

NEDO燃料電池・水素技術開発ロードマップ中間報告会

# 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

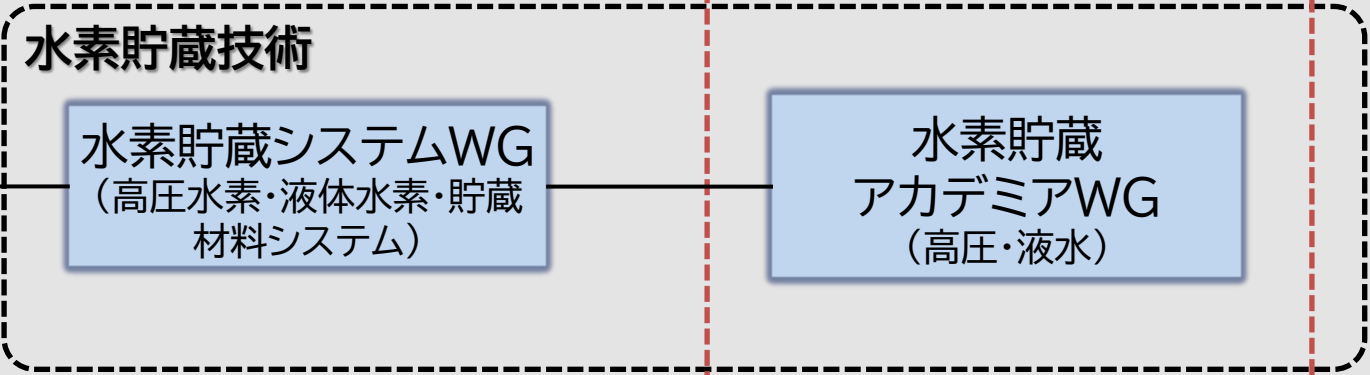
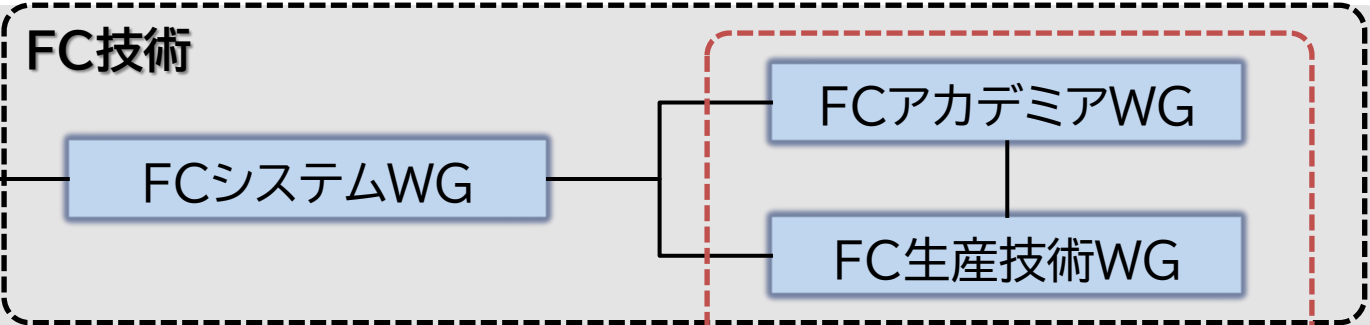
プレゼンター：谷村直樹(みずほリサーチ&テクノロジーズ)

NEDO 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

1. WG 体制
2. ロードマップ(DX技術)の構成と変更点
3. 世界の研究事例
4. DX技術の目標の検討
5. 中長期視点での技術開発

**DX技術WG メンバー**  
◎NEDO/トヨタ: 木崎  
○みずほR&T: 谷村・羽田・山口  
FC3: 今井・新沼・佐藤  
NEDO: 藤井・塩沢  
(2024年2月末時点)

FC・水素貯蔵全体戦略 ———— BMC戦略



**DX技術WG**

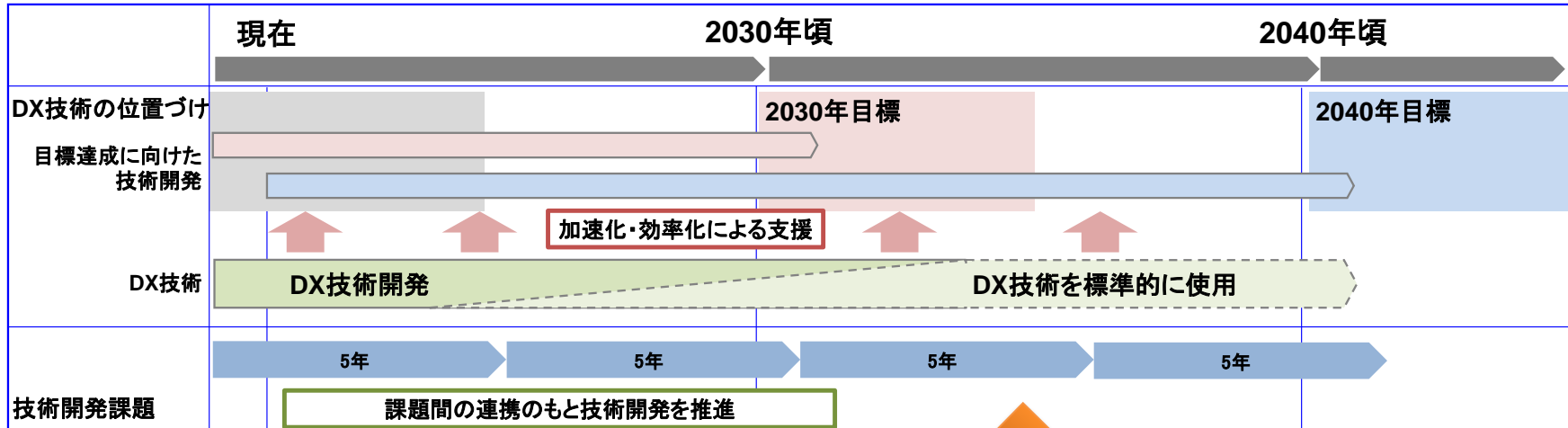
製品WG

製品要求スペック

IV目標(BOL/EOL)・貯蔵密度・システム・構造

材料・部材開発の方向性・R&D課題・基盤技術

## 2022年度版



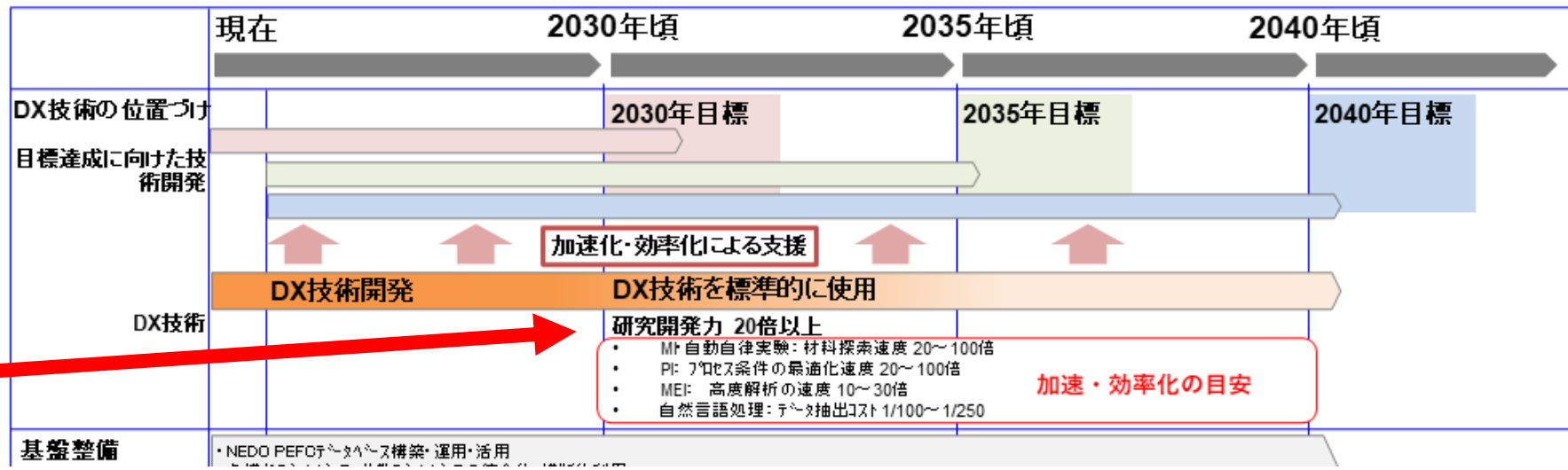
**【DX技術の位置づけは変更なし】**

- DX技術は、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**、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**

## 2023年度版

**【DX技術の目標を新たに記載】**

- 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年時点で達成する**
- 標準的に使用する体制の実現に向け、**可能なものから開発に実戦投入**



## 2022年度版

## 2023年度版

### 【DX技術の範囲について変更なし】

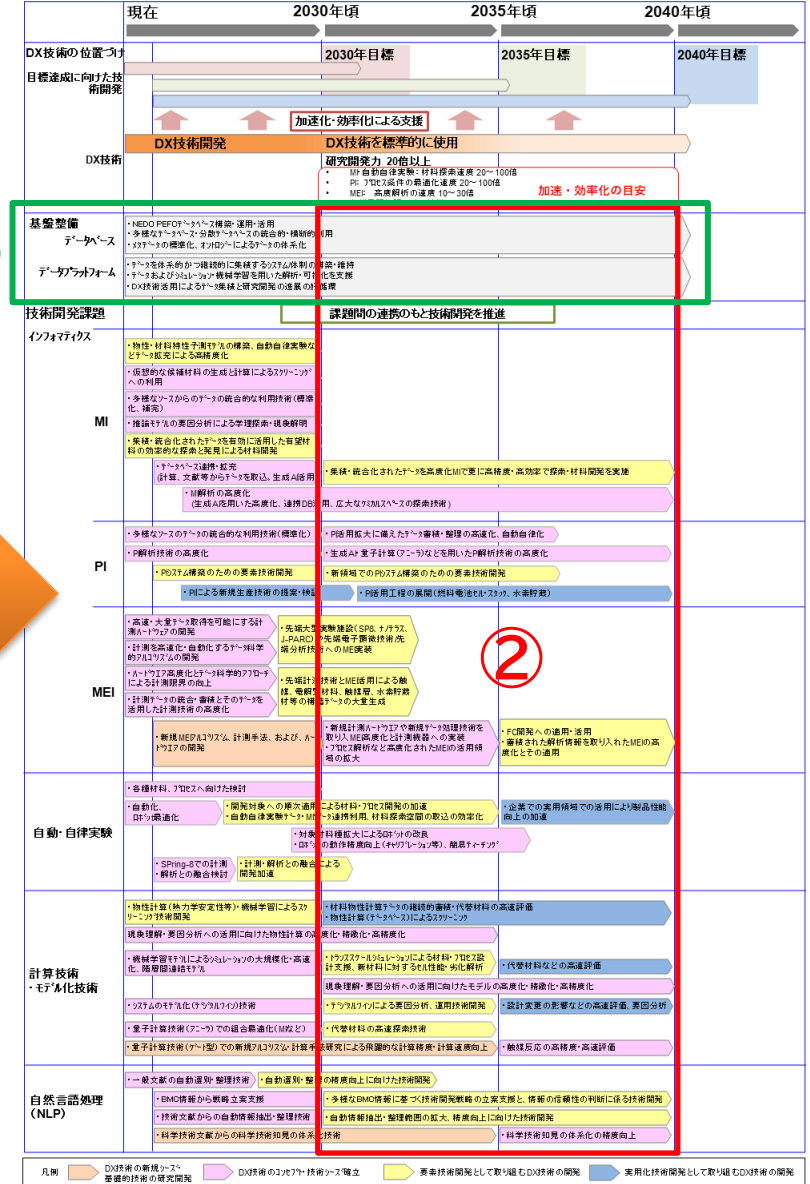
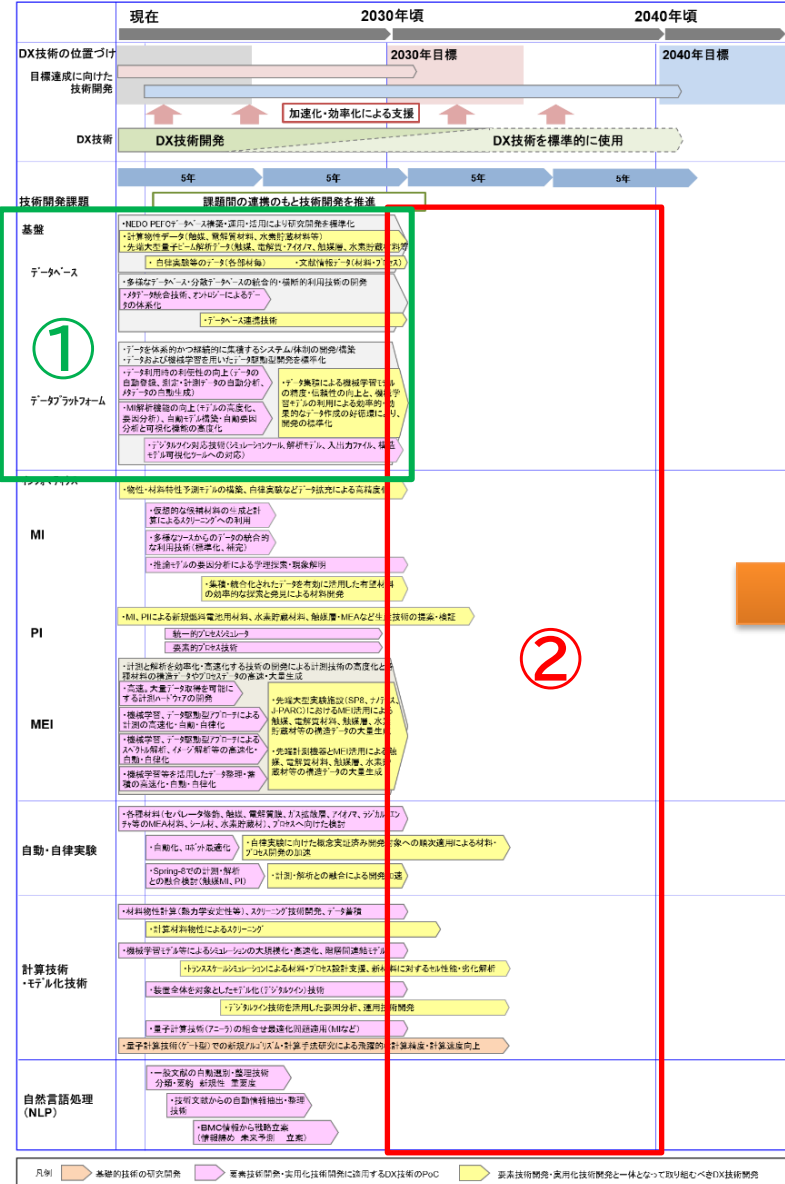
- 基盤(データベース、データプラットフォーム)
- インフォマティクス(MI/PI/MEI)
- 自動・自律実験
- 計算技術・モデル化技術
- 自然言語処理

### 【①基盤の位置づけ】

- 基盤は継続的に構築・維持・運用するものとした

### 【②中長期的視点での技術開発】

- 2022年度版では、2030年頃からはDX技術を標準的に用いることを念頭に線表を設定
- 技術基盤としての厚みを持たせるためには、DX技術の継続的な発展も重要 → 2030~2040に継続する技術開発を追記



- トロント大学(カナダ)、Acceleration Consortium
- AIとロボティクスを化学・材料科学に導入し、AI駆動により自動合成・特性評価を行う
- 先端材料を市場に投入するまでの期間を平均20年から最短1年に、コストを1億ドルから100万ドルに低減することを目指す ( ※ 開発速度20倍、コスト1/100 )

### ◆ 応用分野

ヘルスケア、医薬、輸送・建築、エネルギー、グリーン製造、電子デバイス、新規応用分野

### ◆ ファンド

- 2億ドル/年 × 7年
- パートナーから3億ドル

### ◆ 事例(右図)

- 肝細胞癌の新規抗がん剤候補の探索についてのデモンストレーション
- 標的タンパク質の選択～ヒット化合物の生成までをデータとインフォマティクスを駆使して実施し、実験で検証
- 通常数年～10年かかるプロセスを30日で実施 (速度30～100倍)

### The Cancer Genome Atlas Program (TCGA)



### panda Omics

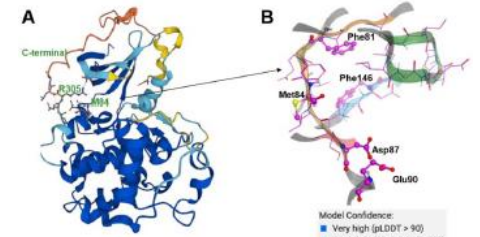
#### Broaden data analysis and visualization horizons

- Decipher published OMICs data
- Analyze OMICs data type
- Discover and evaluate novel drug targets
- Uncover novel strategies for drug repurposing

Targets with experimental-determined structures    Targets with AlphaFold-predicted structures



### AlphaFold Protein Structure Database



### Chemistry42

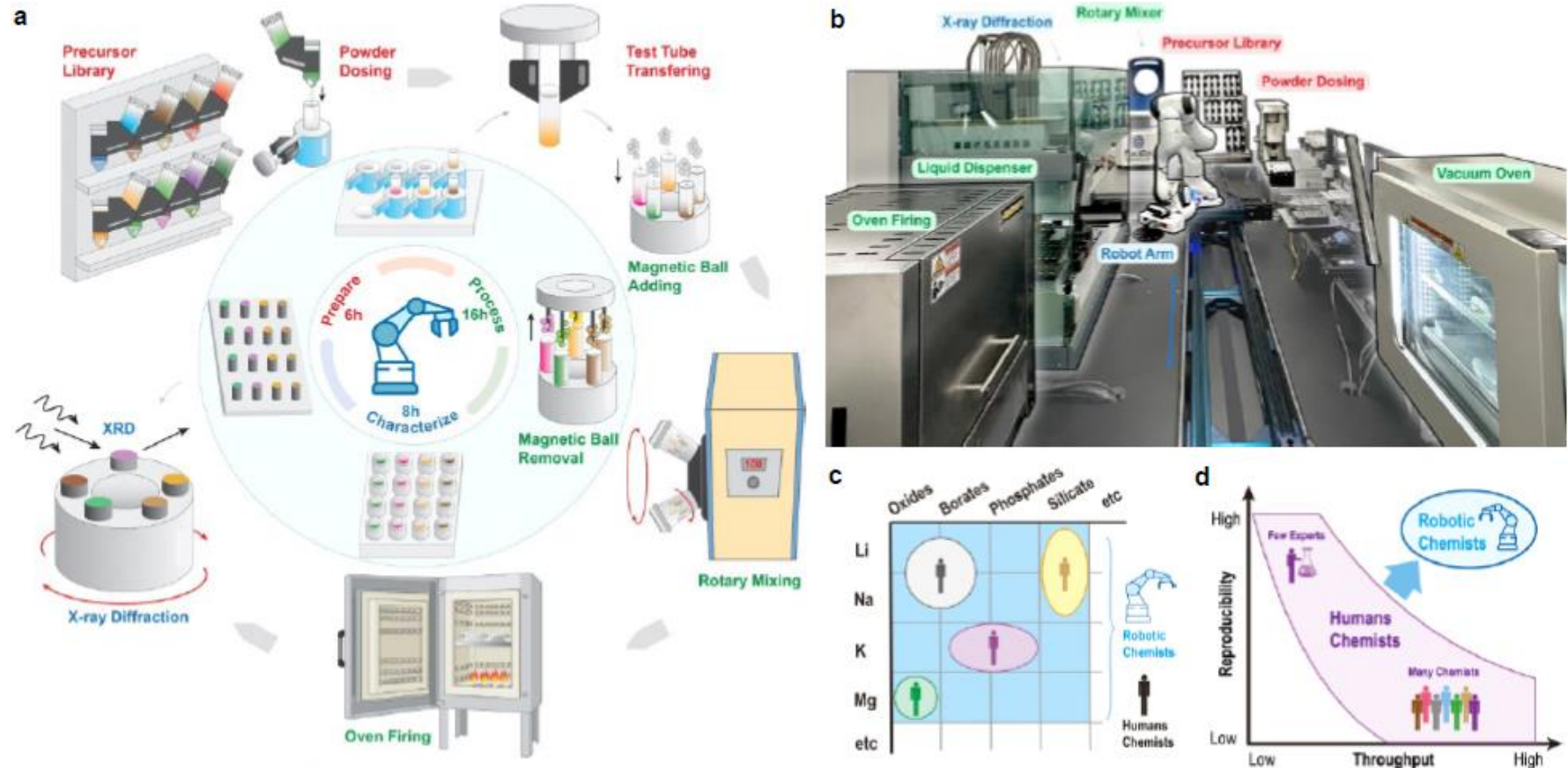
#### Explore uncharted chemical space

- Experience the power of an automated end-to-end machine learning platform
- Discover novel and diverse molecules for target of interest
- Leverage structure- and ligand-based drug design strategies



- サムスン先進技術研究所・ロボット無機材料合成ラボ
- 合成レシピに従い**固体酸化物セラミックス**を自動合成、**組成を評価する自動実験システム**を構築
- 二次電池の**電極活物質・電解質**を対象として、前駆体材料の粉体から目的のセラミックスが得られるような「**効率的なレシピ**」の探索に適用
- 1トレイ上の**24サンプル**を平行に**72時間**で合成・評価（※ **人手作業の24倍以上の速度**）

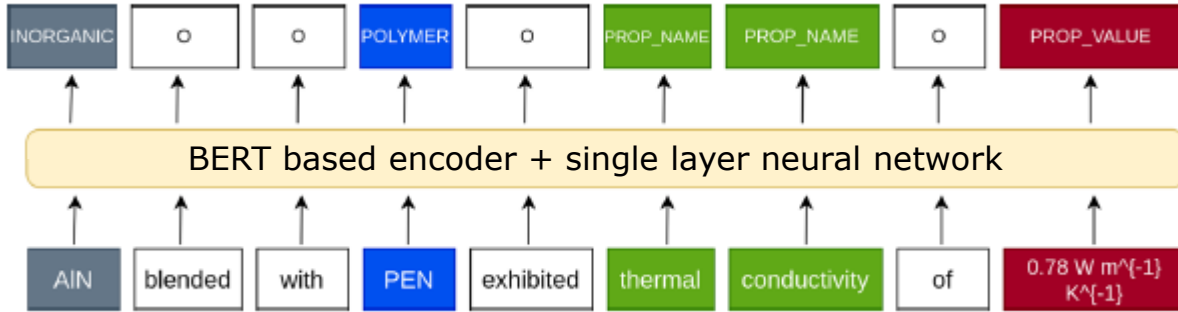
- 計算物性データベースと文献から自然言語処理を用い、目的とする材料の前駆体を特定
- 目的とする35種の4元固体酸化物の「効率的な合成レシピ」探索のため、28種の前駆体材料の粉体(27元素を含む)から224の合成反応を評価
- 前駆体の粉体を混合、焼成し、XRDにより目的とする結晶相の割合の評価までを自動化



## ■ ジョージア工科大学

- 広範なポリマー材料の論文要約240万件から、固有表現認識(NER)を行うモデルを作成
- 論文要約13万件から、材料特性30万件を、60時間で抽出 (※ 人手作業の100倍以上の速度)

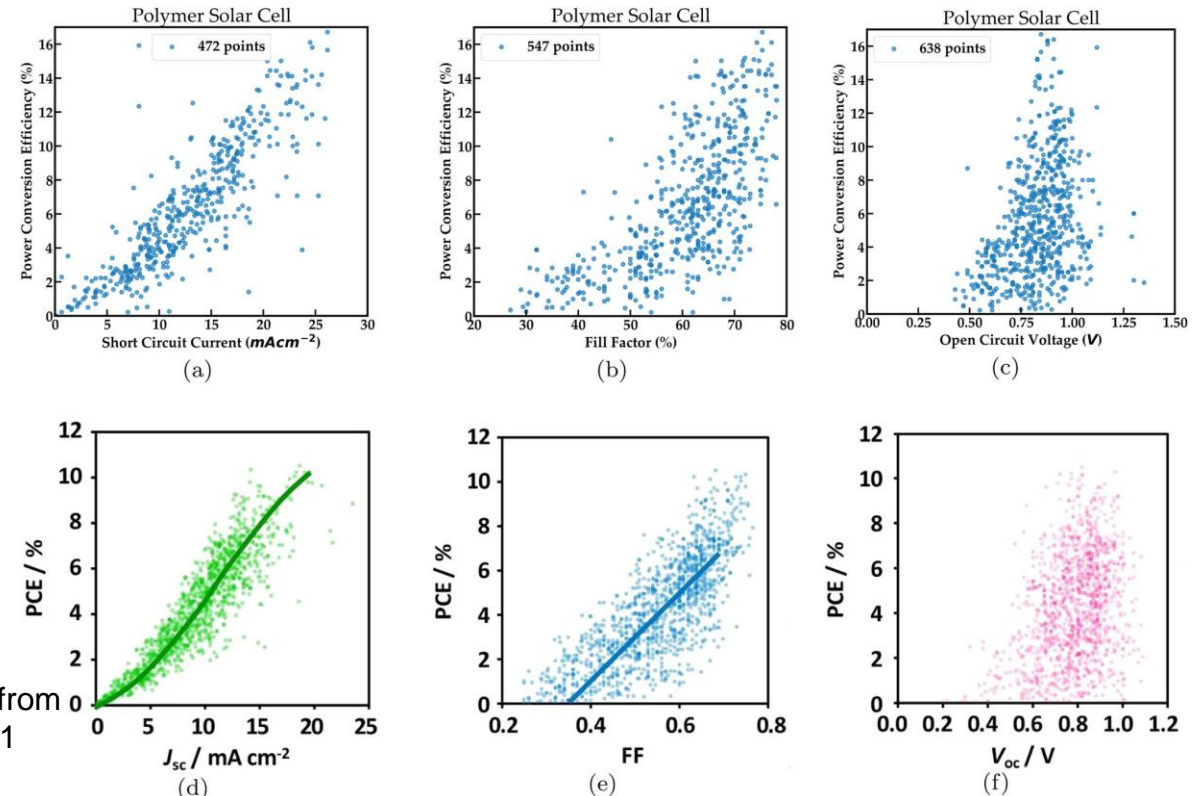
◆ 固有表現認識・固有表現抽出(NER)  
文章(下)の要素のEntity typeを識別



Entity type	説明
POLYMER	ポリマー材料。
ORGANIC_MATERIAL	ポリマーでない有機物。通常、可塑剤または架橋剤。
MONOMER	POLYMERの繰り返し単位として明示的に示されている材料
POLYMER_CLASS	特定の化学物質を指すのではなく、ポリマーのクラスに使用される広義の用語である物質
INORGANIC_MATERIAL	無機材料。通常ポリマーの添加剤として仕様。
MATERIAL_AMOUNT	材料配合中の特定の材料の量
PROPERTY_NAME	材用特性
PROPERTY_VALUE	材料特性に対応する数値と単位
OTHER	上記に当てはまらないすべてのトークンに適用されるデフォルト

出典： Shetty, Pranav, et al. "A general-purpose material property data extraction pipeline from large polymer corpora using natural language processing." *npj Computational Materials* 9.1 (2023): 52.

- ◆ 材料特性の相関プロットについて、NERモデル(上段)と手作業による抽出(下段)を比較
- ◆ NERモデルでは手作業と同レベルで抽出できており、材料特性間の関係性を推論することが可能





- 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

### 【加速・効率化の目安】

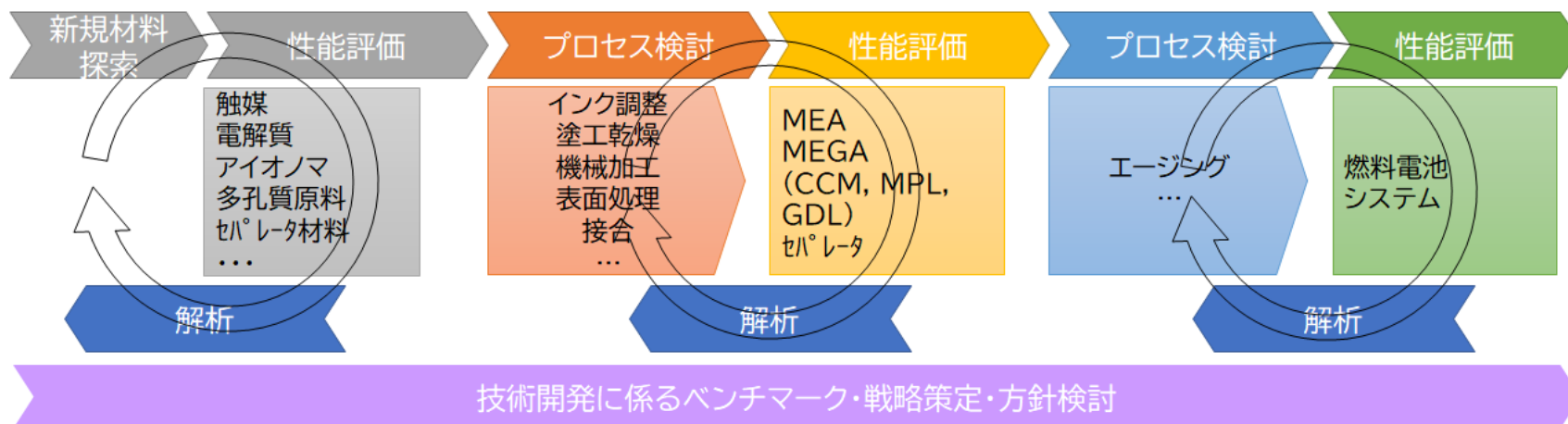
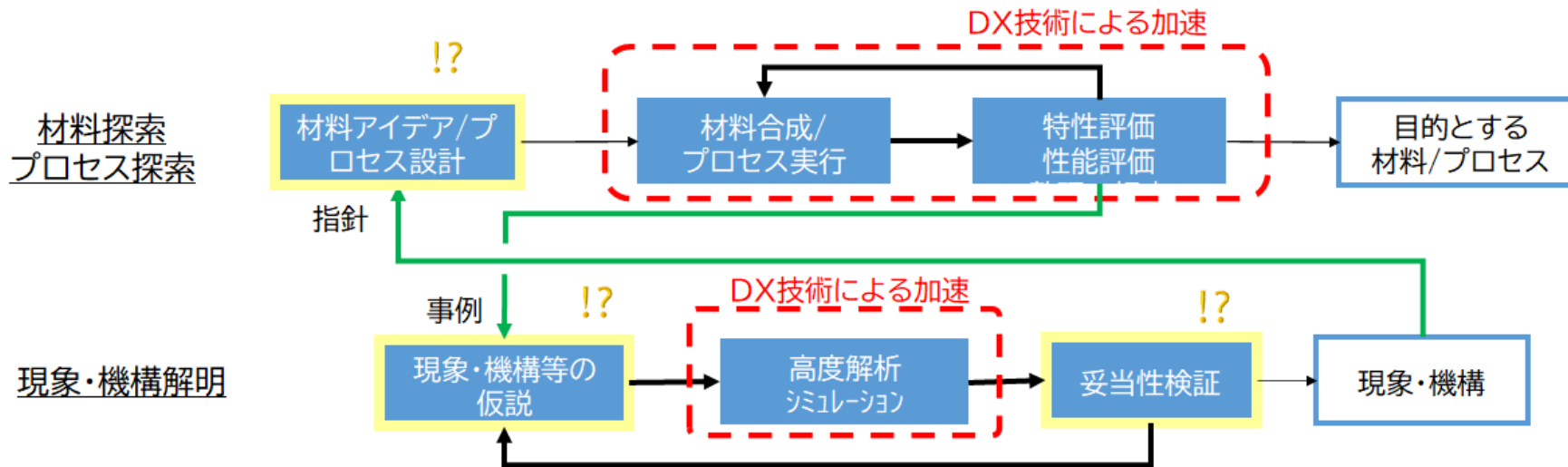
- MI・自動自律実験：材料探索速度20～100倍
- PI：プロセス条件の最適化を20～100倍
- MEI：高度解析のスピードを10～30倍以上
- 自然言語処理：データ抽出・ベンチマークコスト1/100～1/250



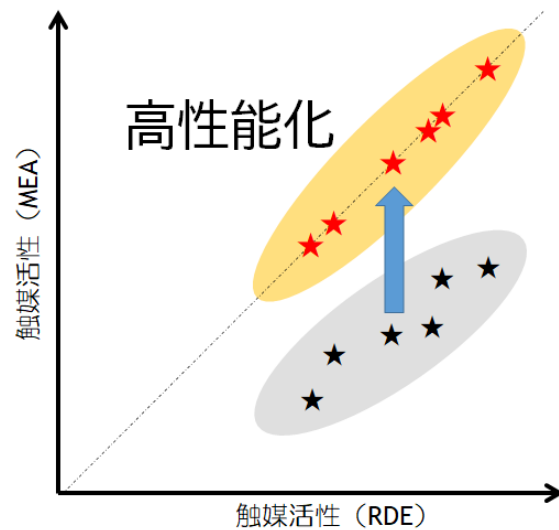
## ● DX技術



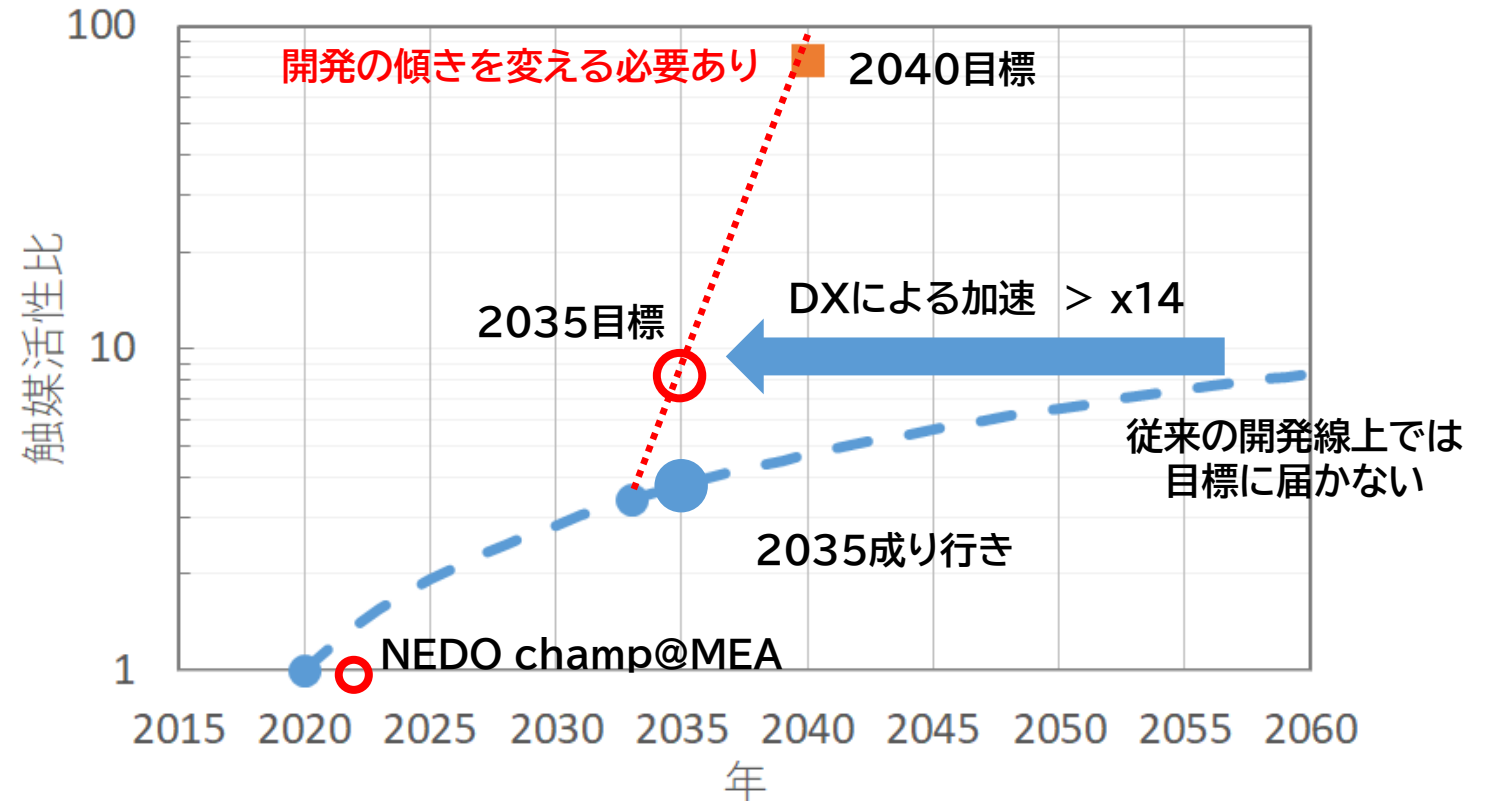
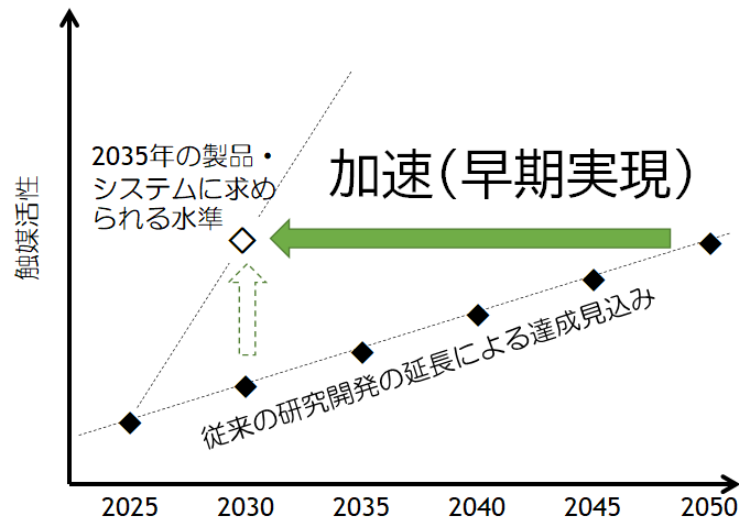
- DX技術を活用し、研究開発での**材料・プロセス探索**と、**現象・機構解明**を加速、研究者・開発者のリソースを**タスクから解放し、創造的活動へ集中**
- DX技術により、**材料～部材～システムの多段にわたる一連の研究開発を加速**



■ 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



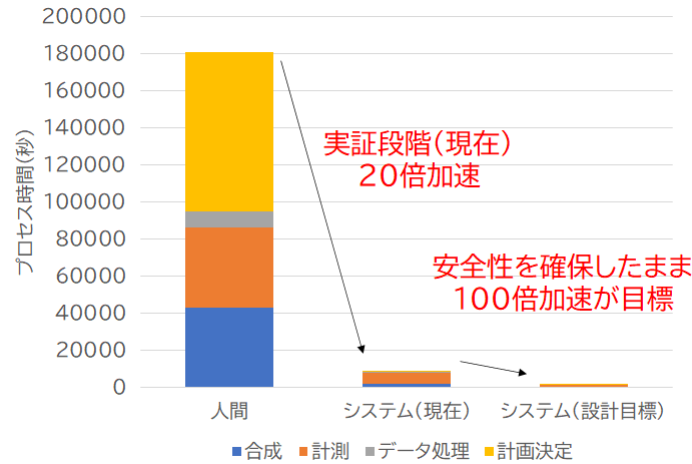
- 産業側・アカデミア側の双方により、製品・システムの目標を実現するため触媒・膜などの材料に求められる性能を詳細に検討
- 既存技術をベースとして、30~40年に向けて性能向上の傾きを変える必要があり、DXにより従来に比べ開発を14倍以上加速させることが必要



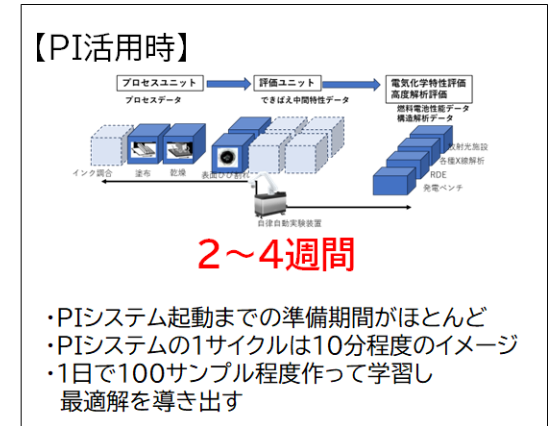
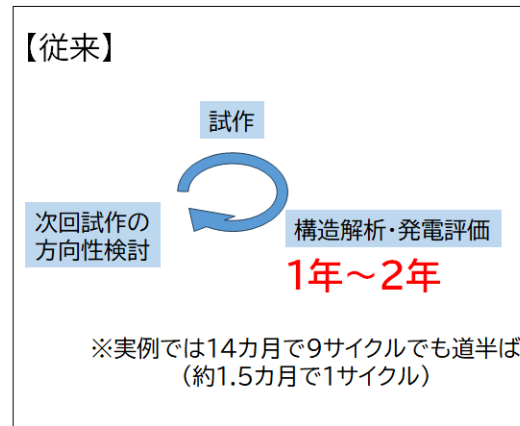
- 燃料電池・水素産業分野の材料技術開発に、現時点の**20倍以上**の研究開発力をもたらす
- 35年の製品・システム目標に向け、**30年時点で達成**している必要がある

## 【加速化・効率化の目安】

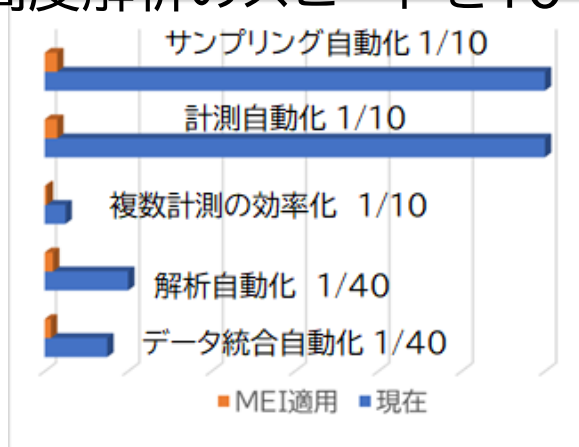
- MI・自動自律実験：材料探索速度20～100倍



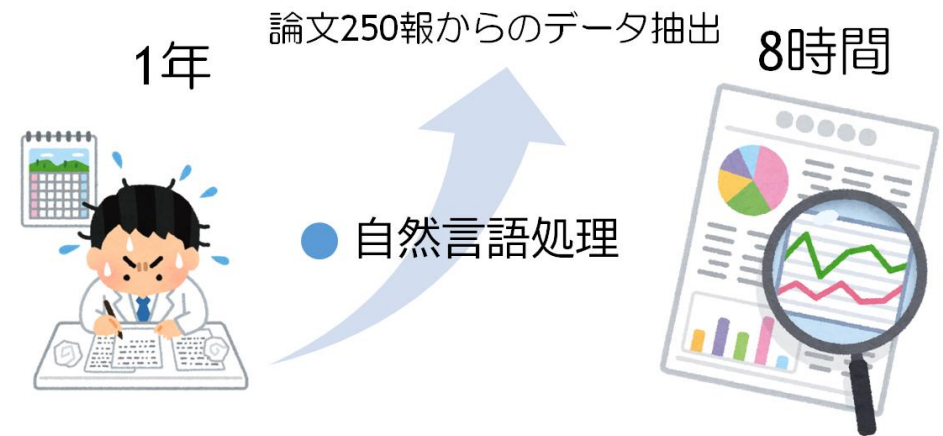
- PI: プロセス条件の最適化を20～100倍



- MEI: 高度解析のスピードを10～30倍以上



- 自然言語処理: データ抽出コスト1/100～1/250



## ■ 一部を刷新(PI)・整理(MEI)し、2030~2040年にかけての技術開発を追記

	現在	2030年頃	2035年頃	2040年頃
技術開発課題		<div style="border: 2px solid red; padding: 5px; color: red; font-weight: bold;">                     ・2030~2040年にかけての技術開発                 </div>		
インフォマティクス				
MI	<ul style="list-style-type: none"> <li>・物性・材料特性予測モデルの構築、自動自律実験などデータ拡充による高精度化</li> <li>・仮想的な候補材料の生成と計算によるスクリーニングへの利用</li> <li>・多様なソースからのデータの統合的な利用技術(標準化、補完)</li> <li>・推論モデルの要因分析による学理探索・現象説明</li> <li>・集積・統合化されたデータを有効に活用した有望材料の効率的な探索と発見による材料開発</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・データソース連携・拡充(計算、文献等からデータを取込、生成AI活用)</li> <li>・集積・統合化されたデータを高度化MIで更に高精度・高効率で探索・材料開発を実施</li> <li>・M解析の高度化(生成AIを用いた高度化、連携DB活用、広大なケミカルスペースの探索技術)</li> </ul>		
PI	<ul style="list-style-type: none"> <li>・多様なソースのデータの統合的な利用技術(標準化)</li> <li>・P解析技術の高度化</li> <li>・PIシステム構築のための要素技術開発</li> <li>・PIによる新規生産技術の提案・検証</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・PI活用拡大に備えたデータ蓄積・整理の高速化、自動自律化</li> <li>・生成AI・量子計算(アニーラ)などを用いたP解析技術の高度化</li> <li>・新領域でのPIシステム構築のための要素技術開発</li> <li>・PI活用工程の展開(燃料電池セル・スタック、水素貯蔵)</li> </ul>		
MEI	<ul style="list-style-type: none"> <li>・高速・大量データ取得を可能にする計測ハードウェアの開発</li> <li>・計測を高速化・自動化するデータ科学的アルゴリズムの開発</li> <li>・ハードウェア高度化とデータ科学的アプローチによる計測限界の向上</li> <li>・計測データの統合・蓄積とそのデータを活用した計測技術の高度化</li> <li>・新規MEIアルゴリズム、計測手法、および、ハードウェアの開発</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・先端大型実験施設(SPring、ナトラス、J-PARC)や先端電子顕微鏡技術/先端分析技術へのMEI実装</li> <li>・先端計測技術とMEI活用による触媒、電解質材料、触媒層、水素貯蔵材等の構造データの大量生成</li> <li>・新規計測ハードウェアや新規データ処理技術を取り入れMEI高度化と計測機器への実装</li> <li>・プロセス解析など高度化されたMEIの活用領域の拡大</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・FC開発への適用・活用</li> <li>・蓄積された解析情報を取り入れたMEIの高度化とその適用</li> </ul>	

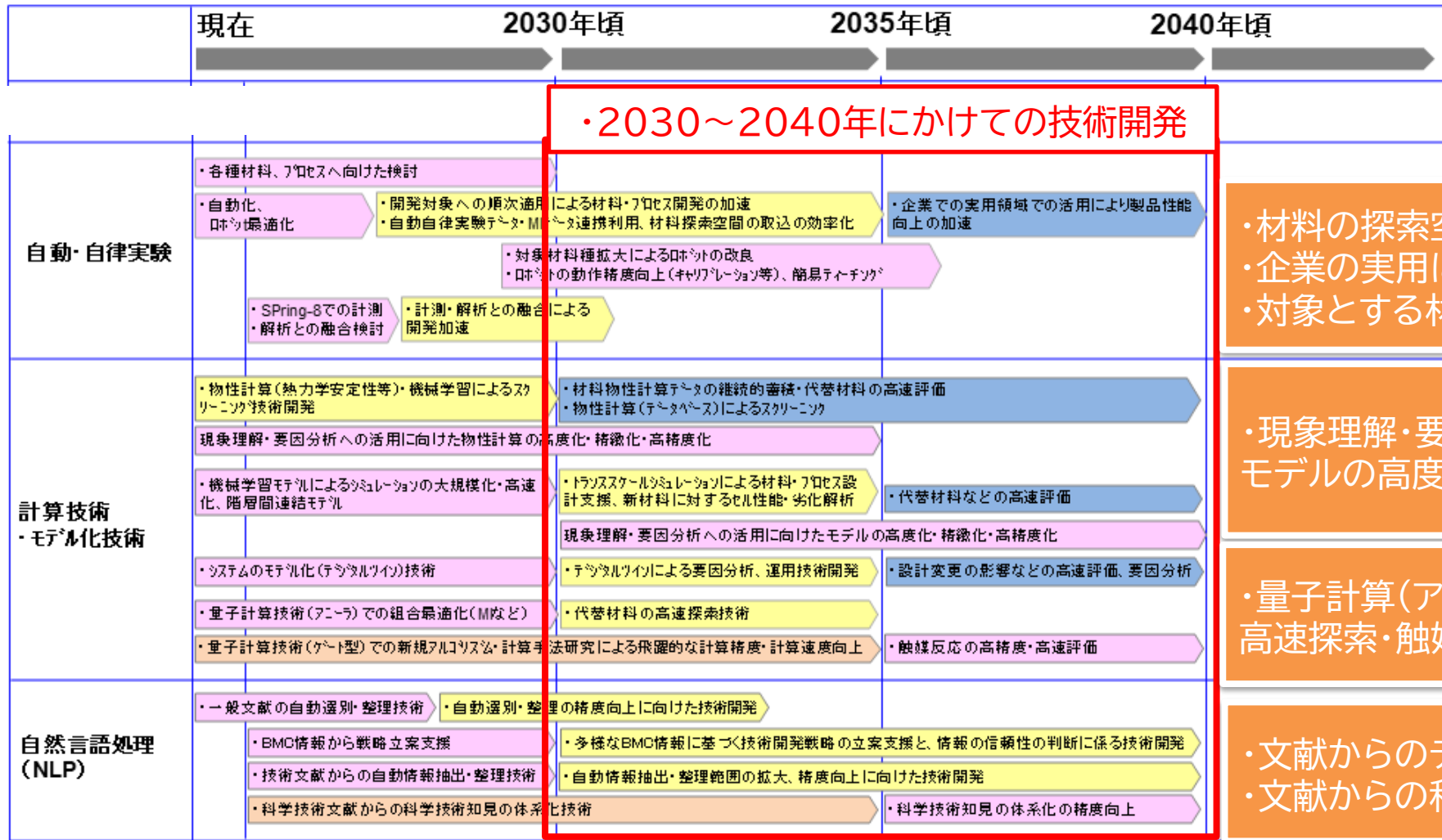
・蓄積されたデータを組み合わせる相互利用  
 ・生成AIを利用した高度化、広大なケミカルスペース探索

・データ作成・蓄積と解析技術を順次高度化  
 ・PIシステム構築と適用領域を順次拡大  
 ・PI適用による新規生産技術の提案、検証

・MEIの目的による整理  
 ・大量データの自動取得(ハードウェア、アルゴリズム)  
 ・計測限界の向上、計測技術の高度化

・新規MEIアルゴリズム、計測手法、ハードウェアの開発

■ 2030～2040年にかけての技術開発を追記



凡例 DX技術の新規コア・基礎的技術の研究開発 DX技術のコア/中核技術の確立 要素技術開発として取り組むDX技術の開発 実用化技術開発として取り組むDX技術の開発

---

ご清聴をありがとうございました