

「水素利用等先導研究開発事業／水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発／プロセスインフォマティクスへの拡張性を考慮したマテリアルズインフォマティクスに関する調査研究」に係る仕様書
(2022年度)

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構
スマートコミュニティ・エネルギーシステム部

1. 件名：

- 〈大項目〉 水素利用等先導研究開発事業
〈中項目〉 水電解水素製造技術高度化のための基盤技術研究開発
〈小項目〉 プロセスインフォマティクスへの拡張性を考慮したマテリアルズインフォマティクスに関する調査研究

2. 研究開発の目的及び内容

(1) 事業目的

本事業では、2040年以降という長期的視点を睨み、水素等の「カーボンフリーなエネルギーの新たな選択肢」としての地位を確立させることを目指す。具体的には、再生可能エネルギーからの高効率低コスト水素製造技術、水素の長距離輸送、長時間貯蔵を容易にするためのエネルギーキャリア技術及び大規模水素利用技術の先導的な研究開発に主として取り組み、2030年における水素コスト30円/Nm³を目標とし、化石燃料等の他のエネルギー源と競合できる価格の実現を目指す。

(2) 事業概要

政府は2020年10月に「2050年までに温室効果ガスの排出量を実質ゼロ」とする目標を示してグリーンイノベーション戦略を強力に推し進めており、その中でも水素は重要な役割として位置づけられている。特に、必要とされる水素を確保するために、水素の製造方法については技術開発競争がさらに厳しいものとなっている。特に、再生可能エネルギーを用いた水素製造を可能とする水電解技術についてはその構成部材である触媒及び膜といった材料の高性能化・高耐久化が急務である。その課題解決には材料の開発期間短縮が必要である。これら材料の開発速度を向上させる取り組みとして情報科学の技術により、材料開発を高効率化する方法としてマテリアルズインフォマティクス(MI)がある。本事業では、MIを用いた水電解水素製造装置

に関係する触媒、膜など素材開発の加速に資する文献データの調査やデータの収集といった方法論、存在するデータについてデータ科学手法を適用し、MI適用の効果等について調査を実施する。具体的には触媒や膜に関する元素の選択やその組み合わせ、さらには性能を含む要求物性はもとより、合成の可能性とプロセスの最適化も含む、設計から製造までを一気通貫するプラットフォーム構築に関する調査を実施する。将来的にはMEA (Membrane Electrode Assembly) としての最適化やプロセスインフォマティクス (PI) への拡張も視野に一連のプラットフォーム構築を目指すために取り組むべき方法論も調査の対象とする。なお、本事業においては固体高分子 (PEM) 型水電解のアノードの非貴金属化を例に実施する。

本検討に基づき、アノードの非貴金属化を例に既知データによる予測について評価するとともに、MIを実施するために必要なデータについての提言とPIへの拡張に向けた具体的な提言をまとめる。

(3) 事業目標

【最終目標 (2022 年度末)】

研究開発項目①PEM型水電解のアノードの非貴金属化に関する既知情報からのデータベースの構築

- PEM型水電解のアノードの非貴金属化に関する学術文献・特許文献等の既知情報からデータを選択的に収集し体系的な構成の提示

研究開発項目②データベースの評価

- 研究開発項目①で構築したデータベースの評価結果と目指すべきデータベース構築に向けた課題と指針の提示
- 検証結果に応じた追加すべき方法論の提示

研究開発項目③PIへの拡張に関する調査・検証

- PIへの拡張に向けた具体的な提言

(4) 事業内容

既知情報に対するMIの適用による逆問題に対する解の提示について検証する。

本事業ではイリジウム (Ir) 等の貴金属を含まないPEM型水電解のアノードの非貴金属化を対象に実施する。検討にあたり以下の3項目を実施する。

研究開発項目①PEM型水電解のアノードの非貴金属化に関する既知情報からのデータベースの構築

既知の学術・特許文献を中心に調査し、PEM型水電解のアノードの性能と耐久性に関するMI適用に必要なデータを選択的に収集し、体系的にまとめる。どの程度のデータ数が文献・特許データとして存在しているのか他分野の過去の失敗事例なども必要に応じて含め、実態を把握する。

研究開発項目②データベースの評価

研究開発項目①で構築したデータベースを活用して、アノードの非貴金属化の指針出しを実施するとともに、データベース設計の課題抽出を行ったうえでデータの過不足の内容についても検証する。課題もしくはデータの過不足があった場合、必要なデータを取得するための方法論について具体的に提示する。方法論に関しては、ハイスループット実験¹を初めとする取得必要なサンプルやデータ、シミュレーション技術など技術要素別の効果・費用・開発期間の項目でベンチマークを行い、検証結果をまとめる。

研究開発項目③PIへの拡張に関する調査・検証

将来的にPIへの拡張を進めるにあたり、MI検討時点から考慮すべき方法論の検討を行う。例えば材料が合成できるか否かを判定するような機械学習を作成することができるか等を既存の文献データや論文の調査によって明らかにする。

加えて、MEAのように材料と材料を組み合わせた時の性能最適化といったプロセスの最適化への拡張についても考慮した場合のMI検討の方法論についても示す。

これらの3つの研究開発項目を実施し、将来的に水電解装置に関係する素材開発においてMI手法がどのように扱えるかを評価し、加えてどのようなデータベースが構築できるか及び材料合成プロセスまで含めたPIの適用の可否について検討・提言する。

3. プロジェクトリーダー

本プロジェクトは、国立研究開発法人産業技術総合研究所 関西センター所長代理 栗山 信宏をプロジェクトリーダーとする。

4. 研究委託期間

当機構の指示する日から2023年3月31日まで

¹ ハイスループット実験 (high-throughput experimentation : HTE) は、従来の実験手段と比較して少ない労力で、多数の合成反応を並行して行うことを可能にする手法

5. 成果の取り扱い

委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構新エネルギー・産業技術業務方法書」第25条の規定等に基づき、原則として、委託先に帰属させることとする。

また、推進体制を構成する企業等が相互に連携しつつ、研究開発及び事業化を効果的に推進するために、知的財産管理規程等を定めることを求める。

6. 成果報告書（中間年報、成果報告書）の提出

中間年報、成果報告書の電子ファイル一式についてNEDOプロジェクトマネジメントシステム(以下PMS)を介して、所定の期日までに提出すること。

7. その他重要事項

(1) 成果報告会の実施

本研究開発の成果をNEDO主催の成果報告会等で公開する。

(2) PL 進捗フォローの開催

PLによる進捗フォロー会議を1回/年開催すること。

(3) PMS を介した各種手続き

PMSの利用申請を行い、PMSを介した実施計画書等のアップロード等の各種手続きに協力すること。

以上