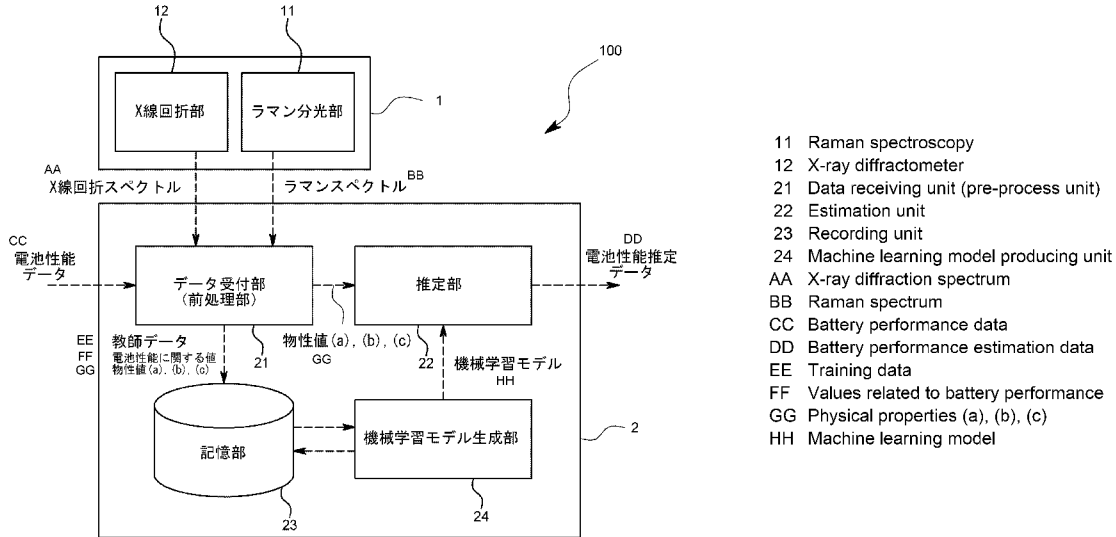
(74) 代理人: 西村 竜平, 外(NISHIMURA, Ryuhei et al.); 〒6008441 京都府京都市下京区四条町347番地1 CUBE西烏丸9階 Kyoto (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY,

(54) Title: BATTERY PERFORMANCE ESTIMATION METHOD, BATTERY PERFORMANCE ESTIMATION DEVICE, AND BATTERY PERFORMANCE ESTIMATION PROGRAM

(54) 発明の名称: 電池性能推定方法、電池性能推定装置及び電池性能推定プログラム

[図1]



(57) Abstract: According to the present invention, the performance of a battery manufactured using carbon as a negative electrode active material is estimated with high accuracy from the physical properties of the carbon. A method for estimating the performance of a battery manufactured using carbon as a negative electrode active material from the physical properties of the carbon is characterized in that the performance of the battery is estimated using a machine learning model obtained on the basis of training data including the following physical properties (a) and (b) of carbon, and values related

MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL,
PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK,
SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

to the battery performance measured for the battery manufactured using the carbon as the negative electrode active material. (a) The ratio (ID/IG) of the peak top intensity (ID) of the D band calculated from the Raman spectrum to the peak top intensity (IG) of the G band or a value relating to the ratio (b) The width of the G band calculated from the Raman spectrum or a value relating to the width

(57) 要約: 炭素の物性値から、この炭素を負極活物質として用いて製造された電池の性能を高精度で推定する。炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する方法であって、炭素の物性値である以下の(a)及び(b)と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値と、を含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定することを特徴とする電池性能推定方法。(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度(ID)とGバンドのピークトップ強度(IG)との比(ID/IG)又は前記比に関する値(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

明 細 書

発明の名称：

電池性能推定方法、電池性能推定装置及び電池性能推定プログラム

技術分野

[0001] この発明は、電池性能推定方法、電池性能推定装置及び電池性能推定プログラムに関するものである。

背景技術

[0002] 電池の開発工数や実験設備投資の削減、製造した電池性能が妥当なものかどうかを判断するベンチマークが求められている。

[0003] そこで、電池の状態を知るために負極活物質として使用する炭素のラマンスペクトルやX線回折スペクトルを測定し、炭素の黒鉛化度や格子間隔、結晶子サイズを調査することが試みられている（特許文献1）。

[0004] しかしながら、前述したような炭素の黒鉛化度や格子間隔、結晶子サイズの分析結果から電池の性能を推定する場合には予期することができないノイズを排除することができないという問題がある。また炭素についての様々な分析結果のうち具体的にどのパラメータを用いれば精度よく推測できるかは明らかではなく、電池の性能を正確に推測する方法は未だ確立されていない状況である。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特許第6489529号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] 本発明は、前述した課題に鑑みてなされたものであり、負極活物質として用いる炭素の物性値から、この炭素を負極活物質として用いて電池を製造した場合の電池の性能を高精度で推定することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0007] 本発明は、前記課題を解決すべく本発明者が鋭意検討を重ねた結果、炭素の物性値として前記（a）及び（b）を用い、これら（a）及び（b）と該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値とを含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定することにより、従来よりも十分に高い精度で電池の性能を推定できることを見出して初めて完成されたものである。

[0008] すなわち本発明に係る電池性能推定方法は、炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する方法であって、炭素の物性値である以下の（a）及び（b）と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値と、を含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定することを特徴とするものである。

（a）ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度（ I_D ）とGバンドのピークトップ強度（ I_G ）との比（ I_D / I_G ）又は前記比に関する値

（b）ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

[0009] 電池性能をより多角的に精度よく推定するには、前記物性データとしてさらに（c）X線回折スペクトルから算出したC軸方向の格子間隔に関する値を含むものとするのが好ましい。

[0010] 本発明の具体的な実施態様の一つとしては、前記（c）が、X線回折スペクトルから算出した複数種類の変数を次元削減して得たものであるものを挙げることができる。

[0011] 本発明によって推定する電池性能の一例としては、電池の充放電容量又はCレート特性を挙げることができる。

[0012] 前記教師データとして、前述した炭素の物性値又は電池性能に関する値以外に環境温度に関する値や電池の充放電サイクル数に関する値をさらに含むものとしても良い。

発明の効果

[0013] 本発明によれば、負極活物質として用いる炭素の物性値に基づいて、この炭素を用いて製造された電池の性能を高精度で推定することができる。

図面の簡単な説明

[0014] [図1]本発明の一実施形態に係る電池性能推定装置の全体模式図。

[図2]本実施形態に係る電池性能推定装置によって電池性能を推定する手順及び測定結果を示す模式図。

[図3]本発明に係る他の実施形態に係る機械学習装置を示す模式図。

[図4]本発明に係る電池性能推定方法の効果を確かめた実験結果を示す図。

[図5]本発明に係る電池性能推定方法の効果を確かめた実験結果を示す図。

[図6]本発明に係る電池性能推定方法の効果を確かめた実験結果を示す図。

[図7]本発明に係る電池性能推定方法の効果を確かめた実験結果を示す図。

発明を実施するための形態

[0015] 以下に本発明の一実施形態について図面を参照して説明する。

[0016] <本実施形態に係る電池性能推定装置の構成>

本実施形態に係る電池性能推定装置100は、例えば、図1に示すように、炭素の物性値を測定する測定ユニット1と、該測定ユニット1から出力される炭素の物性値を受け付けて、前記炭素を負極材料として用いて製造された電池性能を推定する情報処理ユニット2とを備えるものである。

[0017] 測定ユニット1は、炭素のラマンスペクトルを測定するラマン分光部11及び炭素のX線回折スペクトルを測定するX線回折部12を備えるものである。

ラマン分光部11及X線回折部12としては、市販のラマン分光装置、X線回折装置等を備えるものとすることができる。

測定ユニット1は、前述したもの以外にも、例えば、炭素のラマンスペクトルやX線回折スペクトルを測定した時点の環境温度を測定する温度センサ等を備えるものとしても良い。

[0018] 測定ユニット1は有線又は無線により情報処理ユニット2との間でデータ

を送受信することができるように構成されている。

[0019] 情報処理ユニット2は、バッファ、増幅器などを有したアナログ電気回路と、CPU、メモリ、DSPなどを有したデジタル電気回路と、それらの間に介在するA/Dコンバータ等を有した、例えば汎用のコンピュータである。

[0020] 該情報処理ユニット2は、メモリに格納した所定のプログラムにしたがってCPUやその周辺機器が協動することにより、前述したラマン分光部11やX線回折部12から出力される信号（例えば、ラマンスペクトルやX線回折スペクトル）を受け付けるデータ受付部21と、データ受付部21が受け付けた信号に基づいて電池性能を推定する推定部22としての機能を発揮するように構成されている。

[0021] 本実施形態に係る情報処理ユニット2は、データ受付部21が受け付けたデータに基づいて作成された教師データを記憶し蓄積する記憶部23と、該記憶部23に蓄積された教師データに基づいて機械学習を行うことによって機械学習モデルを生成する機械学習モデル生成部24としての機能をも発揮するものである。

推定部22は、前記機械学習モデル生成部24によって生成された機械学習モデルを用いて、電池の性能に関する値を推定するように構成されている。

[0022] <本実施形態に係る電池性能推定装置による電池性能推定方法>

このように構成された電池性能推定装置100を用いて電池性能を推定する方法は、例えば図2に示すように、機械学習モデルを生成するための教師データを取得し（S1、S2）、これら教師データに基づいて機械学習モデルを作成し（S3）、さらにこの機械学習モデルに基づいて実際の炭素サンプルの物性値から電池性能を推定する（S4、S5）ものである。以下にこれら各工程について詳しく説明する。

[0023] 本実施形態において用いられる教師データは、炭素の物性値と該炭素を負極活物質として用いて製造された電池の測定ユニット1によって測定された

炭素の物性値と、前記炭素を使用して実際に製造した電池の性能に関する値（電池性能データともいう。）と互いに紐づけた状態で一組のデータセットである。

[0024] 前記炭素の物性値は、本実施形態では前記測定ユニット 1 によって測定されたラマンスペクトル及び X 線回折スペクトルに基づいて算出されるものである。

物性値の算出は、例えば、データ受付部 21 が行うものとして行うことができる。この場合には、データ受付部 21 は前処理部であるということができる。

[0025] 前記物性値として、本実施形態においては以下の (a) ~ (c) を用いている。

(a) ラマンスペクトルから算出した D バンドのピークトップ強度 (I_D) と G バンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出した G バンドの幅又は前記幅に関する値

(c) X 線回折スペクトルから算出した C 軸方向の格子間隔に関する値

[0026] 波長 532 nm の励起光を用いたラマン分光分析によって得られる炭素のラマンスペクトルには、D バンド (1350 cm^{-1} 以上 1370 cm^{-1} 以下の帯域) に含まれるピークと G バンド (1570 cm^{-1} 以上 1620 cm^{-1} 以下の帯域) に含まれるピークが存在することが知られている。

これら D バンドに含まれるピーク強度の最大値（ピークトップ強度又は I_D ともいう。）と G バンドに含まれるピーク強度の最大値（ピークトップ強度又は I_G ともいう。）との比 (I_D / I_G)、及び G バンドのバンド幅（G バンドに存在するピークの半値幅）は炭素の結晶化度等を示す指標であることが知られている。

[0027] X 線回折スペクトルから算出した C 軸方向の格子間隔に関する値として、具体的には、X 線回折により得られる格子定数 (d) 及び結晶子サイズ (L) に関する値である $d(002)$ 、 $d(004)$ 、 $d(006)$ 、 $L(00$

2)、 $L(004)$ 、 $L(006)$ 、 $L(110)$ 及び $L(112)$ 等を挙げることができる。

本実施形態においては、これら格子定数に関する物性値をそのまま使用するのではなく、これら格子定数 (d) 及び結晶子サイズ (L) に関する各値の間に存在する多重共線性を利用して、前述した格子定数 (d) 及び結晶子サイズ (L) に関する複数の変数 (例えば、前述した 8 つの変数) について次元削減を行い 1 次元の変数とすることによって得た値を物性値として用いるようにしている。

[0028] 本実施形態においては、前述した (a)、(b)、(c) の値を以下のようにして求めている。

ある炭素についてラマン分光分析及び X 線回折分析を行い、得られたラマン分光スペクトルから算出した前記比 (I_D/I_G) 及び G バンドのバンド幅と、X 線回折スペクトルから算出した前記 8 種類の変数を算出し、合計 10 種類の物性値を取得する。

一方で、この炭素を用いて製造した電池の性能に関する値 (例えば、リチウムイオン二次電池の充電容量) を測定する。

この作業を様々な炭素及びこれを用いた電池について繰り返して得られたデータ群について、Partial Least Square 法 (PLS 法) により、測定されたすべての電池性能に関する値と前述した 10 種類の物性値との共分散が最大となる新規な軸を設定する。

このようにして設定された新規な軸に対して、X 線回折スペクトルから算出された 8 次元の変数を投射して 1 次元の変数へと次元削減したものを物性値 (c) として用いている。

さらに前述した (a) 及び (b) についても、前述したように求めた新軸に対してそれぞれ投射して得た変数を、それぞれ独立した物性値 (a) 及び (b) として使用している。なお、電池性能に関する値と物性値との共分散が最大となる新規な軸を設定する方法として、ここでは PLS 法を用いた場合を説明したが、PLS 法に変えて Principal componen

t regression (PCR法) 等の他の方法を用いてもよい。

[0029] 前記電池の性能に関する値としては、例えば、電池の充電容量や不可逆容量、Cレート特性の入力性能等の電池の品質管理を行う際に一般に測定される各指標を挙げることができる。

これら電池の性能に関する値については、物性値を測定した炭素を負極活物質として用いて実際に製造された電池についてそれぞれ測定されたものをユーザが情報処理ユニット2に対して入力するようにしても良いし、電池の性能に関する値を測定する測定機器から情報処理ユニット2に対して直接入力するものとしても良い。

[0030] 記憶部23は、このように算出された炭素の物性値と、該炭素を負極活物質として用いて製造された電池について測定された電池の性能に関する値とを成分として含む一組のデータセットを教師データとして記憶し蓄積する。

[0031] 前述したようにして教師データが記憶部23に蓄積されると、機械学習モデル生成部24が記憶部23に蓄積された教師データに基づいて、炭素の物性値と電池性能との相関関係に関する機械学習モデルを生成する。

[0032] このように機械学習モデルが生成された後、実際に電池性能を推定したい炭素について測定ユニットにおいてラマンスペクトル及びX線回折スペクトルを測定すると、この測定データを受け付けたデータ受付部21が前述した炭素の物性値(a)～(c)を算出する。

このように算出された炭素の物性値が電池性能を推定する推定部22に送られると、推定部22が機械学習モデル生成部24によって生成された機械学習モデルと物性値に基づいて電池の性能を推定し推定結果として電池の性能に関する値(電池性能推定データともいう。)を出力する。

[0033] <本実施形態の効果>

このように構成した本実施形態に係る電池性能推定装置100によれば、炭素の物性値として以下の(a)及び(b)を用いて機械学習モデルを生成するようにしているので、従来の推定方法に比べて電池の性能に関する値を高精度で推定することができる。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅に関する値

[0034] さらに、炭素の物性値として (a) 及び (b) に加えてさらに以下の (c)) を用いているので、電池の性能に関する値について、さらに高精度で推定することができる。

(c) X線回折スペクトルから算出したC軸方向の格子間隔に関する値

[0035] 前述したようにして算出した炭素の物性値を用いることによって、これら物性値から推定される電池の性能に関する値の誤差をできるだけ小さく抑えることができるので、従来よりも精度よく電池の性能を推定することができる。

[0036] <本発明に係るその他の実施形態>

なお、本発明は前記実施形態に限られるものではない。

前述した実施形態においては、(a) 及び (b) として、それぞれPLS法に基づいて定めた新軸に投射した値を使用するものとしたが、これら (a) 及び (b) としてこのような処理を行っていない比 (I_D / I_G) やGバンドの幅をそのまま使用するものとしても良い。

また、(c) についても必ずしも次元削減が必要というわけではなく、X線回折スペクトルから算出したC軸方向の格子間隔に関する値をそのまま使用したり、その一部のみを次元削減するようにして(C)の物性値として複数種類のものを使用するものとしても良い。

さらに言えば、物性値として(C)は必ずしも用いなくても良い。

[0037] 前述した実施形態においては、教師データとするための電池の性能に関する値は全て25℃、一気圧、充電レート0.1C等の標準的な条件で測定しているが、例えば、特定の充電レート及び温度で充電した場合のリチウムイオン二次電池の充電容量を100%とした場合に電池を充電する際の充電レートを変化させた場合の充電容量維持率をプロットして、このプロットに基づいて近似式を求め、この近似式に含まれる1つまたは複数の係数を前記教師

データにさらに含めるものとしても良い。このような教師データを用いることによって、電池のCレート特性を推定することができる。

また、電池を充電する際の温度（電池を使用する際の温度、すなわち環境温度）を徐々に変化させた場合の係数を同様に求めて教師データに含めておくようにしても良い。環境温度を教師データとして含めている場合には、炭素の物性値に加えて、使用を予定している環境温度の情報をさらに入力することによって、ある環境温度における電池の性能に関する値（充電容量等）を推定することも可能である。

[0038] 例えば、前述した実施形態では、電池性能推定装置が測定ユニットにラマン分光部とX線回折部とを両方備えるものについて説明したが、少なくともラマン分光部を備えるものとすればよく、X線回折部については必ずしも必須の構成ではない。

[0039] 前述した実施形態においては、測定ユニットが測定したラマンスペクトルやX線回折スペクトルを直接測定ユニットが直接情報処理ユニットに対して出力する場合について説明したが、測定ユニットは必ずしも必須の構成ではなく、別の装置によって予め測定された炭素についての測定データ又は既に算出された物性値をユーザが情報処理ユニットに手動で入力するようにしてもよい。

[0040] また、温度センサ等の炭素の物性値や測定条件に関する値を測定するための測定機器についても、測定ユニットに備えられているものとしても良いし、独立した測定機器を用いて測定したものを別途情報処理装置に入力できるようにしても良い。

[0041] 教師データの成分としては、前述したもの以外にも、例えば、炭素の物性値の元となる測定データや電池性能を測定した際の測定条件（湿度や測定装置の品番や年式等に関する情報等）や、電池の構造や構成成分についての情報、教師データを得るために電池性能を測定した時点における電池の充放電サイクル数等の電池の品質情報をさらに含むものとしてもよい。

[0042] 情報処理ユニットの一部が例えば、インターネットなどを介して複数の測

定器との間で通信可能な、独立したサーバ装置等で構成された機械学習装置であっても良く、不特定多数のユーザが使用している測定ユニット等から教師データを収集して、機械学習モデルを用いて算出した測定値又は機械学習モデルを複数の各測定ユニットに対して配信するものとしても良い。

[0043] この場合の機械学習装置としては、例えば、図3に示すように、教師データを受け付けるデータ受付部と、記憶部と、機械学習モデル生成部とを備え、複数の測定ユニットから出力される教師データを蓄積し、機械学習モデルを生成して、各測定ユニットに対して生成した機械学習モデルを出力するものを挙げることができる。

[0044] その他、前述した実施形態や変形実施形態の一部又は全部を適宜組み合わせてもよく、その趣旨を逸脱しない範囲で種々の変形が可能であるのは言うまでもない。

実施例

[0045] 以下に、本発明に係る電池性能推定方法について、より具体的な例を挙げてその効果を説明するが、本発明はこれに限られない。

[0046] 負極活物質として使用する炭素については、市販品として入手可能な様々な炭素の粉末を用いた。

具体的にはリチウム二次電池の負極活物質として使用可能な炭素材料であって、球状又は破碎された天然黒鉛、球状又は破碎された人造黒鉛について、メーカーや品番、平均粒径等が互いに異なるものを20種類程度用意した。

使用した各種炭素について、それぞれラマンスペクトル及びX線回折スペクトルを測定した。ラマン分光分析に用いた装置は、株式会社堀場製作所製顕微レーザーラマン分光測定装置であり、測定条件は以下の通りとした。

レーザーパワー：2mW

露光時：60秒

積算回数：2回

X線回折に用いた装置は、株式会社リガク製SmartLabであり、測定はCuのK α

1 線を使用して行った。

[0047] 各種炭素について測定したラマンスペクトルから、各種炭素について前述した物性値（a）及び（b）をそれぞれ算出した。

また、各種炭素について測定したX線回折スペクトルから、各種炭素について前述した物性値（c）を算出した。

具体的には、前述した実施形態で説明したように、電池性能の実測値と炭素の物性値（X線回折スペクトルから算出された8つの変数、ラマン分光スペクトルから算出された比（I D / I G）及びGバンドの幅の合計10種類の変数）との共分散が最大になる新軸を設定して、設定された新規な軸に対して、X線回折スペクトルから算出された8つの変数を全て併せて投射して1次元の変数へと次元削減したもの、又はX線回折スペクトルから算出された8つの変数について次元削減を行わずd（002）、d（004）、d（006）、L（002）、L（004）、L（006）、L（110）及びL（112）をそのまま使用してを物性値（c）として用いた。

（a）及び（b）については、前述したようにして求めた前記新軸に対してそれぞれ投射して得た変数を、それぞれ独立した値をそれぞれ用いた。

[0048] 前述した各種炭素を負極活物質として用いて実際にリチウムイオン二次電池を作製し、このリチウムイオン二次電池の性能に関する値を測定した。

電池の性能に関する値としては、充放電容量及びCレート特性を測定した。

電池の充放電容量及びCレート特性の測定方法は、以下のようなものである。

負極活物質である炭素と固体電解質とを1：1割合で含有する混合粉末を押し固めてペレット状にしたものを、前記固体電解質で形成したペレット状の固体電解質層に積層し、対極としてリチウム金属を用いた試験用電池セルを作成し、Scribner Associates, Inc.製充放電測定システムを用いて行った。

充放電容量の測定は、10時間充電レート（充電に10時間かかる充電レート

）で3サイクル測定した。Cレート特性の評価は、充電レートを変化させて、各充電レートにおける充電容量を測定し、ある充電レート（ここでは0.1 C）での充電容量を100%とした場合の各充電レートにおける充電容量維持率を調べることによって行った。

[0049] このようにして測定した炭素の物性値（a）～（c）と電池の性能に関する値とを一組の教師データとして機械学習モデル生成部に対して複数与えて、機械学習モデル生成部に機械学習モデルを生成させた。

[0050] 次に、教師データを得るために用いた炭素とは異なる種類の炭素について教師データと同様の手順で、同様のデータセット（テストデータと呼ぶ。）を取得した。

[0051] そして、あるテストデータに含まれる炭素の物性値（a）～（c）を推定部に与え、推定部がこれら物性値と前述した機械学習モデルとに基づいて推定した電池の性能に関する値と、前記テストデータに含まれる電池の性能に関する値とが一致するかどうかを調べた結果が図4～図7である。

[0052] 炭素の物性値として（a）と（b）とを使用して電池のCレート特性を推定した場合の結果を図4に示す。

図4の縦軸は実測値についてCレート特性をプロットした場合の近似式である3次式の係数の一つであるAを、横軸は推定された係数Aを表しており、これらが傾き1の直線上にある場合には電池のCレート特性についての実測値と推定値とが一致していることを示している。

図4示すように、炭素の物性値として（a）と（b）とを使用したところ、電池のCレート特性について推定部から出力された推定値とテストデータに含まれる実測値との相関関係を示すドットの分布が傾き1の直線の近傍に集まっており、推定値と実測値のずれがほとんどないことから、本発明によれば炭素の物性値から電池のCレート特性を非常に精度よく推定できることが確かめられた。

[0053] また図5に示すように、炭素の物性値として（a）と（b）と次元削減をして1次元に集約した（c）とを使用したところ、電池の充放電容量につい

て推定部から出力された電池の性能に関する値（電池性能推定データ）とテストデータに含まれる電池の性能に関する実測値との誤差はほとんどなく、炭素の物性値から電池の充放電容量についても非常に精度よく推定できることが確かめられた。

この結果を電池の充放電容量の推定について、図6に示すように、炭素の物性値（c）のみを使用した比較例（図6（b）は物性値としてd（002）を使用、図6（c）は物性値としてd（002）、d（004）、d（006）、L（002）及びL（004）の5変数を使用）と比較すると、炭素の物性値として（a）と（b）と（c）を使用する本発明に係る推定方法（図6（a））によれば、分布が傾き1の直線の近傍により集まっており、明らかに推定精度が向上していることが分かる。

[0054] さらに、炭素の物性値として（a）と（b）と（c）を全て使用している場合について、図7に示すようにより詳細な検討を行ったところ、物性値（c）について次元削減を行わず、d（002）、d（004）、d（006）、L（002）、L（004）、L（006）、L（110）及びL（112）をそのまま使用して10変数での重回帰を行った場合（図7（b））よりも、物性値（c）についてd（002）、d（004）、d（006）、L（002）、L（004）、L（006）、L（110）及びL（112）を次元削減により1つの変数としてから用いた場合（図7（a））の方が、推定精度が向上することが分かった。

産業上の利用可能性

[0055] 本発明によれば、負極活物質として用いる炭素の物性値から、この炭素を負極活物質として用いて電池を製造した場合の電池の性能を高精度で推定することができる。

符号の説明

[0056] 100・・・電池性能推定装置

1・・・測定ユニット

11・・・ラマン分光部

- 1 2 . . . X線回折部
- 2 . . . 情報処理ユニット
- 2 1 . . . データ受付部
- 2 2 . . . 推定部
- 2 3 . . . 記憶部
- 2 4 . . . 機械学習モデル生成部

請求の範囲

- [請求項1] 炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する方法であって、
- 炭素の物性値である以下の（a）及び（b）と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値と、を含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定することを特徴とする電池性能推定方法。
- （a）ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度（ I_D ）とGバンドのピークトップ強度（ I_G ）との比（ I_D / I_G ）又は前記比に関する値
- （b）ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値
- [請求項2] 前記物性値としてさらに以下の値を含む、請求項1に記載の電池性能推定方法。
- （c）X線回折スペクトルから算出したC軸方向の格子間隔に関する値
- [請求項3] 前記（c）が、X線回折スペクトルから算出した複数の変数を次元削減して得たものである、請求項1又は2に記載の電池性能推定方法。
- [請求項4] 前記電池性能が電池の充放電容量又はCレート特性である、請求項1～3のいずれか一項に記載の電池性能推定方法。
- [請求項5] 前記教師データが環境温度に関する値をさらに含む、請求項1～4のいずれか一項に記載の電池性能推定方法。
- [請求項6] 前記教師データが電池の充放電サイクル数に関する値をさらに含む、請求項1～5のいずれか一項に記載の電池性能推定方法。
- [請求項7] 炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する推定部を備え、
- 前記推定部が、炭素の物性値である以下の（a）及び（b）と、該

炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値と、を含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定するものであることを特徴とする電池性能推定装置。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

[請求項8] 炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する電池性能推定プログラムであって、

炭素の物性値である以下の (a) 及び (b) と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値と、を含む教師データに基づいて得られた機械学習モデルを用いて電池の性能を推定する推定部としての機能をコンピュータに発揮させることを特徴とする電池性能推定プログラム。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

[請求項9] 炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する電池性能推定装置に用いられる機械学習装置であって、

前記炭素の物性値である以下の (a) 及び (b) と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値とを含む教師データを取得するデータ受付部と、

前記データ受付部によって取得された前記教師データに基づいて機械学習モデルを生成する機械学習モデル生成部とを備える、機械学習

装置。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

[請求項10]

炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定するために用いられる機械学習方法であって、

前記炭素の物性値である以下の (a) 及び (b) と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値とを含む教師データを取得し、

取得された前記教師データに基づいて機械学習モデルを生成する機械学習方法。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出したGバンドの幅又は前記幅に関する値

[請求項11]

炭素の物性値から該炭素を負極活物質として製造した電池の性能を推定する電池性能推定装置に用いられる機械学習装置用のプログラムであって、

前記炭素の物性値である以下の (a) 及び (b) と、該炭素を負極活物質として製造した電池について測定された電池性能に関する値とを含む教師データを取得するデータ受付部と、

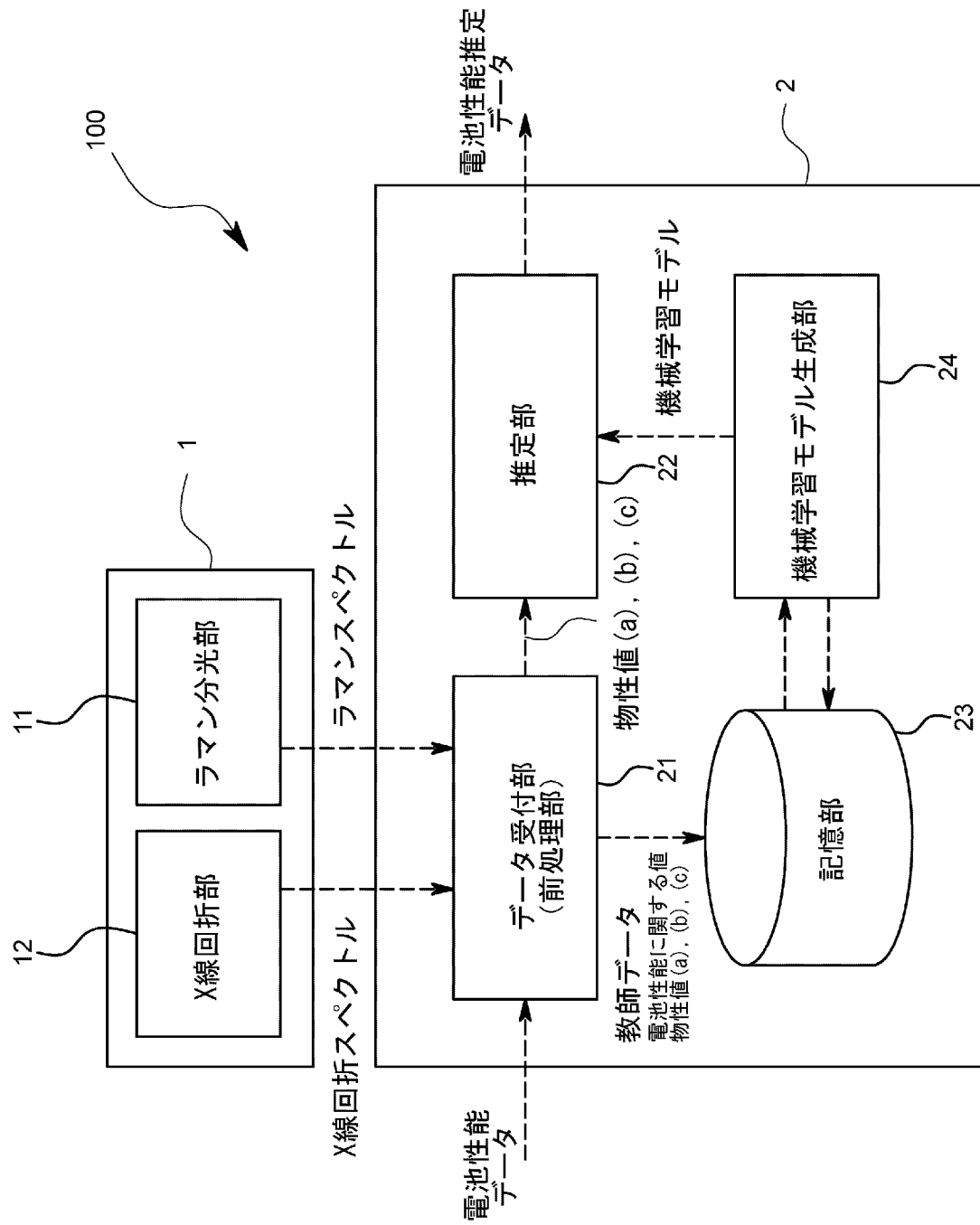
前記データ受付部によって取得された前記教師データに基づいて機械学習モデルを生成する機械学習モデル生成部としての機能をコンピュータに発揮させる、機械学習プログラム。

(a) ラマンスペクトルから算出したDバンドのピークトップ強度 (I_D) とGバンドのピークトップ強度 (I_G) との比 (I_D / I_G) 又は前記比に関する値

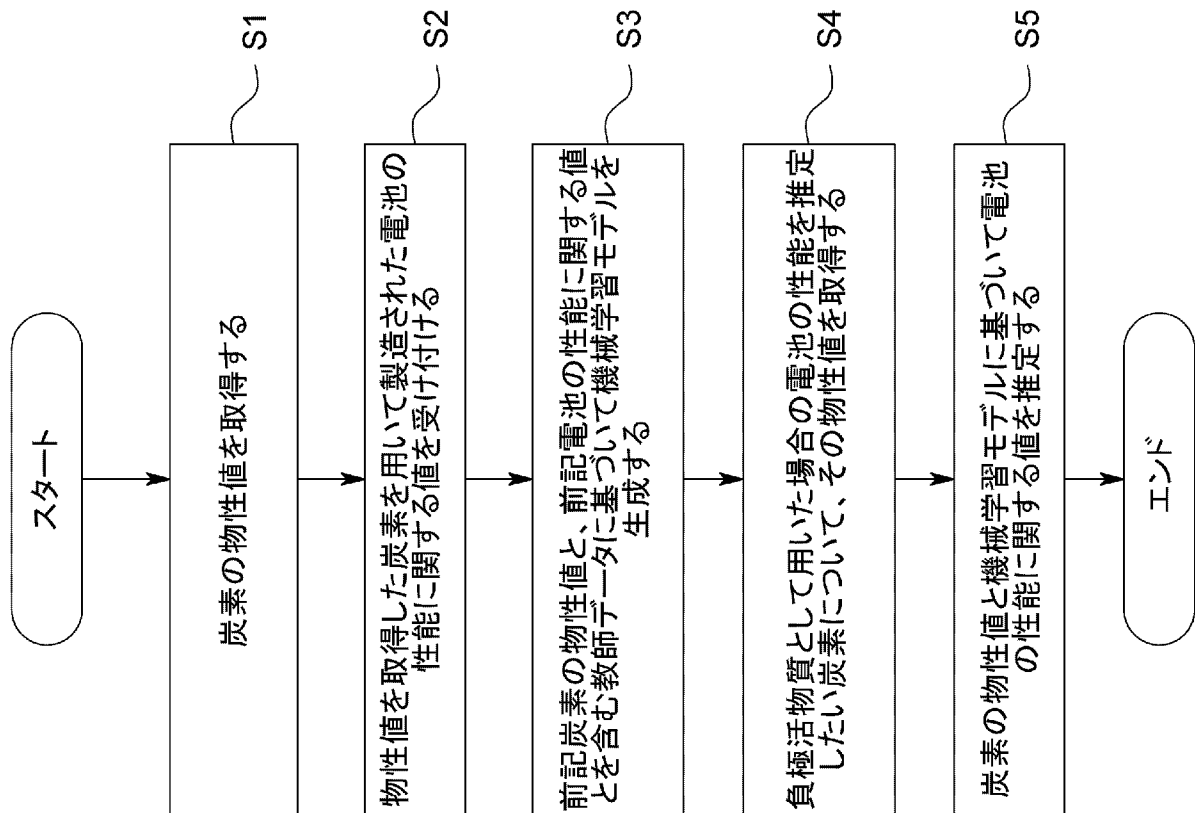
I D) と G バンドのピークトップ強度 (I G) との比 (I D / I G)
又は前記比に関する値

(b) ラマンスペクトルから算出した G バンドの幅又は前記幅に関する値

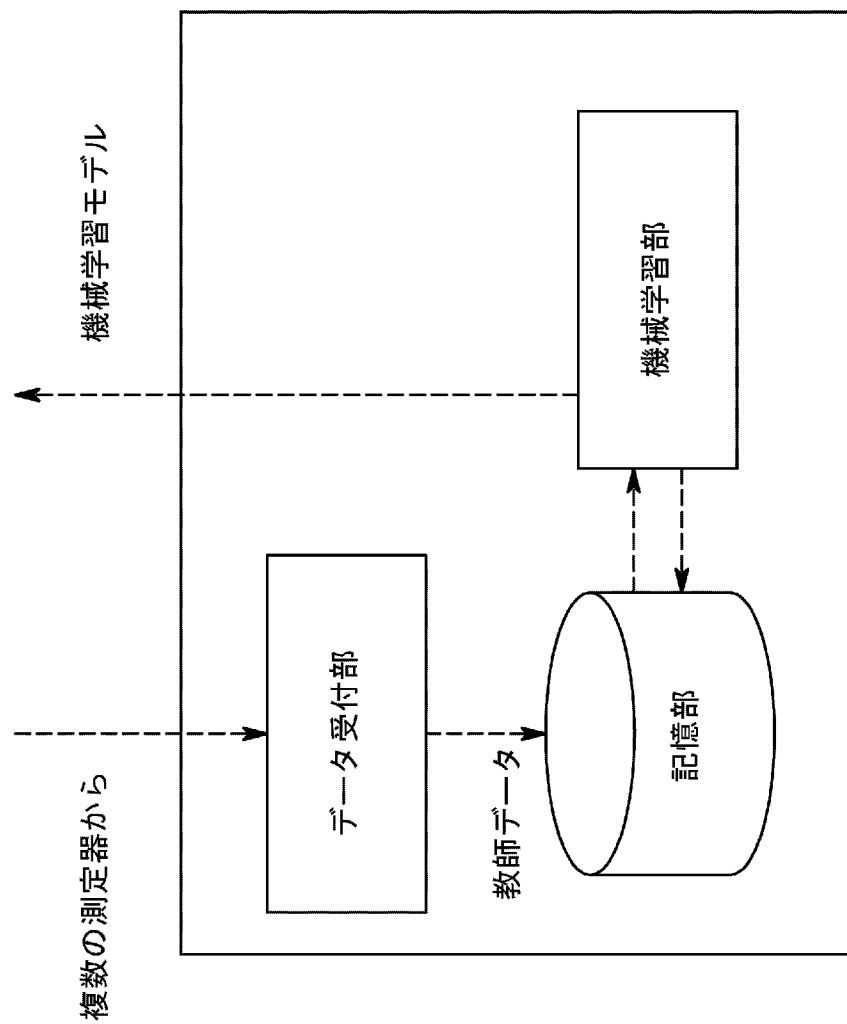
[図1]



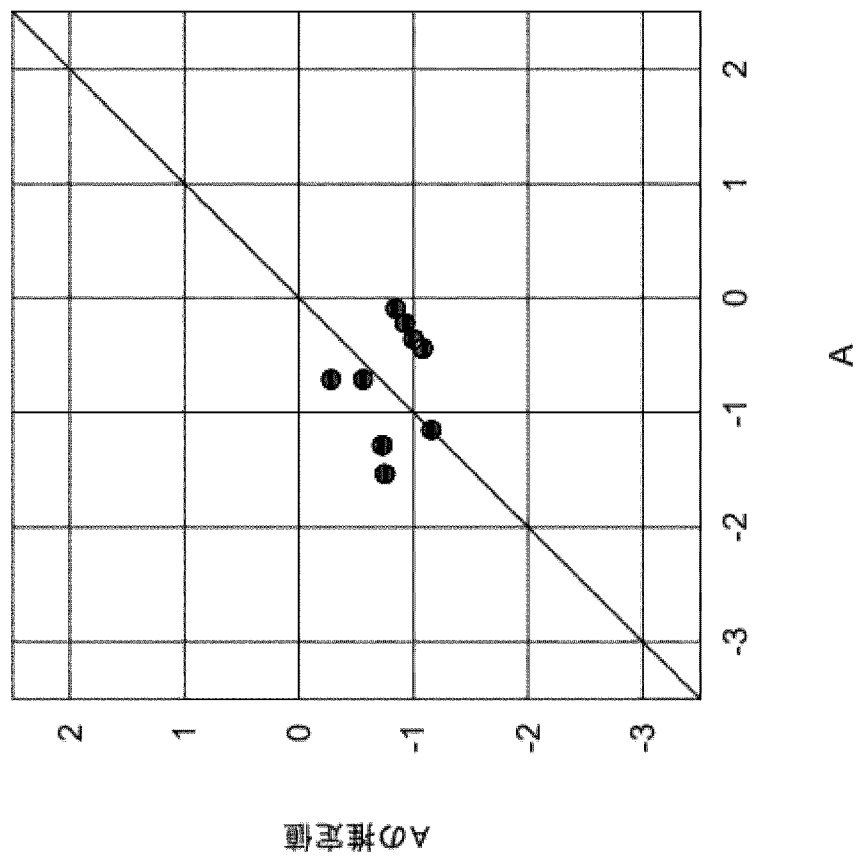
[図2]



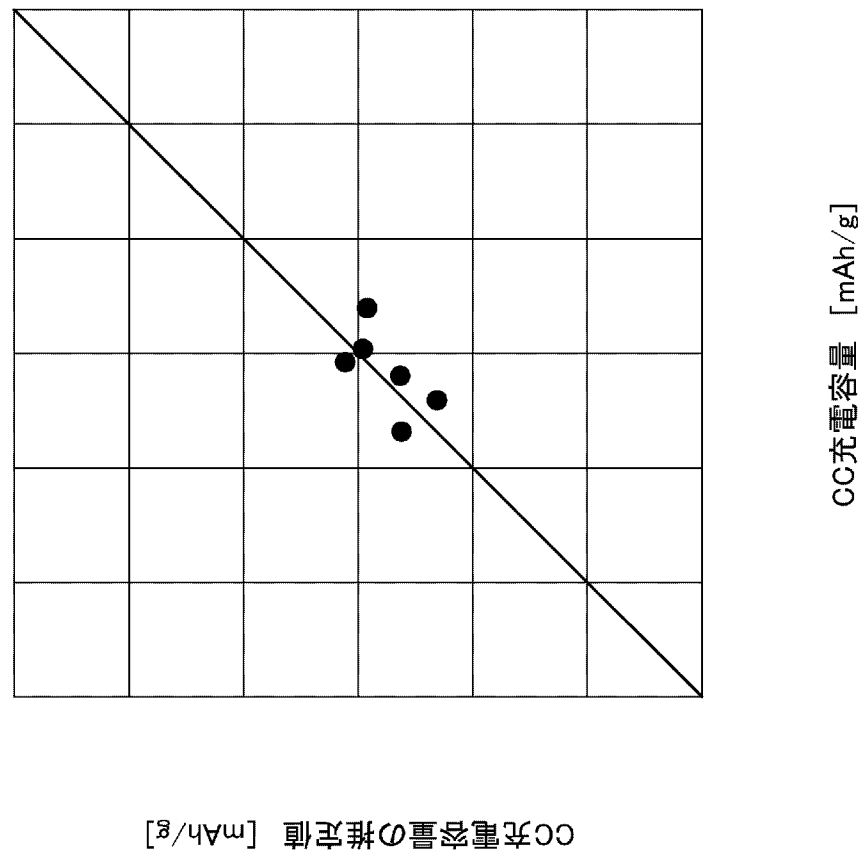
[図3]



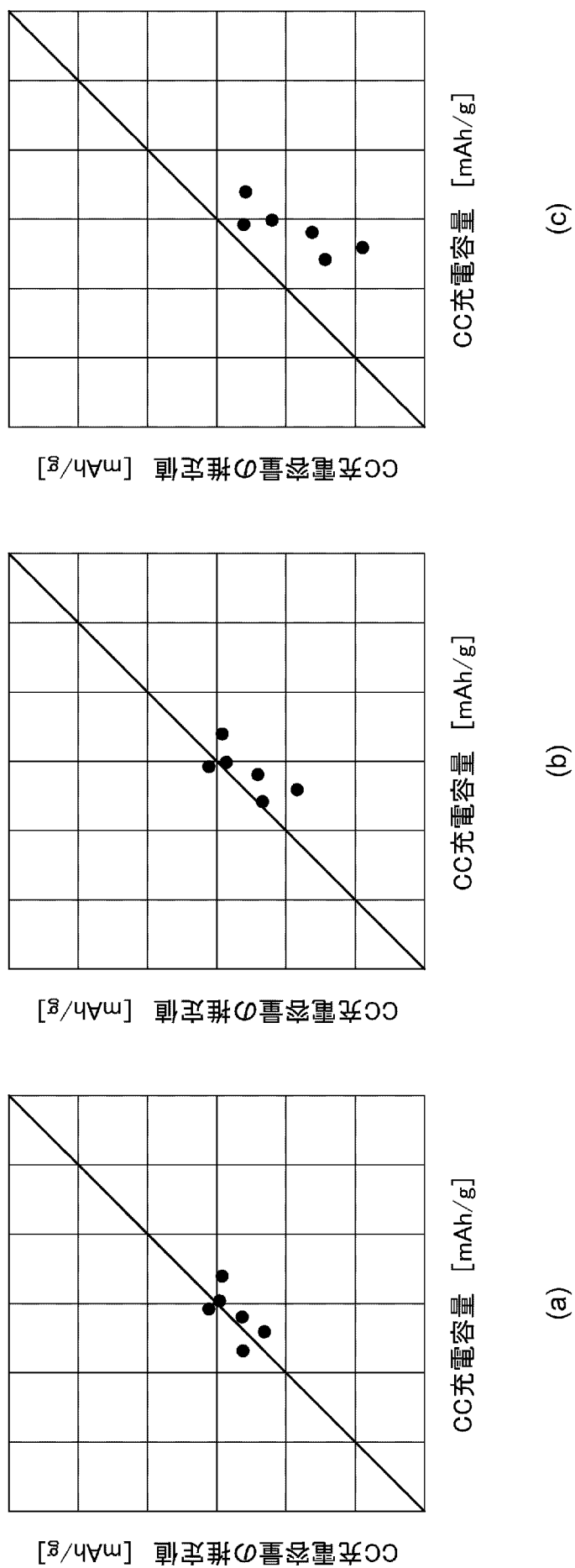
[図4]



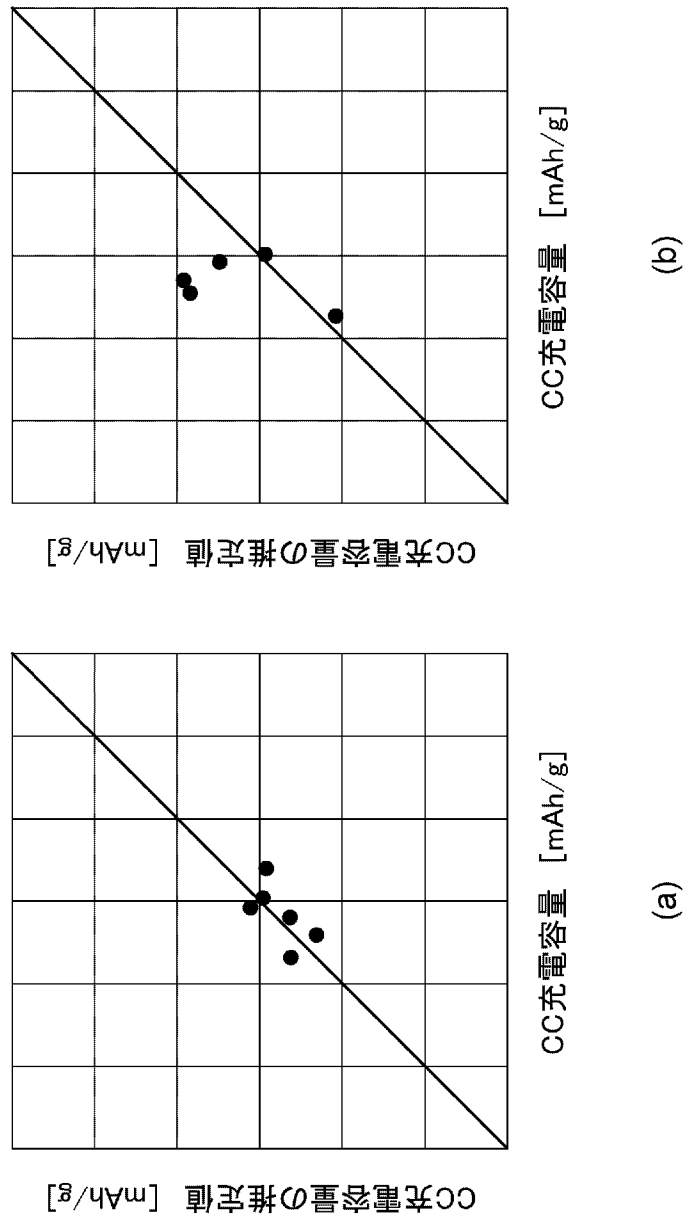
[図5]



[図6]



[図7]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/035784

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01M 10/48(2006.01)i; **G01R 31/367**(2019.01)i; **G01R 31/382**(2019.01)i; **G01R 31/385**(2019.01)i; **G01R 31/387**(2019.01)i;
H02J 7/00(2006.01)i

FI: H01M10/48 P; G01R31/367; G01R31/382; G01R31/385; G01R31/387; H01M10/48 301; H02J7/00 Q

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01M10/48; G01R31/367; G01R31/382; G01R31/385; G01R31/387; H02J7/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2023
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2023
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2022-111692 A (SANYO CHEM. IND., LTD.) 01 August 2022 (2022-08-01) entire text, all drawings	1-11
A	JP 2020-184516 A (PANASONIC IP MANAGEMENT CORP.) 12 November 2020 (2020-11-12) entire text, all drawings	1-11
A	JP 11-54123 A (MATSUSHITA ELECTRIC IND. CO., LTD.) 26 February 1999 (1999-02-26) entire text, all drawings	1-11



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 “&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

20 November 2023

Date of mailing of the international search report

28 November 2023

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2023/035784

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
JP	2022-111692	A	01 August 2022	WO	2022/158515	A1	

JP	2020-184516	A	12 November 2020	US	2020/0341065	A1	
				entire text, all drawings			
				CN	111860860	A	

JP	11-54123	A	26 February 1999	US	2002/0061445	A1	
				entire text, all drawings			
				WO	1998/054779	A1	
				EP	917228	A1	
				KR	10-2000-0029650	A	
				CN	1227004	A	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） H01M 10/48(2006.01)i; G01R 31/367(2019.01)i; G01R 31/382(2019.01)i; G01R 31/385(2019.01)i; G01R 31/387(2019.01)i; H02J 7/00(2006.01)i FI: H01M10/48 P; G01R31/367; G01R31/382; G01R31/385; G01R31/387; H01M10/48 301; H02J7/00 Q		
B. 調査を行った分野		
調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） H01M10/48; G01R31/367; G01R31/382; G01R31/385; G01R31/387; H02J7/00		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2023年 日本国実用新案登録公報 1996-2023年 日本国登録実用新案公報 1994-2023年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2022-111692 A（三洋化成工業株式会社）01.08.2022（2022-08-01） 全文全図	1-11
A	JP 2020-184516 A（パナソニックIPマネジメント株式会社）12.11.2020（2020-11-12） 全文全図	1-11
A	JP 11-54123 A（松下電器産業株式会社）26.02.1999（1999-02-26） 全文全図	1-11
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日 20.11.2023		国際調査報告の発送日 28.11.2023
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 佐藤 卓馬 5T 5581 電話番号 03-3581-1101 内線 3568

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2023/035784

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
JP	2022-111692	A	01.08.2022	WO	2022/158515	A1	
JP	2020-184516	A	12.11.2020	US	2020/0341065	A1	
				全文全図			
				CN	111860860	A	
JP	11-54123	A	26.02.1999	US	2002/0061445	A1	
				全文全図			
				WO	1998/054779	A1	
				EP	917228	A1	
				KR	10-2000-0029650	A	
				CN	1227004	A	