

NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップ成果報告会

NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ (FCV・HDV 用燃料電池技術開発) DX技術

プレゼンター: 谷村直樹(みずほリサーチ&テクノロジーズ)

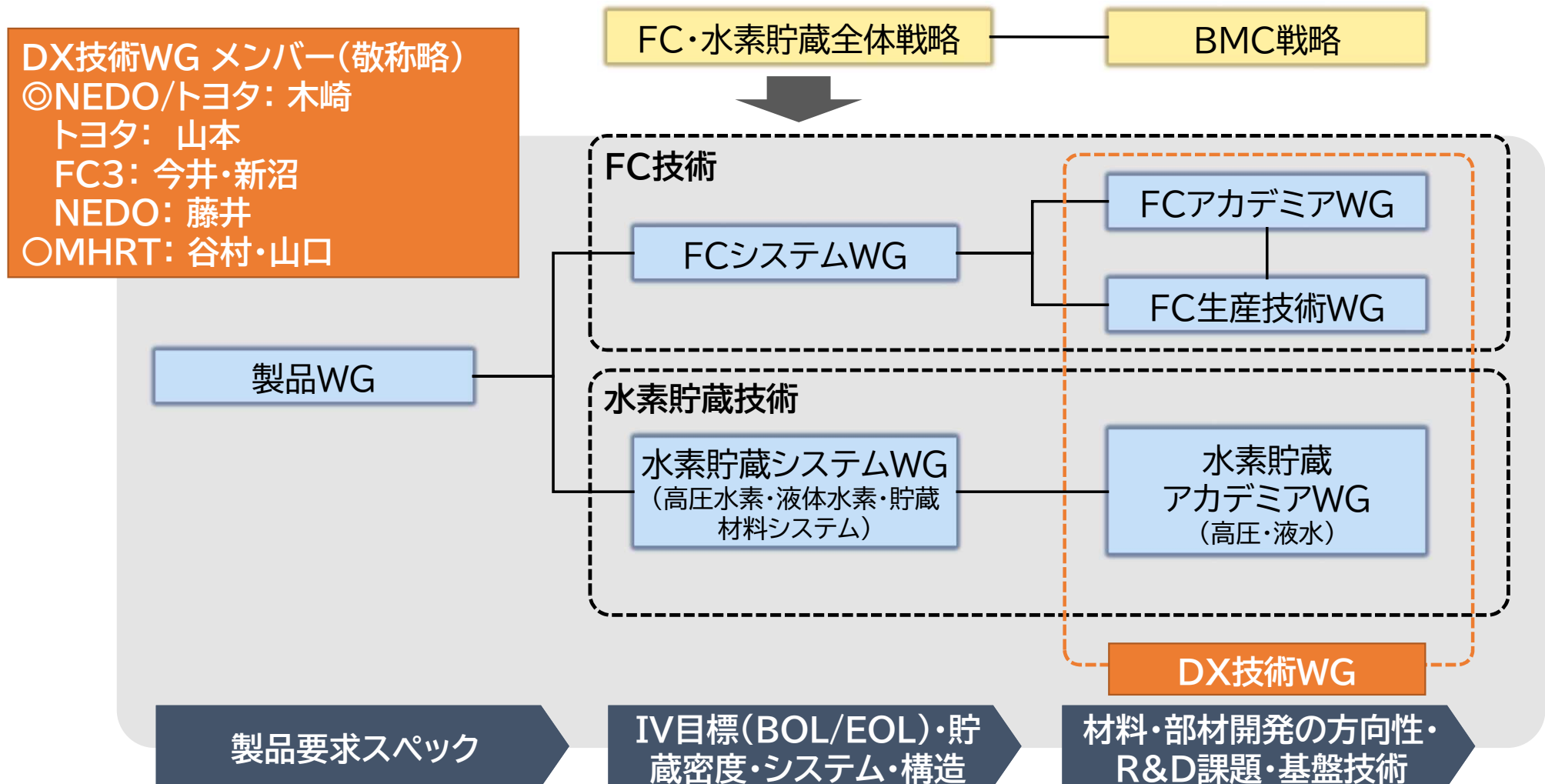
NEDO 水素・アンモニア部
(委託先)みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社

WG 体制

1. DX技術の目標
2. DX技術活用の推進体制・拠点化
3. ロードマップの改訂
4. まとめ

WG体制

3/20

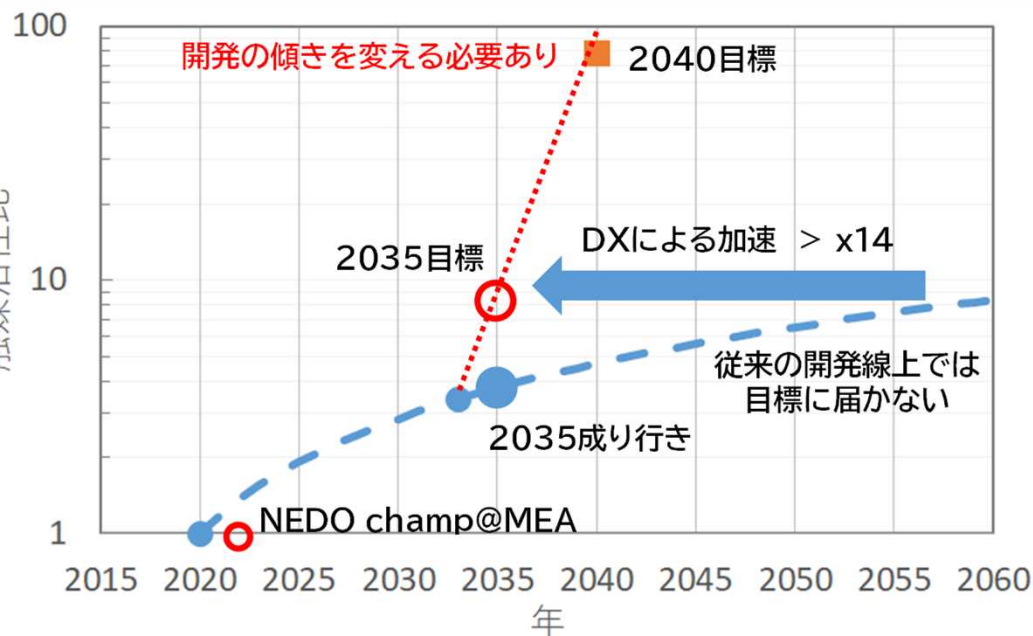


1. DX技術の目標: DX技術への期待と目標

4/20

- 製品・システムなどの高性能化などに向けた**研究開発を加速**し、目標を早期に実現することを期待
- 燃料電池・水素産業分野の材料技術開発に、現時点の**20倍以上**の研究開発力をもたらす
- 35年の製品・システム目標に向け、**30年時点で達成**している必要がある

- 既存技術をベースとして、30～40年に向けて性能向上の傾きを変える必要があり、DXにより従来に比べ開発を14倍以上加速させることが必要



【加速・効率化の目安】

- MI・自動自律実験: 材料探索速度20～100倍
- PI: プロセス条件の最適化を20～100倍
- MEI: 高度解析のスピードを10～30倍以上
- 自然言語処理: データ抽出・ベンチマークコスト1/100～1/250



● DX技術



1. DX技術の目標: DX技術活用により広い探索空間をカバー

5/20

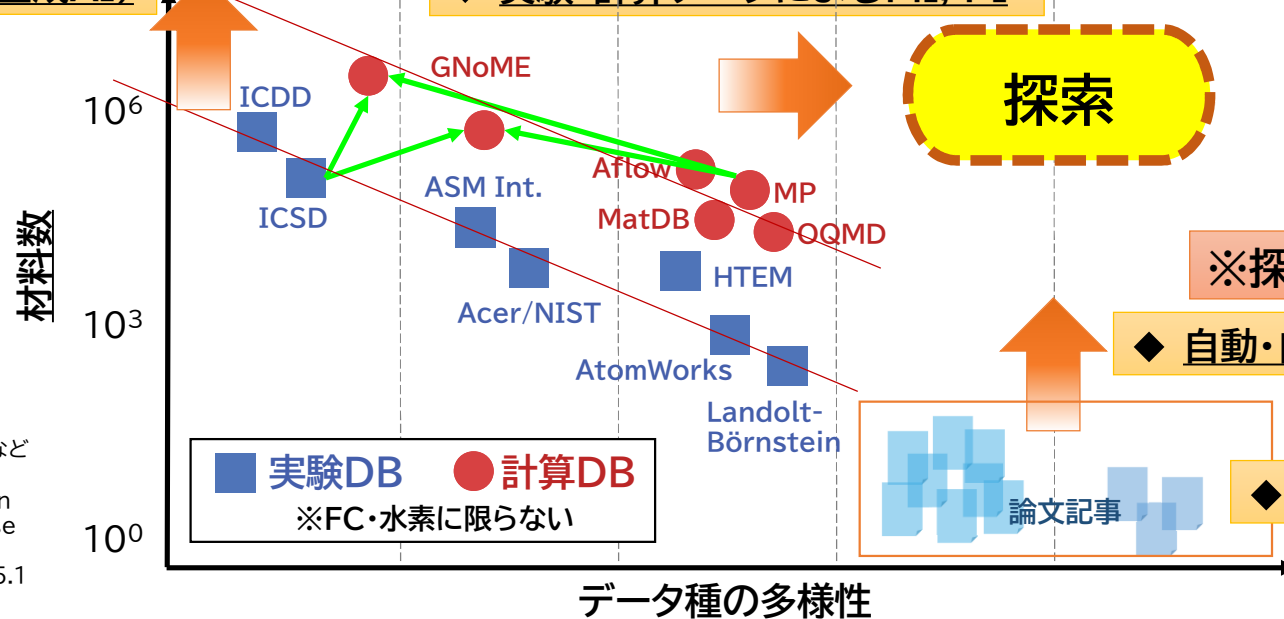
- より多くの材料候補に対して、より最適な合成法を探索し、より良い性能につながるものを見つける
- 広い探索空間をカバーするため、様々なDX技術を補完的に組み合わせることが必要

※探索範囲100倍？

※合成法・性能に係る教師データが少ない

◆ 計算科学・MI(生成AI)

◆ 実験・計算データによるMI, PI



※探索範囲100倍くらいまで？

◆ 自動・自律実験による探索・データ拡充

◆ 自然言語処理によるデータ化

【出典】下記論文の図(Figure 1)などを参考に作成
Zakutayev, Andriy, et al. "An open experimental database for exploring inorganic materials." *Scientific data* 5.1 (2018): 1-12.

構造
安定性
物性
合成法
性能

✓	✓	✓	✓	✓
	✓	✓	✓	✓
		✓	✓	✓
			✓	
				✓

構造
安定性
物性
合成法
性能

合成法や性能まで揃ったデータは少数

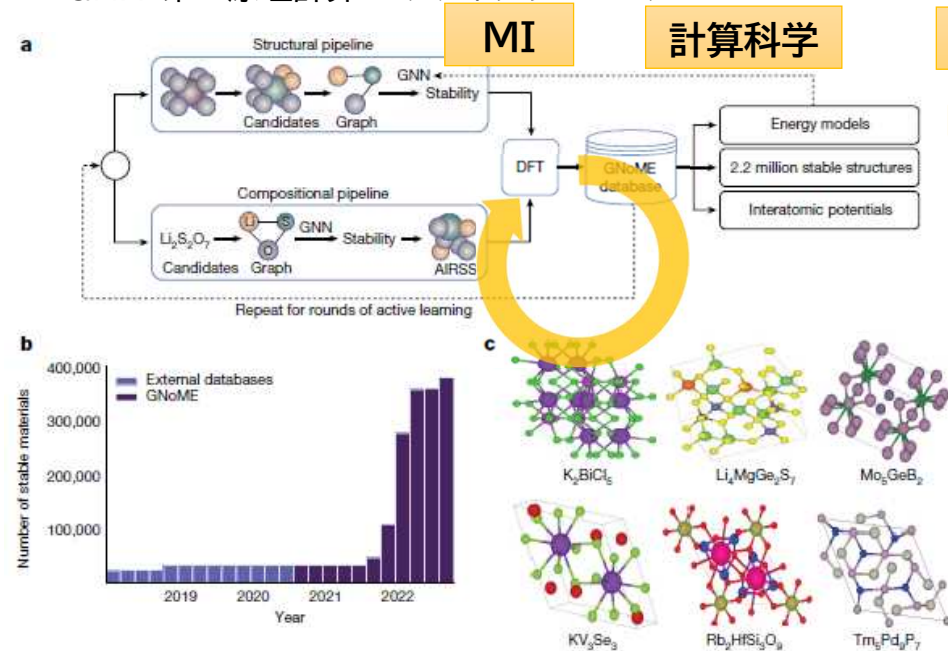
1. DX技術の目標： 調和のとれたDX技術開発

6/20

- 多数の候補の生成、スクリーニングによる絞り込み、合成対象の選定、合成方法の検討、プロセス条件の設定、合成、評価など、一連の材料・プロセス開発の加速化するためには、各ステップでのDX技術の導入が必要
- 各々のDX技術間で調和のとれた技術開発が必要

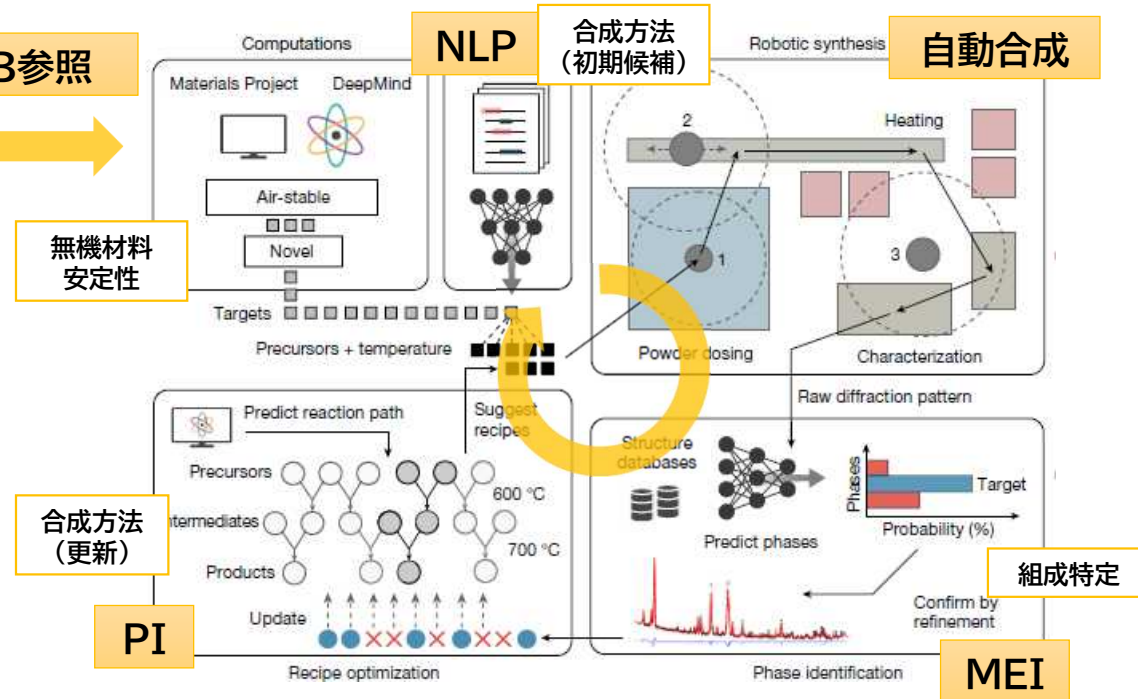
◆ Google[1]

- ・ 既存データベースもとにして材料探索空間を拡大、熱力学的に安定な無機化合物のデータベースを作成、38万種の熱力学的に安定な新規結晶を発見
- ・ GNN・第一原理計算・アクティブラーニング



◆ UC Berkeley·LBNL[2]

- ・ 空气中で安定な新規無機化合物41種類を17日間・355回の自律実験により合成
- ・ 自律実験(アクティブラーニング)で合成法を探索

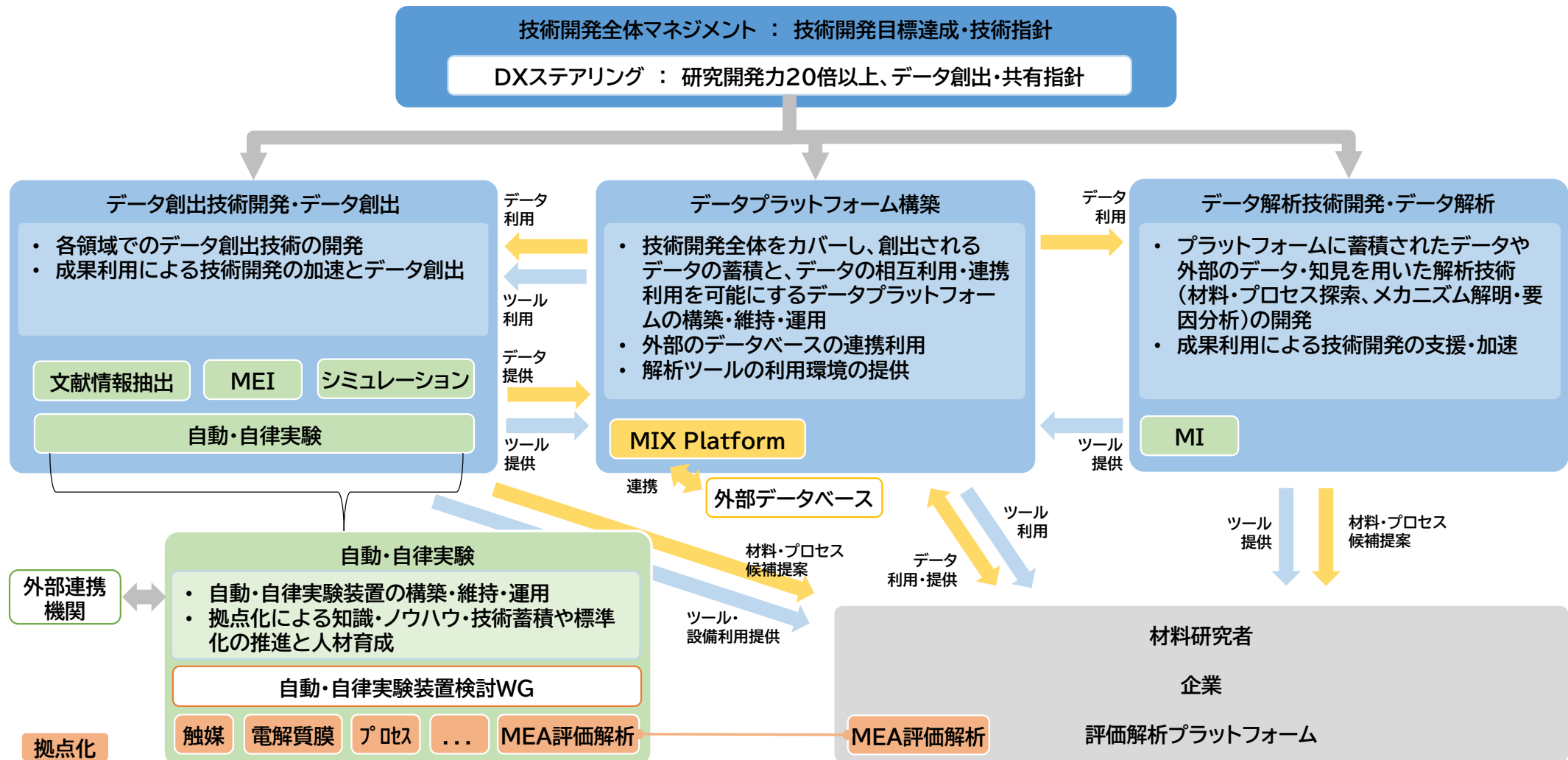


出典：[1] Merchant, Amil, et al. "Scaling deep learning for materials discovery." Nature 624.7990 (2023): 80-85.

[2] Szymanski, Nathan J., et al. "An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials." Nature 624.7990 (2023): 86-91.

2. DX技術活用の推進体制・拠点化

7/20



3. ロードマップの改訂: ロードマップ(DX技術)の構成と変更点

8/20

2023年度版

2024年度版

①【基盤整備】

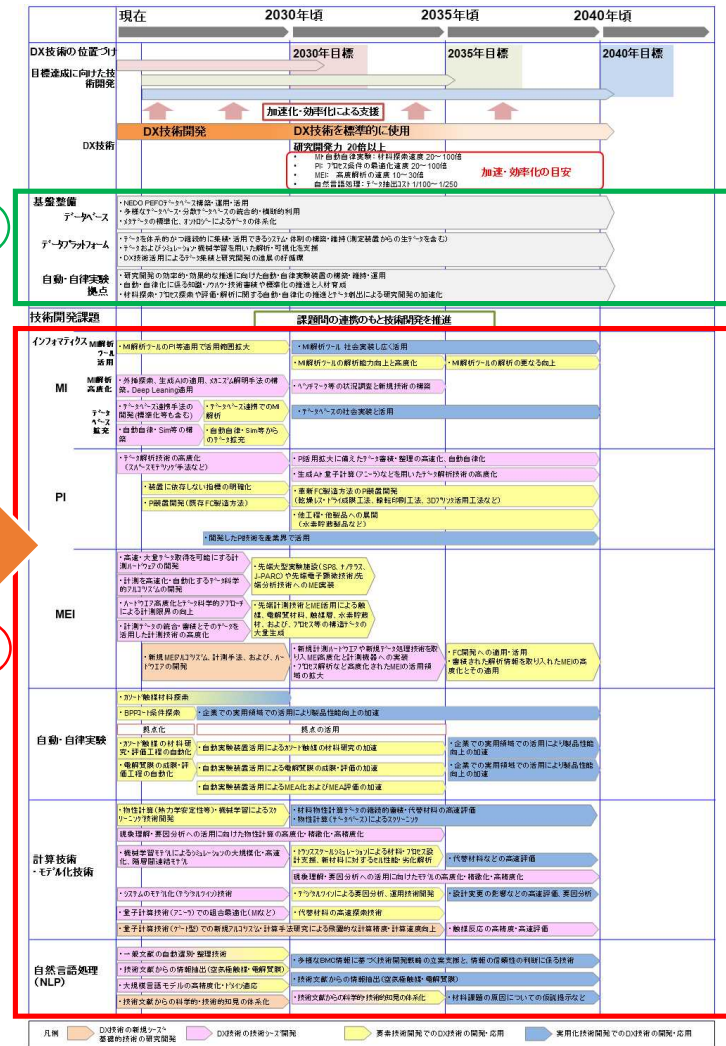
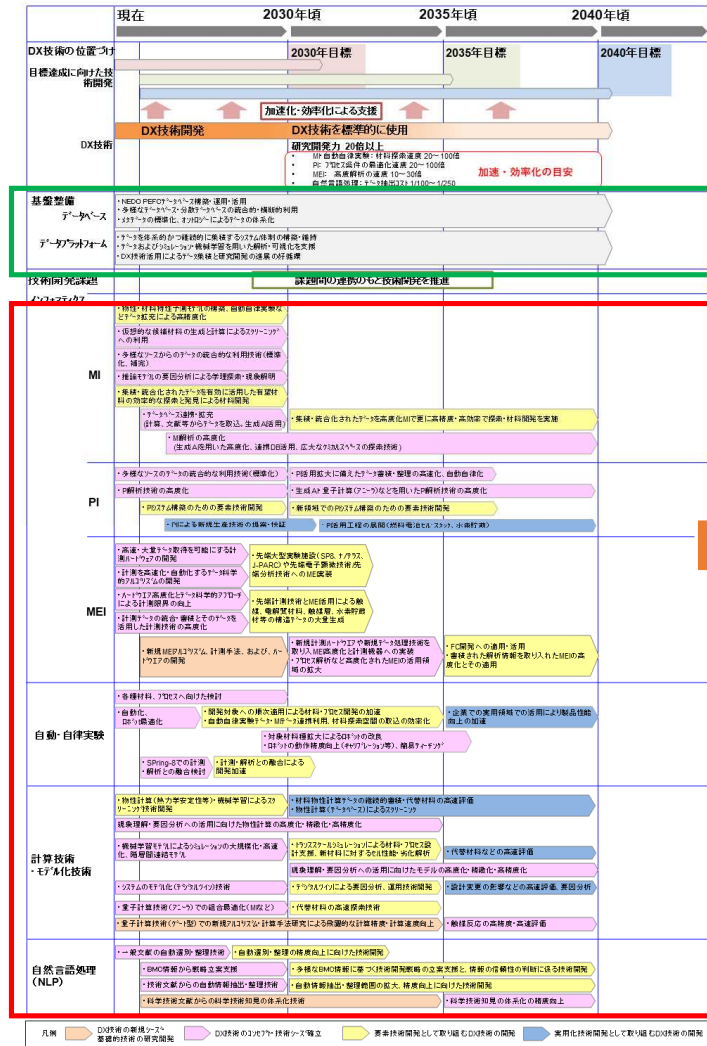
- 継続的に構築・維持・運用する基盤として従来のデータベース、データプラットフォームに**自動・自律実験**拠点を追加

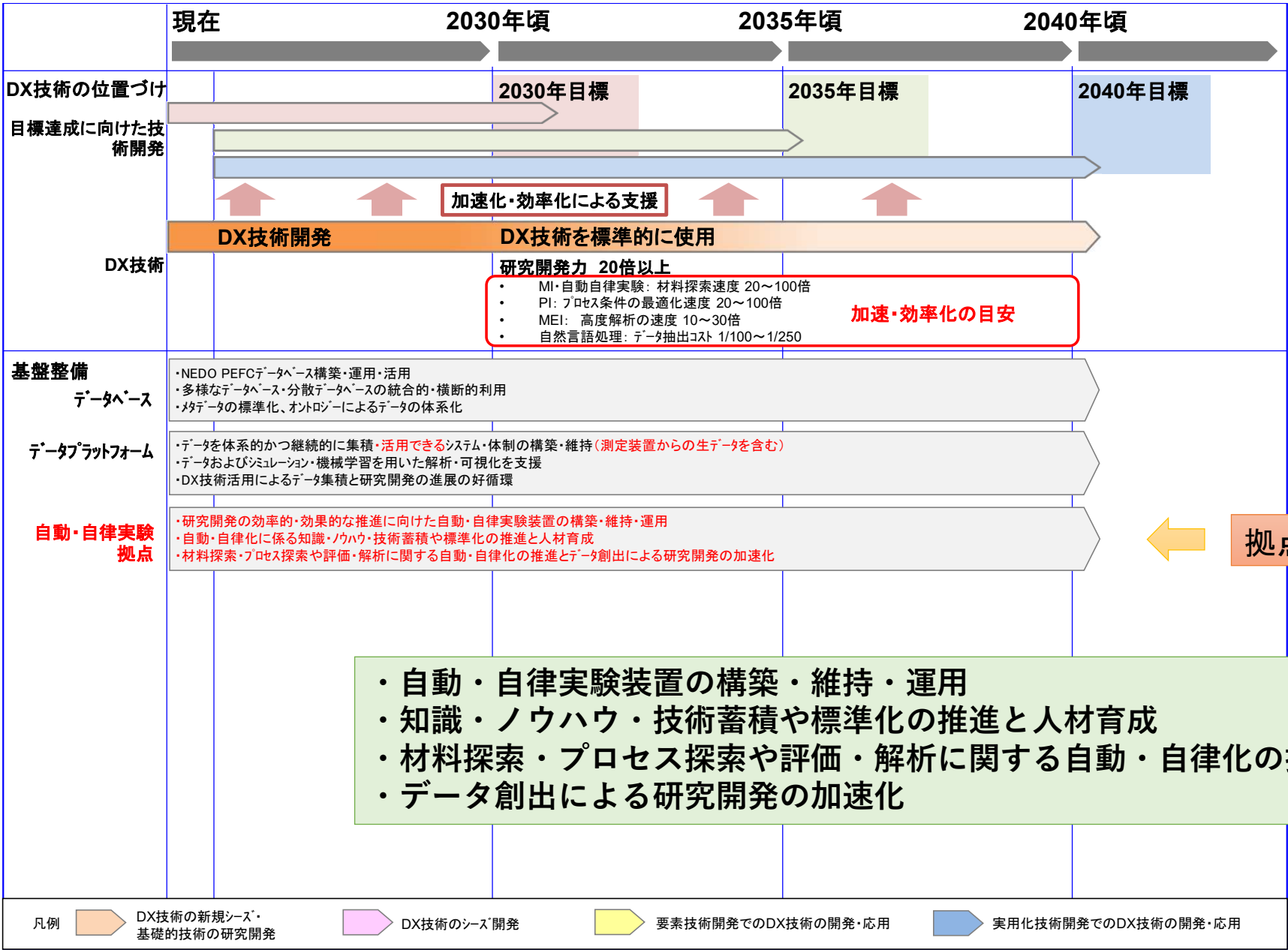
②【技術開発の対象は変更なし】

- インフォマティクス(MI/PI/MEI)
- 自動・自律実験
- 計算技術・モデル化技術
- 自然言語処理

②【技術開発内容の変更点】

- MI: 記載内容を整理
- PI、自動・自律実験: 検討をもとに具体化
- MEI: 軽微な修正
- 計算技術・モデル化技術: 変更なし
- 自然言語処理: 全体的に前倒し、大規模言語モデルを追加

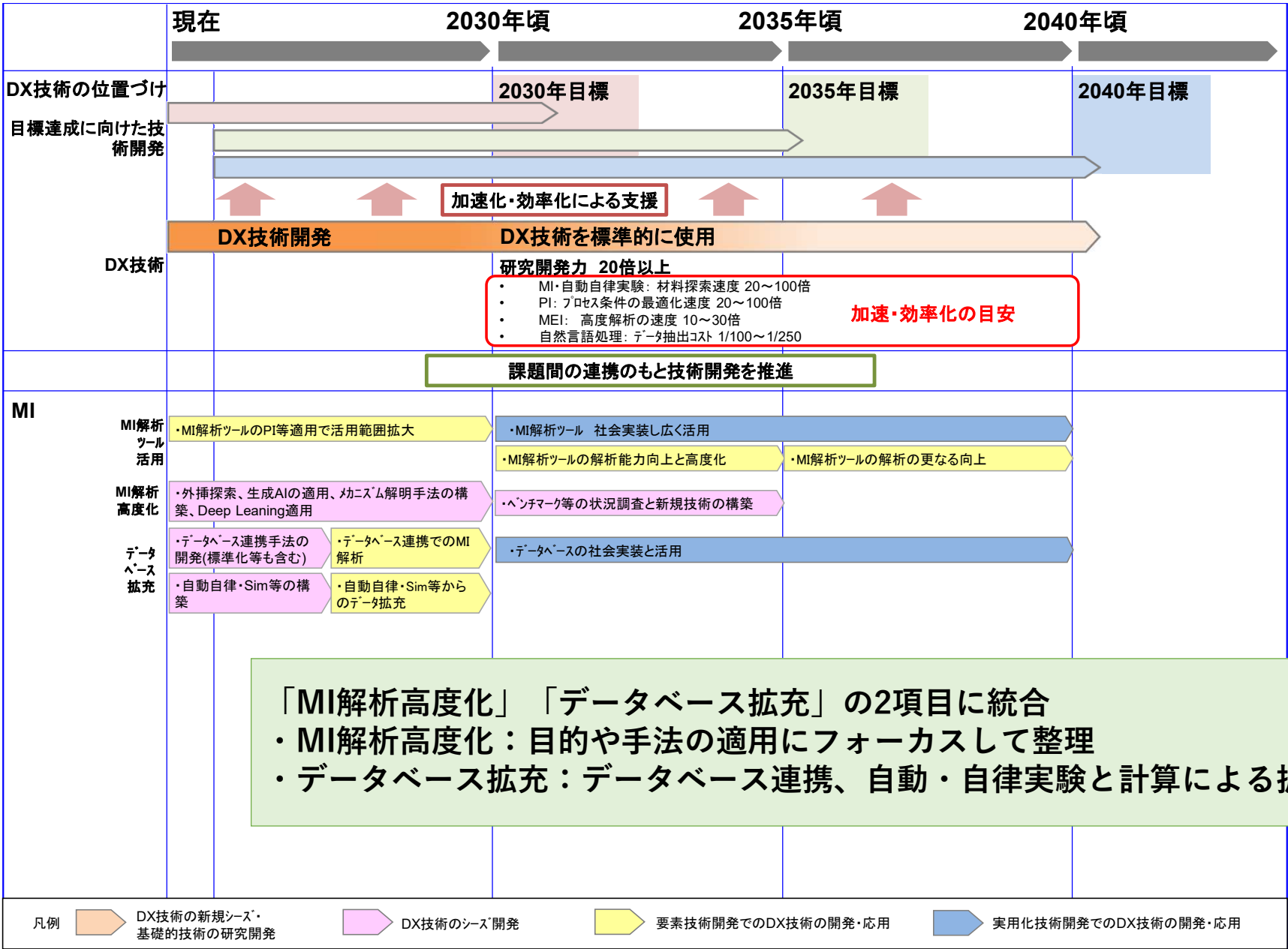




2024年度版

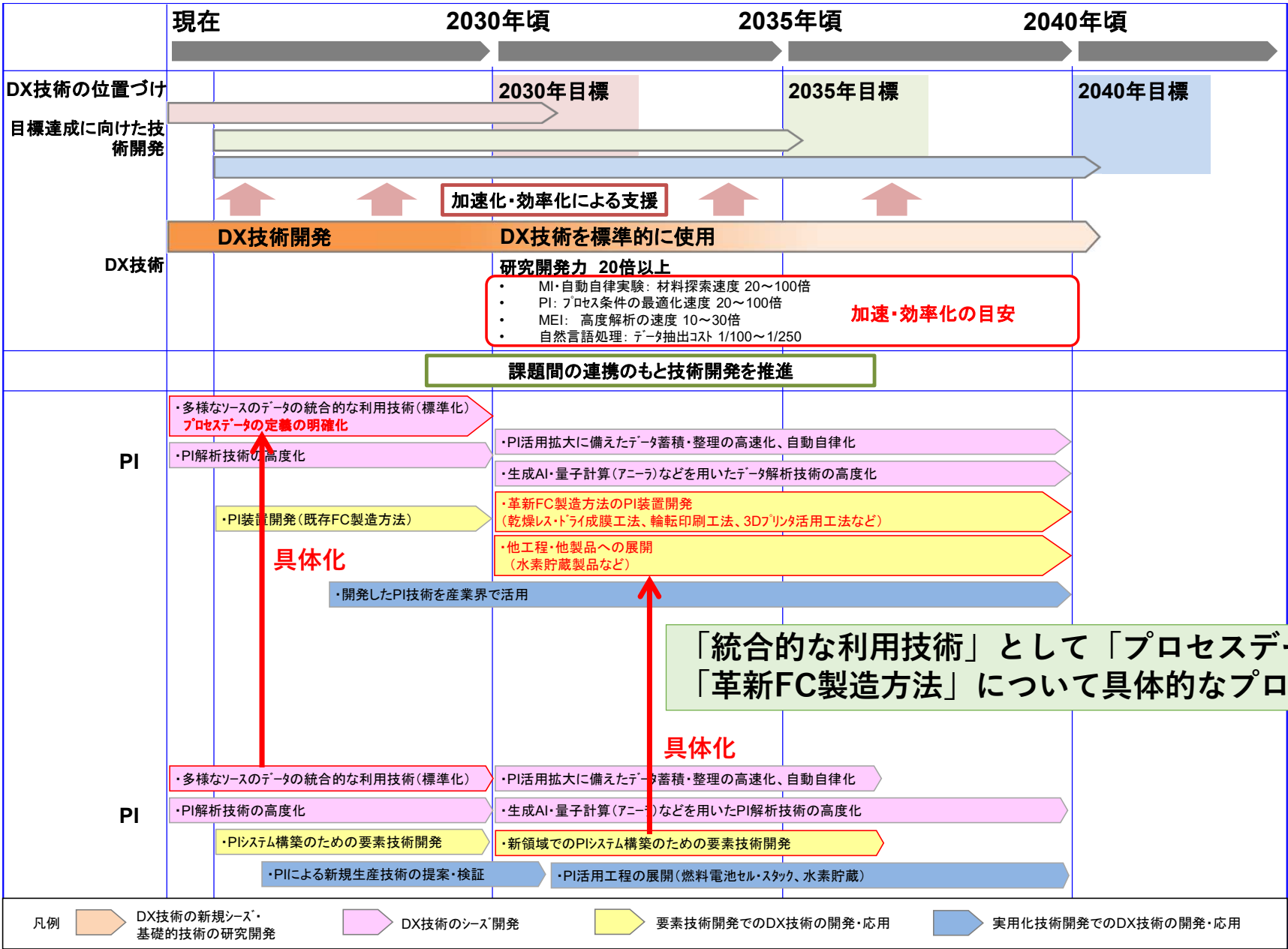
拠点形成について記載

- 自動・自律実験装置の構築・維持・運用
- 知識・ノウハウ・技術蓄積や標準化の推進と人材育成
- 材料探索・プロセス探索や評価・解析に関する自動・自律化の推進
- データ創出による研究開発の加速化



MI

2024年度版

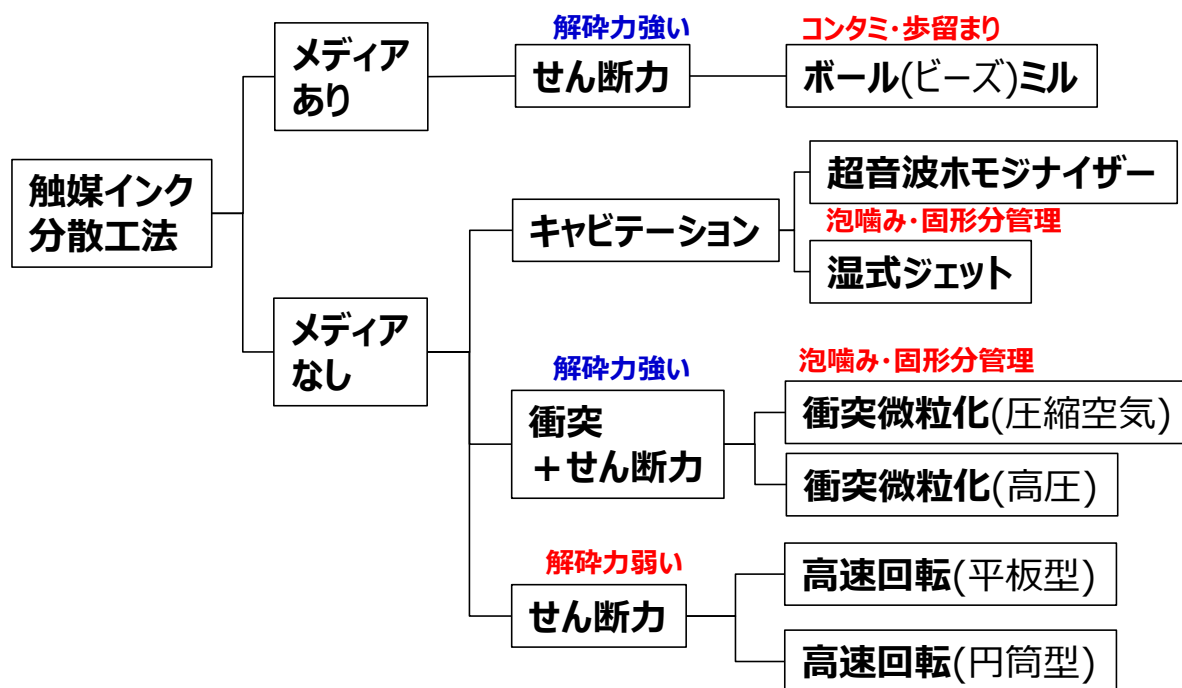


PI

2024年度版

2023年度版

例：インク分散工法



パラメータ (温度FIX)

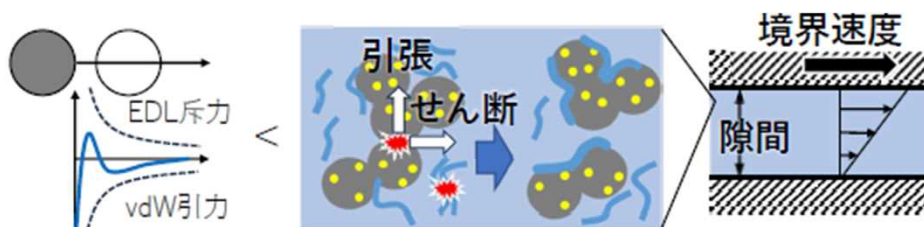
- …ボール、回転速度、時間
- …圧力、隙間、距離、時間
- …圧力、隙間、距離、時間
- …圧力、隙間、時間
- …圧力、隙間、時間
- …隙間、回転速度、時間
- …隙間、回転速度、時間

データを蓄積しても
他工法を使っている
人には活用できない

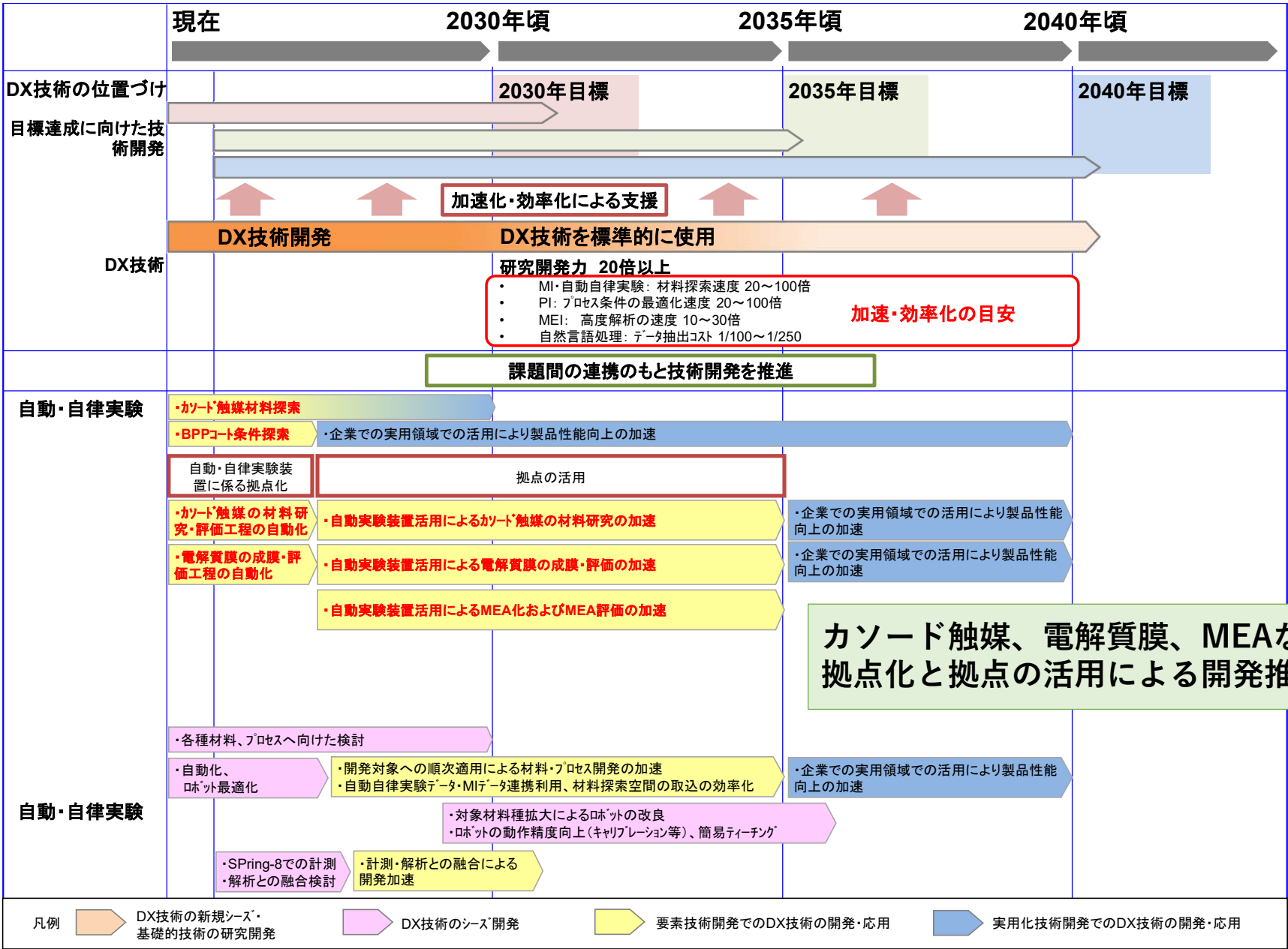


データ蓄積が進まない

課題：物理パラメータ規定



工法・設備によらない本質的な
物理パラメータを取得できる計測技術が必要



自動・自律実験

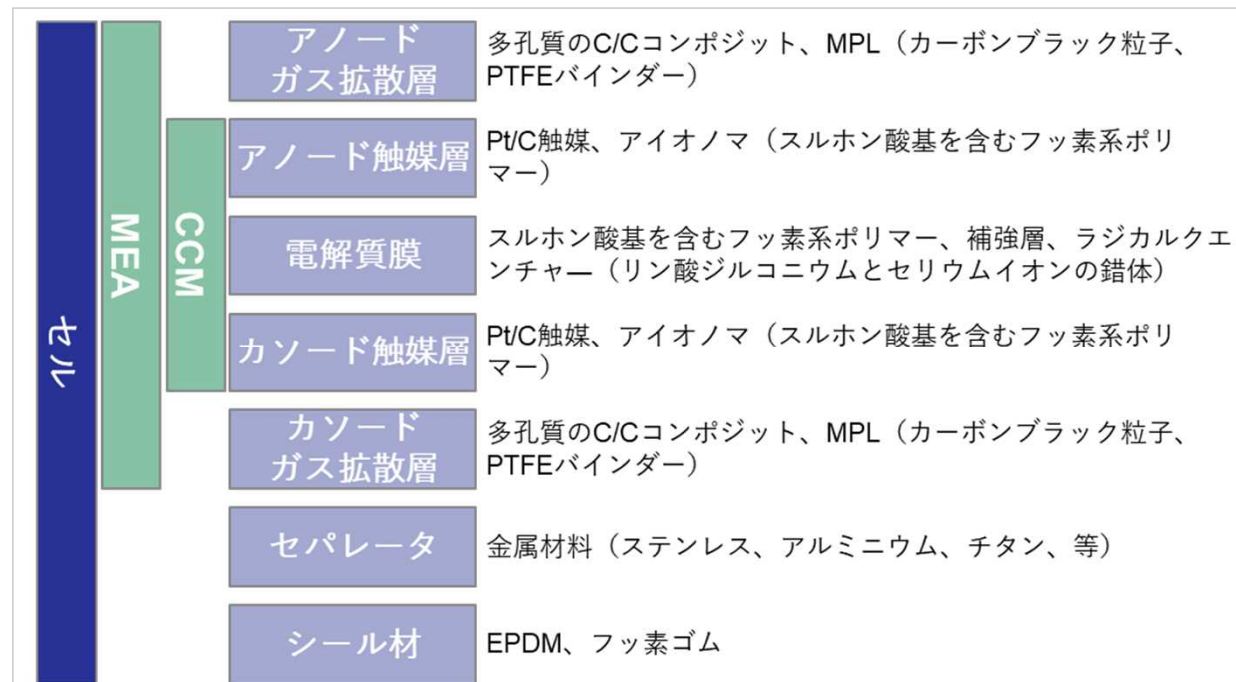
2024年度版

2023年度版

- 燃料電池の部材・材料における自動自律化の優先度を検討
- ロードマップの材料目標達成に向けて課題解決の難易度が高いものを材料開発のボトルネックに設定

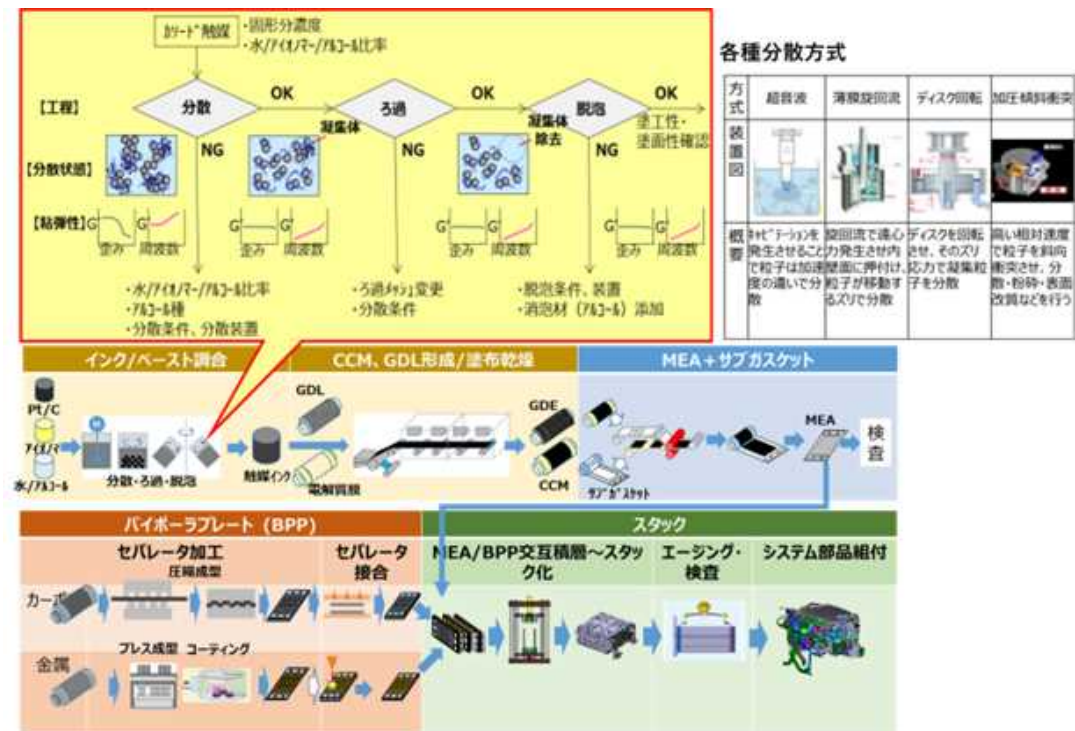
- 燃料電池材料、及び生産工程全般に詳しい民間企業研究者にヒアリングを実施。得られた情報は以下の通り。
 - 部材・材料開発は、燃料電池自動車のモデルサイクル(5年)に併せて開発を進める。
 - ボトルネックの考え方として、燃料電池技術開発ロードマップの材料目標達成に向けた課題解決の難易度が高いものの方が開発の優先度は高い:
 - Aランク: **カソード触媒層、電解質膜**
 - Bランク: セパレータ(腐食)、シール材(耐熱性)
 - Cランク: カソードガス拡散層
 - Dランク: アノード触媒層、アノードガス拡散層

燃料電池部材・材料の整理



- 燃料電池のプロセス開発における自動自律化の優先度を検討
- 生産工程の中で順序が早い工程で必要となる材料・プロセスや、目標達成に向けた課題解決の難易度が高いものをプロセス開発のボトルネックに設定

- 燃料電池材料、及び生産工程全般に詳しい民間企業研究者にヒアリングを実施。得られた情報は以下の通り。
 - 生産工程を確立していく上で、必要となる各種材料・プロセスについて同時並行で検討と最適化を進める(1年間で結論を出す)。
 - 生産工程の中で順序が早い工程で必要となる材料・プロセスや、目標達成に向けた課題解決の難易度が高いものの方が開発の優先度は高い:
 - Aランク:「CCM, GDL形成/塗布乾燥」、「MEA+サブガスケット」、「セパレータ加工圧縮成形」
 - Bランク:「インク/ペースト調合」、「セパレータ接合」
 - Cランク:「MEA/BPP交互積層〜スタック化」、「エージング・検査」、「システム部品組付け」
 - 加えて、工程がマニュアル化されているものの方が自動化しやすい:
 - 「インク/ペースト調合」、「CCM, GDL形成/塗布乾燥」
 - 自動・自律化の候補:「**CCM, GDL形成/塗布乾燥**」



- 自動自律化の優先度が高い部材・材料・プロセスの自動化について、材料研究者にヒアリングした結果、材料ごとに合成装置や評価装置が異なるため、それぞれで装置開発が必要⇒部材・材料・プロセスごとに自動実験装置を構築・拠点化し、構築された装置は他の研究者とシェアリングすることが望ましい

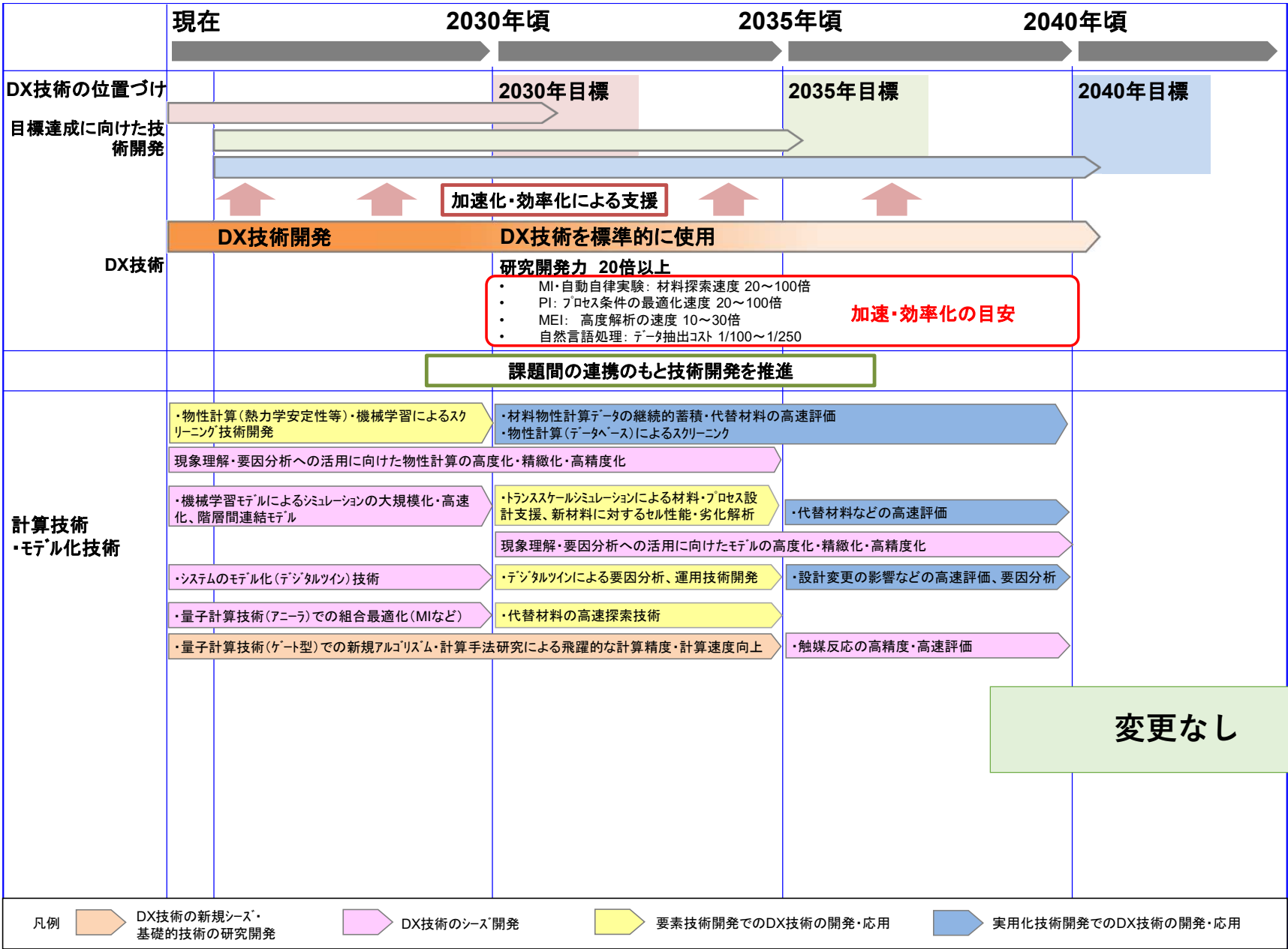
拠点化のメリット・デメリット

	項目	内容
メリット	協調の必要性	実験の自動自律化を行うためには、対象領域(材料)・ロボット・AIの研究者、プロセス装置・分析機器・評価装置・ロボットのメーカー、システムインテグレーターの協働が必要であり、さらに全体を監修できるスーパーバイザーも重要である。
	ノウハウの蓄積と共有	実験の自動自律化への取り組みは多いとはいえ、ノウハウを蓄積して行く必要がある。また蓄積したノウハウを共有し、有効活用していくことも必要である。
	標準化	自動自律実験の適用拡大のためには、サンプルホルダー、治具、ツール、データ、ソフトウェア、通信制御、評価法、運用法などの標準化も必要である。
	人材・企業の確保	- 実験の自動自律化について経験のある研究者・企業が現状では多くないため、少数の人材・企業を有効に活用していく必要がある。 - 自動自律実験を本格的に稼働させる時には、装置の維持・運用を行う技術員が必要。これらの技術員は、自動自律装置についての一定水準の知識・スキルを持つ必要があるが、現状では、育成により確保していく必要がある。
	継続性	2040年を見据えたとき少なくとも2035年ごろまで10年以上自動自律実験を継続する必要がある。継続的な人材の確保、設備の維持・更新や、そのための安定財源の確保、研究の評価基準の変化にも対応していく必要がある。
デメリット	装置利用タイミング	研究者が必要と考える所望のタイミングで装置を使用することができない可能性がある。
	アクセス	拠点から遠地となる研究者にとってはアクセスが不便になり、アクセスに時間がかかる。(リモートラボ化が進めば解消の可能性。)



大学の研究室





計算・モデル化

2024年度版

2023年度版

- 技術開発目標の達成に向け、研究開発を加速するためのDX技術開発の推進体制について検討
- 自動・自律実験/PIに関わる拠点(自動・自律実験拠点)をロードマップに追加、研究開発を中長期にわたり加速する基盤として位置づけ
- 自動・自律実験/PIの技術開発について踏み込んで検討し、技術開発の対象を具体化してロードマップに記載