NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026
発表No.：a-05

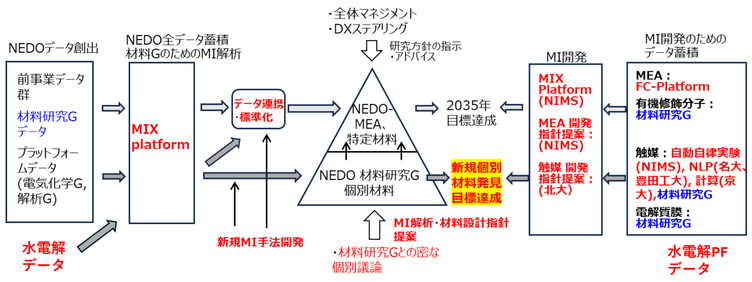
水素利用拡大に向けた共通基盤化のための研究開発事業/燃料電池・水電解の共通基盤技術開発/DXおよびマテリアルズ・インフォマティクスを用いた燃料電池・水電解材料の研究開発

団体名：物質・材料研究機構、北海道大学、京都大学、名古屋大学、豊田工業大学、早稲田大学
発表日：2026年7月22日

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)
髙橋 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 良浩(名古屋大学)
佐々木 裕(豊田工業大学)

4 自動自律実験
冨中 悟史(NIMS)

MIX Platfrormによるデータ蓄積と活用

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。

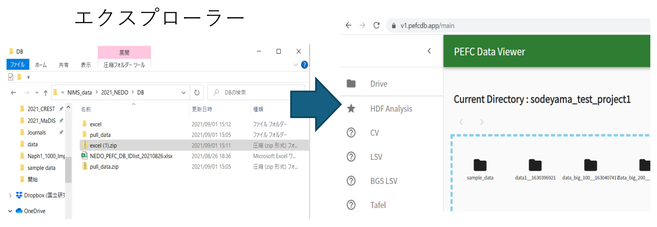
1．生データの読込と実験データ解析
2．統一的な形でデータを保管
　→PEFCデータベースへ
3．簡単なMI解析を手元で実施

現在、ver.4として運用中。

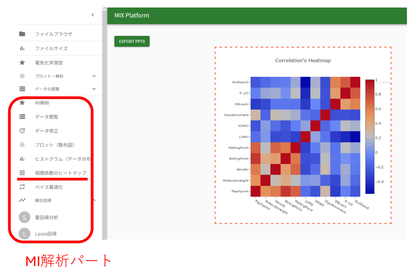
■利用者・データ件数の拡大
28850ファイル
（解析G 9802ファイル, 電気化学G 9797ファイル）
（2026.04.13）

■ウェブブラウザによるデータ蓄積

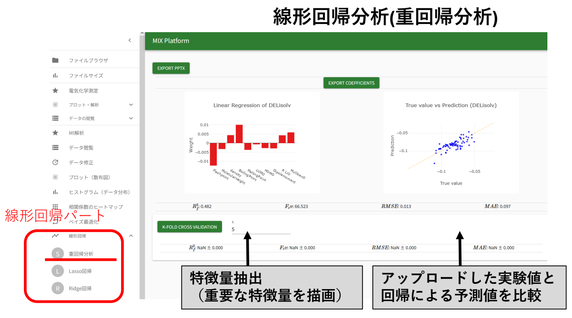
エクスプローラー



相関係数のヒートマップ(Pearsonの相関係数)



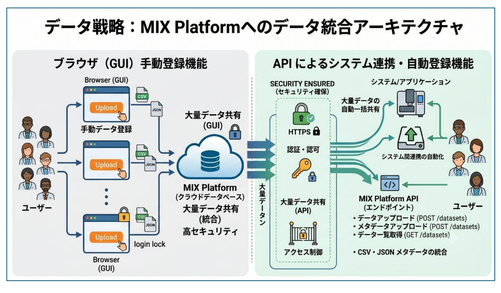
線形回帰分析(重回帰分析)



■FC-Cubic電気化学Grとの磨き上げ

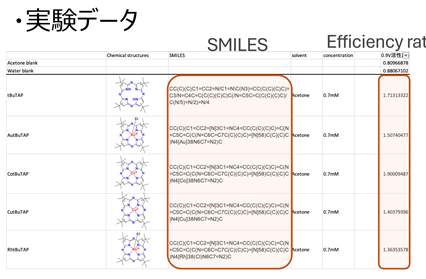
■今後の開発

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）。



新規表面修飾分子探索

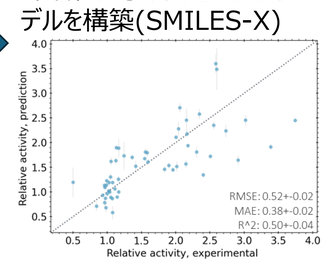
・実験データ



・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。

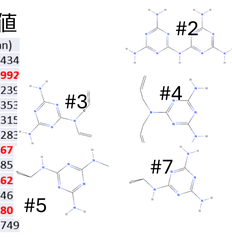
まず、分子構造を与えたら触媒活性が予測できるようなモデルを構築(SMILES-X)



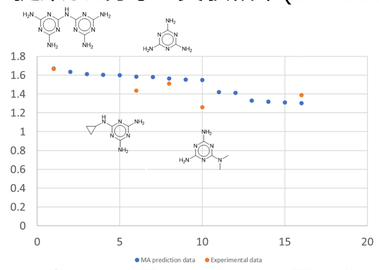
・触媒活性が高くなると予測されるような新規分子をAIで自動生成(提案)。(SMILES-X)

新規提案分子　MAの予測値

##	SMILES	MA @0.9V (mean)
1	Nc1nc(N)nc(NCCS)n1	1.771434
2	Nc1nc(N)nc(Nc2nc(N)nc(N)n2)n1	1.671997
3	C=CCN(C=C)c1nc(N)nc(N)n1	1.635239
4	C=CCN(CC=C)c1nc(N)nc(N)n1	1.611353
5	CNc1nc(N)nc(NC2CC2)n1	1.60315
6	Cc1nc(N)nc(NN(C)CCS)n1	1.600283
7	Nc1nc(N)nc(NC2CC2)n1	1.58267
8	C=CN(CC)c1nc(N)nc(N)n1	1.5785
9	Nc1nc(N)nc(N)n1	1.56462
10	CN(C)Cc1nc(N)nc(N)n1	1.55146
11	CN(C)c1nc(N)nc(N)n1	1.54980
12	CCCCN(CC)c1nc(N)nc(N)[nH+]1	1.418749



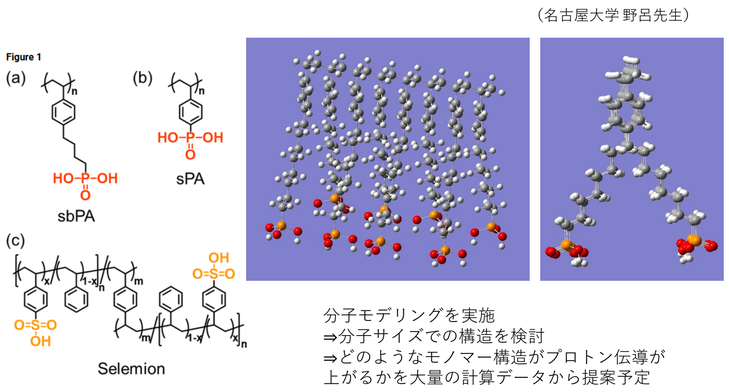
・提案した分子の実験結果(SMILES-X)



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、MAを測定
⇒高いMAを示すことを確認できた

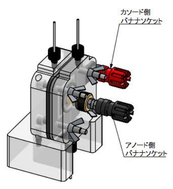
電解質膜用ブロックポリマーの最適設計

（名古屋大学 野呂先生）



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

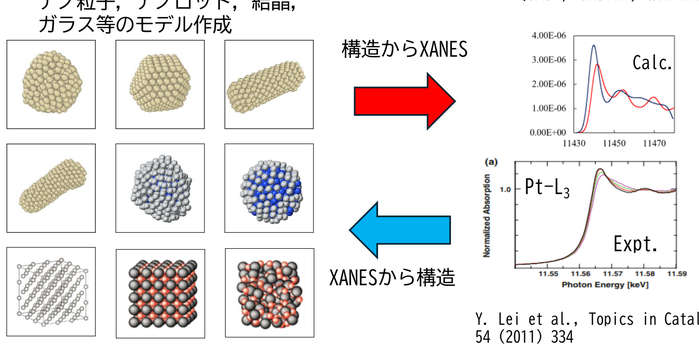
MIによるMEA最適化のため
並行してFC-Cubicと連携しデータ取得項目の決定を実施
今後機械学習・ベイズ最適化・ネットワーク法による解析実施予定

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）

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）

ナノ粒子，ナノロッド，結晶，ガラス等のモデル作成

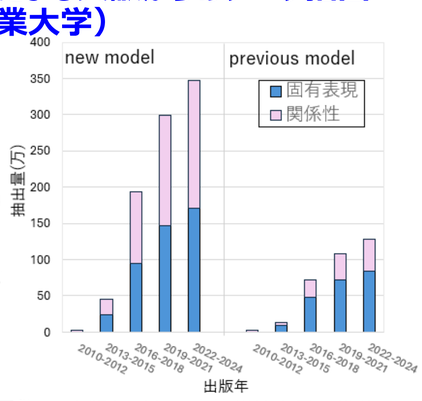


Y. Lei et al., Topics in Catalysis 54 (2011) 334

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



出版年ごとの全情報抽出量の推移

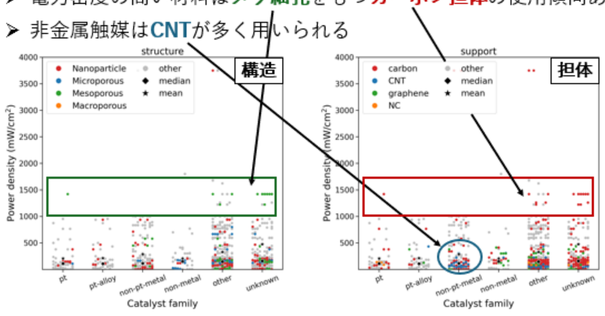
触媒組成：16万件、プロセス：24万件、物性：82万件を達成

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

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

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

・ **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。基本的にはNEDOによる許可のもと、可能なデータは国内で公開する。

・ **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ことを計画している。

・ **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。

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