

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
物質・材料研究機構
2024年7月19日

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

1. 期間

開始 : 2020年8月

終了（予定） : 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。

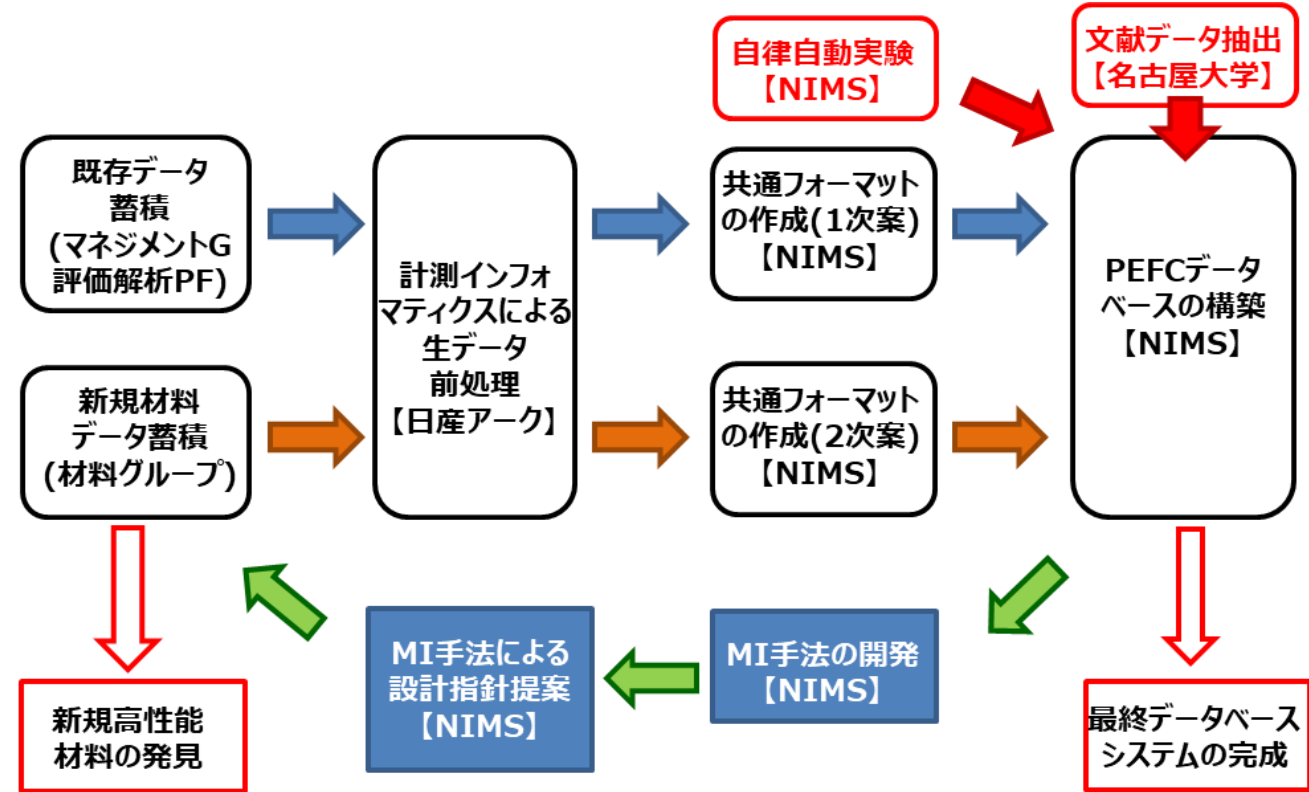
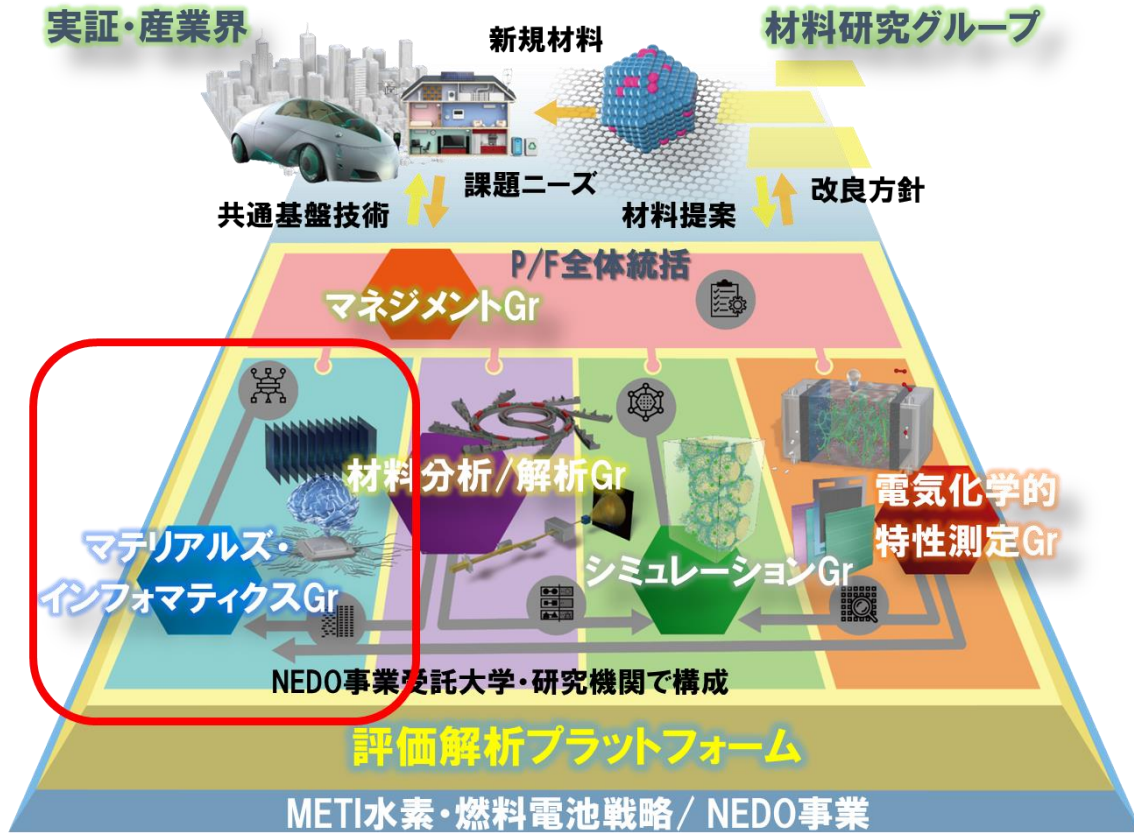
そのために以下を実施する。

- ・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。
- ・データ蓄積のために、自動自律探索実験を実施する。
- ・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、機能追加した。
- ・自動自律探索実験の装置を導入し、設定を実施している。
- ・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共同で実施し、成果を得た。

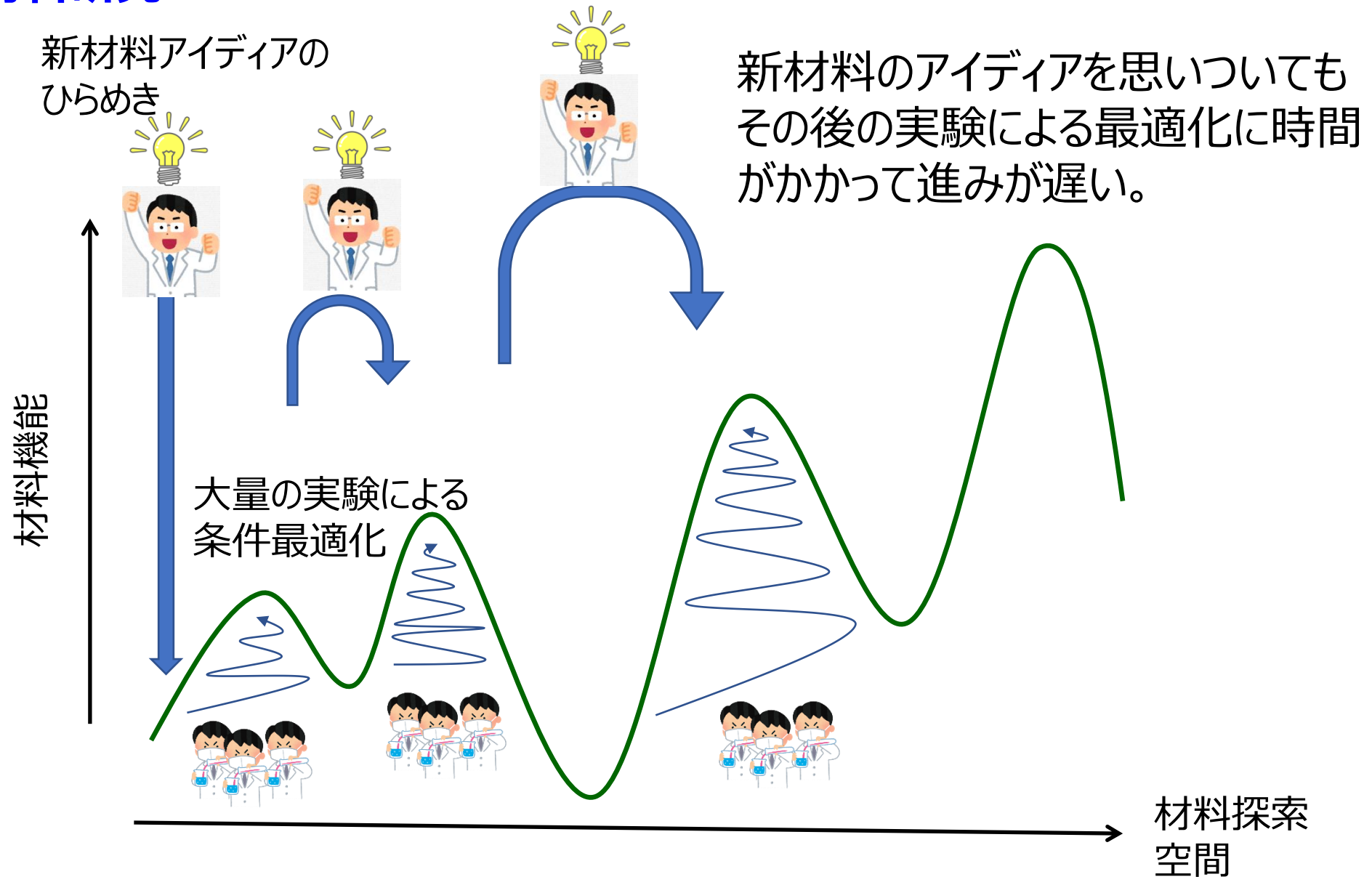
1. 事業の位置付け・必要性



- ①材料研究Gr.およびPFのデータを蓄積し、PEFCに関する共通フォーマットに基づいたデータベースPFを構築する。
- ②自律自動実験を実施し、データを蓄積すると共に高性能材料の設計指針を得る。
- 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。

1. 事業の位置付け・必要性

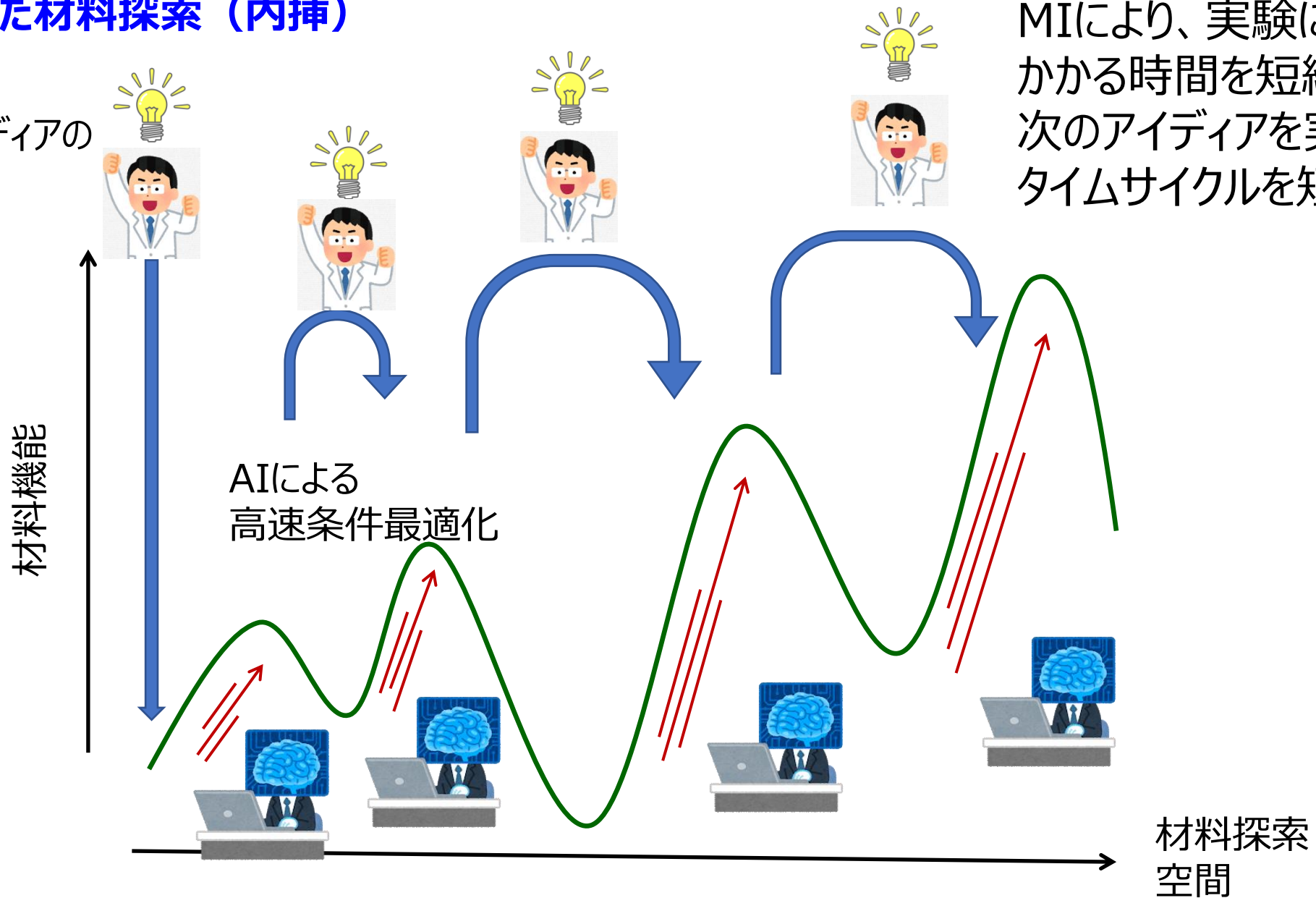
一般的な材料研究



1. 事業の位置付け・必要性

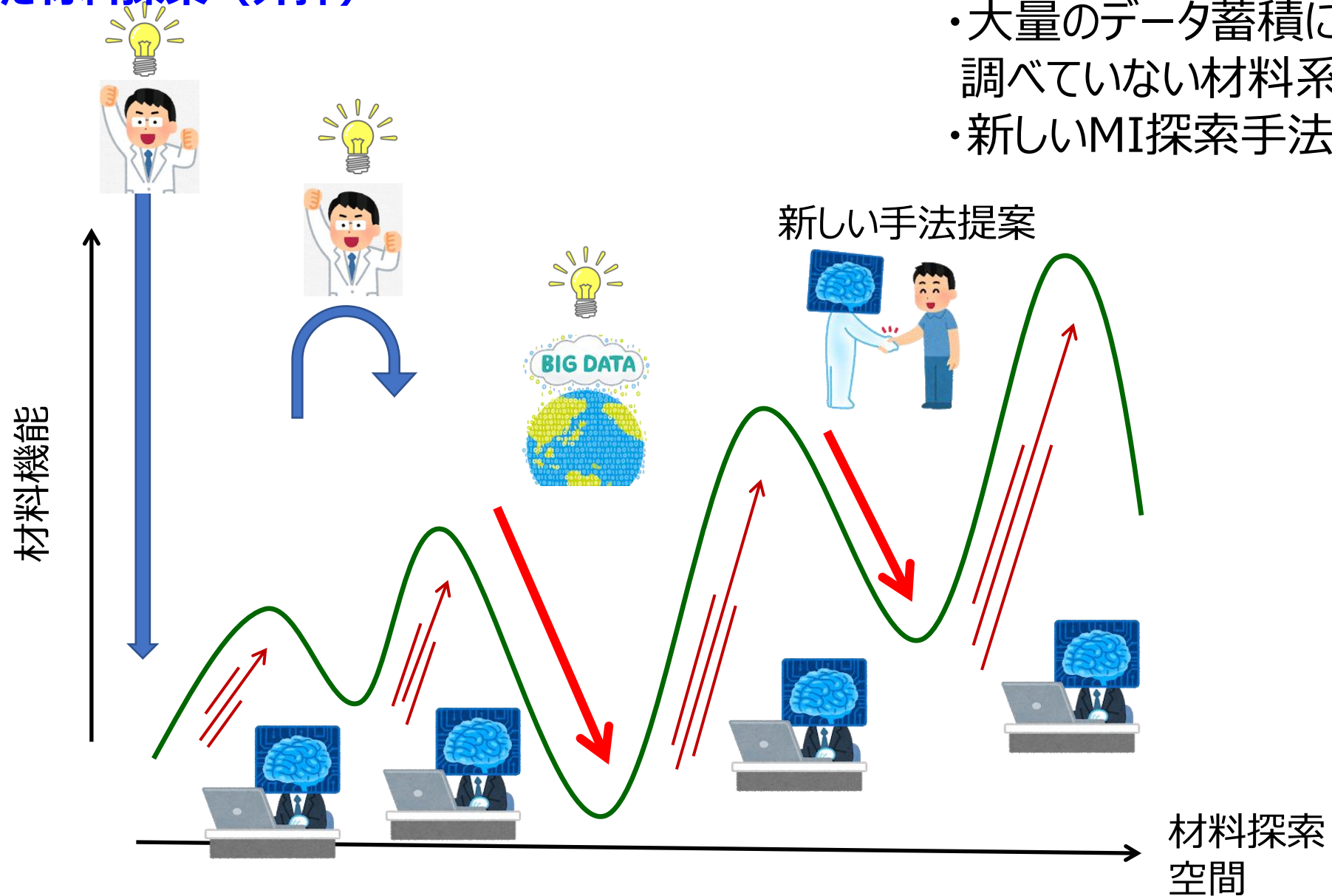
データを使った材料探索（内挿）

新材料アイデアの
ひらめき

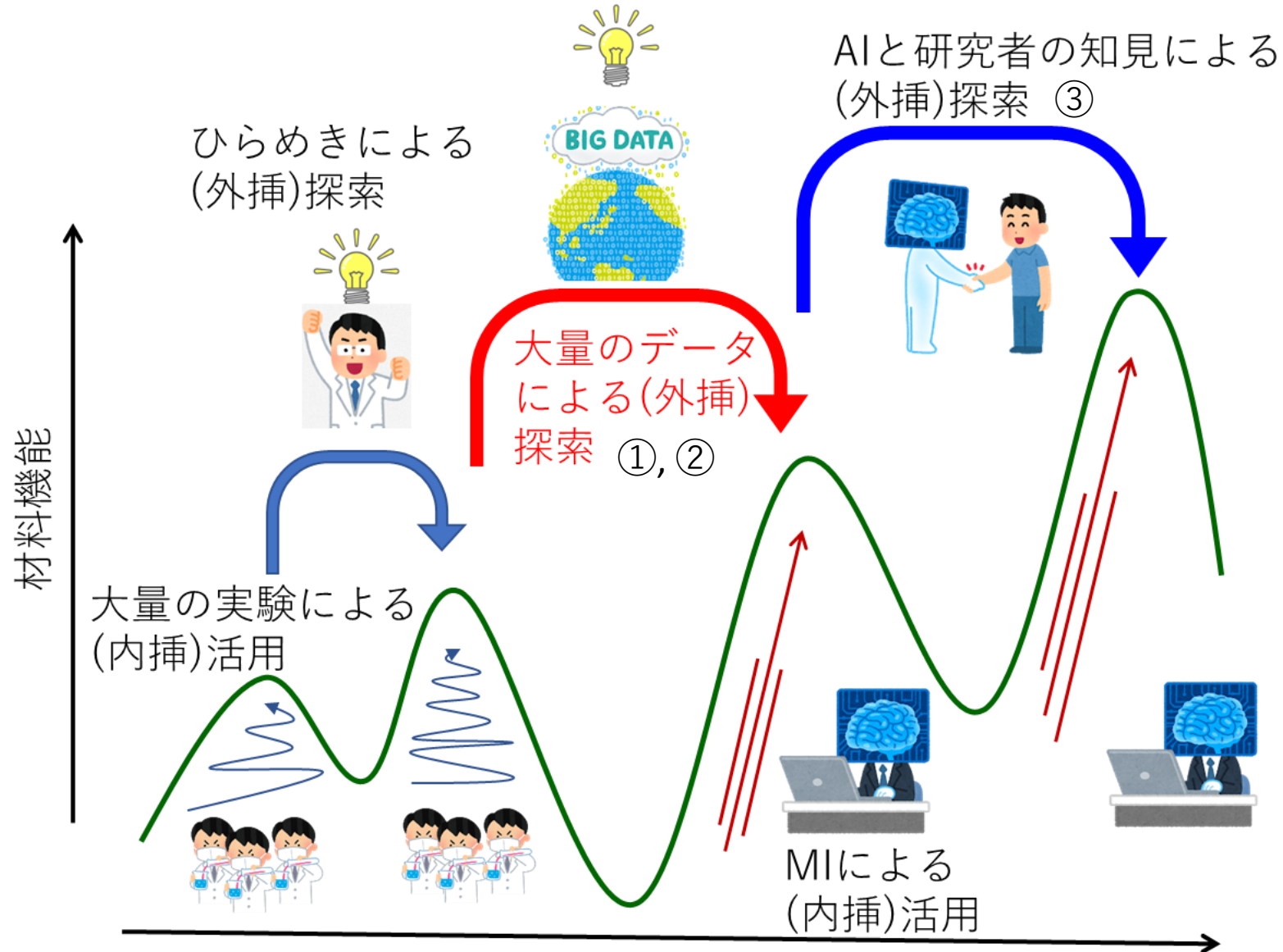


1. 事業の位置付け・必要性

データを使った材料探索（外挿）



1. 事業の位置付け・必要性



2. 研究開発マネジメントについて

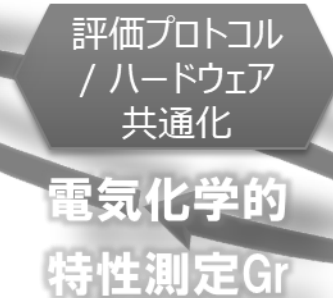
A) 材料改良方針

D) 革新材料創生

WP1: データ駆動材料設計



WP3: 評価共通化

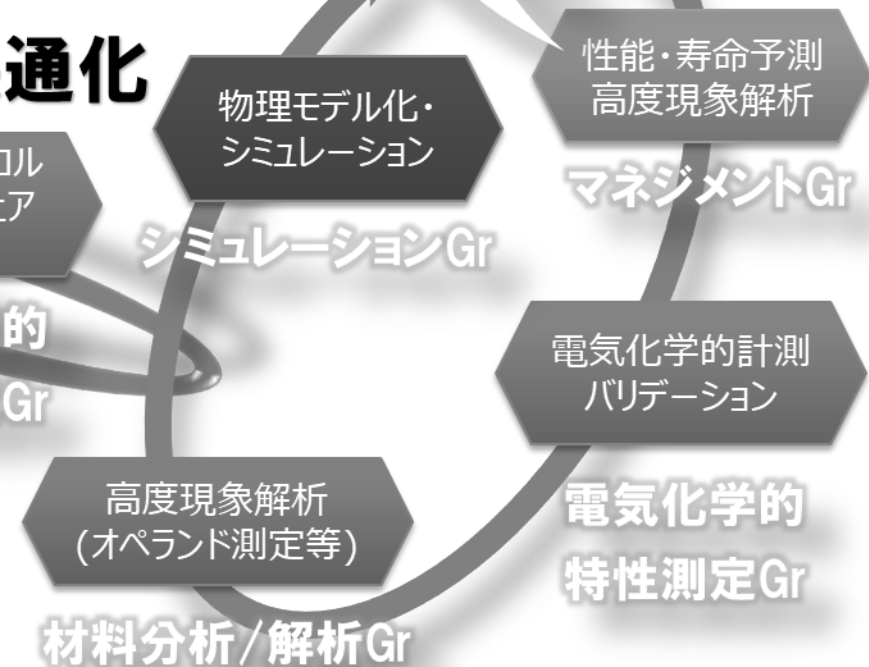


B) 現象の可視化

C) 現象の予測

D) 革新材料創生

WP2: モデル駆動材料設計



3. 研究開発成果について

MIX platform開発

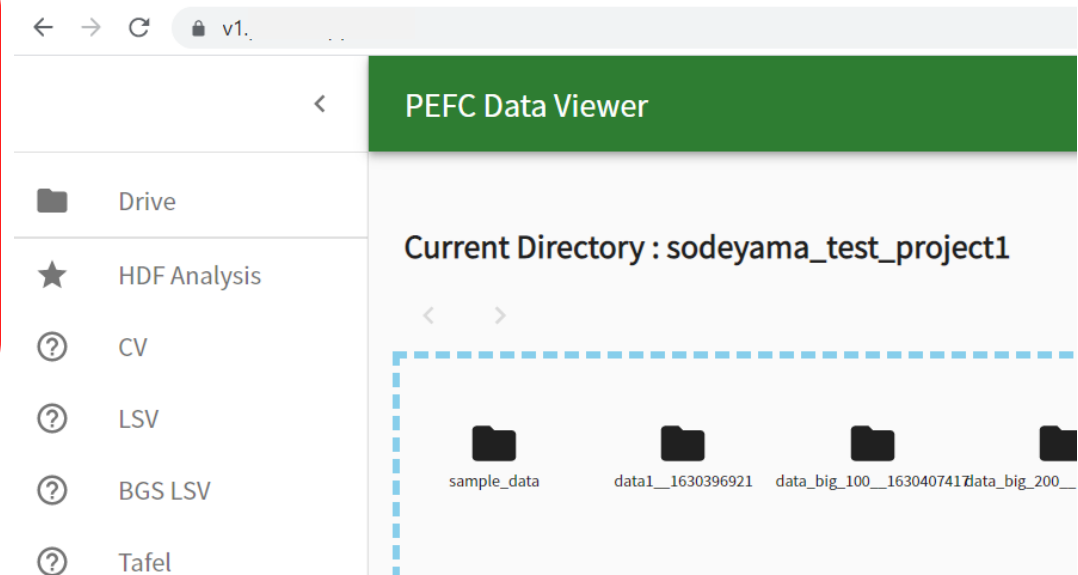
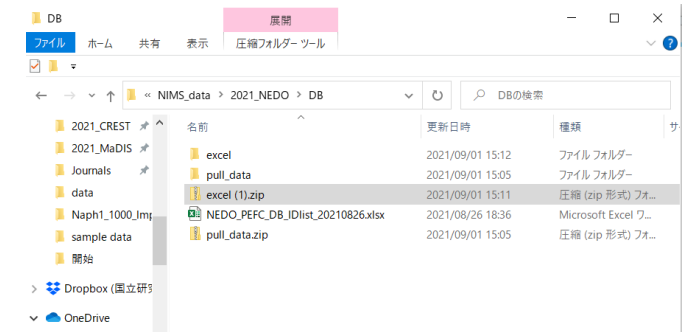
ウェブブラウザ（Chrome推奨）でURLにアクセス

→データをアップロードする画面が表示
アップロード後、以下の機能が利用可能。

1. 生データの読込と実験データ解析
2. 統一的な形でデータを保管
→PEFCデータベースへ
3. 簡単なMI解析を手元で実施

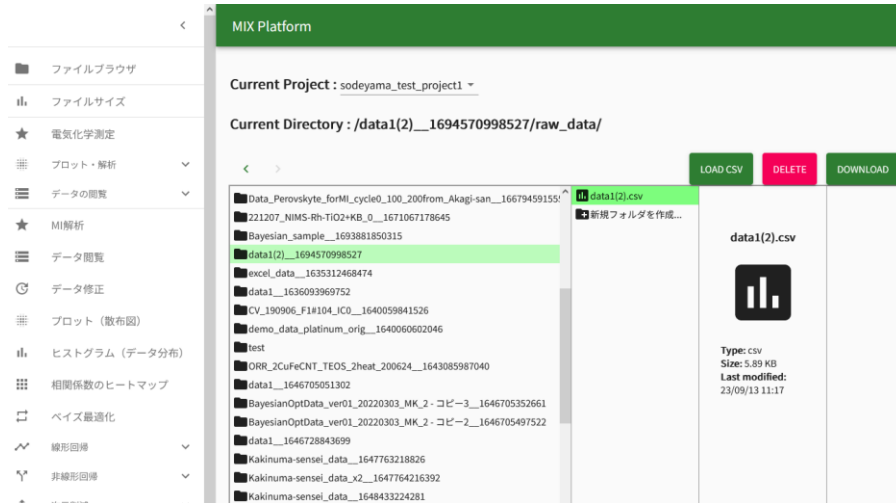
現在、ver.4として運用中。

エクスプローラー



3. 研究開発成果について

MIX platform開発



実験データ蓄積のための仕組み

- ・ ウェブアプリとして開発
⇒使いやすさ、データの入れやすさを重視
- ・ 講習会を2度実施

ver.4 (2023.09)



ver.X (2025.03)



3. 研究開発成果について

MIX platform 解析申請書 自動作成機能実装 (研究活動のDX化)

1. MIX platformへデータ投入



2. メタデータ記入ウィンドウ開く
(分析解析依頼書作成を選択)



3. 解析依頼書に必要な情報を記入
するウィンドウ開く(内容記入)



4. 解析依頼書(Excelファイル)が
自動作成される。

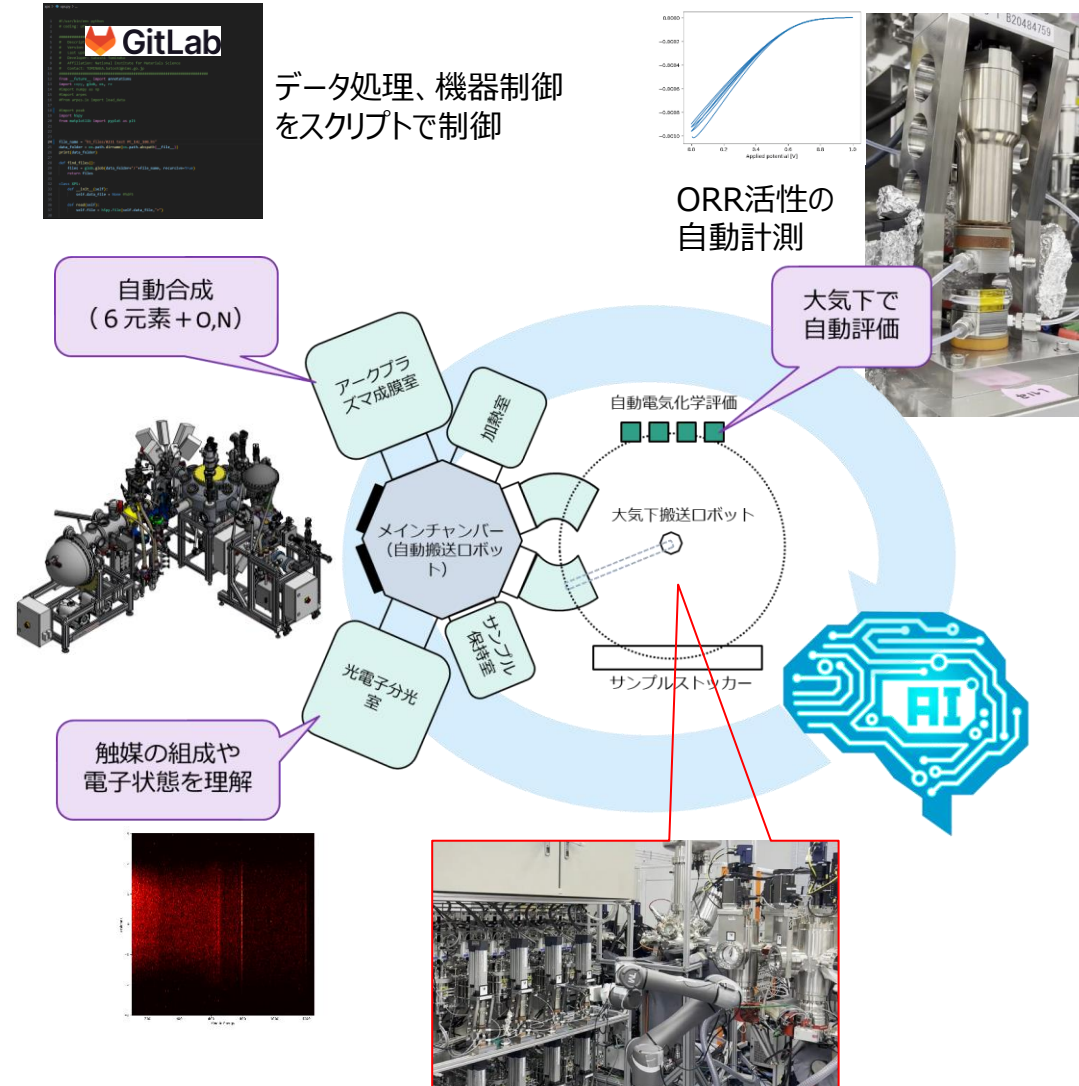
5. マネジメントグループに自動転送



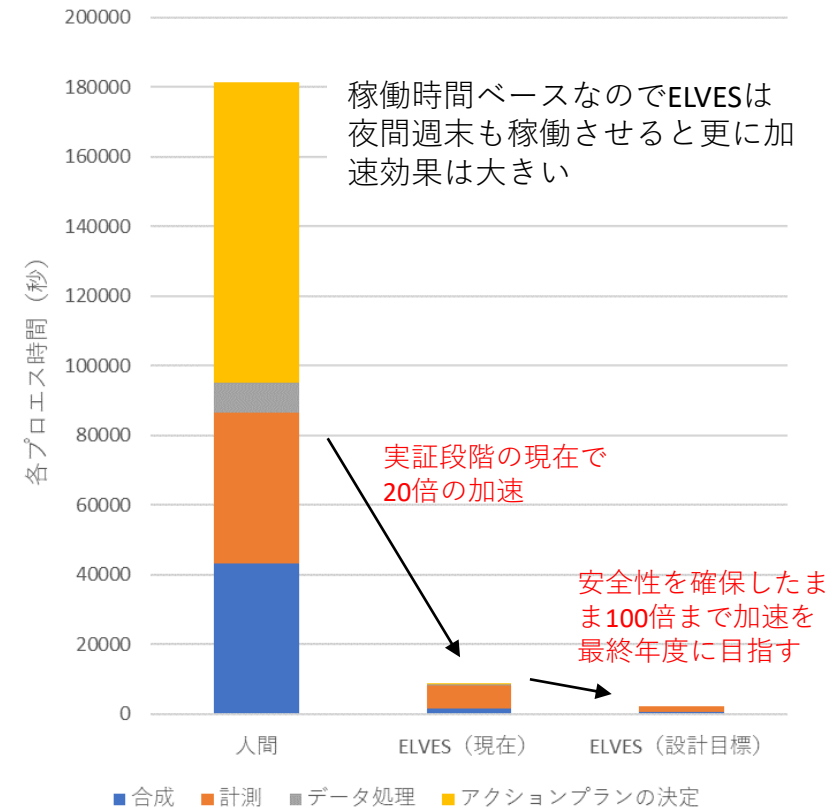
3. 研究開発成果について

自律自動実験 均質なデータを高速収集

ロボットと人工知能の集合システム (ELVES)



人間 vs ELVESシステム



人間の既存の開発時間は超人的な値 (上限値) として設定

3. 研究開発成果について

自動自律実験

ELVES 開発プロジェクト



「無人で研究を進める小人たち」

the elves and the shoemaker

- 制御はPythonで自動化
- APIが無いものはNIMSで作製し公開
- データベース化(データプラットフォーム)
- 高速解析しMI解析(NIMSの専門家の知)
- AIをNIMSで構築し育成

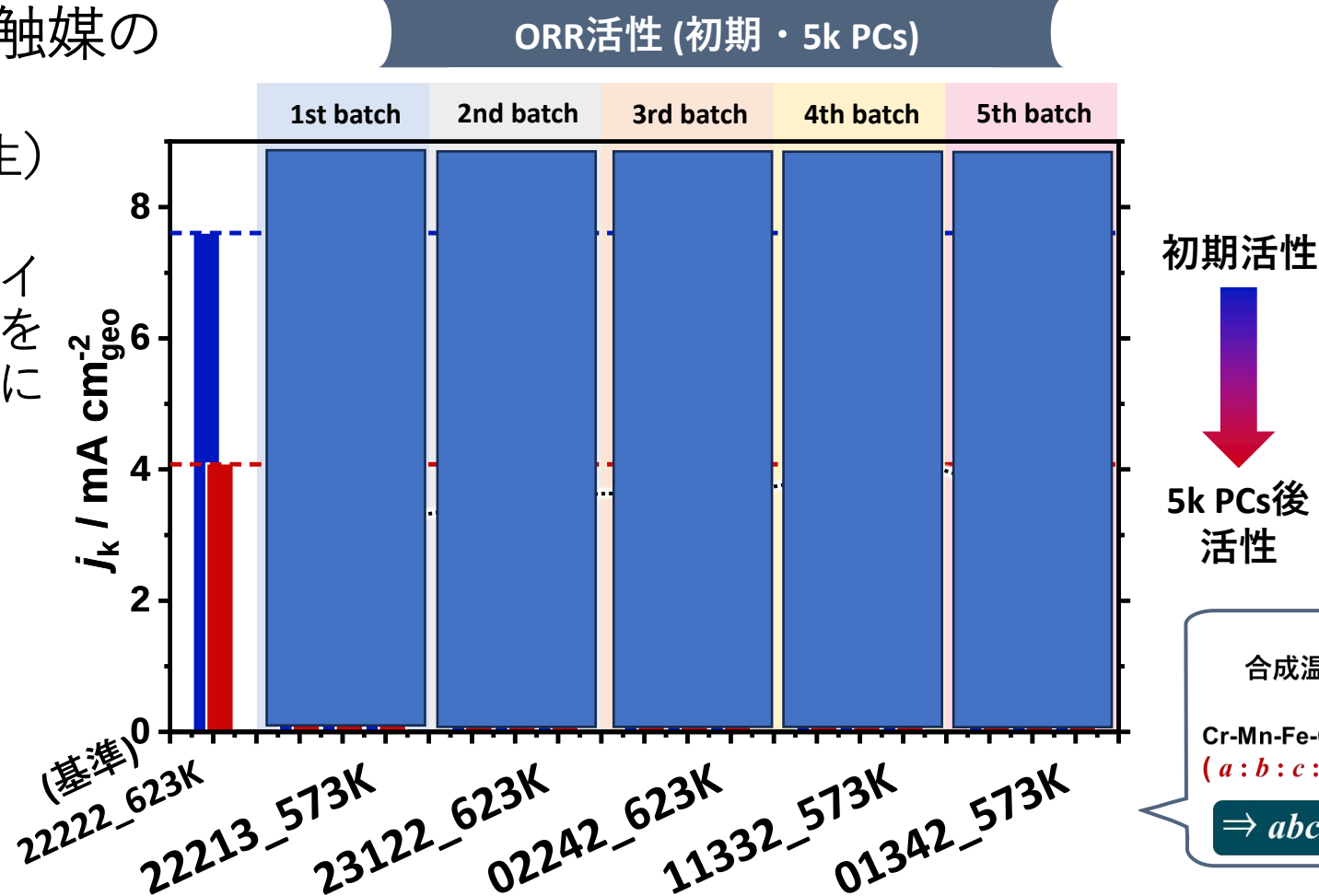
統一規格品でなくても、
インターフェースを作って連携させる。

3. 研究開発成果について

MI解析実例紹介

Pt-HEA(111)モデル触媒の 合成条件検討 (東北大学 和田山先生)

ハイレントロピーアロイ
触媒の組成と実験条件を
アクティブラーニングに
より最適化。



- ✓ 1st ~ 4th batchまでは、batch内で最高の特性を示した試料の”5kPCs後活性”が batch毎に向上 ⇒ 4th batchで Pt / 等組成Cr-Mn-Fe-Co-Ni と同等のORR特性
- ✓ 非等組成比5元系, 4元系の合金化元素でも高ORR特性を示す合成条件を発見

4. 今後の見通しについて

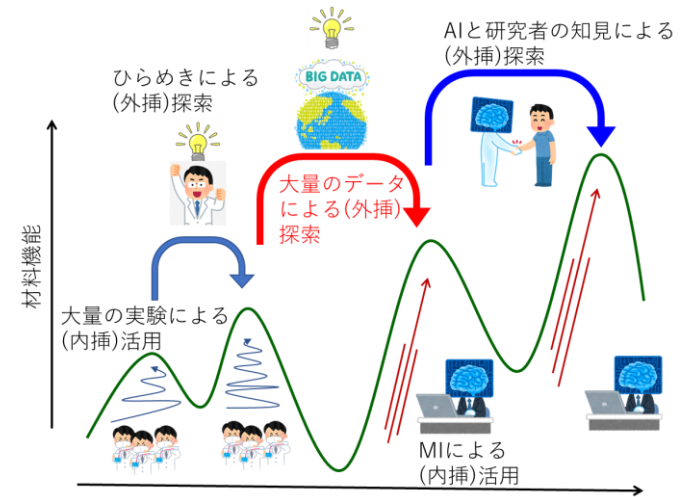
異なる研究者、分野のデータ連携→合体した大きな表を作成

		特徴量			XRD ^{DFT} 自動実験...		
サンプル名	事業者A データ	① 共通するデータを抽出					
	事業者B データ	② 共通する計測・ 計算データを利用					
		...					

事業の全データを融合させたテーブル

1. 拠点内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。
2. 個別データ間の関連性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。
3. 非対角成分にデータを与えるため、
 - ① 個別データ間で共通するデータを抽出する。(データの共通リスト化)
 - ② 個別データ間で共通する計測手法や計算データを利用する。

⇒大量に蓄積される、異なる性質のデータを利用した解析の実施が可能に。



4. 今後の見通しについて

- **実用化・事業化のイメージ（成果がどのように使われるか）**

本事業で構築したPEFC データベースを用い、本事業で得たMI解析のノウハウを利用することで事業者が独自にMI解析を行い、新材料探索の指針を得ることができる。

- **実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針**

作成したデータベースを事業終了後にどのように扱うかを決める必要がある。

- **実用化・事業化に向けた具体的な取り組み（計画や戦略等）**

作成したデータベースおよびMI解析プラットフォームをより利用しやすく改修する。

- **その他、顕著な経済・技術・社会的な効果、人材育成の取り組み等**

基本的なMI解析手法が自由に利用できるようなプラットフォームになっているため、これを用いたMI解析の実習が可能であり、研究者のスキルアップに貢献できる。