

NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026 プログラムNo.603-2-06

水素利用拡大に向けた共通基盤化のための研究開発事業/
燃料電池・水電解の共通基盤技術開発/
DXおよびマテリアルズ・インフォマティクスを用いた
燃料電池・水電解材料の研究開発

発表： 2026年7月22日

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

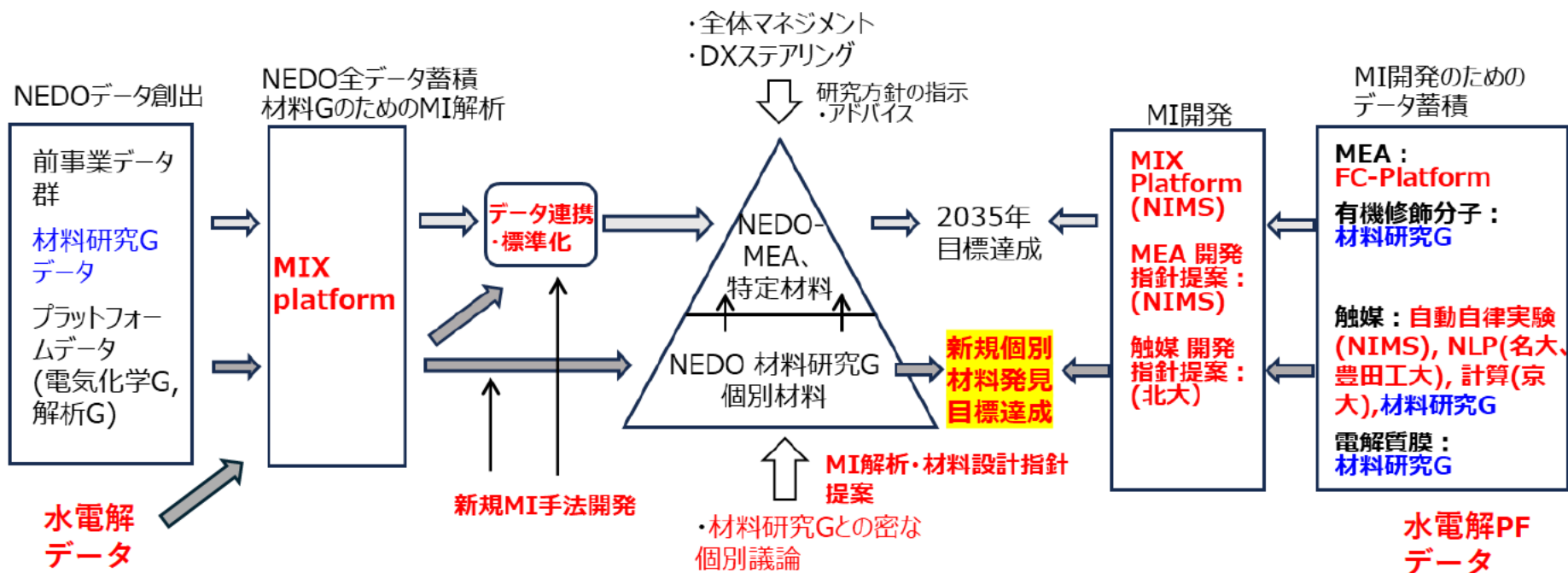
発表者名 袖山慶太郎

*団体名（国研）物質・材料研究機構、（国）北海道大学、（国）京都大学、（国）名古屋大学、（学）豊田工業大学、早稲田大学

問い合わせ先 物質・材料研究機構 E-mail: SODEYAMA.Keitaro@ nims.go.jp

DX・MIグループ活動内容

- ・ 各事業者のデータを蓄積
- ・ データのMI解析を実施⇒事業者にフィードバック



グループ体制

1 MIデータ解析

袖山 慶太郎(NIMS・グループリーダー)
高橋 啓介(北海道大学)

2 スペクトル計算

田中 功(京都大学)
山本 知之(早稲田大学)

3 テキストデータマイニング

旭 良治(名古屋大学)
佐々木 裕(豊田工業大学)

4 自動自律実験

富中 悟史(NIMS)

Contents

- データ蓄積と電気化学解析、MI解析ができるサービス
⇒ MIX Platformの現状について紹介
- MI解析実施例の紹介
⇒
 1. 多元系合金触媒
 2. 有機修飾系
 3. MEA
 4. 電解質膜
 5. テキストデータマイニング
 6. データ標準化

MIX Platformによるデータ蓄積と活用

- NEDO燃料電池・水電解事業のデータを蓄積・活用するDXプラットフォーム (ウェブアプリ)
- ウェブブラウザ(Chrome推奨)でURL(<https://v4.pefcdb.app>) にアクセス

データ蓄積

実験データ ➡ MIX Platform

ドラッグ & ドロップ

実験条件 ➡ MIX Platform
データ 入力フォーム
(メタデータ)

計測依頼 ➡ MIX Platform

入力フォーム

➡ 申請書を自動作成してプラットフォームへ自動送信

データ活用

蓄積データ ➡ MI解析

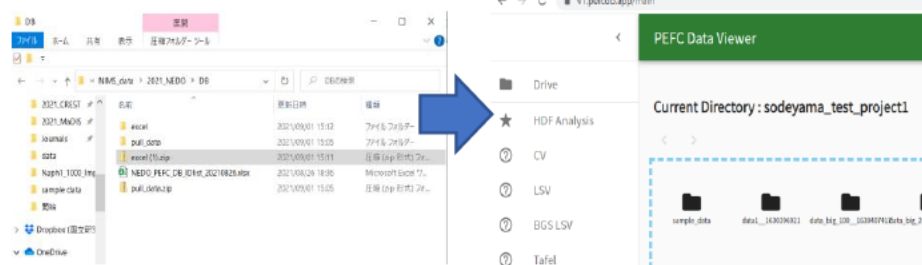
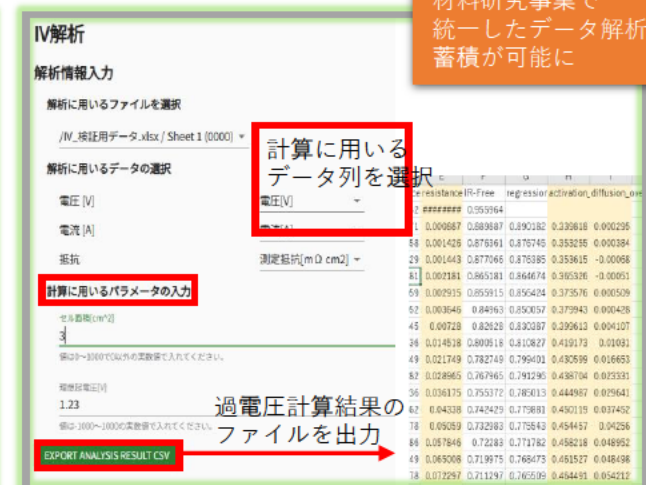
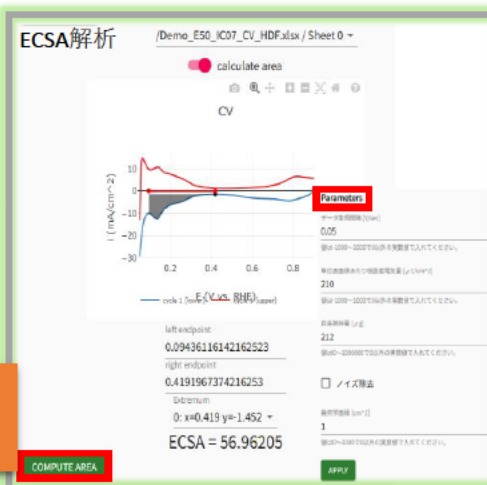
GUI(ブラウザ操作)

蓄積データ ➡ 電気化学解析
(実験生データ)

GUI(ブラウザ操作)



エクスプローラー

COC COC解析 従った解析を
操作のみで実

材料研究事業で
統一したデータ解析・
蓄積が可能に

過電圧計算結果の
ファイルを出力

MIX-Platformによるデータ蓄積と燃料電池材料評価での活用しやすさ向上

データ解析 (MIX Platform)

相関係数のヒートマップ(Pearsonの相関係数)

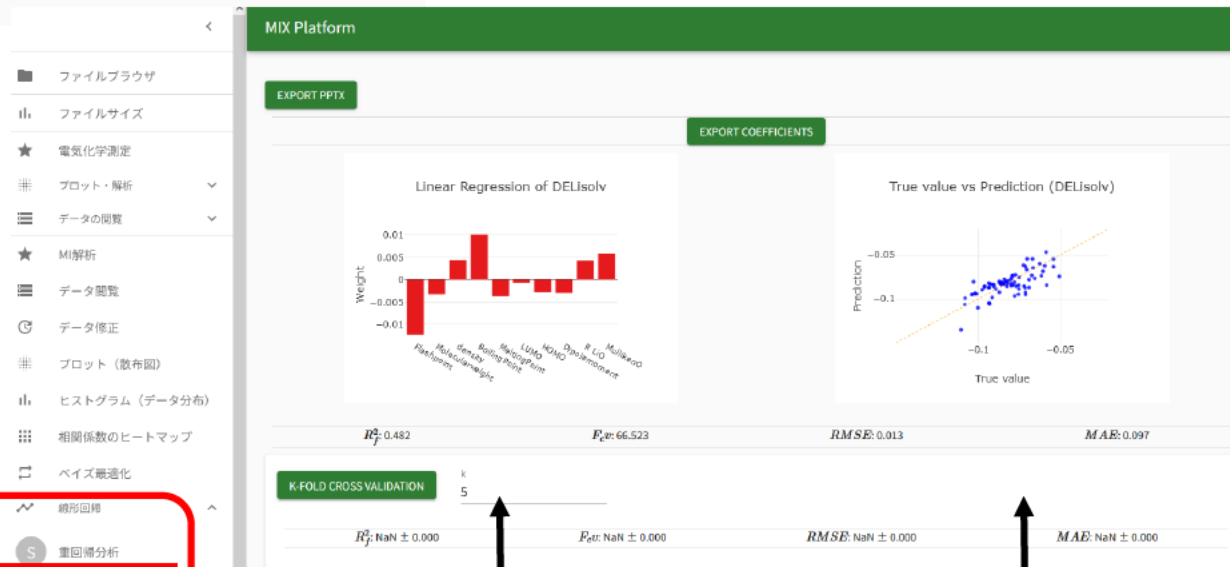
MIX Platformデータ数 :
28850ファイル
(解析G 9802ファイル,
電気化学G 9797ファイル)
(2026.04.13)



線形回帰分析(重回帰分析)

MI解析パート

線形回帰パート



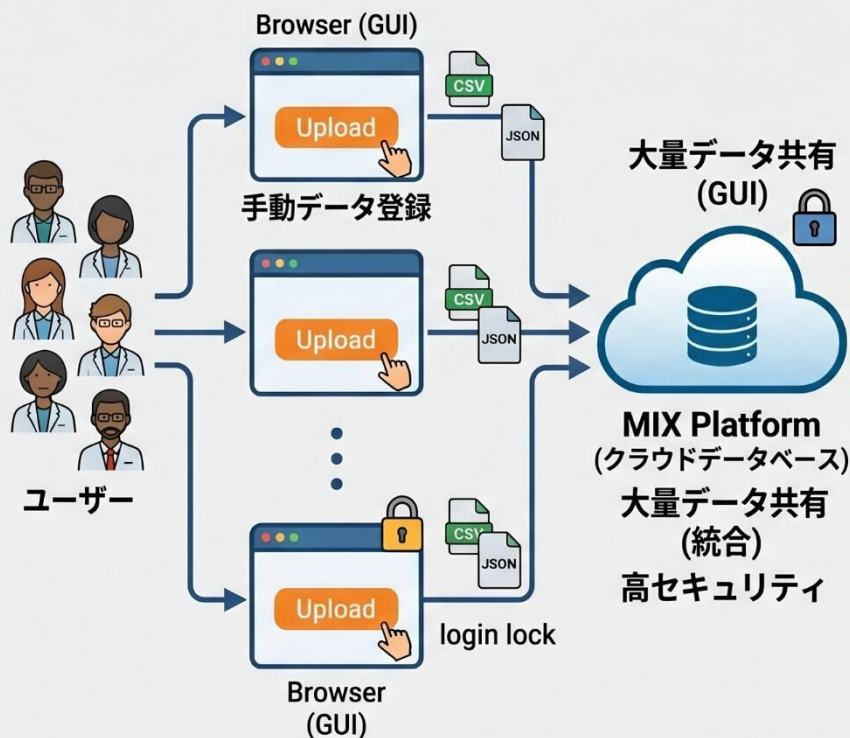
特徴量抽出
(重要な特徴量を描画)

アップロードした実験値と
回帰による予測値を比較

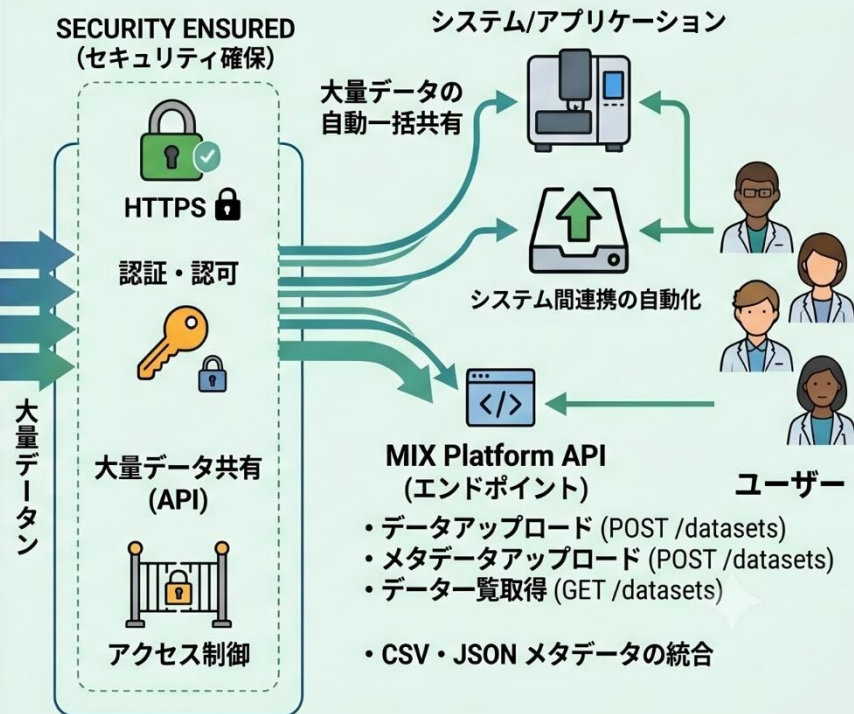
自動自律実験や文献解析など大量のデータを扱うためにAPIを構築（テスト段階）。

データ戦略：MIX Platformへのデータ統合アーキテクチャ

ブラウザ（GUI）手動登録機能



APIによるシステム連携・自動登録機能



MI解析実施例紹介: 非白金水素酸化触媒の組成探索

- MI解析(アクティブラーニング)により、白金を含まない触媒組成を探索

ACS **APPLIED**
ENERGY MATERIALS

www.acsaem.org

Letter

北海道大学
加藤先生、八木先生

Machine Learning-Assisted Development of Platinum-Free RuNiCo Nanocages for Electrocatalytic Hydrogen Oxidation Reaction in Acidic Media

Colin A. Tadgell, Masaru Kato,* Sae Dieb, Keitaro Sodeyama, Takahito Hoshi, Koshiro Suzuki, Bohao Du, Takeshi Watanabe, and Ichizo Yagi*



Cite This: *ACS Appl. Energy Mater.* 2025, 8, 14052–14057



Read Online

ACCESS |



Metrics & More



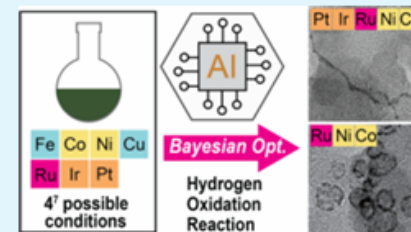
Article Recommendations



Supporting Information

ABSTRACT: Through data-driven synthesis involving 24 experiments from 16,384 possible combinations (<1%), we developed two optimal electrocatalysts for the hydrogen oxidation reaction (HOR) in acidic media: PtIrRuNiCo nanowires and Pt-free RuNiCo nanocages. The objective function obtained in the Bayesian optimization (BO) process is highly correlated with the experimental current density for the HOR. The RuNiCo nanocages exhibited higher HOR activity than Ru because of the suppression of the surface oxide formation. Our BO-assisted approach accelerates the development of highly active electrocatalysts without requiring high-throughput synthesis.

KEYWORDS: Hydrogen oxidation reaction, Electrocatalyst, Bayesian optimization, Platinum-free catalyst, Nanocage, Nanowire, Polymer electrolyte fuel cell

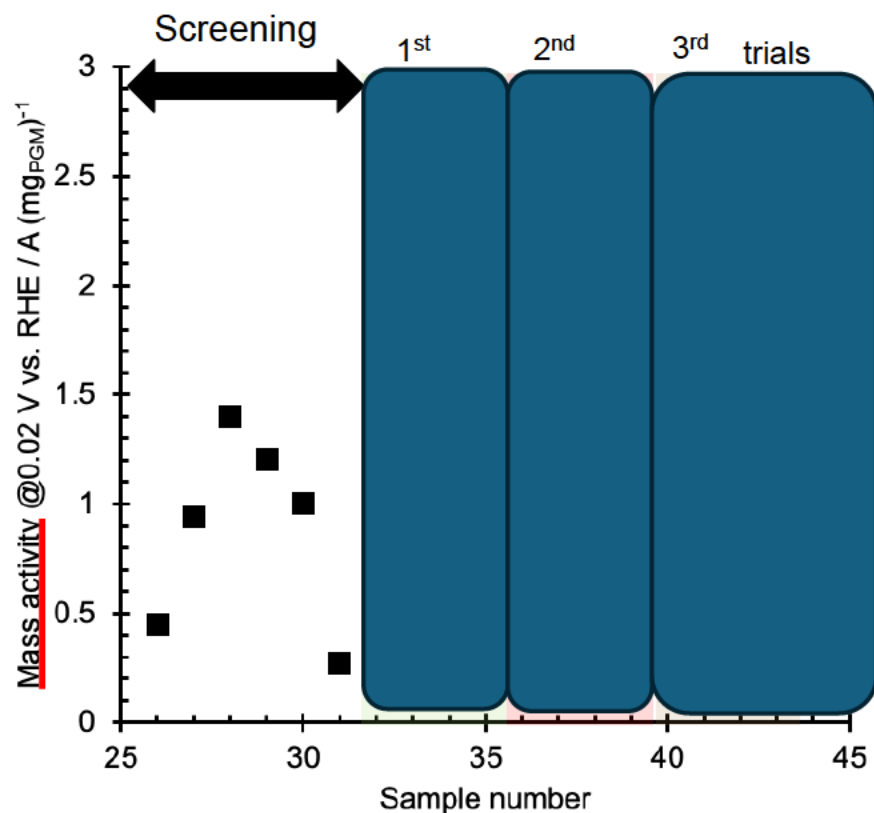


非白金水素酸化触媒の組成探索

・非白金触媒の**アクティブラーニング**による探索

⇒ 1. 触媒活性を最大化

2. 白金量を最小化



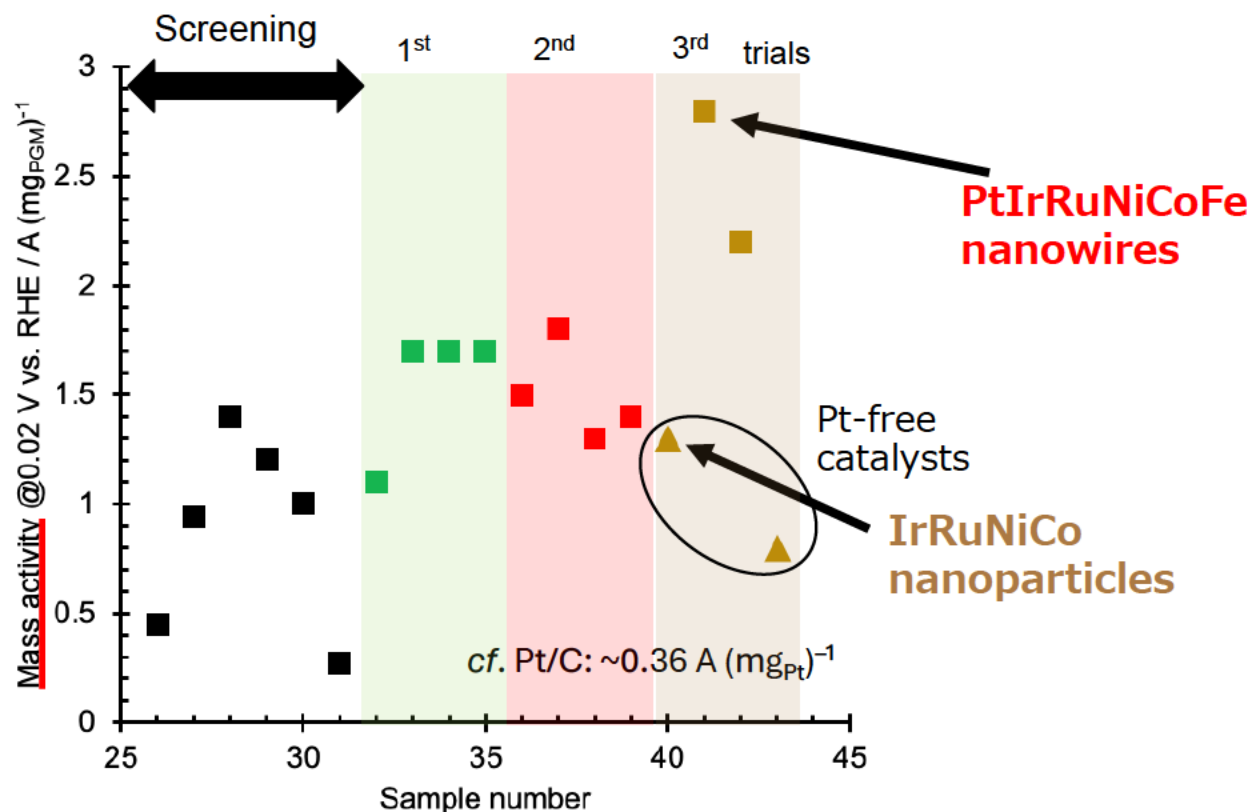
Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

非白金水素酸化触媒の組成探索

・非白金触媒の**アクティブラーニング**による探索

⇒ 1. 触媒活性を最大化

2. 白金量を最小化



Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

・白金触媒であるが、MAが高いものを探索できた。

・非白金触媒で活性があるものを実験的に探索した。

新規表面修飾分子探索

(AIST 五百蔵様)

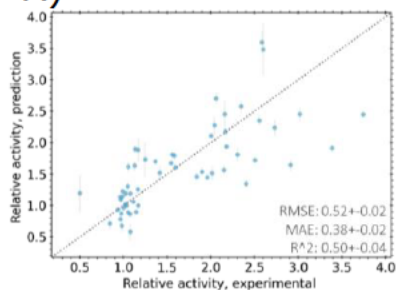
・次に、触媒活性が高くなると予測されるような新規分子をAIで自動生成(提案)。(SMILES-X)

	Chemical structures	SMILES	solvent	concentration	Efficiency ratio @0.9V
Acetone blank					0.9V活性1.0
Water blank					0.8006678
1BuTAP		<chem>CC(C)(C)C1=CC2=NC1=NC(N3)=CC(C)(C)C=C3N=C(C)C(C)(C)C(C)C(N)=C6C=C(C)(C)C(C)C(N5)=N2=N4</chem>	acetone	0.7mM	1.71313322
Au3BuTAP		<chem>CC(C)(C)C1=CC2=NC3=C1=NC4=C(C)(C)(C)C=C(N)=C5C=C(C)(N=C6C=C7C(C)(C)C(N8)=N58)C(C)(C)C(N4)(Au3)8N6C7=N2(C</chem>	acetone	0.7mM	1.50760477
Cu3BuTAP		<chem>CC(C)(C)C1=CC2=NC3=C1=NC4=C(C)(C)(C)C=C(N)=C5C=C(C)(N=C6C=C7C(C)(C)C(N8)=N58)C(C)(C)C(N4)(Cu3)8N6C7=N2(C</chem>	acetone	0.7mM	1.90039387
Cu3BuTAP		<chem>CC(C)(C)C1=CC2=NC3=C1=NC4=C(C)(C)(C)C=C(N)=C5C=C(C)(N=C6C=C7C(C)(C)C(N8)=N58)C(C)(C)C(N4)(Cu3)8N6C7=N2(C</chem>	acetone	0.7mM	1.40379395
Ru3BuTAP		<chem>CC(C)(C)C1=CC2=NC3=C1=NC4=C(C)(C)(C)C=C(N)=C5C=C(C)(N=C6C=C7C(C)(C)C(N8)=N58)C(C)(C)C(N4)(Ru3)8N6C7=N2(C</chem>	acetone	0.7mM	1.36353578

・表面修飾分子により、
触媒活性が実験的に
向上

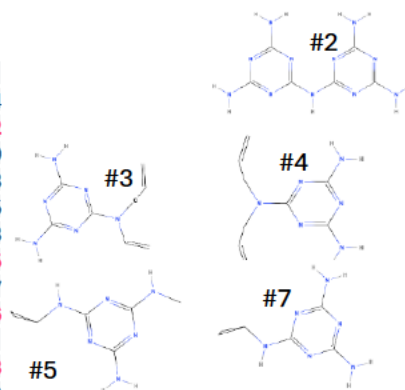
・どんな分子を使えば、
触媒活性がより向上
するか知りたい。

まず、分子構造を与えたら
触媒活性が予測できるよ
うなモデルを構築(SMILES-
X)

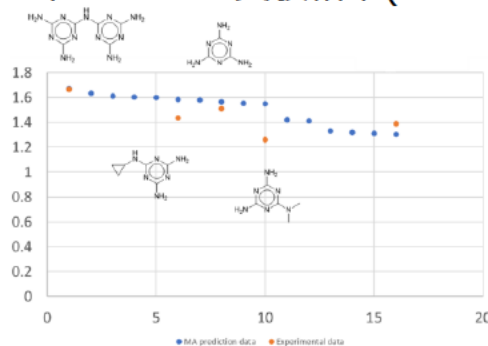


新規提案分子 MAの予測値

##	SMILES	MA @0.9V (mean)
1	<chem>Nc1nc(N)nc(NCCS)n1</chem>	1.771434
2	<chem>Nc1nc(N)nc(Nc2nc(N)nc(N)n2)n1</chem>	1.671992
3	<chem>C=CCN(C=C)c1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.635239
4	<chem>C=CCN(CC=C)c1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.611353
5	<chem>CNc1nc(N)nc(NC2CC2)n1</chem>	1.60315
6	<chem>Cc1nc(N)nc(NN(C)CCS)n1</chem>	1.600283
7	<chem>Nc1nc(N)nc(NC2CC2)n1</chem>	1.582675
8	<chem>C=CN(CC)c1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.57857
9	<chem>Nc1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.564626
10	<chem>CN(C)Cc1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.551461
11	<chem>CN(C)c1nc(N)nc(N)n1</chem>	1.549803
12	<chem>CCCCN(CC)c1nc(N)nc(N)[nH+]1</chem>	1.418749



・提案した分子の実験結果(SMILES-X)

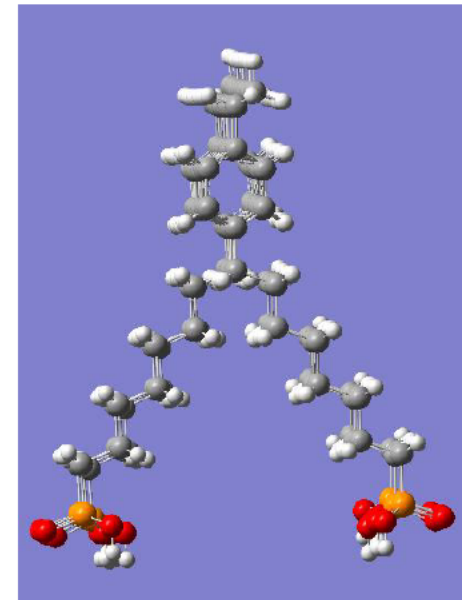
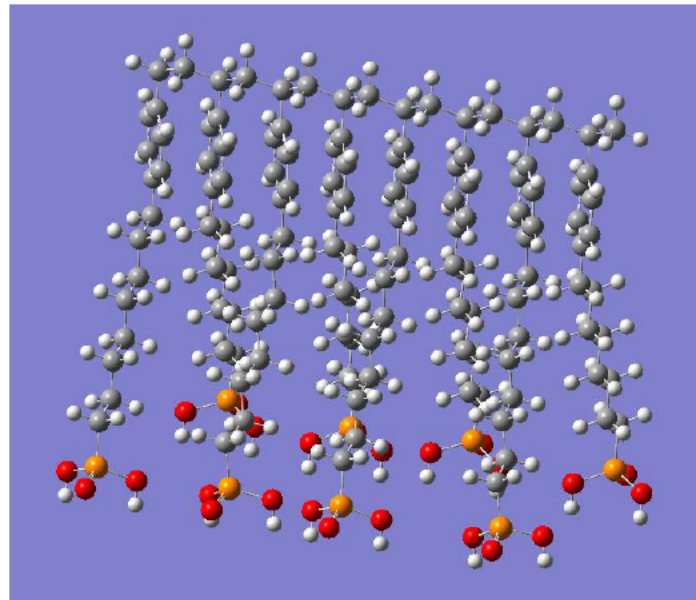
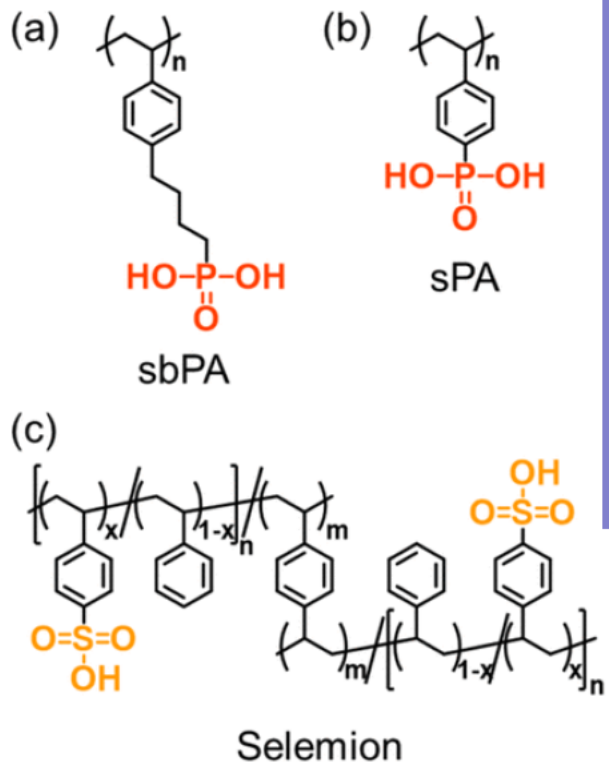


提案した分子の中でMAの
予測値が比較的高いもの
を選び、実験にてMAを測定
⇒高いMAを示すことを確認
できた

電解質膜用ブロックポリマーの最適設計

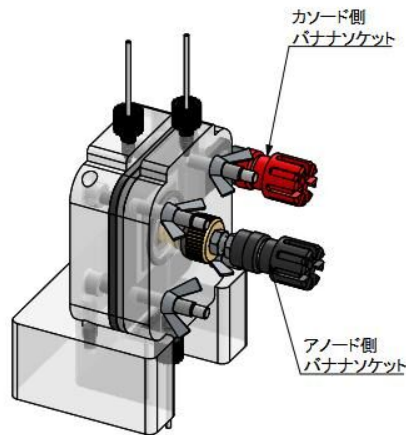
(名古屋大学 野呂先生)

Figure 1



分子モデリングを実施
 ⇒分子サイズでの構造を検討
 ⇒どのようなモノマー構造がプロトン伝導が
 上がるかを大量の計算データから提案予定

ハイスループット燃料電池セルの開発（北海道大学）



アクリル材質による簡易燃料電池セル

- ・アノード/カソードGDL : 0.3~0.4mm厚（東レTGP-H-120）+ 触媒塗工済み膜
- ・GDE（電極塗工済み拡散層）を膜に挟み込む構造
- ・集電板はTiにガラス状カーボンをコート(集電版の耐久性維持のため)
- ・ガスを流す場合の流路:サーペンタイン流路
- ・セルはトルクレンチによる均等な膜厚になるように設計
- ・MEAサイズ:1.0cm²

現在セルの工作中

今後はFC-Cubicの助言をいただきながら簡易セルの性能評価
その後5-10連によるハイスループット燃料電池実験によるMEA及び
多元素触媒データの取得を実施予定

MIによるMEA最適化のため

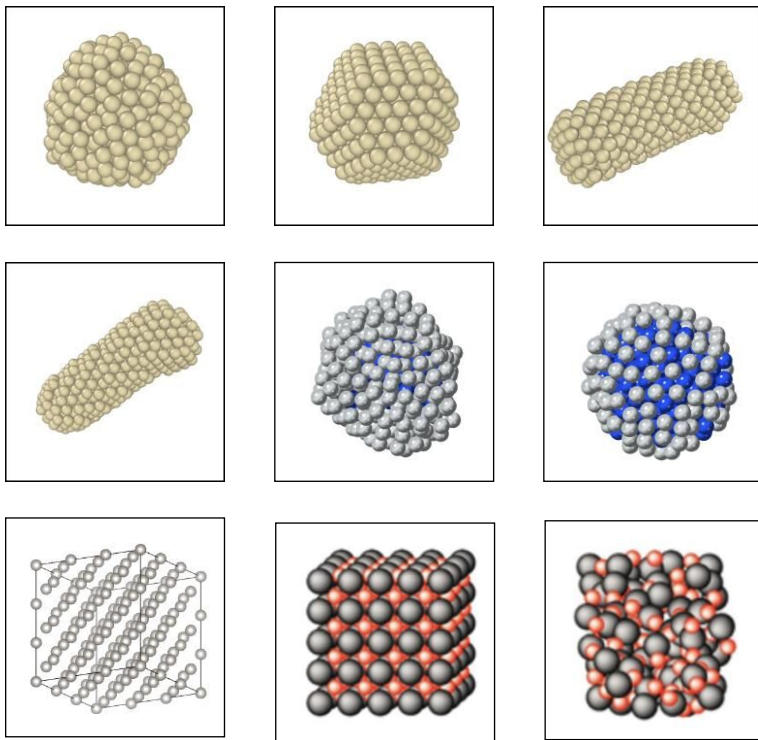
並行してFC-Cubicと連携しデータ取得項目の決定を実施
今後機械学習・ベイズ最適化・ネットワーク法による解析実施予定

種々の構造を持つ貴金属合金の第一原理XANES スペクトルのデータ蓄積 (京都大学、早稲田大学)

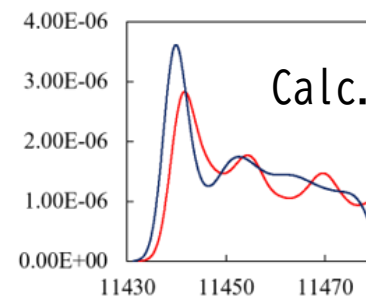
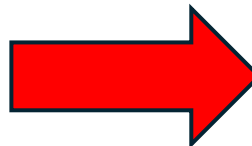
貴金属合金 (Pt, Pd, Ir, Rhなど)
古典MD, 第一原理MD, 機械学習MD
(LAMMPS, VASP, MACE, GPUMD)



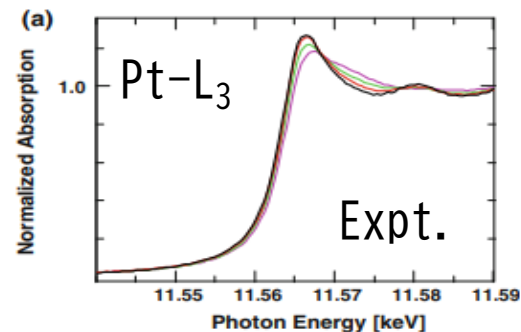
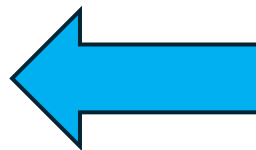
ナノ粒子, ナノロッド, 結晶,
ガラス等のモデル作成



構造からXANES



XANESから構造



内殻空孔効果を取り入れた
第一原理計算によるXANES
スペクトル形状データの蓄積
(VASP, CASTEP, WIEN2k)

テキストデータマイニングによる文献からのデータ抽出 (名古屋大学、豊田工業大学)

➤ 構築したモデルを適用して
約1万件の文献から自動情報
抽出に成功.

➤ アノテーションの改良により
情報抽出量の大幅な増加を
達成. 先行研究と比較すると

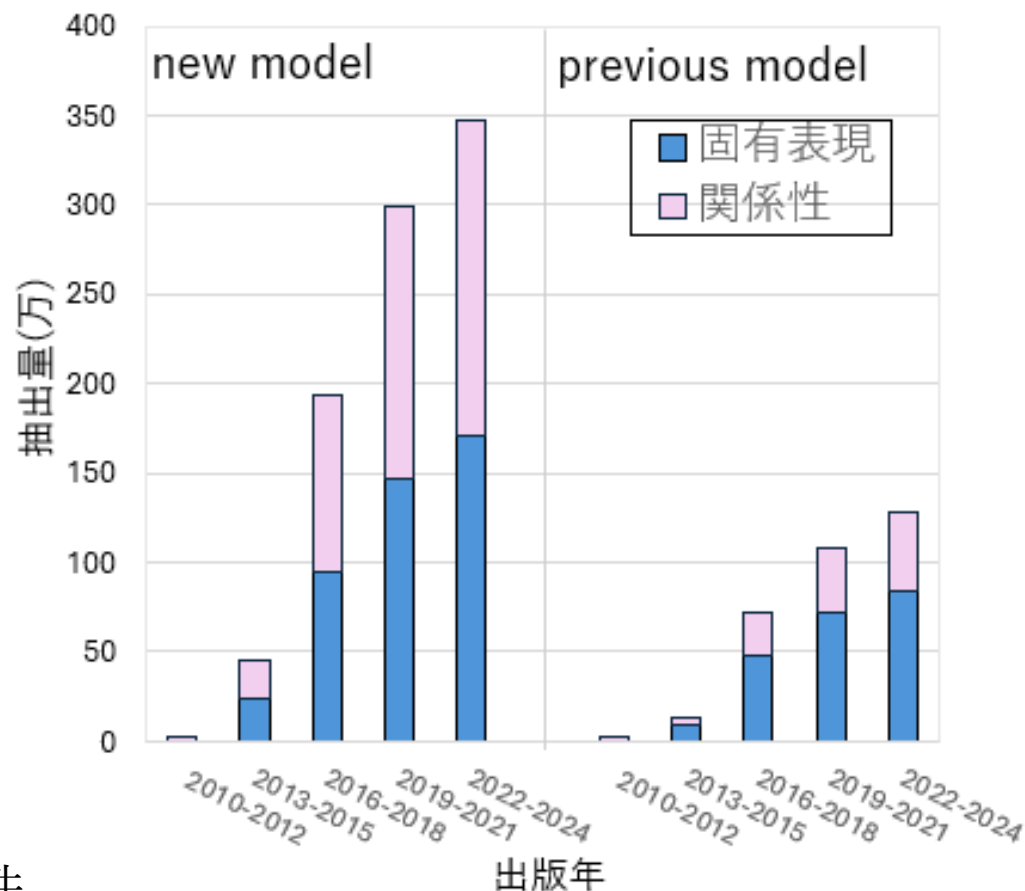
固有表現 : 2.01倍

関係性 : 4.21倍

触媒組成 : 16万件、プロセス : 24万件、
物性 : 82万件を達成

中間目標 (2027年度) :

触媒組成 : 10万件、プロセス : 5万件、
物性 : 20万件



出版年ごとの全情報抽出量の推移

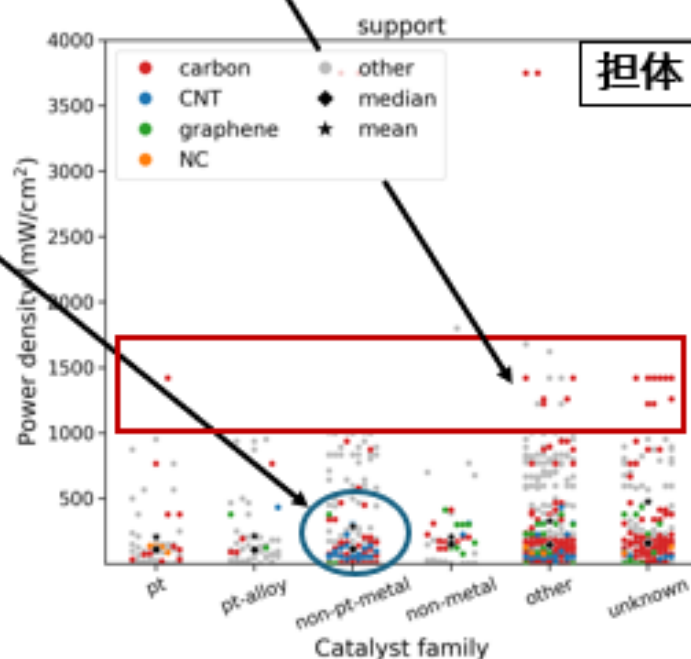
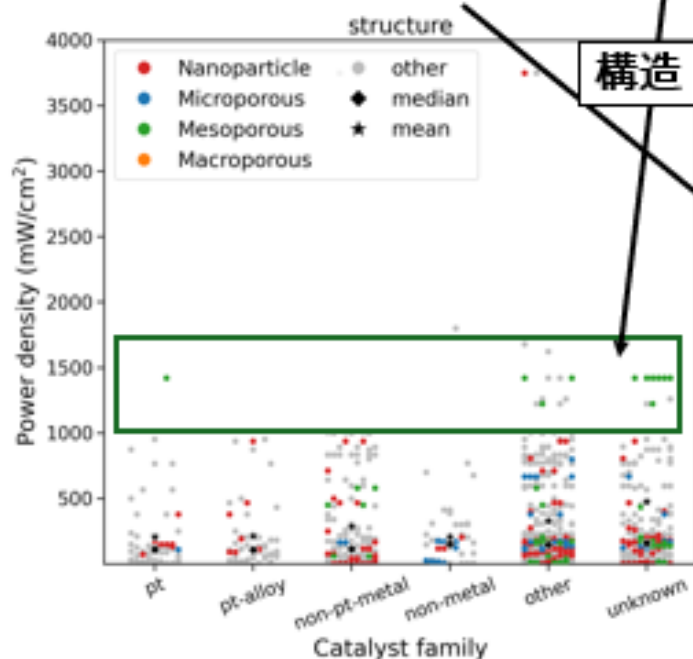
触媒-電力密度の相関分析

<触媒材料の分類>

Pt (55)・Pt合金 (52)・非貴金属 (162)・非金属 (50)・その他 [デバイス] (416)・未分類 (268)

<細孔構造と担体材料の情報抽出>

- 電力密度の高い材料はメソ細孔をもつカーボン担体の使用傾向あり
- 非金属触媒はCNTが多く用いられる



材料語彙の標準化



辞書選択 ▾

QIDまたはラベルで検索

FCシステム語彙

—	Q3994: FCシステム語彙
—	Q5350: 高分子形燃料電池
—	Q3995: セル部材
—	Q3996: MEA部材
—	Q3998: 触媒層
	Q4189: 担持量
	Q4190: I/C比
	Q4191: Pt担持率
	Q4193: 触媒層厚さ
+	Q3999: 電解質膜
+	Q4000: GDL/MPL
	Q4180: CCM
	Q4181: アノード
	Q4182: カソード

FCシステム語彙 > 高分子形燃料電池 > セル部材 > MEA部材 > 触媒層 > 担持量

Q4189: 担持量

語彙ID <http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q4189>

言語	ラベル	説明	
日本語	担持量	触媒層中のPtなどの電極触媒の幾何面積当たりの質量 [mg-Pt/cm ²]。	担持密度
英語	Loading amount	Mass per geometric area of the electrocatalyst, such as Pt, in the catalyst layer.	

データ

単位 (文字列)
mg-Pt/cm², μg-Pt/cm²

関連語彙

▶ 上位語

語彙を統一的に扱うため、リスト化する。
⇒MatVocサービスを利用

まとめ

- データ蓄積と電気化学解析、MI解析ができるサービス
⇒ MIX Platformの現状について紹介した。
⇒ 積極的にご利用ください。利用に関してご連絡ください。
- 以下のMI解析実施例の紹介をした。
⇒ 1. 多元系合金触媒
2. 有機修飾系
3. MEA
4. 電解質膜
5. テキストデータマイニング
6. データ標準化
⇒ 事業者データの解析も行います。