

NEDO水素・燃料電池成果報告会2022

発表No.A-13

燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型  
産学官連携研究開発事業/共通課題解決型基盤技術開発  
/マテリアルズ・インフォマティクスによる燃料電池材料  
の研究開発

袖山慶太郎、富中悟史  
物質・材料研究機構、日産アーク  
2022年7月28日

連絡先：  
物質・材料研究機構  
(SODEYAMA.Keitaro @nims.go.jp)

## 1. 期間

開始 : (西暦) 2020年8月

終了 (予定) : (西暦) 2025年3月

## 2. 最終目標

NEDO燃料電池ロードマップにおける2030年以降に目指すべき目標達成に向けて、革新的な新規材料開発のための指針提案を行うことを目的とする。

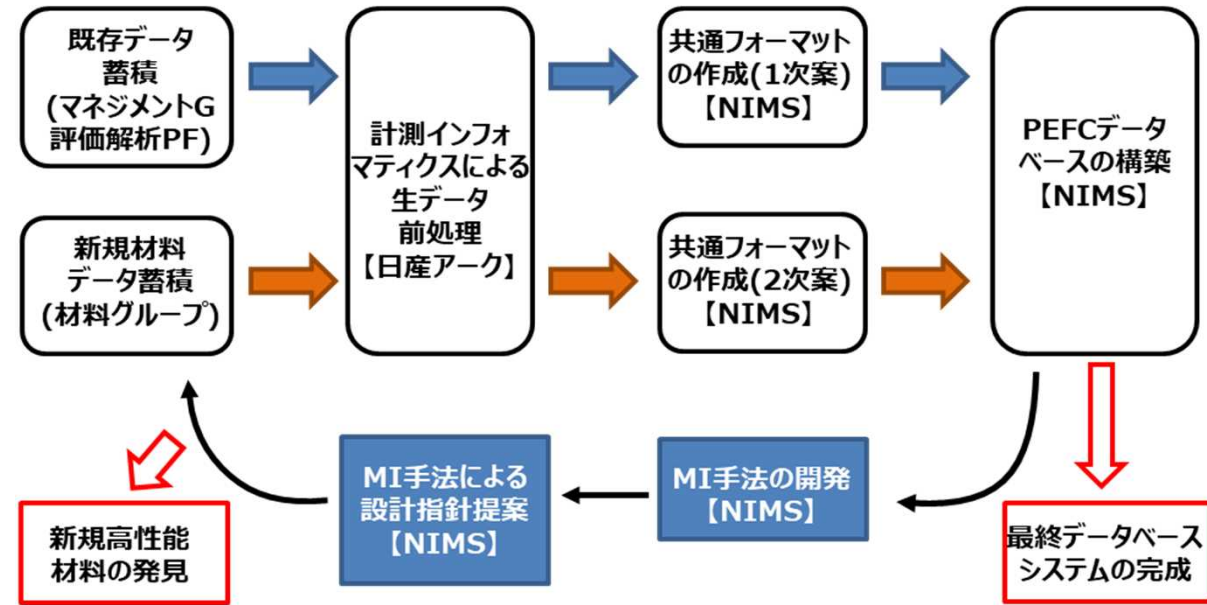
そのために以下を実施する。

- ・ これまでに得られている知見を集約し、新規データを蓄積する。
- ・ スペクトルや画像生データを蓄積するための前処理方法を確立する。
- ・ 上記DBとMI解析を用いた指針提案法のノウハウを蓄積する。

## 3. 成果・進捗概要

- ・ 新規データ蓄積のためのデータベースと、それを利用するためのプラットフォームを構築した。
- ・ スペクトルや画像生データを蓄積するための前処理方法を提案した。
- ・ 上記DBとMI解析を用いた指針提案を、材料研究グループとの間で取り組み始めた。

# 1. 事業の位置付け・必要性



- ①材料研究Gr.およびPFのデータを蓄積し、PEFCに関するデータベースPFを構築する。
- ②DBを今後永遠に使えるように、共通フォーマットを決める。(生データ前処理も実施)
- ③DBを利用したMI解析を実施し、設計指針提案を含むノウハウを構築する。

A) 材料改良方針

D) 革新材料創生

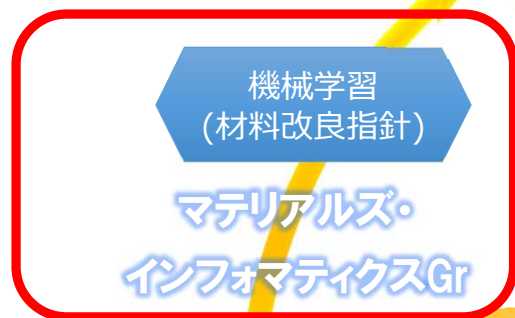
B) 現象の可視化

C) 現象の予測

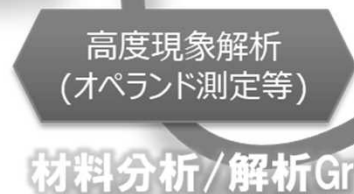
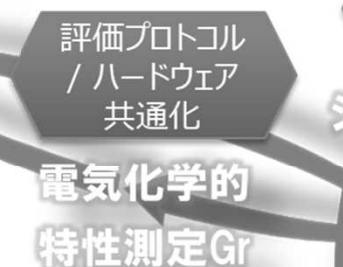
D) 革新材料創生

WP1:

データ駆動材料設計

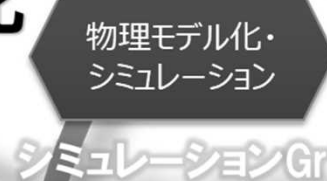


WP3:  
評価共通化



WP2:

モデル駆動材料設計



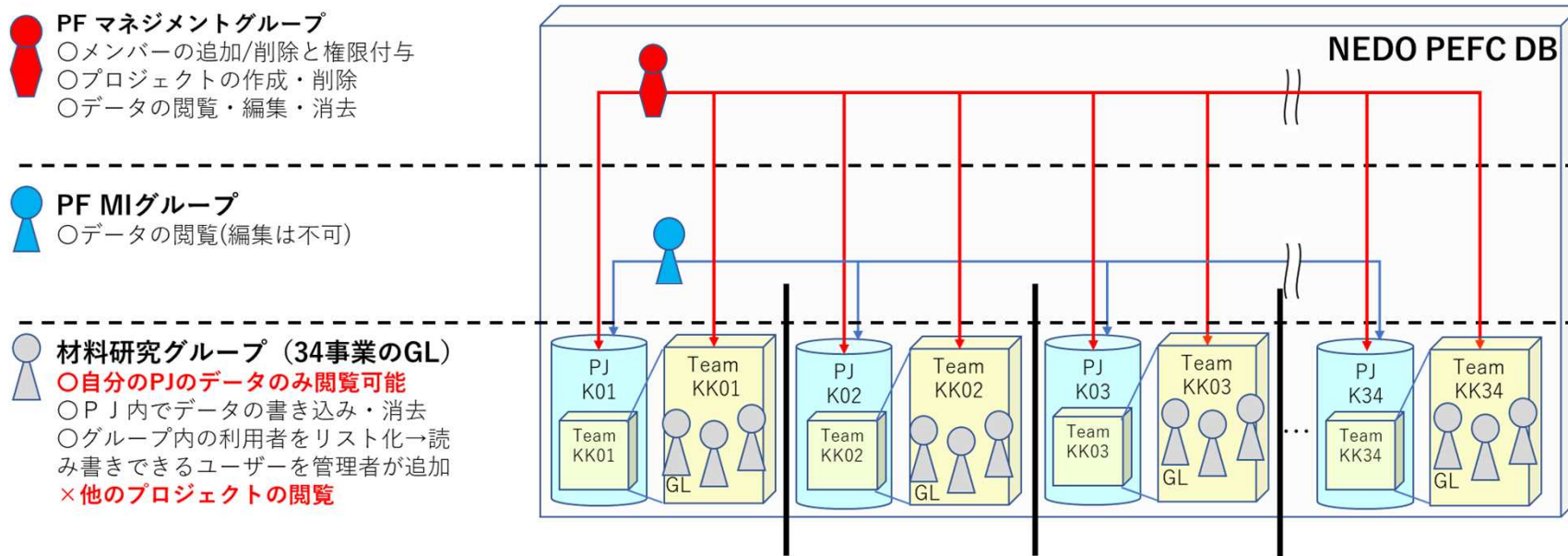
#### ■ 共通フォーマットに基づく系統的PEFCデータベースの開発 (NIMS)

##### ● データベース構築とウェブアプリの実装

・現在、実験データは各事業者により様々なファイル形式で保存されている。  
これらのデータは10-20年後には読めなくなってしまう。

⇒実用化のためにも、共通フォーマットで統一的にデータを蓄積する必要あり。

- 「成果」： 1. クラウド上に実験データを蓄積できるデータベースを構築した。  
2. 共通フォーマットでデータをアップロードするためのウェブアプリを実装した。



各材料研究グループが固有のデータ蓄積領域をもち、データがコンタミしない仕様でデータベースを構築。



### 3. 研究開発成果について

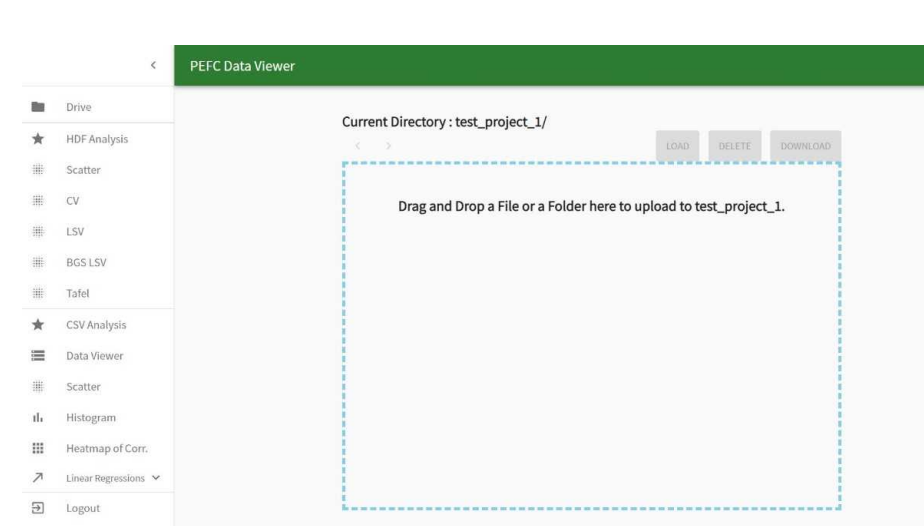
- データベース構築とウェブアプリの実装

- ・実用化を見据え、誰もが簡単に共通フォーマットを保持してデータを蓄積できる必要あり。  
⇒共通フォーマットに変換してデータをアップロードするためのウェブアプリを実装した。

ウェブアプリ：ウェブブラウザからURL([https://\\*\\*\\*](https://***))によりアクセス可能



ログイン画面



ウェブアプリ画面

マニュアルもウェブアプリ画面からダウンロード可能

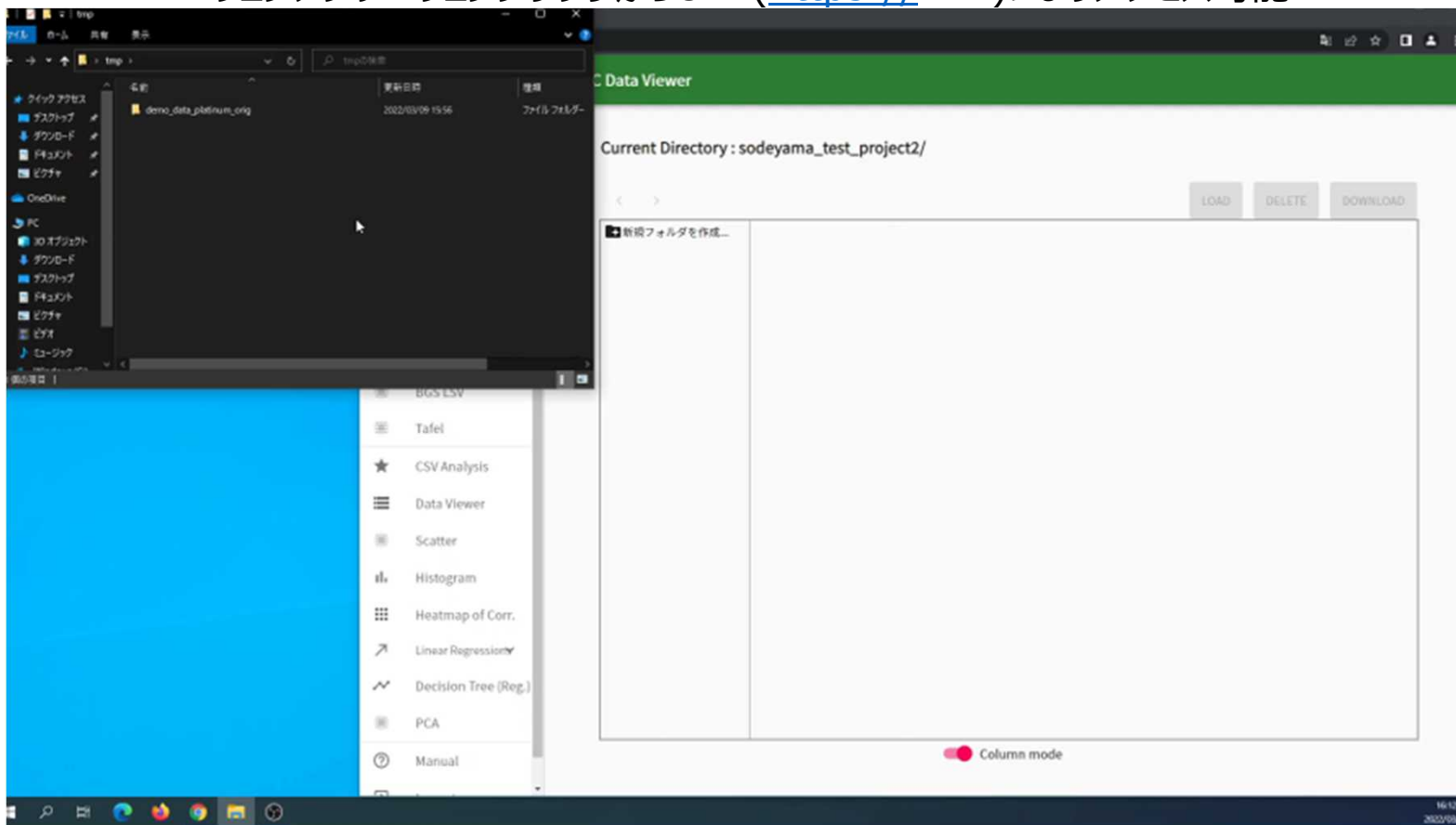


### 3. 研究開発成果について

- データベース構築とウェブアプリの実装

- ・実用化を見据え、誰もが簡単に共通フォーマットを保持してデータを蓄積できる必要あり。  
⇒共通フォーマットに変換してデータをアップロードするためのウェブアプリを実装した。

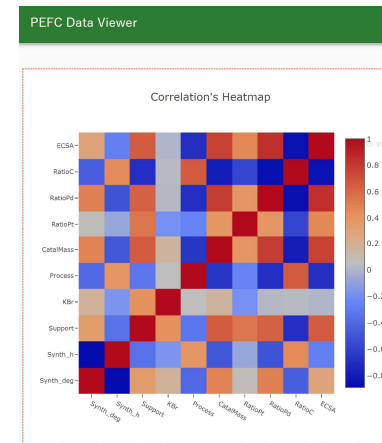
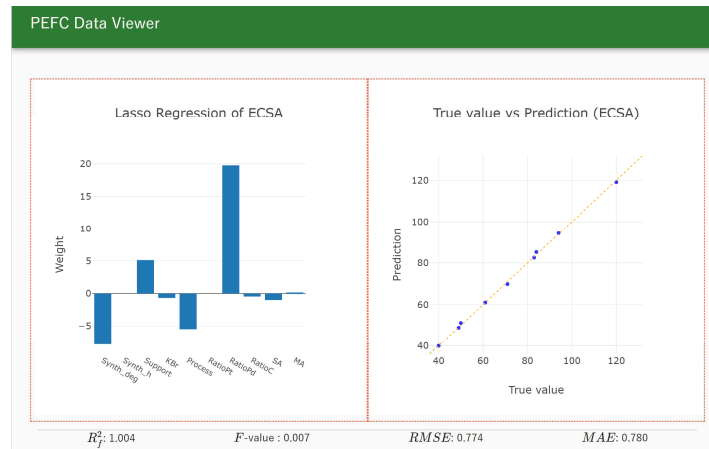
ウェブアプリ：ウェブブラウザからURL([https://\\*\\*\\*](https://***))によりアクセス可能



#### ■ MI解析による指針提案 (NIMS)

##### ● MI解析手法のウェブアプリへの実装

- 基本的なMI解析を実験データアップロード時に実行できるプラットフォームが必要。  
⇒機械学習手法のうち、多変数線形回帰、LASSO、Ridge回帰をウェブアプリに実装。



##### ● 個別データのMI解析による指針提案

- 現状、材料研究グループと個別に議論・MI解析を実施



### 3. 研究開発成果について

- 触媒の組成および合成条件の探索

⇒ HOR時の電流密度をMI解析により予測。何が有効な特徴量かを抽出。

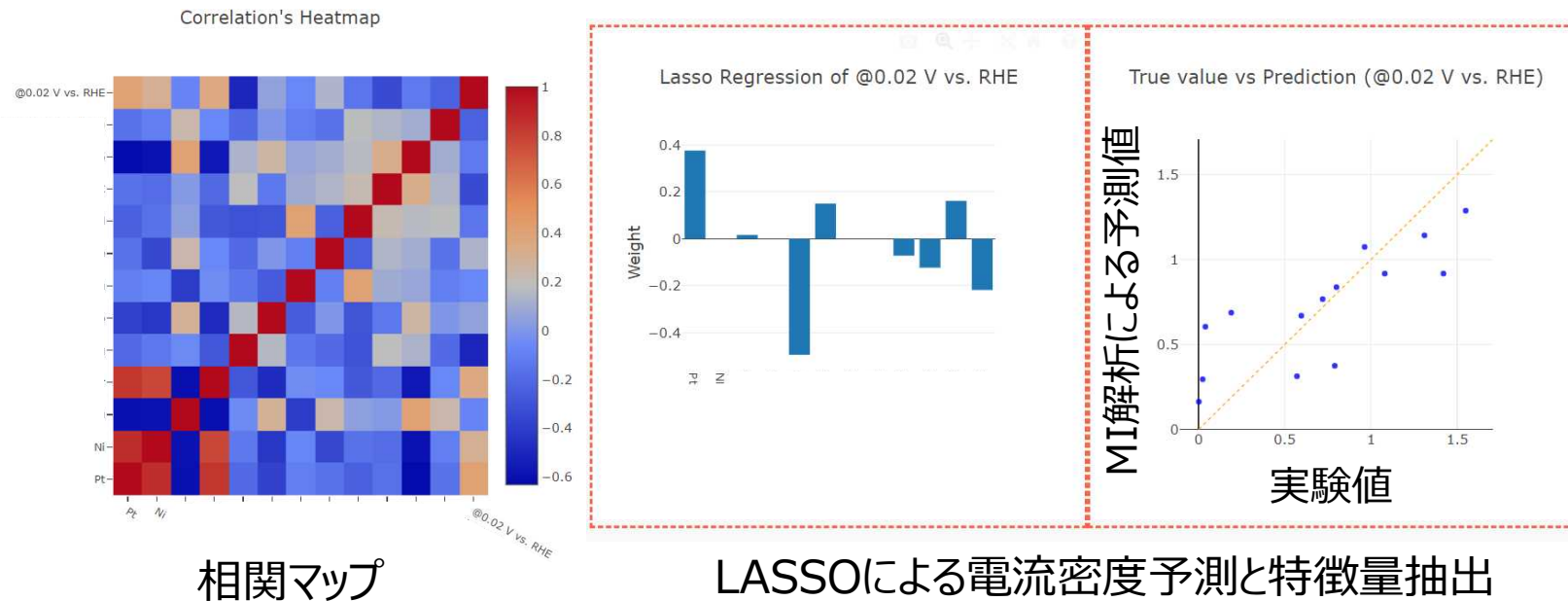
Sample name / ID	Experimental parameters												Experimental data
	Amounts of metal precursors / $\mu\text{mol}$												Disk current densities / $\text{mA cm}^{-2}$
	Pt	Ni											
Sample1	25	25	25	25	0	25	0	0	0	156	125	2	1.42
Sample2	25	25	25	25	0	25	0	0	0	31.3	125	2	1.31
Sample3	25	25	25	25	0	25	0	0	0	156	125	8	0.04
Sample4	25	25	25	25	0	0	0	0	25	156	125	2	0.19
Sample5	25	25	25	25	0	0	0	0	25	156	125	8	0.79
Sample6	25	25	25	0	0	25	0	0	25	156	125	2	0.80
Sample7	25	25	25	25	0	0	0	25	0	156	125	2	0.72
Sample8	25	0	25	25	0	25	0	25	0	156	125	2	1.08
Sample9	25	25	0	25	25	25	0	0	0	156	125	2	0.0245
Sample10	25	25	25	25	25	0	0	0	0	156	125	2	0.00237
Sample11	25	25	25	0	25	25	0	0	0	156	125	2	0.571
Sample12	25	25	0	25	0	0	25.4	0	25	156	125	2	0.596
Sample13	75	75	0	75	0	0	0	0	0	100	75	2	0.963
Sample14	75	75	0	75	0	0	0	0	0	156	125	2	1.549

北海道大学 加藤先生グループの生データ

### 3. 研究開発成果について

- 触媒の組成および合成条件の探索

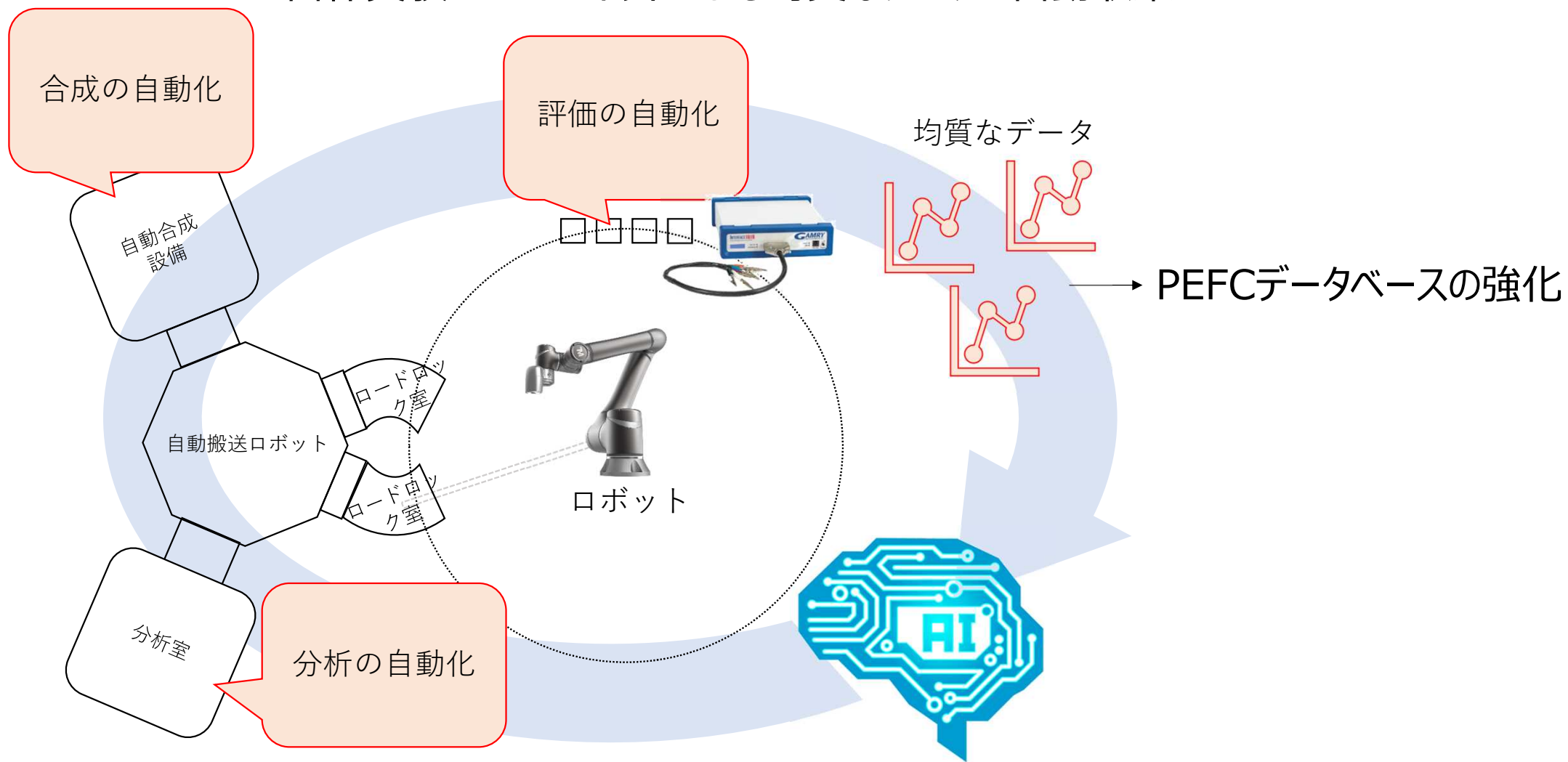
⇒ HOR時の電流密度をMI解析により予測。何が有効な特徴量かを抽出。



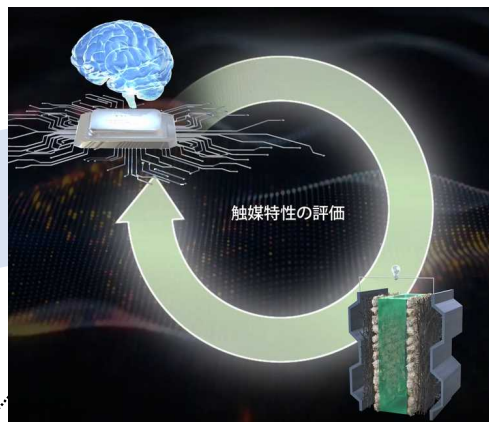
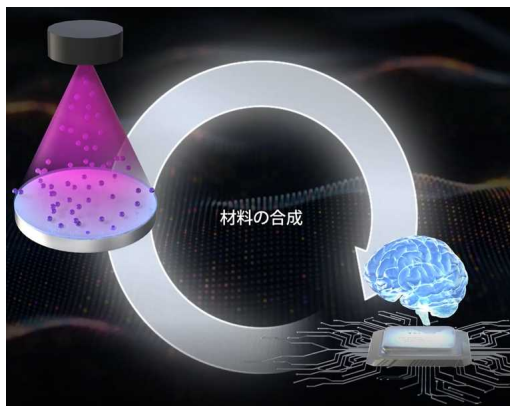
- データ点数が少ない割には比較的よく予測できている。
- Pt, Coが多いほど電流大(当然の結果を再現)。今後Pt少なくしたデータを追加。
- 先行例ではデータ増により精度向上。今後他の元素のデータを増やして精度を上げていく。

⇒ アクティブラーニングによる、次に実験すべき組成および実験条件の提案へ

## 自律実験：AIとロボットによる均質なデータの自動収集



## 自律実験：AIとロボットによる均質なデータの自動収集



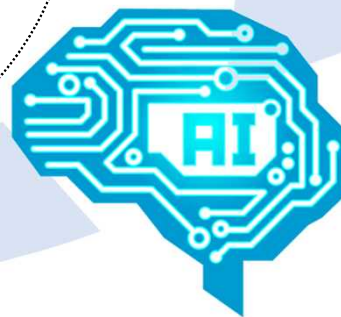
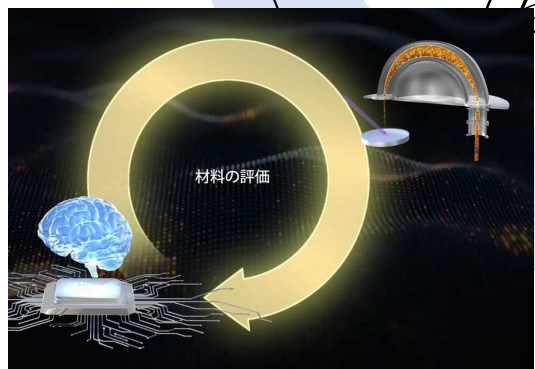
自動搬送ロボット

ロード  
ク室

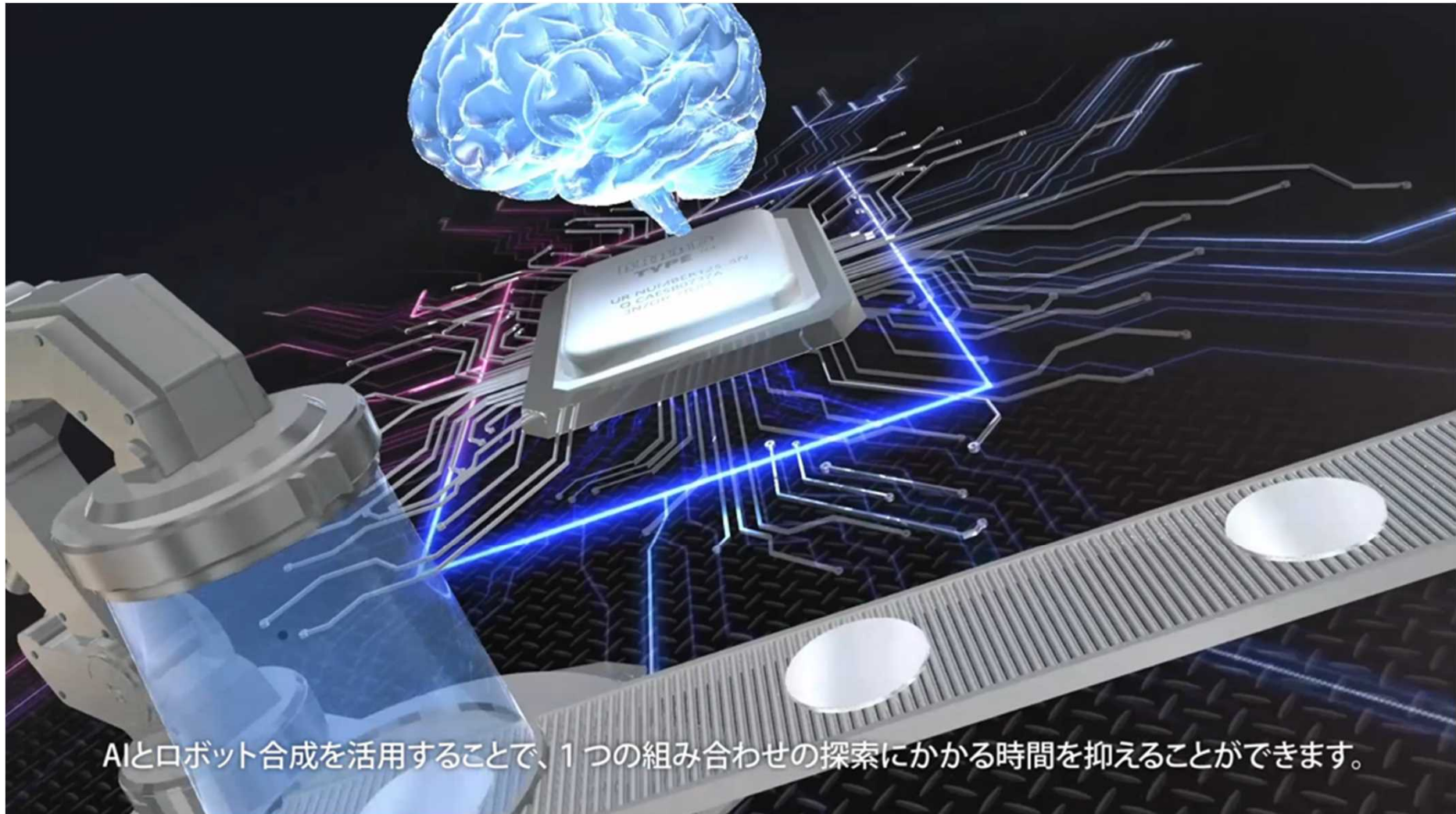
ロード  
ク室



AIがデータを解析し次に何を  
作るかを考える（ロボットを通じ  
て全てを自律させる）



### 自律実験：AIとロボットによる均質なデータの自動収集





- ①これまでに得られている知見を集約し、新規データを蓄積する。  
⇒新規データ蓄積のためのデータベースと、それを利用するためのプラットフォームを構築した。
- ②スペクトルや画像生データを蓄積するための前処理方法を確立する。  
⇒スペクトルや画像生データを蓄積するための前処理方法を提案した。
- ③上記DBとMI解析を用いた指針提案法のノウハウを蓄積する。  
⇒DBとMI解析を用いた指針提案を、材料研究グループとの間で取り組み始めた。