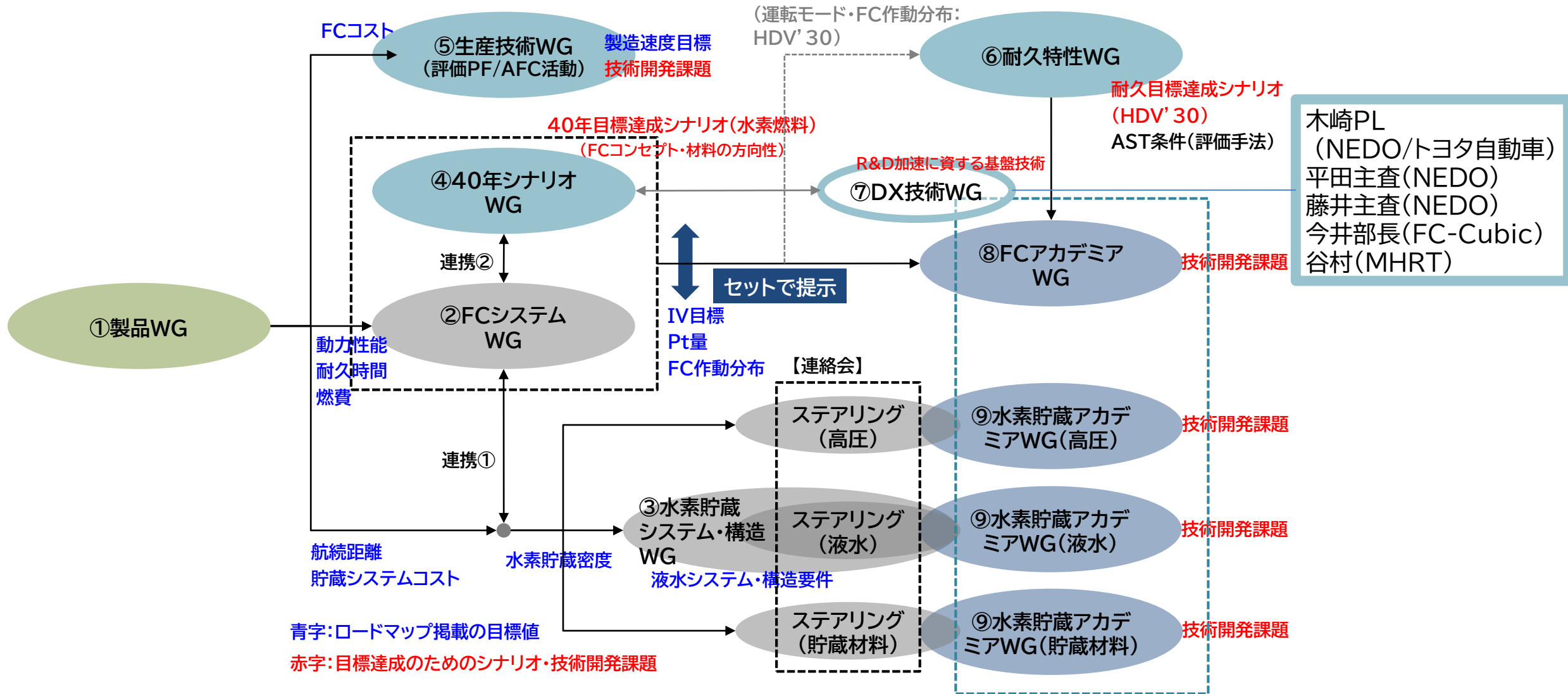


NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップ報告会

# NEDO 燃料電池・水素技術開発ロードマップ (FCV・HDV用燃料電池) 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 スマートコミュニティ・エネルギーシステム部 燃料電池・水素室  
(委託先)みずほリサーチ&テクノロジーズ



各国・地域の研究開発への取り組み

| 国・地域 | 研究開発人材※    | 研究開発費※    | 傾向・方向性など                   |
|------|------------|-----------|----------------------------|
| 欧州   | 189万人(20年) | 45兆円(20年) | グリーン・ディール政策、欧州による水素覇権、脱ロシア |
| 中国   | 227万人(20年) | 59兆円(20年) | 政府による統制、補助金政策、ハングリー        |
| 米国   | 157万人(19年) | 72兆円(20年) | 研究大国                       |
| 日本   | 69万人(21年)  | 18兆円(20年) | 危機意識の弱さ、時流に鈍感              |

※【出典】文部科学省 科学技術・学術政策研究所、科学技術指標2022、調査資料-318、2022年8月

日本の水素・燃料電池技術開発が SDGs・CNにおいて

日進月歩の領域で**世界をリード**するためには(世界に貢献 日本の産業に貢献)

- 1)進化に敏感に魅力ある**目標立案** :①BMC(ベンチマーク) & 戦略議論
- 2)世界に先駆け目標達成できる**開発力** :②DX+解析力 ③人材育成&オープン・イノベーション・コンソーシアム

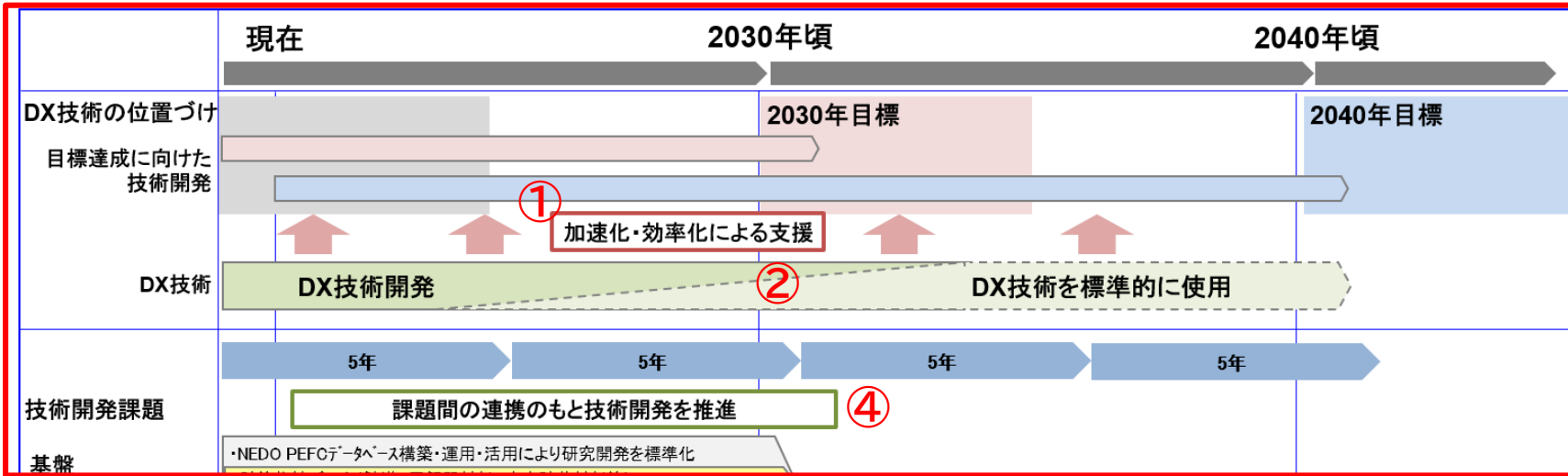
## ■ DX技術開発の目的

例えば2040年までかかるような材料・生産技術開発を10年に短縮し、製品化までの期間を短縮する。  
新材料の探索・発見、生産技術の検討・開発などでデータ駆動を一体化し、デジタル的なPFを作る。

## ■ ロードマップの目的

水素・燃料電池開発における早期DX活用を推進する。  
水素・燃料電池に特有で使えるDX技術の探索&開発を推進する。

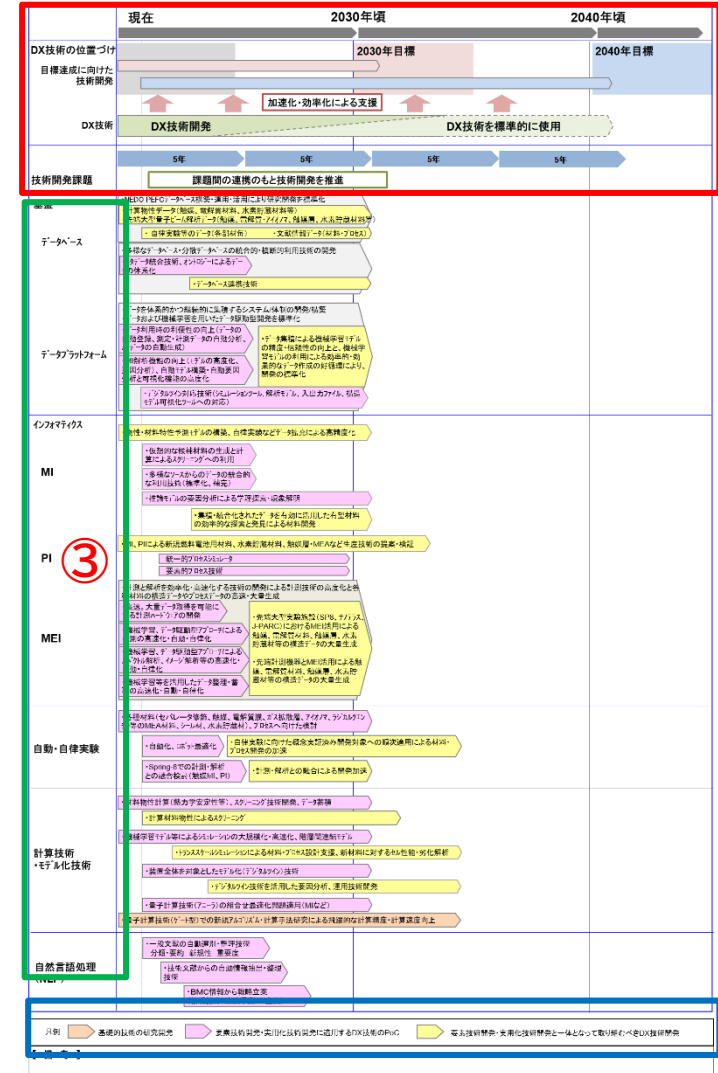
- ① DX技術は、2030年・2040年目標をめざした燃料電池・水素関連技術開発の加速化・効率化のための支援技術
- ② 2030年頃までにDX技術開発を行いながら、開発した技術を順次標準的に使用
- ③ スタック・生産技術・水素貯蔵などの要素技術開発・実用化技術開発に関連し、横断的・共通項目となるような技術として、基盤(データベース、データプラットフォーム)、インフォマティクス(MI、PI、MEI)、自動・自律実験、計算技術・モデル化技術、自然言語処理を設定
- ④ DX技術項目間も互いに密接に関係しており、連携の下で開発を推進



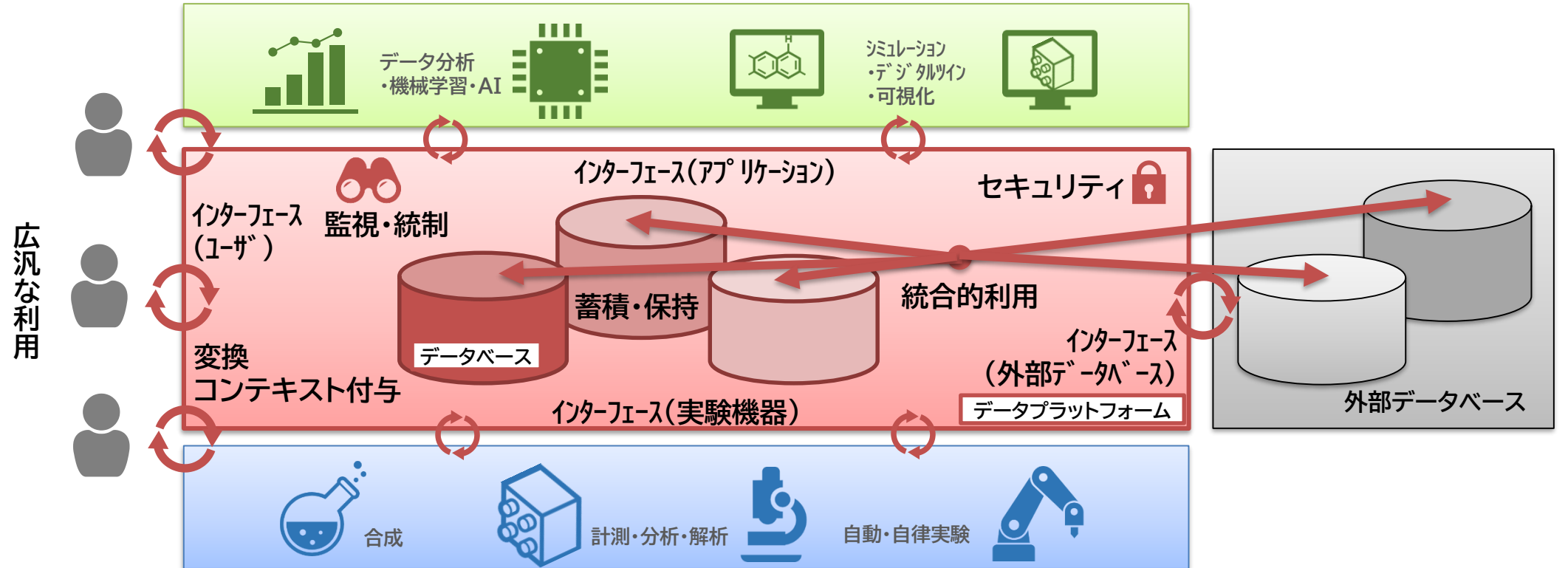
(情報提供 未来予測 立案)

凡例  基礎的技術の研究開発  要素技術開発・実用化技術開発に適用するDX技術のPoC  要素技術開発・実用化技術開発と一体となって取り組むべきDX技術開発

【備考】  ①



- データベース・データプラットフォームは、DXの根幹
- 技術開発に伴い作成されるデータの蓄積・利活用、事業外部のデータを含めた統合的利活用を可能にし、技術開発を推進

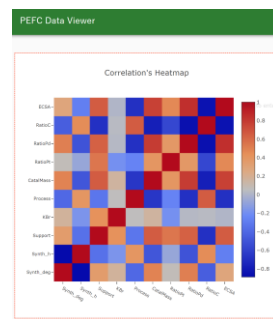
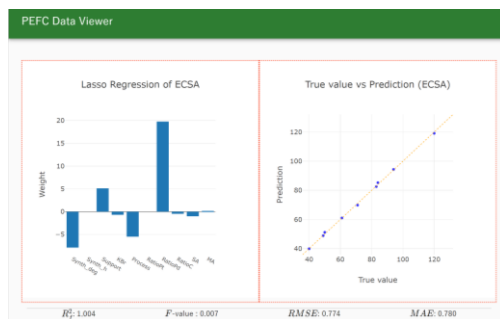


## データベース・データプラットフォームの役割

- ・データの蓄積・保持による広範囲で永続的なデータ利用
- ・多様なデータを統合的に利用できるように変換・コンテキスト付与
- ・データ利用やアクセスに対するセキュリティの確保
- ・データの管理・利用についての監視・統制
- ・ユーザーやアプリケーションでの利用、実験機器からのデータ収集のインターフェースを規定
- ・データ分析、機械学習・AIによる解析やシミュレーション・デジタルツインへの利用

- 燃料電池触媒材料などの計測・解析データ、MI解析機能などNEDO事業で取り組み開始
- 電解質・水素貯蔵材料などの材料開発、触媒層などの部材開発・生産技術開発でのプロセスデータへの対応や、デジタルツインの活用などを見据えた対応が必要
- 多様なデータベースを統合的に利用できるような連携技術が必要

## 【PEFCデータベース、MIXプラットフォーム】

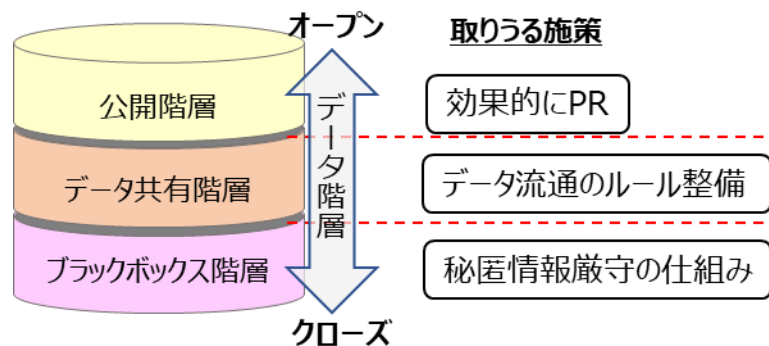
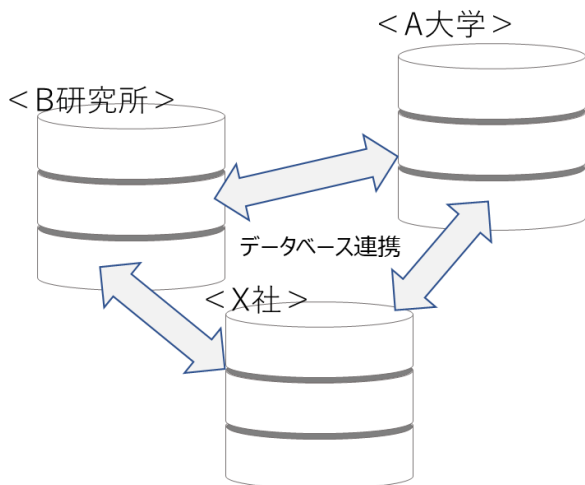


- 燃料電池材料(触媒など)の計測・解析データ
- 共通フォーマットに変換してアップロード
- 基本的なMI解析機能

↓ 拡張・拡充・機能向上

- 電解質、水素貯蔵材料など様々な材料種、触媒層・MEAなど部材等への対応
- MI機能の高度化・高精度化
- 生産工程にかかわるプロセスデータへの対応
- シミュレーションやデジタルツインへの対応

## 【データベース連携技術】



- データ共有階層においては、業界内に利用できる情報を戦略的に抽出する仕組みづくり
- 暗号化技術やプログラムを秘匿したまま計算・機械学習に利用できるセキュリティ対応技術開発



- 触媒材料などの特性・性能予測、設計指針提示を目的としてNEDO事業で取り組み開始
- MIにより、実験データが小規模であること、材料の探索空間が広大であることへの対応、多様なデータの統合的な取扱い(標準化、補完)が必要
- 推論モデルを用いた要因分析による学理探索・現象理解への利用にも期待
- 計算データの利用、自動・自律実験によるデータ拡充にも対応しつつ、電解質、水素貯蔵材料など他の材料にも展開

表:材料開発で期待されるMIの利用方法

| 項目        | 内容   |
|-----------|--|
| 特性・性能予測   | ・物理化学特性の予測<br>・材料性能の予測                         |
| 材料発見・設計   | ・候補リストからの選択<br>・新規組成・分子構造の生成<br>・既存材料の性能・特性を凌駕 |
| 現象の理解     | ・法則の定式化<br>・支配的要因の抽出<br>・分析を容易にする可視化           |
| 合成プロセス設計  | ・合成経路探索・逆合成<br>・プロセス条件探索・最適化                   |
| モデリングの高度化 | ・複雑な現象の代理モデル<br>・高精度・低計算コスト                    |
| 材料構造・特性評価 | ・分析装置で生成されるデータからの情報抽出                          |
| 知見抽出      | ・論文・特許文献からの知見抽出・整理                             |

表:材料開発へのMI適用の課題

| 項目          | 内容   |
|-------------|--|
| 多様なデータへの対応  | ・様々な材料種・異なるラボからのデータ<br>・様々な物性・特性・分析手法などマルチモーダル<br>・様々なフォーマット |
| 小規模データへの対応  | ・実験データが少ない(<100)<br>・広大な探索空間のなかのスパースデータ                      |
| サンプルバイアスの存在 | ・論文化に向かない失敗データが欠如(傾向の学習が難)                                   |
| 予測タスクの特徴    | ・飛びぬけた性能や新奇材料など「規格外」に強い関心<br>・予測モデルの不確実性                     |
| データ統合指針策定   | ・網羅的、十分な情報量があり、柔軟性があるメタデータの定義                                |
| データ共有/知財保護  | ・共有による相乗効果の出現<br>・知財保護のためクローズすることによるサイロ化                     |
| エコシステム構築    | ・多数の関係者が有用性を受け入れ、継続的にデータ蓄積・共有が行われる体制の構築                      |
| 長期維持・管理コスト  | ・DB・モデルバージョン管理・アクセス管理・データマネジメントなどインフラへの多大な投資                 |

出典:下記資料などを基に整理

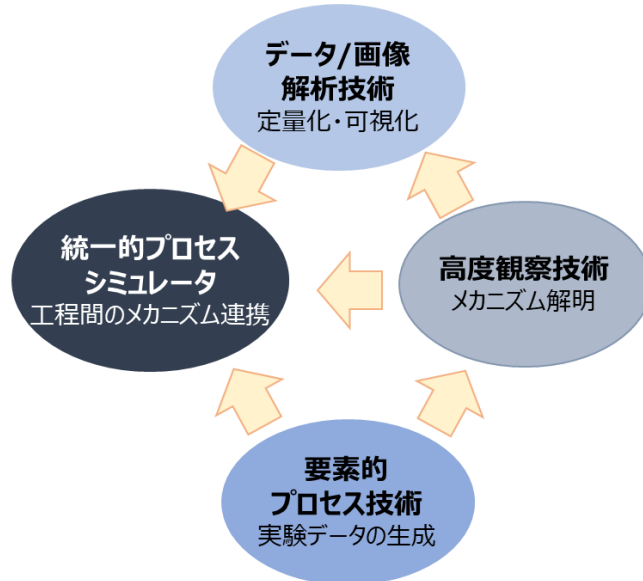
[1] Himanen, Lauri, et al. "Data-driven materials science: status, challenges, and perspectives." *Advanced Science* 6.21 (2019): 1900808.

[2] Morgan, Dane, and Ryan Jacobs. "Opportunities and Challenges for Machine Learning in Materials Science." *Annual Review of Materials Research*, Vol. 50.

[3] Citrine Informatics Inc. "Challenges in Machine Learning for Materials and Chemicals - And how to overcome them." (2020)

- 「物」自体の検討だけでなく、材料合成、部材・製品の製造工程(プロセス)の検討にも現状では多大なリソースを要しており、インフォマティクス活用による加速化・効率化が必要
- MI、MEIなどのインフォマティクスを含め、データ解析・機械学習・シミュレーション、計測・分析技術や自動・自律実験を活用してプロセス技術開発を促進
- 要素的プロセスや複数工程にまたがるようなプロセスの最適化への展開も必要

● PI プロセス・インフォマティクス  
 「材料の形状や化学的な質が時間軸で変化するプロセス設計・制御のためのインフォマティクス技術。サイエンス(物理・化学)に基づき、多工程にわたる製造プロセスの基本設計や、そのスケールアップに活用できる計算科学と実験科学の融合技術」

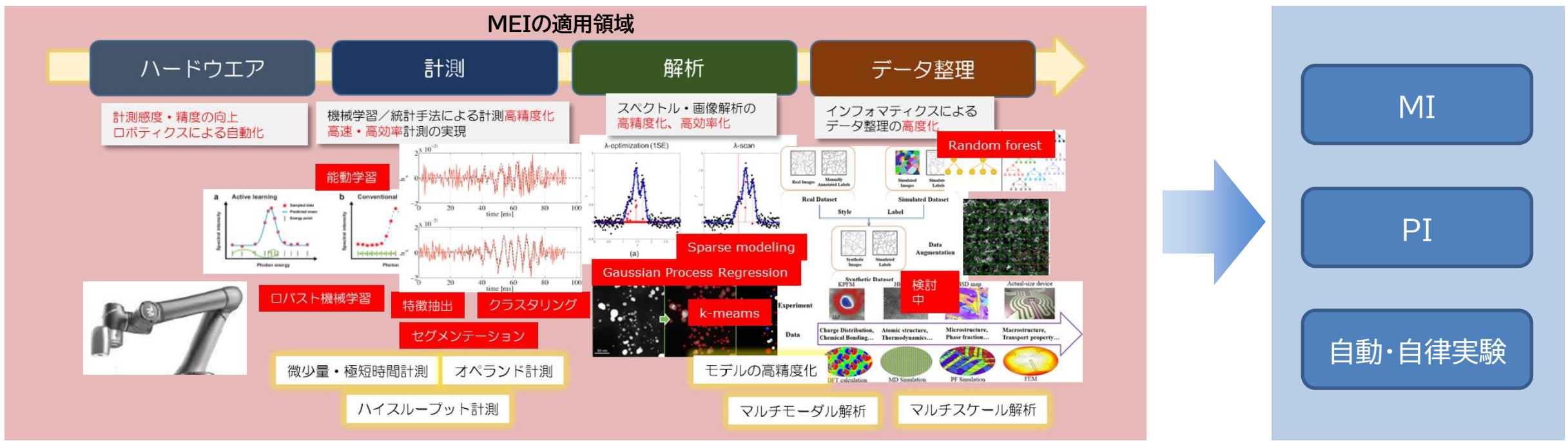


四つの技術開発項目(3つのDX技術と実験データ)との関係とその方向性

|                                |  | 燃料電池製造工程 |       |    |  |       |      |      |
|--------------------------------|--|----------|-------|----|--|-------|------|------|
|                                |  | 触媒       | 触媒    | 塗工 | MEA化   |       | BPP  |      |
|                                |  | 添加剤      | インク調整 | 乾燥 |  |       |      |      |
|                                |  | 原料粉体     | MPL   | 塗工 | MPL付   | MEGA化 | セル積層 | スタック |
|                                |  | 製造       | インク調整 | 乾燥 | GDL  |       |      | 締結   |
|                                |  | 添加剤      |       |    |  |       |      | 発電検査 |
| 高度観察技術<br>メカニズム解明              |  |          |       |    | 全工程をカバーする観察技術の開発<br>高解像度・広視野の3D観察(破壊、非破壊)、高解像度・広視野の動的観察、等  |       |      |      |
| データ/画像<br>解析技術<br>定量化・可視化      |  |          |       |    | 全工程をカバーする物性計測技術群とそれぞれの定量化・可視化技術の開発<br>計測データ等からの特徴量抽出、AIによる画像鮮明化、AIによる画像特徴量抽出、等                         |       |      |      |
| 統一的过程<br>シミュレータ<br>工程間のメカニズム連携 |  |          |       |    | 全工程を連携するプロセスシミュレータの開発<br>全工程をカバーする計算手法の採用、前工程→後工程へデータ受け渡し、<br>機械学習によるフィッティング、実部品サイズの計算領域(大規模な計算リソース)、等 |       |      |      |
| 要素的<br>プロセス技術<br>実験データの生成      |  |          |       |    | 各工程それぞれに係わる要素的プロセス技術の開発  |       |      |      |



- 計測と解析を効率化・高速化・高度化するためのインフォマティクス
- 計測・分析機器・装置の制御や、機器・装置からの1次データを意味のあるデータとする上で多様な処理が必要であり、機械学習・統計的手法を駆使した自動処理化が鍵(⇒MIやPIに必要となる大量データを効率的に収集可能)
- MEIの開発環境の整備を早々に進め、SPring-8等の大型実験施設、先端計測機器、自律実験等に実装し、燃料電池材料、水素貯蔵材料へ適用範囲を広げていくことが必要



## 量子ビーム計測・先端計測機器への実装



## 大量データ生成



- I-V性能やコスト・生産台数などの製品目標達成に向け、材料探索・プロセス条件探索のための実験技術の加速化が必要
- 律速となる人手による処理を低減するための自動化、試行結果の評価や次候補提案をも自動的に行う自律化により、探索・試行を高速化・高効率化
- セパレータ表面処理や触媒について、自律実験への取り組みを開始、その他の材料種や、MEA材料、水素貯蔵材料、シール材料、プロセス等に対しても適用範囲を広げるための検討が必要
- 自動・自律実験を通して得られたデータをもとに、インフォマティクスを高度化・高精度化

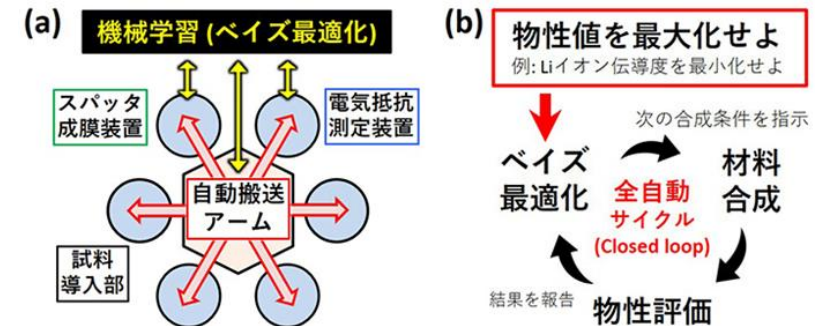
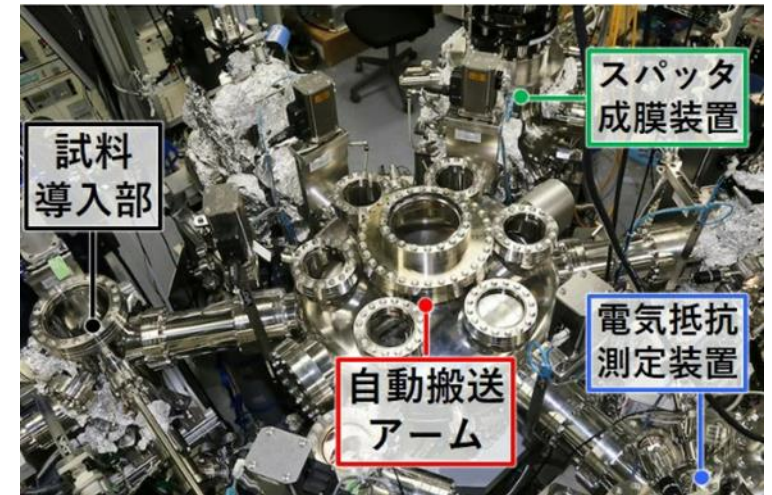
## 自動・自律実験の特徴とメリット

|      |  |
|------|--|
| 特徴   | <ul style="list-style-type: none"> <li>・AIで俯瞰的に物事を見る</li> <li>・機械学習により、次の条件を自動的に提案</li> </ul>                                    |
| メリット | <ul style="list-style-type: none"> <li>・材料探索の効率化、高速化、自動化</li> <li>・データの均質化(人間のスキルに依存しない)</li> <li>・過去の経験にとらわれない予想外の提案</li> </ul> |

## ロードマップ自律実験パート抜粋

|              | 現在   | 2030年頃  | 2040年頃      |
|--------------|--|---|-------------|
| DX技術の位置づけ    |  | 2030年目標   | 2040年目標     |
| 目標達成に向けた技術開発 |  |   |             |
| DX技術         | DX技術開発   | 加速化・効率化による支援  | DX技術を標準的に使用 |
| 自動・自律実験      | <ul style="list-style-type: none"> <li>・各種材料(セパレータ修飾、触媒、電解質膜、ガス拡散層、アイソム、ラジカルケッチャ等のMEA材料、シール材、水素貯蔵材)、プロセスへ向けた検討</li> <li>・自動化、ロボット最適化</li> <li>・Spring-8での計測・解析との融合検討(触媒MI、PI)</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>・自律実験に向けた概念実証済み開発対象への順次適用による材料・プロセス開発の加速</li> <li>・計測・解析との融合による開発加速</li> </ul> |             |

## 自律実験事例



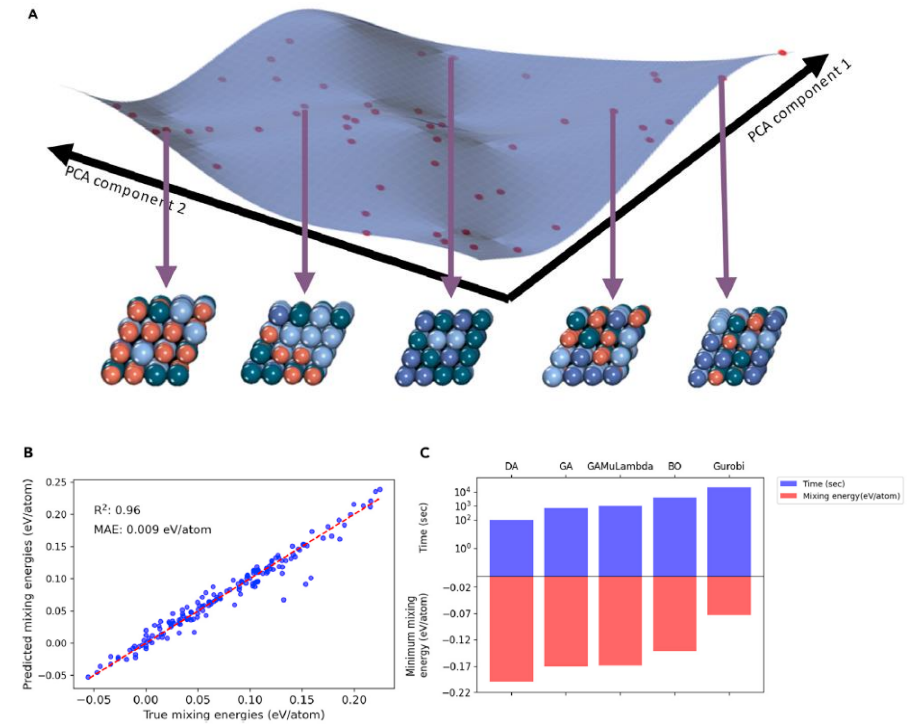


- DX推進のツールとして、計算科学によるシミュレーション、機械学習、量子計算技術
- シミュレーションの特徴(均質なデータを大量に生成できる)、機械学習の特徴(高速な計算、データから変数間の関係性をモデル化)などを活用した支援
- 量子計算技術による組合せ最適化や、絶大な演算能力の将来的利用にも期待

DX推進のツールとしての計算技術・モデル化技術の特徴と利用方法

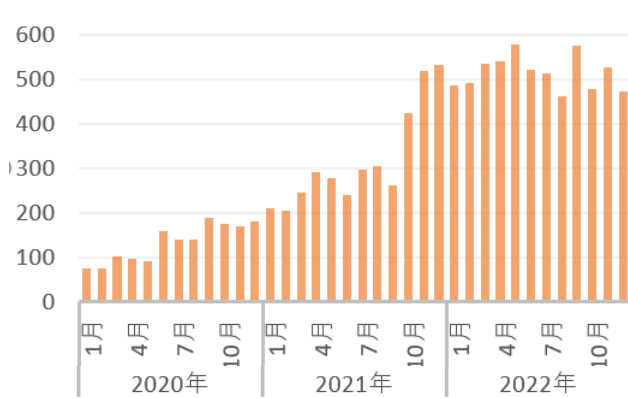
| 分類              | 特徴   | 利用方法  |
|-----------------|--|---|
| 計算科学によるシミュレーション | <ul style="list-style-type: none"> <li>・実験ではコスト・資源制約により実現できないような大規模・広範囲な評価を代替可能</li> </ul>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>・触媒材料(バルク)の熱力学的安定性を第一原理計算で評価し、スクリーニングに利用</li> </ul>                    |
| 機械学習・AI         | <ul style="list-style-type: none"> <li>・データに基づいて対象物の特性・特徴を表現するモデルを構築することが可能</li> </ul>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>・異なる時間・空間スケール階層の物理現象間の橋渡し</li> <li>・装置全体のモデル(デジタルツイン)の構築</li> </ul>    |
| 量子計算技術          | <ul style="list-style-type: none"> <li>・高精度な計算科学シミュレーションよりはかなり高速なシミュレーションが可能</li> </ul>  | <ul style="list-style-type: none"> <li>・第一原理計算に基づく様々な材料状態(表面、粒子)のエネルギーを計算して比較</li> </ul>                      |
|                 | <ul style="list-style-type: none"> <li>・(アニーラ)組合せ最適化問題を高速に解くことが可能</li> <li>・(ゲート型)様々な計算処理に対処できる可能性があり、誤り耐性が実現すると極めて大きなインパクト</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>・触媒の探索などのMIへの利用</li> <li>・励起状態の精密なエネルギーを計算することで触媒反応などの詳細な検討</li> </ul> |

組合せ最適化による触媒材料の探索例

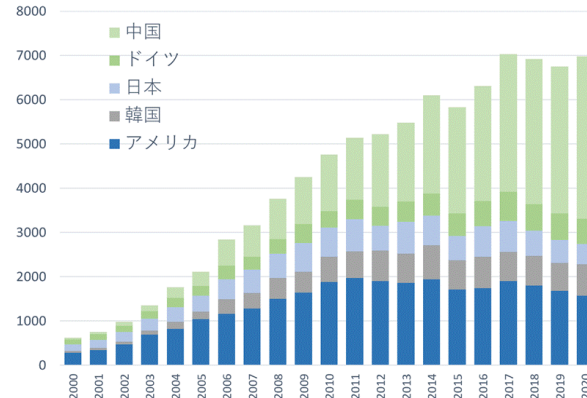


出典: Choubisa, Hitarth, et al. "Accelerated chemical space search using a quantum-inspired cluster expansion approach." Matter (2022).

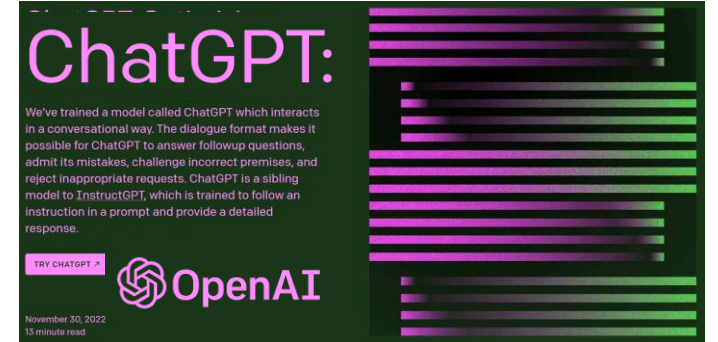
- BMCに基づく開発戦略の構築は重要度を増しており、自然言語処理の活用により、目まぐるしい程の技術の激しい動きや環境の変化に対しタイムリーに正しいBMCを行うことができ、究極では日本の技術開発の戦略を立案するシステムの構築
- 膨大な数の論文・特許が公表され、これらの技術文献を調査し研究開発者をサポートする上でもNLP技術が必要



BMC記事ピックアップ数



FC関係の論文数推移(2000~2020年)国際比較



出典:OpenAIウェブページ

- ✓ まるで人との会話、AI用いた「ChatGPT」驚愕の実力 (東洋経済 ONLINE 2023/1/1)
- ✓ ニューヨーク市、学校での「ChatGPT」利用を禁止 (CNET Japan 2023/1/5)

NLP技術適用のタイムライン

|          | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 |
|----------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| BMC システム |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 分類・要約    | —  | —★ |    |    |    |    |    |    |    |
| 新規性      |    |    | —★ |    |    |    |    |    |    |
| 重要度      |    |    |    | —★ |    |    |    |    |    |
| 他技術域     |    |    |    |    | —★ |    |    |    |    |
| 課題共有     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| データベース化  |    | —★ |    |    |    |    |    |    |    |
| 戦略立案     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| BMC 情報纏め |    |    | —★ |    |    |    |    |    |    |
| 未来予測     |    |    |    | —★ |    |    |    |    |    |
| 立案       |    |    |    |    |    |    | —★ |    |    |
| 文献調査     |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| 固有表現抽出   |    |    | —  | —  | —  | —★ |    |    |    |

- 現状のNLP技術ではチャレンジングなタイムライン
- 予想を遥かに超えるNLPの進化を考慮すると、容易なタイムラインに変わる可能性
- 膨大な情報が日々生み出されており、開発戦略構築・技術開発支援へのNLPの積極的活用は非常に重要
- 燃料電池・水素分野での教師データの蓄積を図る必要

ご清聴をありがとうございました