

マテリアルズ・インフォマティクスによる 燃料電池材料探索

NIMS 袖山慶太郎

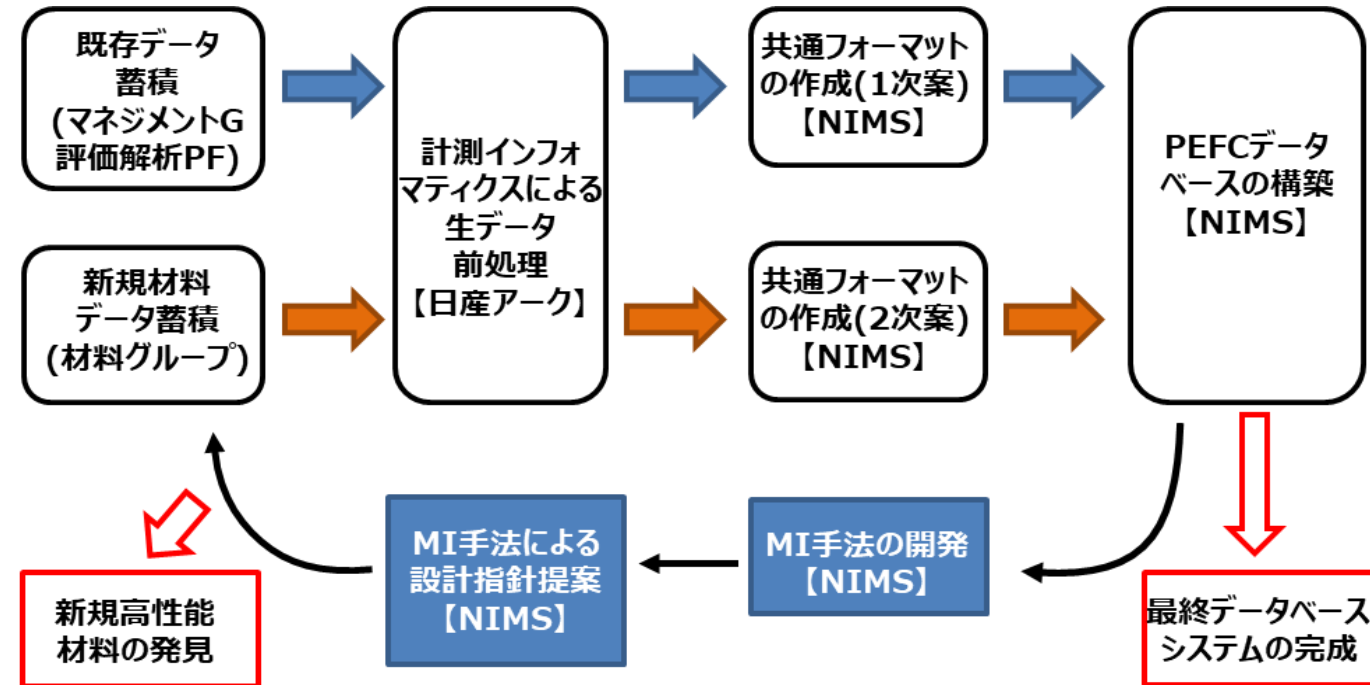
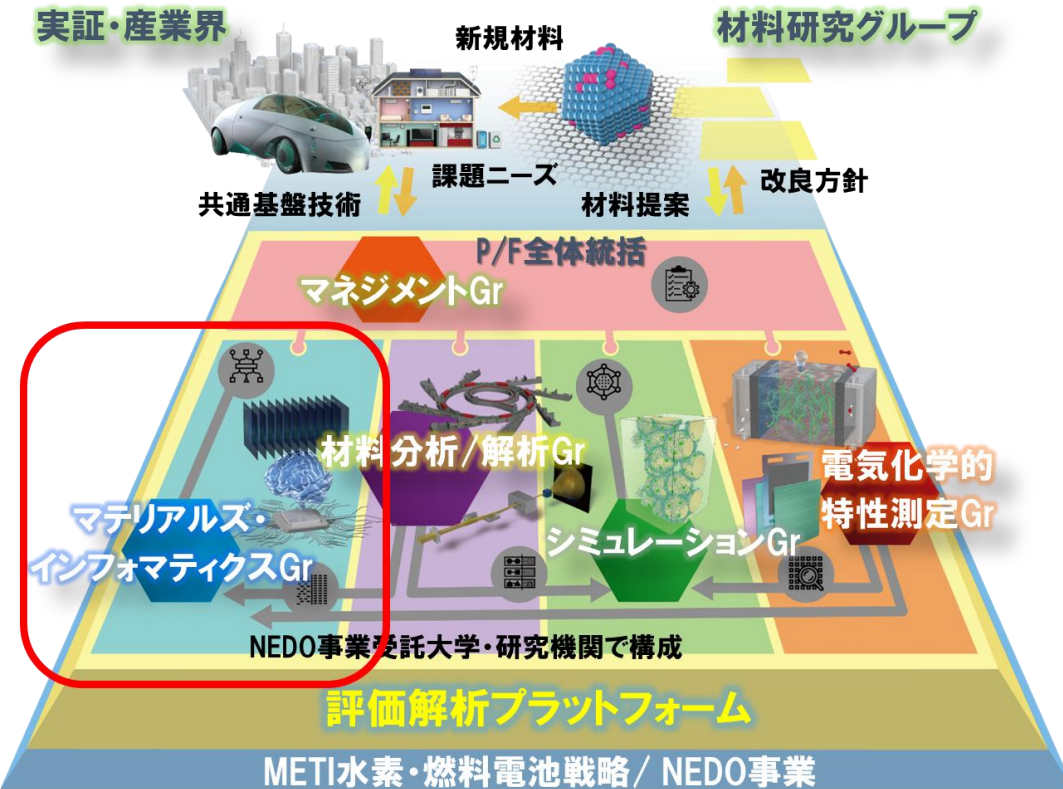
2025年3月6日 11:10-11:35
第16回FC-Cubicオープンシンポジウム
九州大学 伊都キャンパス
日本ジョナサン・KS・チョイ文化館

Contents

1. **マテリアルズ・インフォマティクス(MI)とは？（使う目的）**
2. **MIで何ができるか？（事例紹介）**
3. **MIを使うためには何をすれば良いか？（MI活用に向けて）**

NEDO 燃料電池事業 評価解析プラットフォーム MIグループ

FC•Platform



- ・NEDO燃料電池事業にて事業内のデータを蓄積。
- ・PEFC用データベースを構築。
- ・MI解析を用いた材料設計指針の提案を実施。

MI解析の目的

データ科学、計算科学、理論及び実験を融合させ、物質・材料研究開発のあり方を革新し、**研究開発のスピードを大幅に加速させる**ことを目指す。

材料研究
(マテリアルリサーチ)

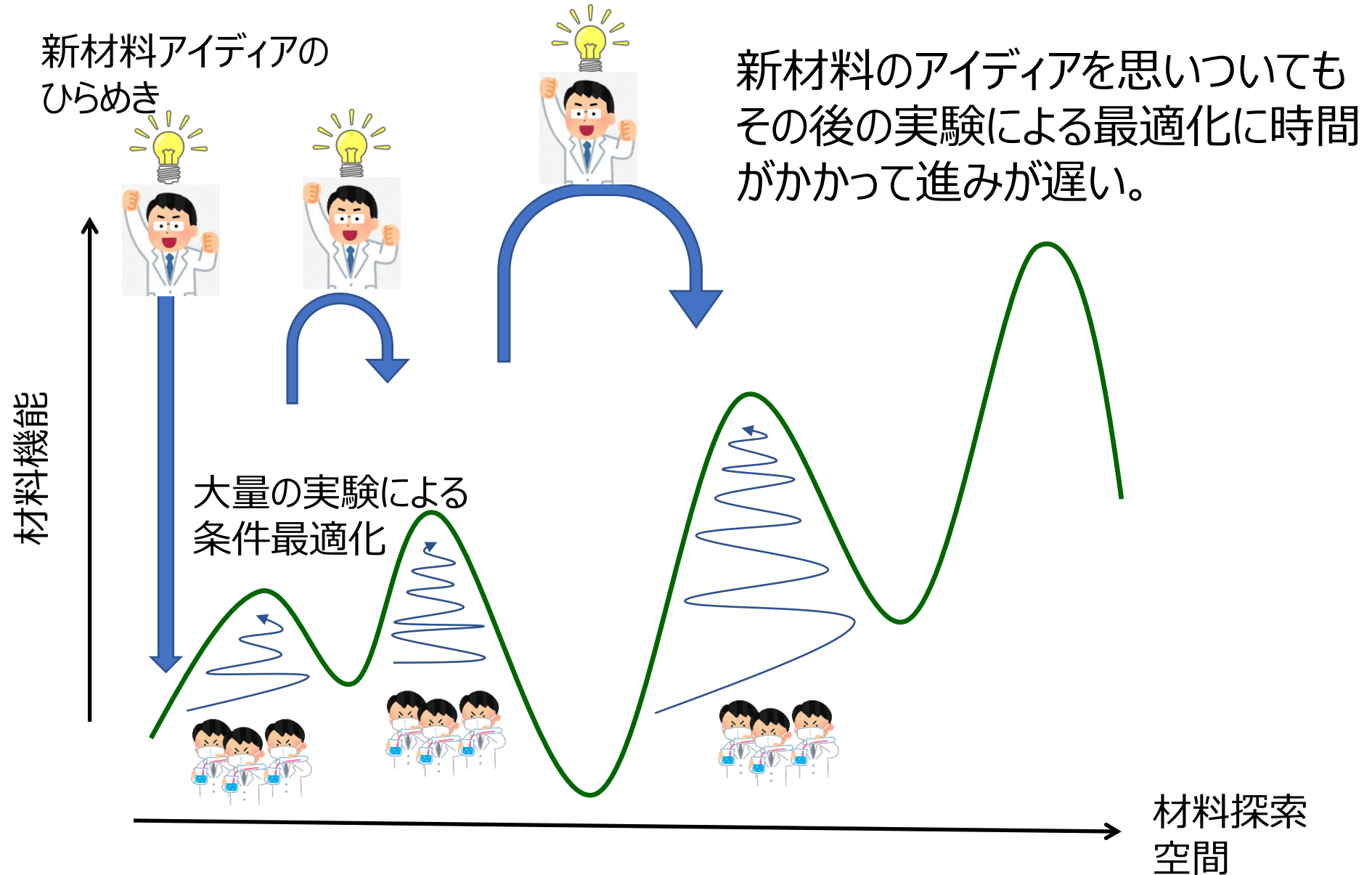
+

データ駆動科学、
機械学習

- 
- ・超伝導材料（無機固体、有機固体）
 - ・磁性材料（無機固体）
 - ・高分子ポリマー材料（有機液体、固体）
 - ・触媒材料(固体+気体、液体)
 - ・リチウムイオン電池(無機固体+有機液体)
- など、材料研究の適用先は多岐にわたる

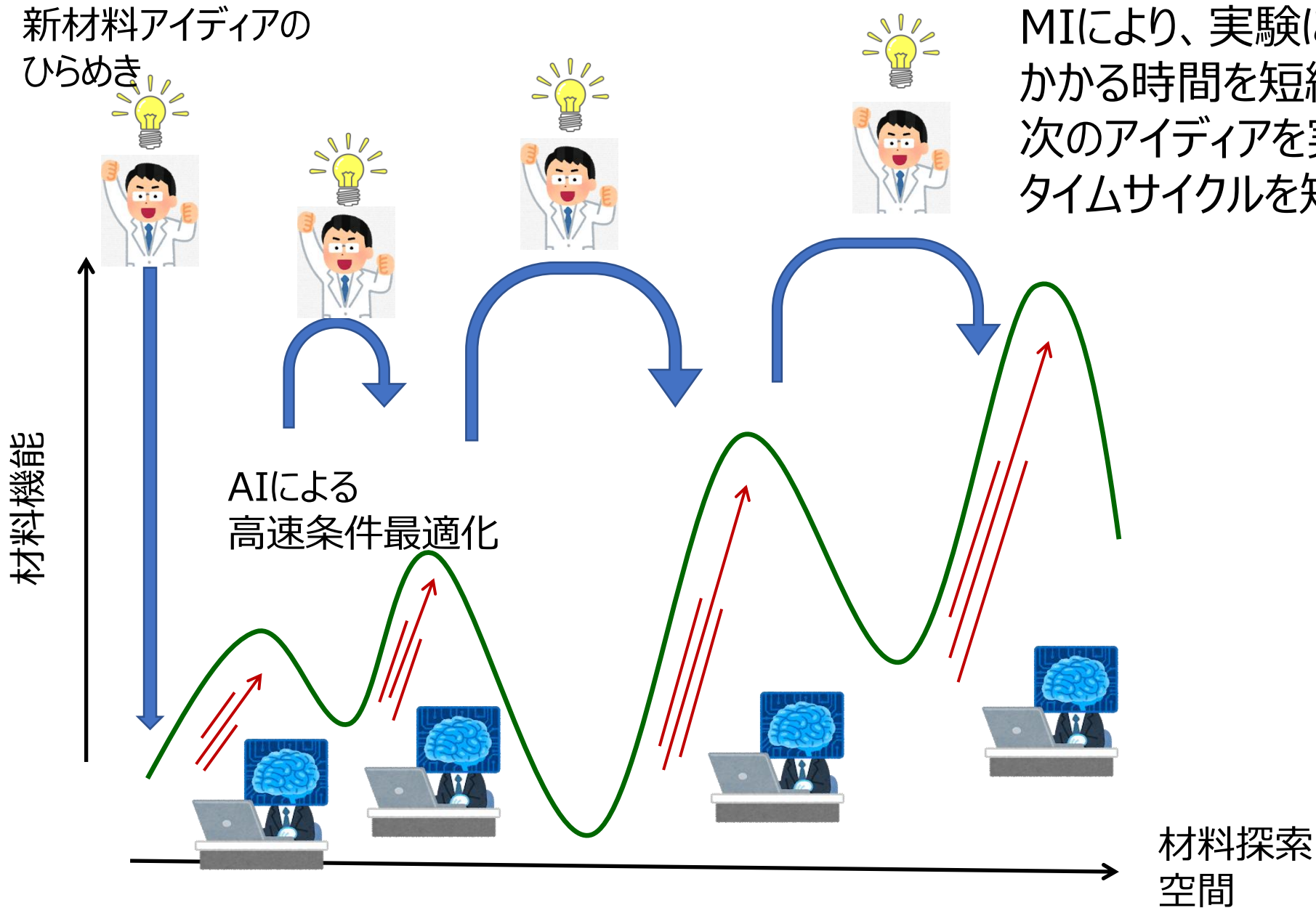
- 
- ・**新規材料開発の高速化**
 - ・**新規メカニズムの解明**

一般的な材料研究



データを使った材料探索（内挿）

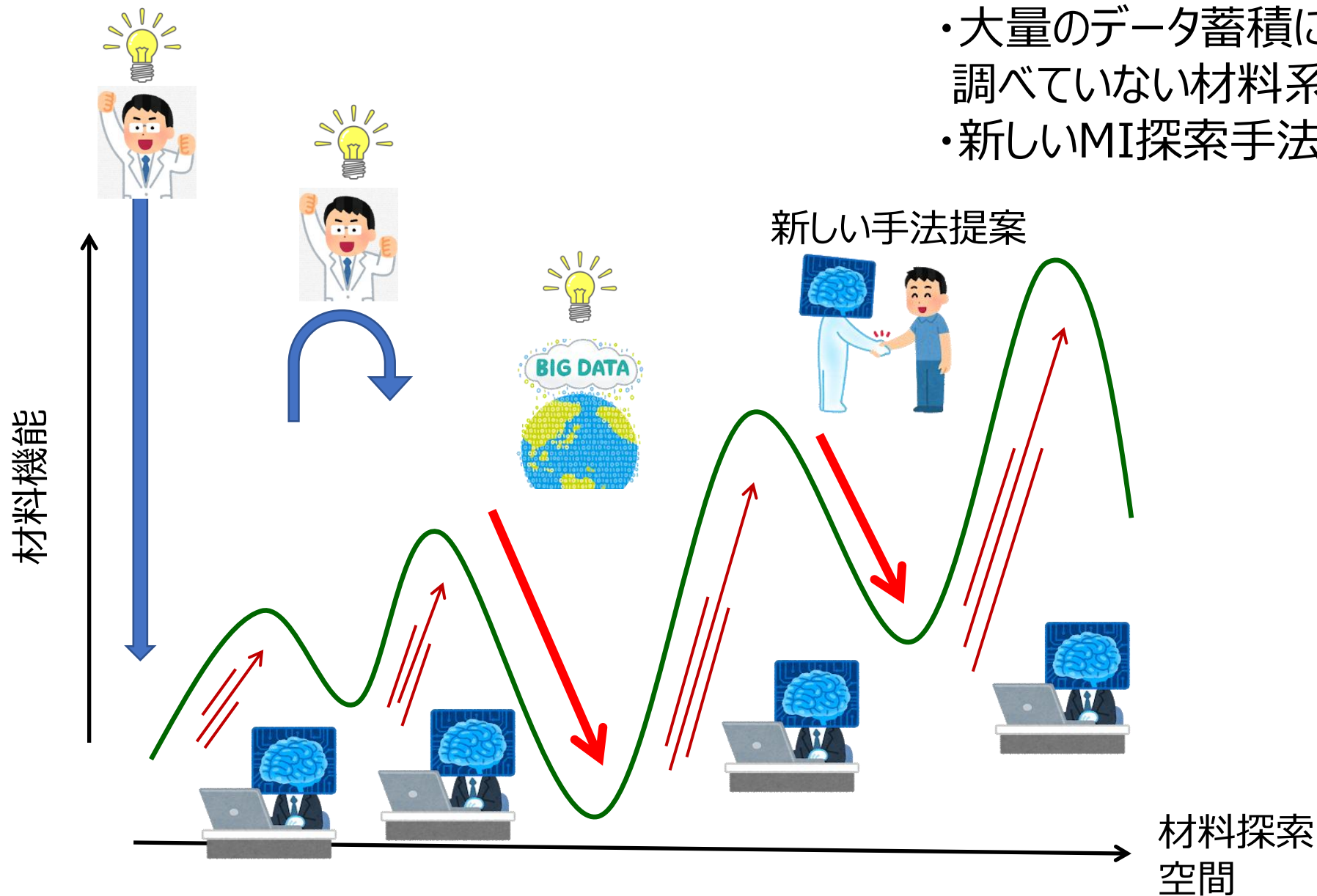
新材料アイデアの
ひらめき



MIにより、実験による最適化に
かかる時間を短縮する。
次のアイデアを実現するまでの
タイムサイクルを短縮。

データを使った材料探索（外挿）

- ・大量のデータ蓄積により、これまで調べていない材料系を提案
- ・新しいMI探索手法を提案



蓄積データの活用イメージ

データを溜めて、何に使うのか？

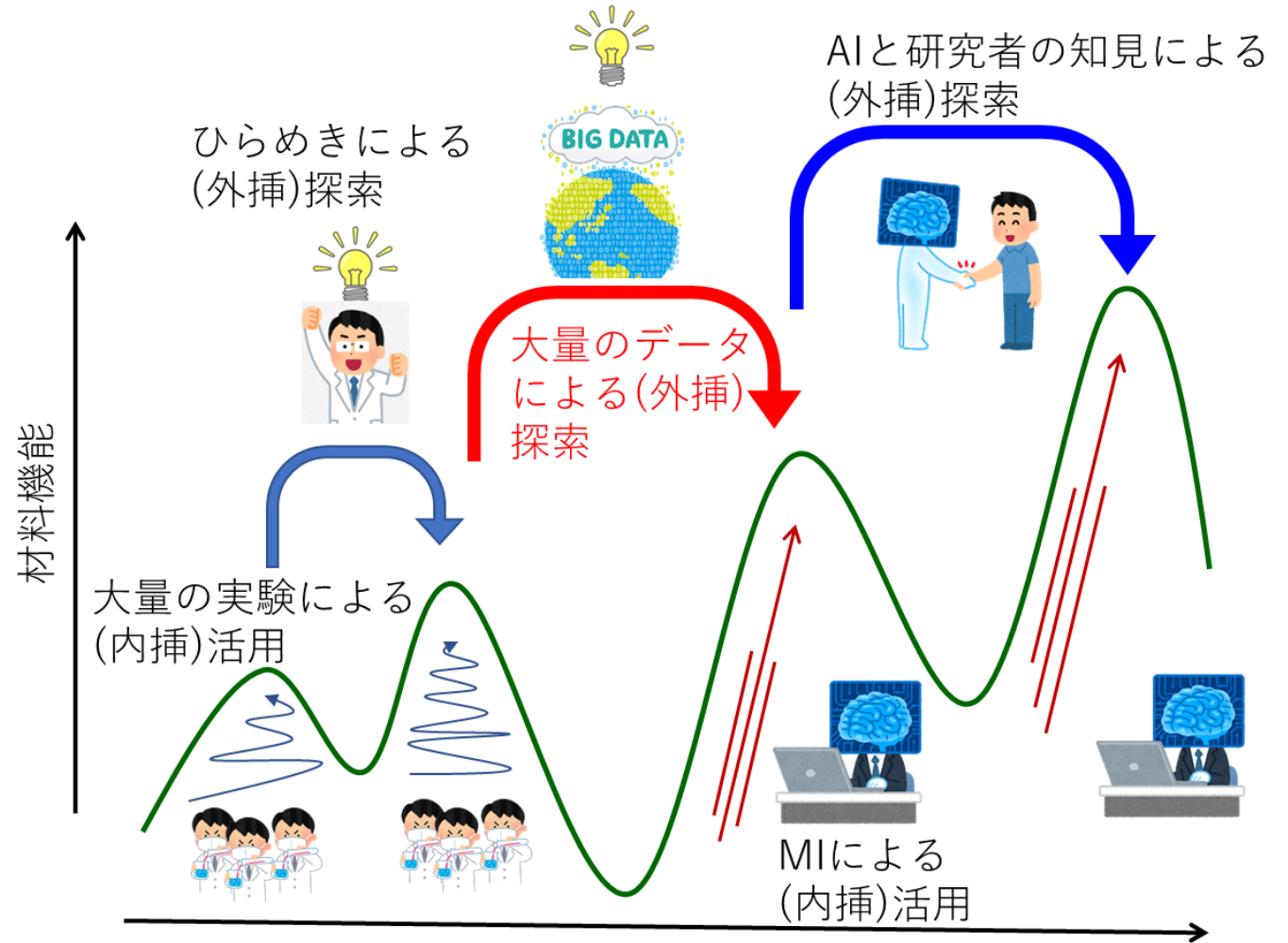
(材料研究者に、どのようなメリットがあるのか？)

➡ ・異なる研究者のデータを融合してMI解析→新材料の設計・開発。DB作成。

高性能材料の探し方指針：
探索(外挿)と活用(内挿)

探索(これまでにない領域を探索)
活用(既存の材料の周辺を最適化)

異なる研究者
異なる分野
の**データを連携**することで
新材料の外挿探索を行う。



本日の発表内容

アクティブラーニングを用いた解析

1. エポキシ系接着剤の実験条件最適化
2. 触媒の組成最適化 1
3. 触媒の組成最適化 2

AIによる分子組成の自動生成

4. ポリマー材料

データベース構築

5. NEDO燃料電池課題におけるデータ蓄積
6. MI解析基盤 (MIX platform)の紹介

本日の発表内容

アクティブラーニングを用いた解析

1. エポキシ系接着剤の実験条件最適化
2. 触媒の組成最適化 1
3. 触媒の組成最適化 2

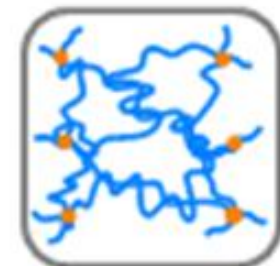
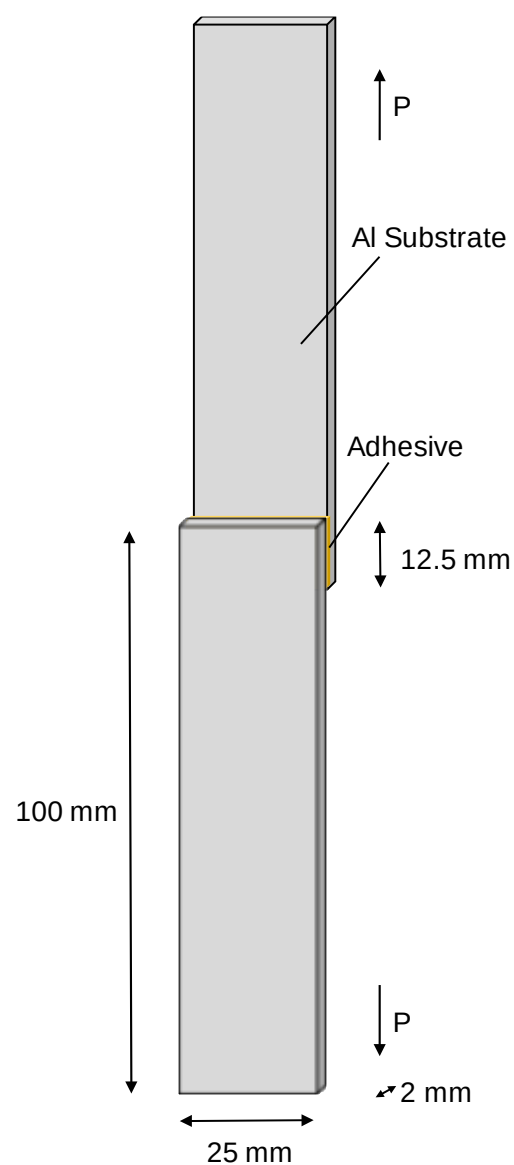
AIによる分子組成の自動生成

4. ポリマー材料

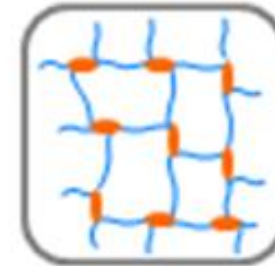
データベース構築

5. NEDO燃料電池課題におけるデータ蓄積
6. MI解析基盤 (MIX platform)の紹介

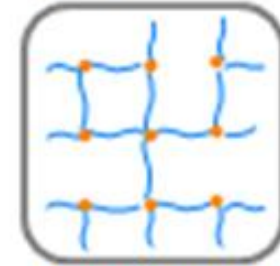
接着性能の高い高分子材料の大量設計



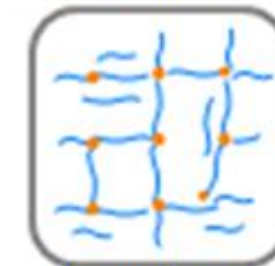
Epoxy resin MW



Curing agent MW



Amine to epoxide

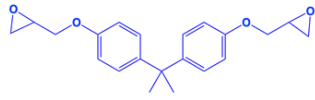


Curing temp.

Epoxy network structure parameter

Epoxy resin MW (g/mol)	Curing agent MW (g/mol)	Amine to epoxide ratio	Curing temp. (° C)
370	230	0.75	90
1650	400	1	130
2900	2000	1.25	170
3800	4000	1.5	210

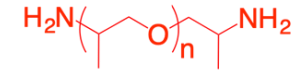
Epoxy Resin



Mw: g/mol Repeat unit (n)

370	1	
1650	4	
2900	8	
3800	10	

Hardner (Amine)



Mw: g/mol Repeat unit (n)

230	2.5	
400	6.1	
2000	33	
4000	68	

接着性能の高い高分子材料の大量設計

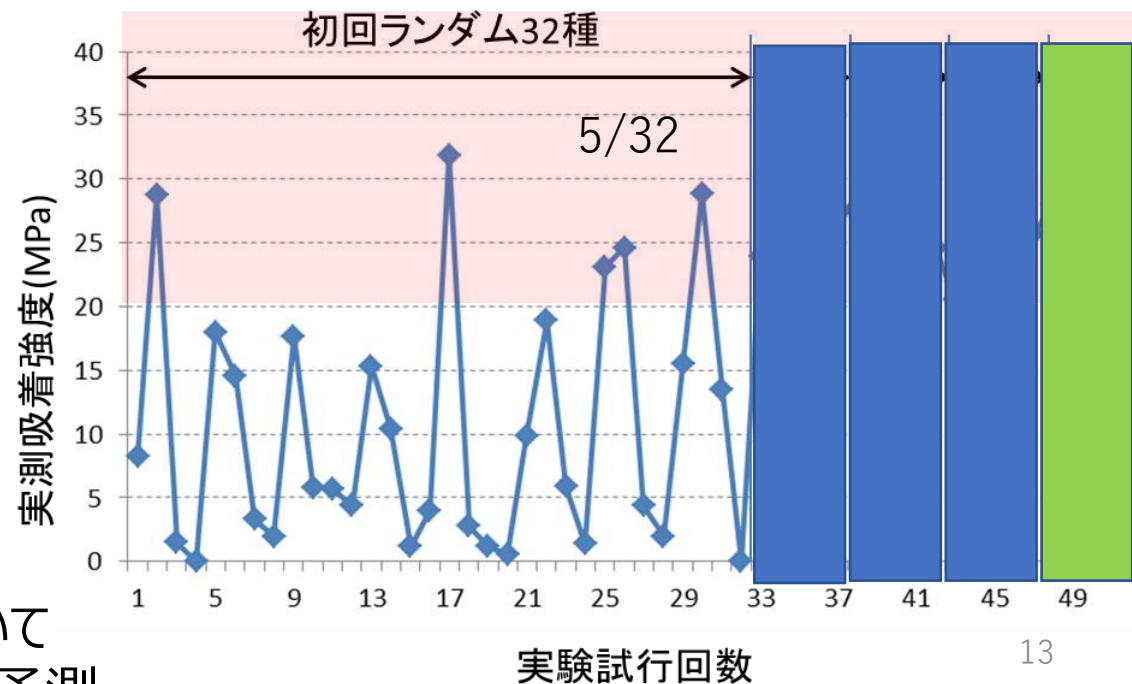
⇒接着性能に関して、材料探索スキームを確立、実証した

説明変数

- ・ポリマー 4種
- ・硬化剤 4種
- ・ポリマー/硬化剤比 4パターン
- ・硬化温度 4点

↓
256通り（全て実験するのは大変）

↓
32通りの実験値を元に、MIを用いて
20MPa以上の組み合わせを大量予測



Epoxy MW	Curing MW	ratio	temp.
2900	400	1.00	210
3800	400	1.00	210
370	400	1.00	210
1650	400	1.00	170

接着性能の高い高分子材料の大量設計

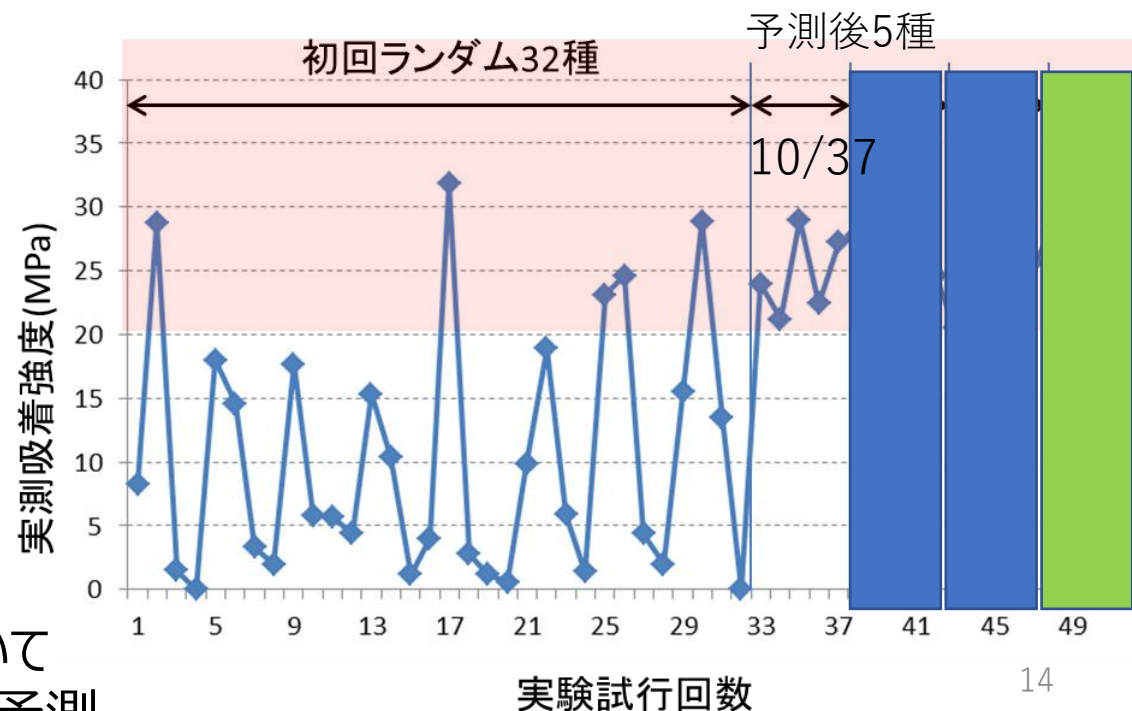
⇒接着性能に関して、材料探索スキームを確立、実証した

説明変数

- ・ポリマー 4種
- ・硬化剤 4種
- ・ポリマー/硬化剤比 4パターン
- ・硬化温度 4点

↓
256通り（全て実験するのは大変）

↓
32通りの実験値を元に、MIを用いて
20MPa以上の組み合わせを大量予測



Epoxy MW	Curing MW	ratio	temp.
370	400	1.25	210
370	400	1.25	170
370	400	1.50	210
370	400	1.50	170

接着性能の高い高分子材料の大量設計

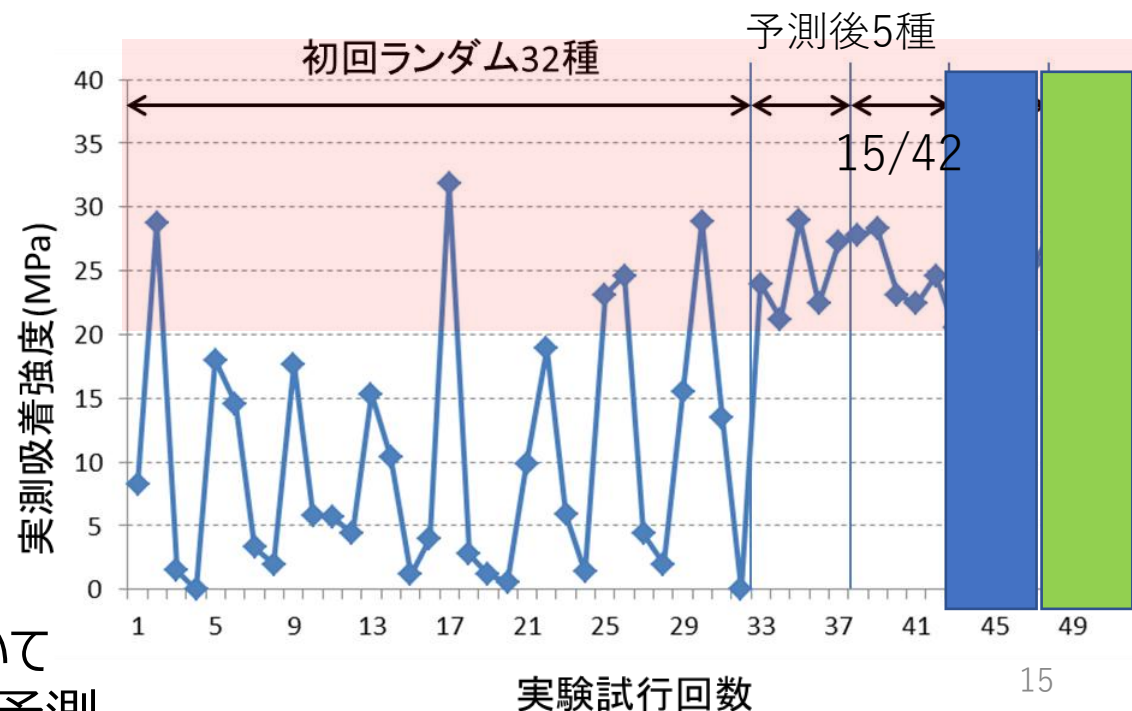
⇒接着性能に関して、材料探索スキームを確立、実証した

説明変数

- ・ポリマー 4種
- ・硬化剤 4種
- ・ポリマー/硬化剤比 4パターン
- ・硬化温度 4点

↓
256通り（全て実験するのは大変）

↓
32通りの実験値を元に、MIを用いて
20MPa以上の組み合わせを大量予測



Epoxy MW	Curing MW	ratio	temp.
2900	400	1.00	170
370	230	1.00	210
370	230	1.00	170
1650	400	1.25	170

接着性能の高い高分子材料の大量設計

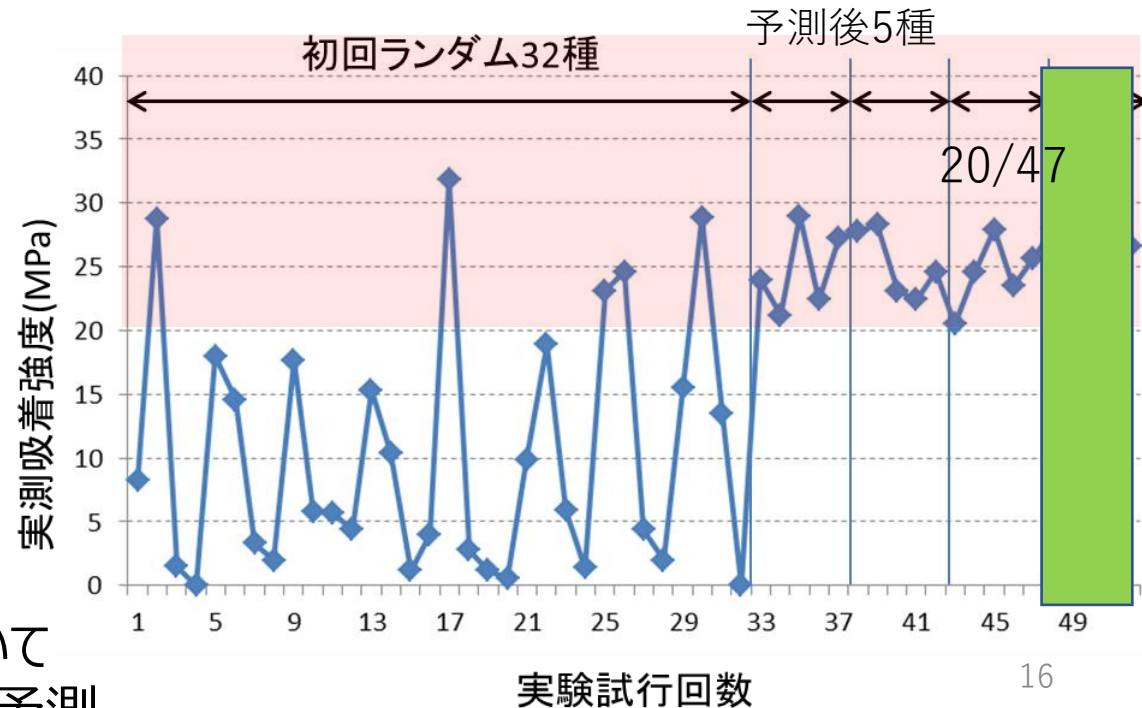
⇒接着性能に関して、材料探索スキームを確立、実証した

説明変数

- ・ポリマー 4種
- ・硬化剤 4種
- ・ポリマー/硬化剤比 4パターン
- ・硬化温度 4点

↓
256通り（全て実験するのは大変）

↓
32通りの実験値を元に、MIを用いて
20MPa以上の組み合わせを大量予測



Epoxy MW	Curing MW	ratio	temp.
3800	400	1.25	210
2900	400	1.50	210
1650	400	1.50	210
1650	400	1.50	170

接着性能の高い高分子材料の大量設計

⇒接着性能に関して、材料探索スキームを確立、実証した

説明変数

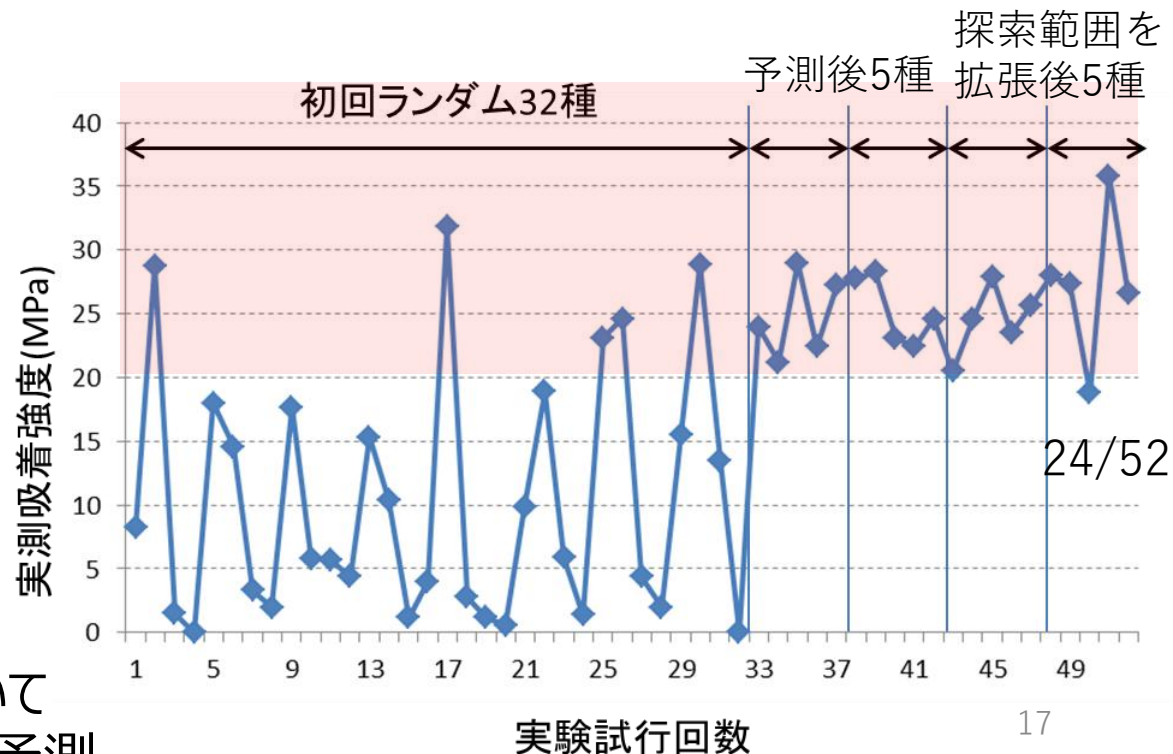
- ・ポリマー 4種
- ・硬化剤 4種
- ・ポリマー/硬化剤比 4パターン
- ・硬化温度 4点



256通り（全て実験するのは大変）

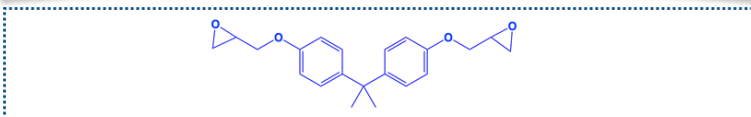


32通りの実験値を元に、MIを用いて
20MPa以上の組み合わせを大量予測



Epoxy MW	Curing MW	ratio	temp.
370	400	1.11	199
370	400	1.24	194
370	400	1.30	191
370	400	0.89	209

Epoxy Resin



Mw: g/mol Repeat unit (n)

370	1	
-----	---	--

1650	4	
------	---	--

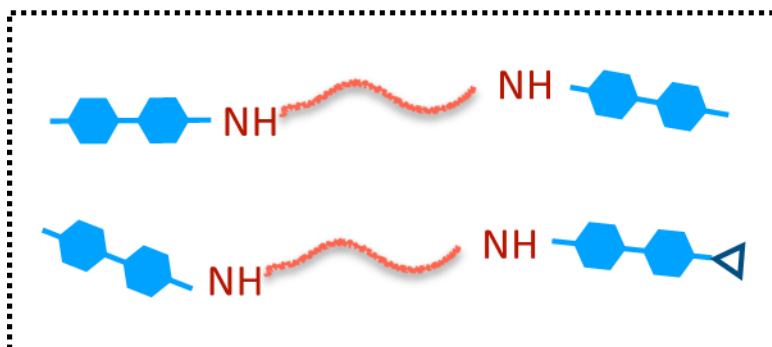
2900

2nd shortest

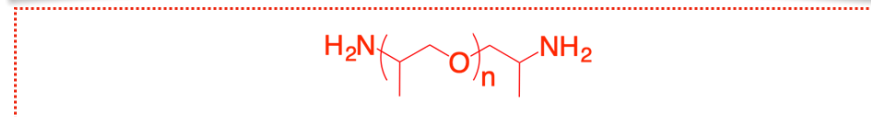


shortest

3800



Hardner (Amine)



Mw: g/mol Repeat unit (n)

230	2.5	
-----	-----	--

400	6.1	
-----	-----	--

10 33

10

33

68

10

触媒組成の最適化 1 (アクティブラーニング)

- 非白金水素酸化触媒の組成探索 (北大 加藤先生)

・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

31種の多元合金触媒の実験データ (活性)

目的変数 : current densities @ 0.02 V vs. RHE
(Ptの使用量を減らす)
説明変数 (制御変数) : 合金に使う金属元素の量

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

新規触媒の
合成 (4
種)

Active leaning loop x3
(Bayesian optimization)

新規材料のMIに
よる提案 (4種)

触媒活性の高い、非白金触媒の探索
(まずはPtを含むものから探索)

触媒組成の最適化 1 (アクティブラーニング)

- 非白金水素酸化触媒の組成探索

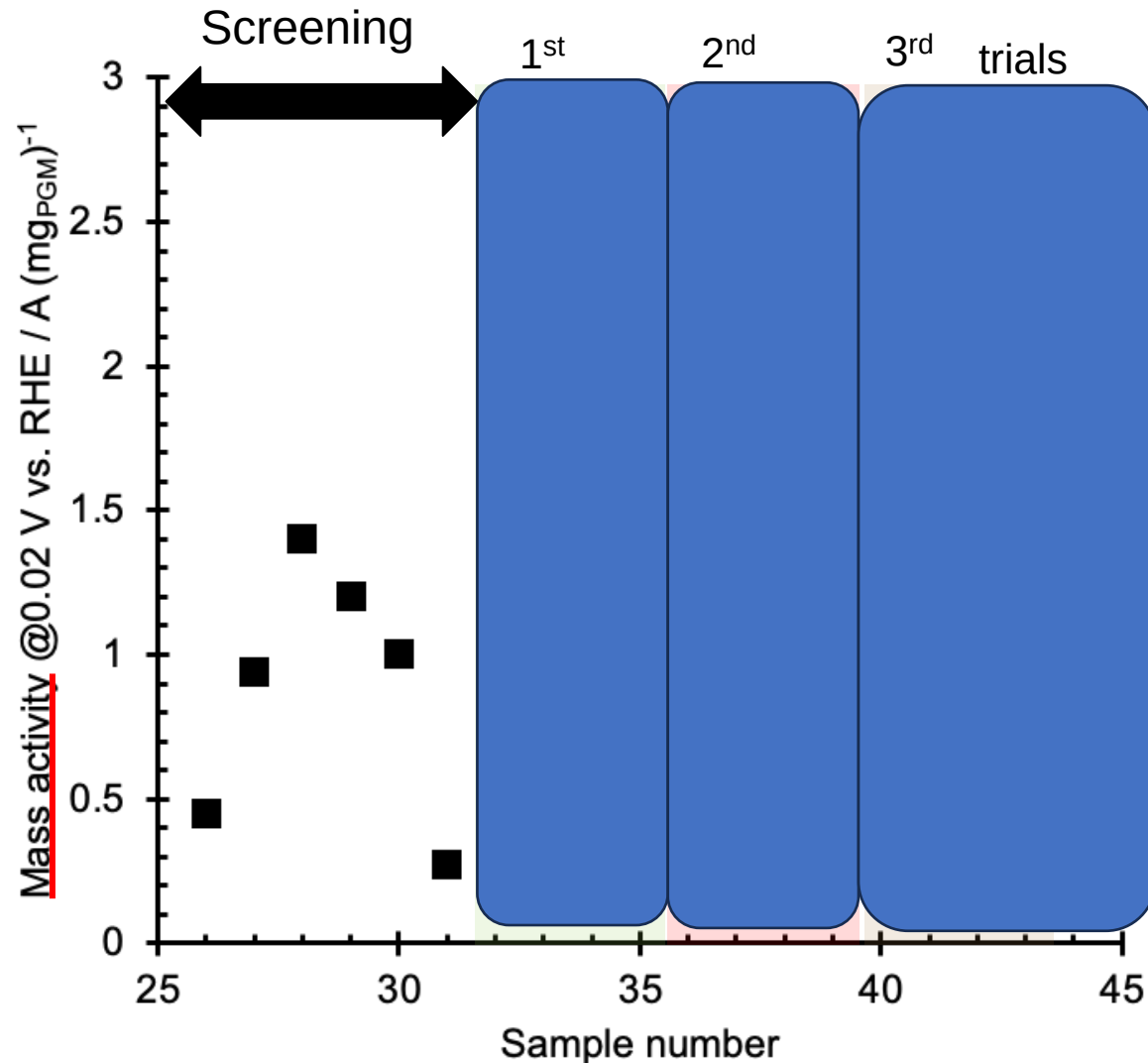
・非白金触媒の**アクティブラーニング**による探索 ⇒ 1. 触媒活性を最大化、2. 白金量を最小化

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

触媒組成の最適化 1 (アクティブラーニング)

- 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

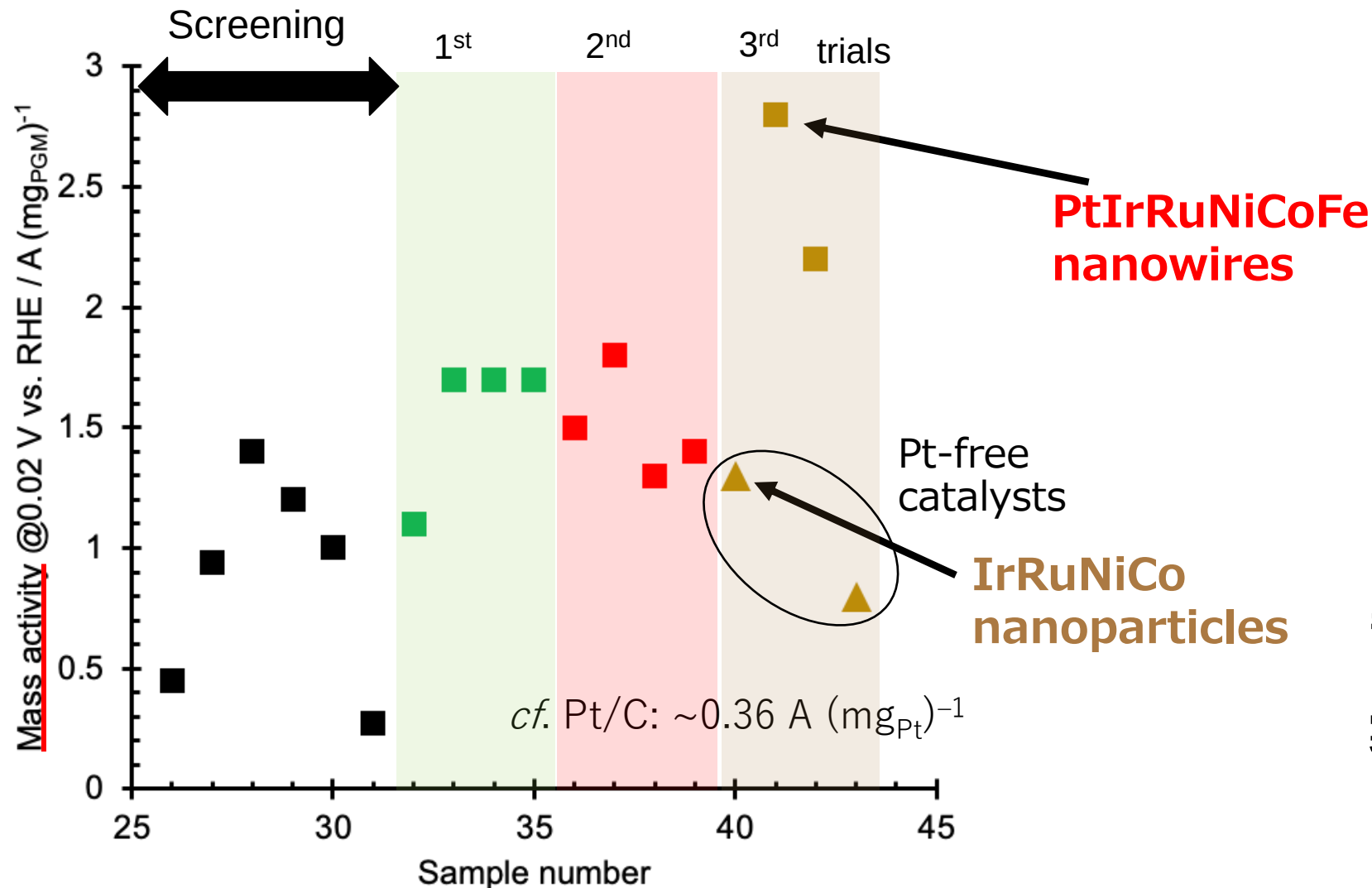


Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

触媒組成の最適化 1 (アクティブラーニング)

- 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



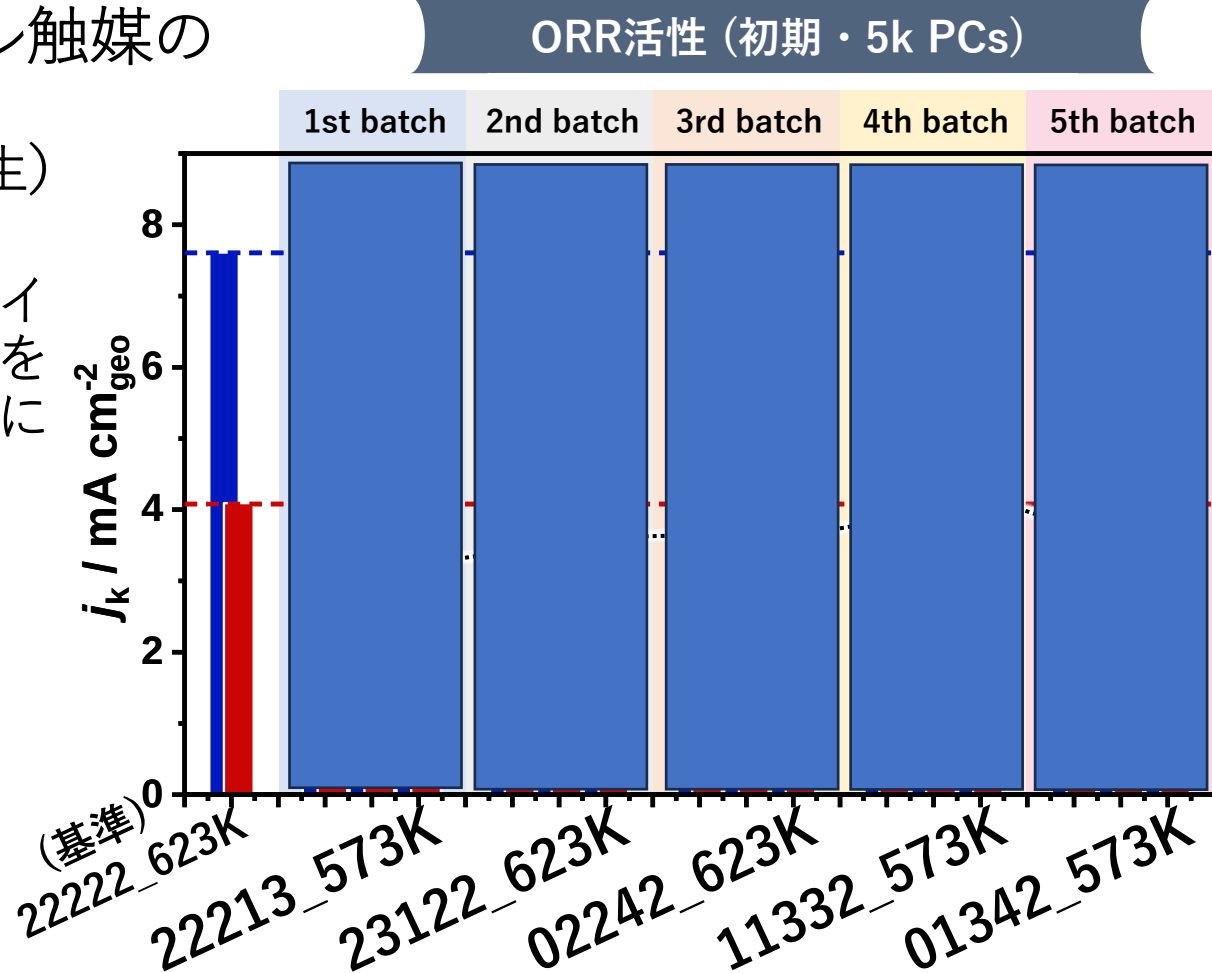
Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl

- ・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。

触媒組成の最適化 2 (アクティブラーニング)

Pt-HEA(111)モデル触媒の
合成条件検討
(東北大学 和田山先生)

ハイレントロピーアロイ
触媒の組成と実験条件を
アクティブラーニングに
より最適化。



高性能新規触媒組成と合成
温度を提案したい

・触媒組成情報と合成温度
のみから物性予測に成功

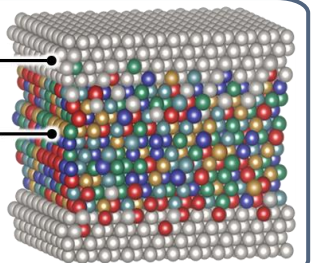
初期

5k PCs後
活性

合成温度 (T_{Pt})

Cr-Mn-Fe-Co-Ni組成比
($a:b:c:d:e$)

⇒ $abcde_T_{Pt}K$



✓ 1st ~ 4th batchまでは、batch内で最高の特性を示した試料の”5kPCs後活性”が
batch毎に向上 ⇒ 4th batchで Pt / 等組成Cr-Mn-Fe-Co-Ni と同等のORR特性

✓ 非等組成比5元系, 4元系の合金化元素でも高ORR特性を示す合成条件を発見

本日の発表内容

アクティブラーニングを用いた解析

1. エポキシ系接着剤の実験条件最適化
2. 触媒の組成最適化 1
3. 触媒の組成最適化 2

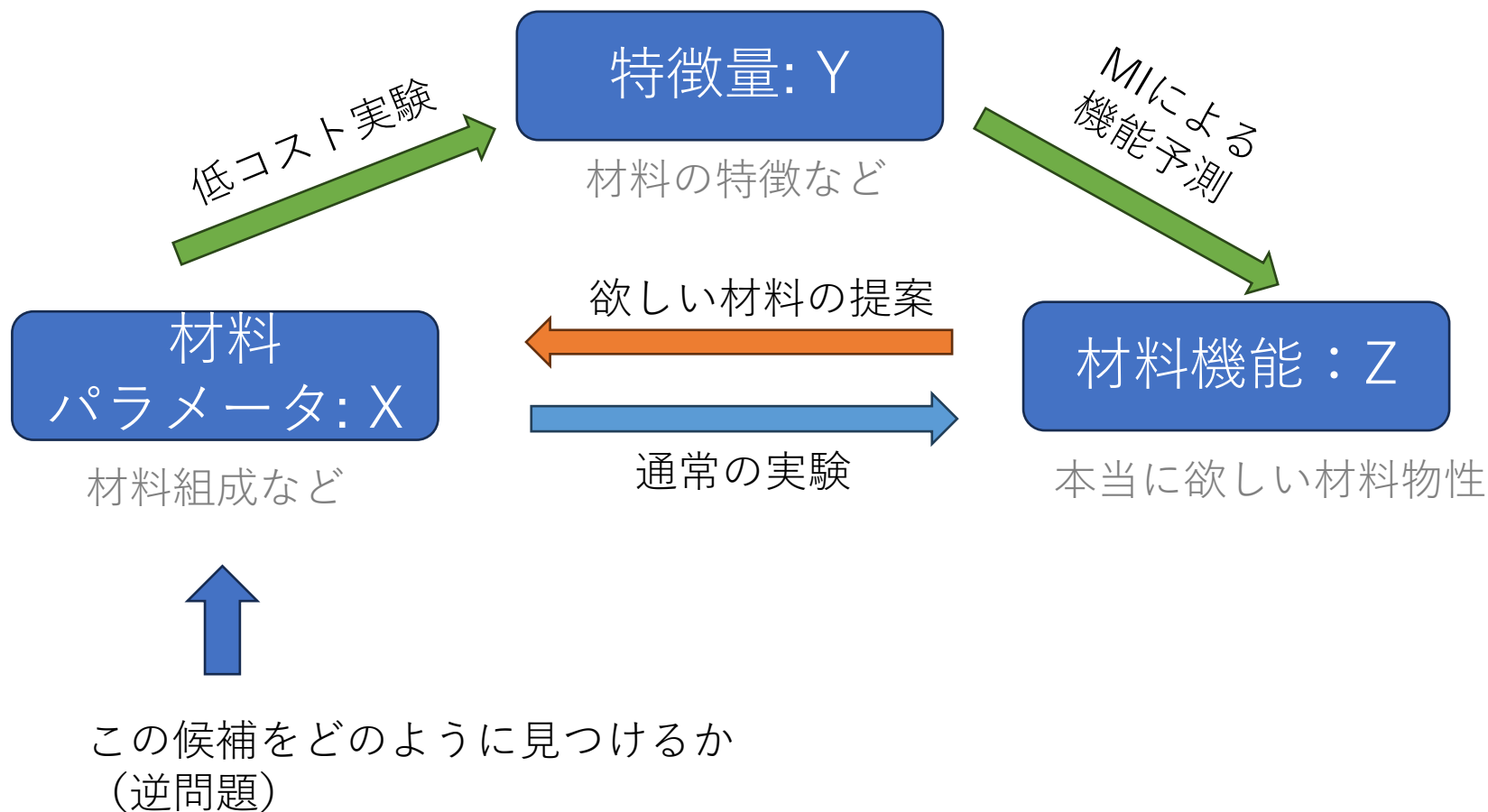
AIによる分子組成の自動生成

4. ポリマー材料

データベース構築

5. NEDO燃料電池課題におけるデータ蓄積
6. MI解析基盤 (MIX platform)の紹介

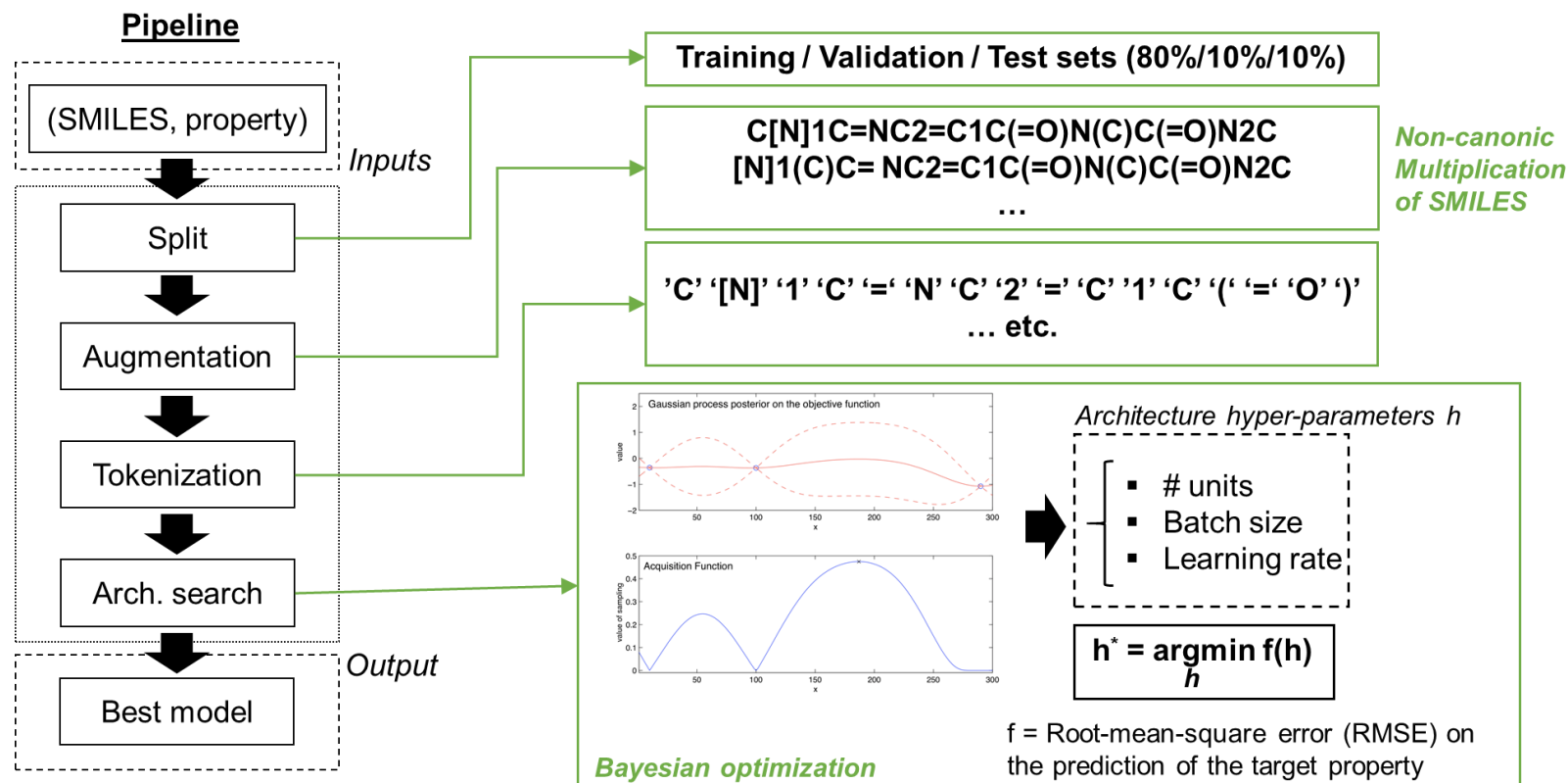
データ科学(人工知能)による材料探索



AI技術による新材料生成

自然言語処理AI

SMILES-Xによる新規高分子材料探索

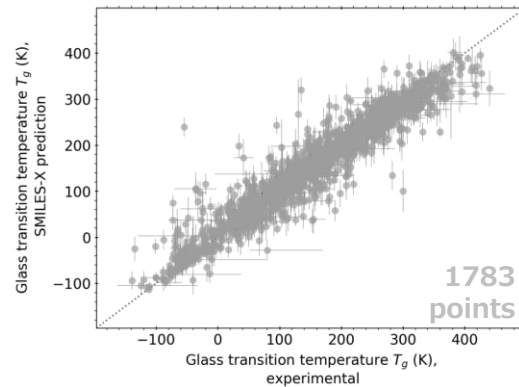


PoLyInfoを使った高分子の線形膨張率予測

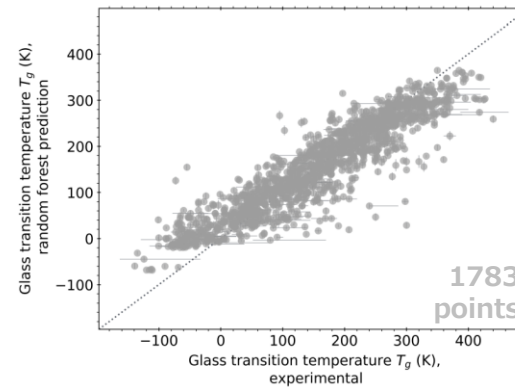
E. Gracheva, et al., STAM-methods, 1(1) 213, 2021.

ガラス転移温度 T_g

SMILES-X



Random forest



PoLyInfoのデータを利用した
高分子MI解析

⇒Tg予測成功。

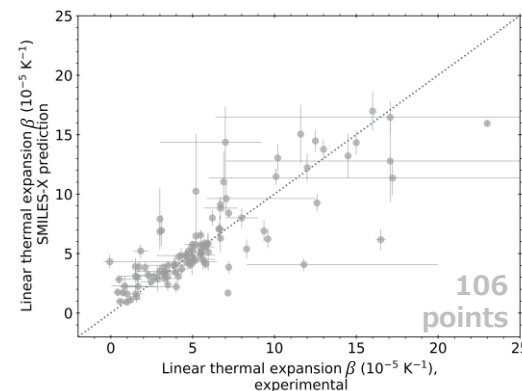
- データ数が多い。
- モノマー構造で物性予測可能。

⇒線形膨張係数の予測
比較的よく予測することに成功。

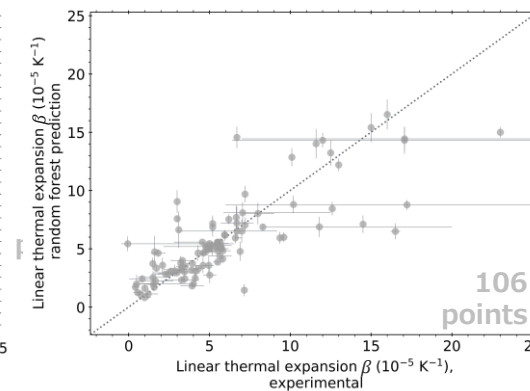
- モノマー構造のみのデータで高次構造の情報を表現できる可能性を示した。

線形熱膨張係数, β

SMILES-X



Random forest



Property	Model	R ² -score	RMSE
$\beta(10^{-5} \text{ K}^{-1})$	SMILES-X	0.68 ± 0.06	2.44 ± 0.17
	Random forest	0.65 ± 0.02	2.54 ± 0.07
$T_g \text{ (K)}$	SMILES-X	0.92 ± 0.00	33.21 ± 0.68
	Random forest	0.84 ± 0.00	45.70 ± 0.62

耐熱高分子材料の設計: ガラス転移点(T_g)の予測と、 新規高分子の提案

データ収集 (PoLyInfo DB, 7193サンプル)



T_g の予測 (SMILES-Xコードの利用)



新規高分子の化学構造を自動設計
(SMILES-Xコードの利用)



実験研究者と合成の可否を
議論



実際に合成成功
高い耐熱性を確認！

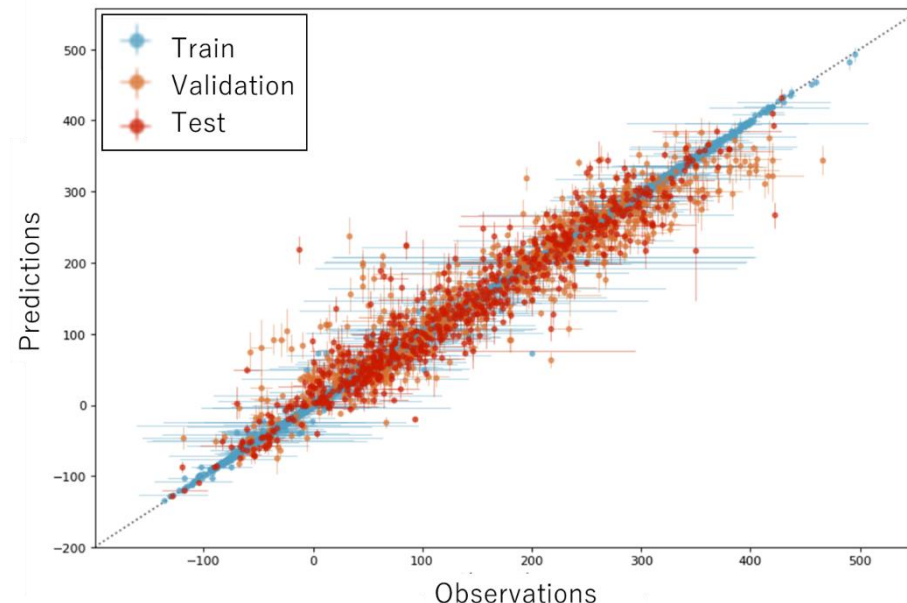


Fig. 1. SMILES-Xによる T_g の予測値

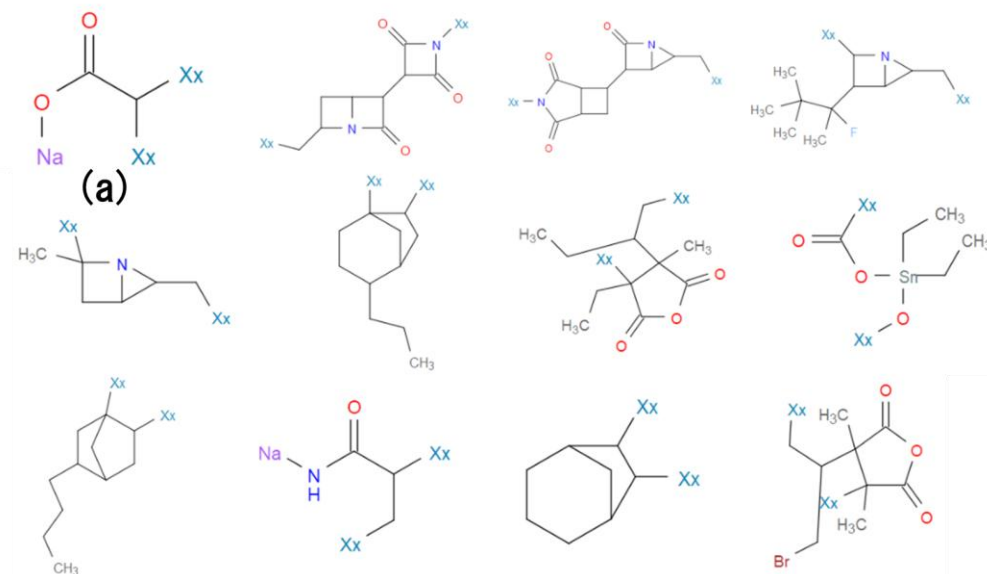


Fig. 2. SMILES-Xにより自動生成された
 $T_g > 250^\circ\text{C}$ と予測される高分子のモノマー構造

本日の発表内容

アクティブラーニングを用いた解析

1. エポキシ系接着剤の実験条件最適化
2. 触媒の組成最適化 1
3. 触媒の組成最適化 2

AIによる分子組成の自動生成

4. ポリマー材料

データベース構築

5. NEDO燃料電池課題におけるデータ蓄積
6. MI解析基盤 (MIX platform)の紹介

異なる研究者、分野のデータ連携 →合体した大きな表を作成

サンプル名	特徴量			
	事業者A			
個別データのテーブル				

1. 事業者内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。

異なる研究者、分野のデータ連携 →合体した大きな表を作成

		特徴量			
サンプル名	事業者A				
		事業者B			
			...		
事業者間の全データを融合させたテーブル					

1. 事業者内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。
2. 個別データ間の関連性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。

異なる研究者、分野のデータ連携 →合体した大きな表を作成

		特徴量		
サンプル名	事業者A		①共通するデータを抽出	
	事業者B			
		...		
事業者間の全データを融合させたテーブル				

1. 事業者内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。
2. 個別データ間の関連性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。
3. 非対角成分にデータを与えるため、
①個別データ間で共通するデータを抽出する。（データの共通リスト化）

異なる研究者、分野のデータ連携 →合体した大きな表を作成

サンプル名	特徴量				XRD ^{DFT} ...		
	事業者A		①共通するデータを抽出				
		事業者B	②共通する計測・計算データを利用				
			...				
事業者間の全データを融合させたテーブル							

1. 事業者内の全てのデータを融合させ、一枚のテーブルを作る。
2. 個別データ間の関連性を考慮していないため、非対角成分にデータが無く、データ解析ができない。
3. 非対角成分にデータを与えるため、
 - ①個別データ間で共通するデータを抽出する。(データの共通リスト化)
 - ②個別データ間で共通する計測手法や計算データを利用する。

⇒大量に蓄積される、異なる性質のデータを利用した解析の実施が可能に。

⇒異なる分野のデータ連携も試みる。

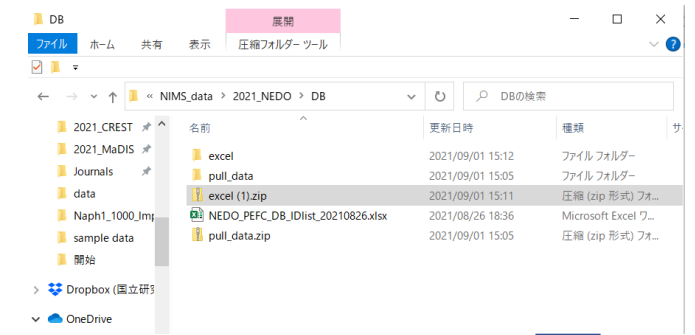
MIX Platform (データ蓄積・MI解析webアプリ)

ウェブブラウザ (Chrome推奨) でURLにアクセス

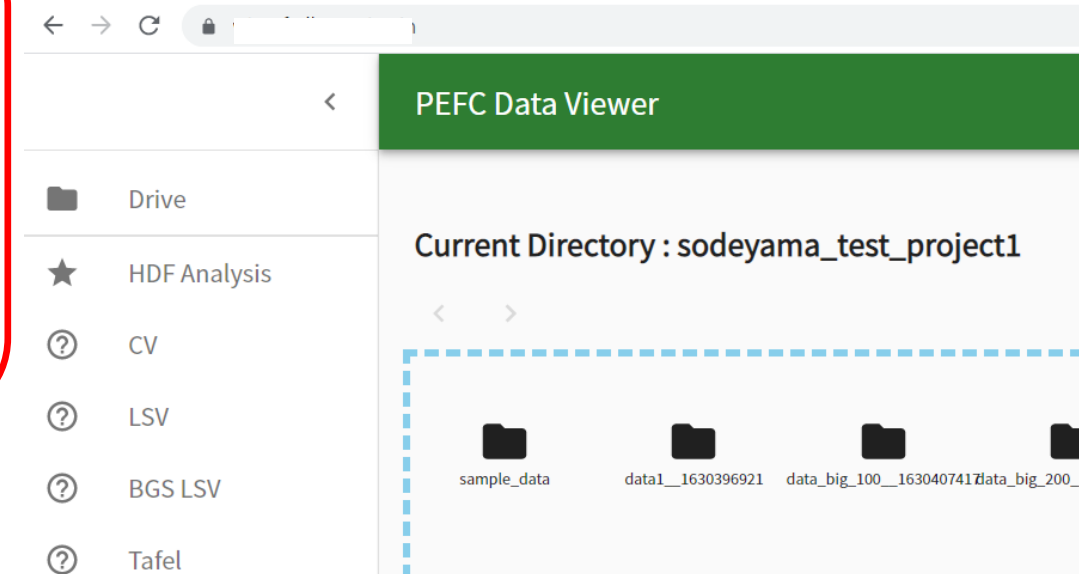
→データをアップロードする画面が表示
アップロード後、以下の機能が利用可能。

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

エクスプローラー



ウェブアプリに
ドラッグ&ドロップ



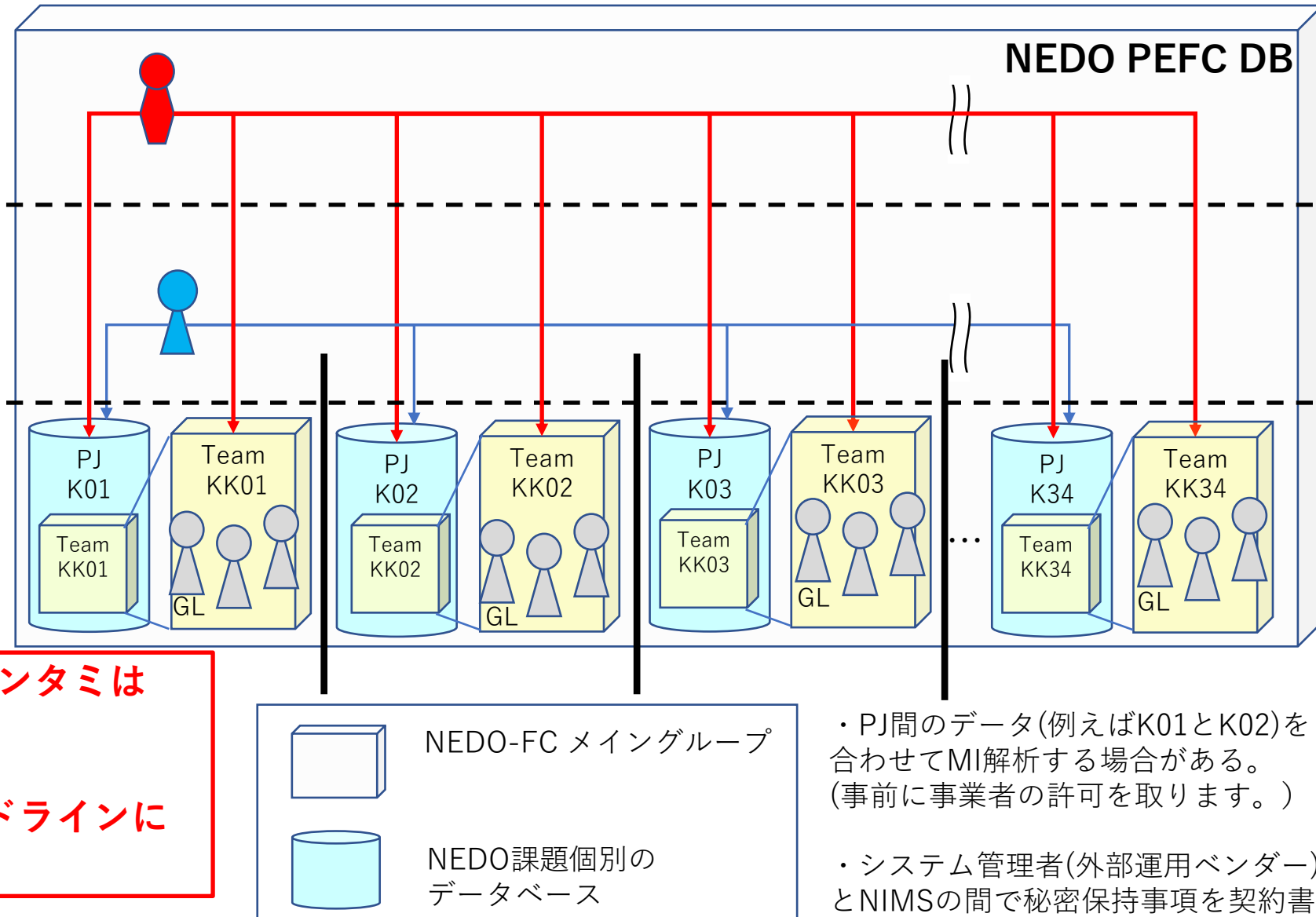
MIX Platform (データ蓄積・MI解析webアプリ)

 **PF マネジメントグループ**
○メンバーの追加/削除と権限付与
○プロジェクトの作成・削除
○データの閲覧・編集・消去

 **PF MIグループ**
○データの閲覧(編集は不可)

 **材料研究グループ (34事業のGL)**
○自分のPJのデータのみ閲覧可能
○PJ内でデータの書き込み・消去
○グループ内の利用者をリスト化→読み書きできるユーザーを管理者が追加
×他のプロジェクトの閲覧

- ・異なるプロジェクトとのデータのコンタミはありません。
- ・運用は、基本的にMETI公開のガイドラインに沿って行います。



・PJ間のデータ(例えばK01とK02)を合わせてMI解析する場合がある。
(事前に事業者の許可を取ります。)

・システム管理者(外部運用ベンダー)とNIMSの間で秘密保持事項を契約書に記載

MIX Platform (データ蓄積・MI解析webアプリ)

1. 表形式のデータを読み込み (.csvファイル)

➤既にきれいな形に揃っているデータを想定。

2. データのMI解析が可能

➤散布図、ヒストグラム分布、相関係数のヒートマップをウェブアプリ上で描画可能。

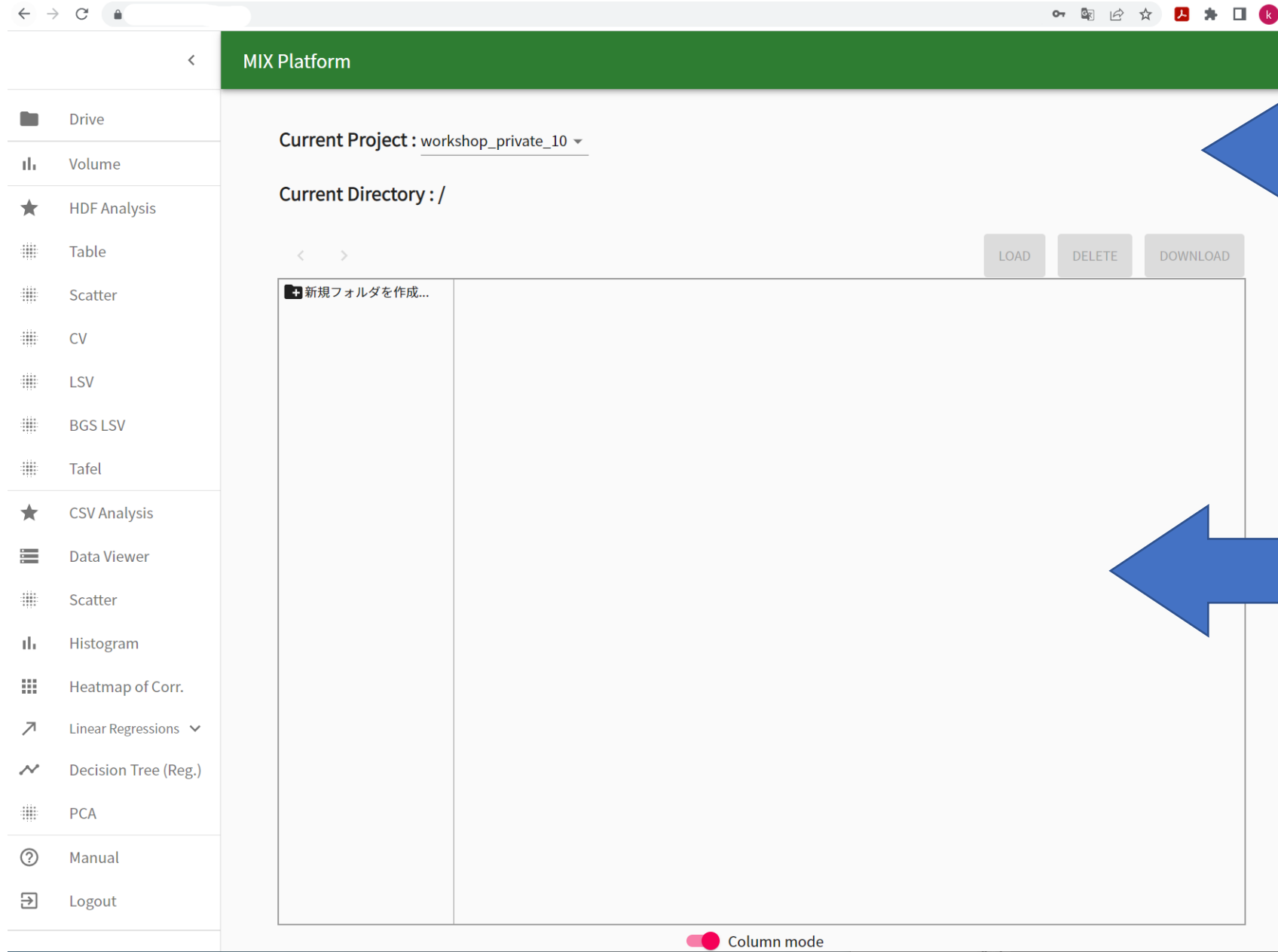
➤線形回帰 (重回帰、LASSO、Ridge回帰)を利用可能。

欲しい物性値の予測と、何が予測に効くかの要因解析をウェブアプリ上で実施。

⇒新機能(v4)

1. 非線形回帰手法(**決定木、Random Forest、XGBoost**)の追加
2. **全状態探索** (線形回帰) 手法の追加
3. **ベイズ最適化**の追加
4. 主成分分析、UMAPの追加
5. その他 (データ上書き機能追加、PPTファイル出力機能追加...)

MIX Platformでできること (DBへの蓄積)



①ウェブブラウザから
アクセス可能
(windowsやMacで
利用可能)

②Drag & dropで
データを簡単に
アップロードできる
(テキストやエクセル
ファイルに対応)

↓
自動的にファイルの中身
を読み取って構造化

MIX Platformでできること (DBへの蓄積)

PEFC Data Viewer

Current Directory: sample_data_csv

Metadata entry

データ提供者: 山田 太郎
実験方法: CV
サンプル識別子 (任意): 白金
キーワード・タグ (任意): #うまかった × 論文 ×

所属: NIMS
データ取得日: 2021/10/15

実験状況 (任意)

項目名	値	
温度	26°C	🗑️
湿度	40%	🗑️

+ 項目を追加

備考

OK CANCEL

③必要最小限の実験条件 (メタデータ) をデータアップロード時に入力
↓
生データと共にDBに保存

④データ提供者が保存しておきたい項目やメモは自由記述で保存可能 (キーワードはハッシュタグで保存)

MIX Platformでできること (DBへの蓄積)

The screenshot displays the MIX Platform's file management interface. On the left, a sidebar shows a list of folders, with 'data1_solvents__1695788257042' highlighted. The main area shows the contents of this folder, including a file named 'data1_solvents.csv'. To the right of the file list are three buttons: 'LOAD CSV' (green), 'DELETE' (pink), and 'DOWNLOAD' (green). A large blue arrow points from the 'DOWNLOAD' button to a text box on the right. Another blue arrow points from a text box on the left to the 'data1_solvents.csv' file.

⑤MacのFinder風に
ファイルを表示
(構造化データ + 生データ)

⑥DOWNLOAD: ファイルを
自由にダウンロード可能
LOAD CSV: MIX Platformの
MI解析機能を利用可能

MIX Platformでできること (MI解析)

Data Viewer (アップロードしたデータの確認、特徴量の選択/非選択)

①MI解析時に利用
するかどうかを
データごとに選択可能

MIX Platform

Data Viewer

Enabled	Name	Flashpoint	Molecularweight	density	BoilingPoint	MeltingPoint	LUMO	HOMO	Dipolemoment	DELisolv
☒	1	204	434.63	0.93	215	-70	1.103	-7.622	3.387	-0.110336759
☒	2	178	218.33	1.22	310	59	-1.108	-6.111	1.597	-0.067238919
☒	3	170	119.12	1.36	240	98	-1.325	-6.694	3.792	-0.090462811
☒	4	165	120.17	1.26	285	28	0.826	-7.383	5.087	-0.101567304
☒	5	161	136.19	0.93	172	-3.5	0.497	-8.789	0.001	-0.07532871

Rows per page: 5 1-5 of 82

Dense padding

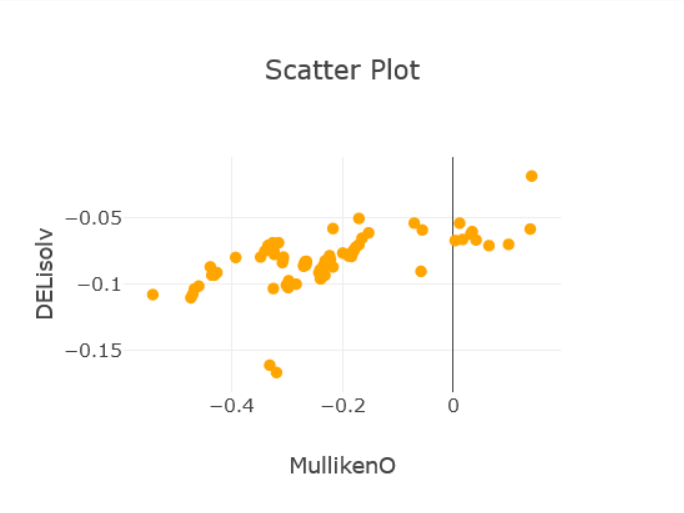
MIX Platformでできること (MI解析)

散布図の描画(Scatter)

MIX Platform

EXPORT PPTX

Scatter Plot



MullikenO

DELisolv

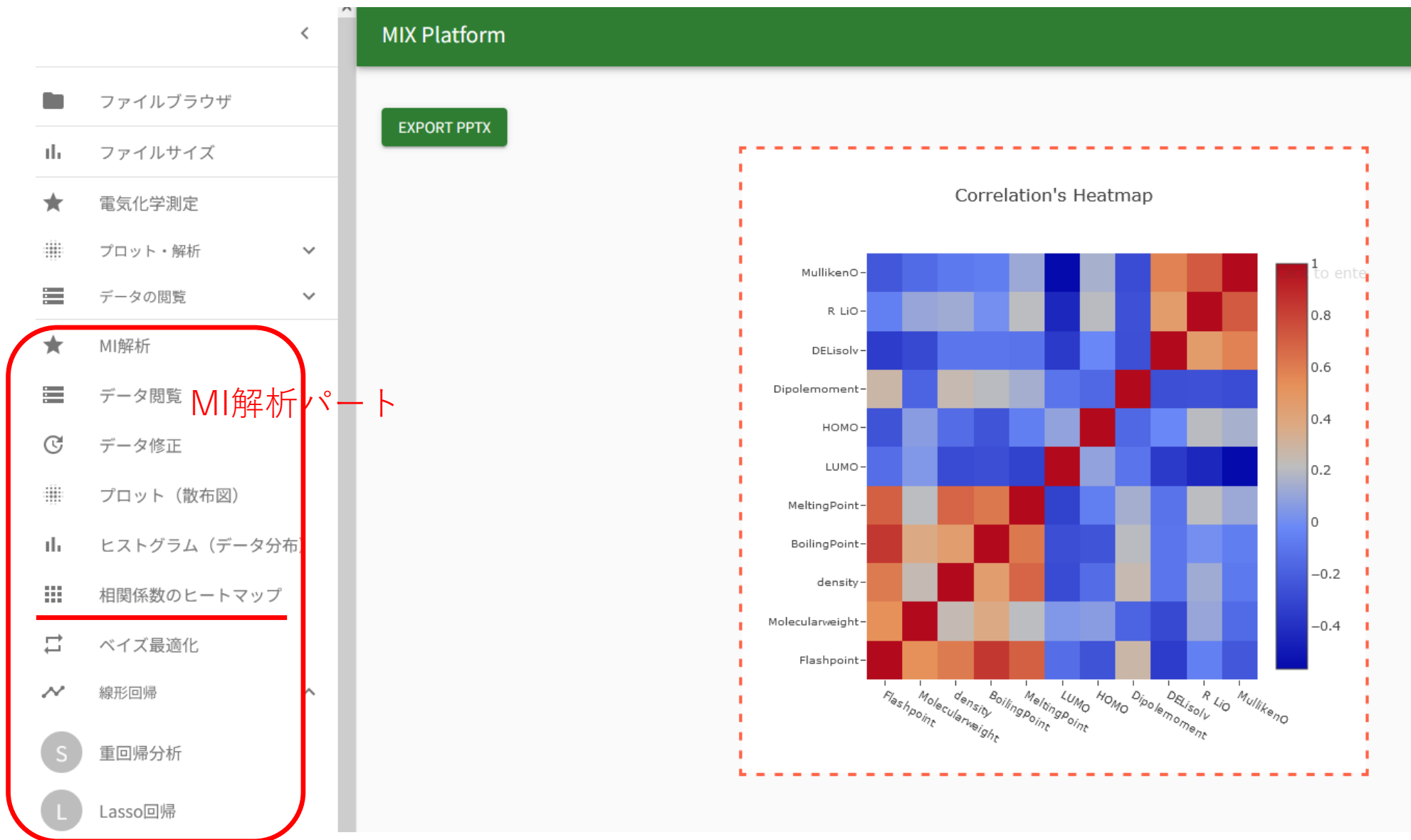
MI解析パート

プロット (散布図)

x 軸、y 軸を選択
(y軸が回帰分析時の
目的変数になる)

MIX Platformでできること (MI解析)

相関係数のヒートマップ(Pearsonの相関係数)



MIX Platformでできること (MI解析)

線形回帰分析(LASSO分析)

ファイルブラウザ

ファイルサイズ

電気化学測定

プロット・解析

データの閲覧

MI解析

データ閲覧

データ修正

プロット (散布図)

ヒストグラム (データ分布)

相関係数のヒートマップ

ベイズ最適化

線形回帰

重回帰分析

Lasso回帰

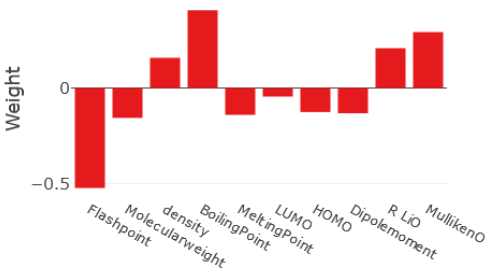
Ridge回帰

MIX Platform

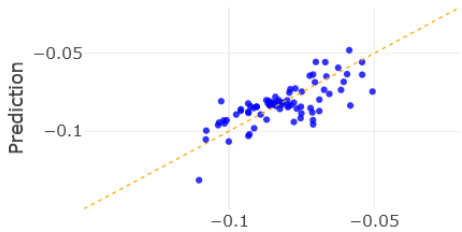
EXPORT PPTX

EXPORT COEFFICIENTS

Lasso Regression of DELisolv



True value vs Prediction (DELisolv)



R_f^2 : 0.477

RELOAD

0.0

100.0

K-FOLD CROSS VALIDATION

k

5

R_f^2 : NaN $\pm$ 0.000

F_{cv} : NaN $\pm$ 0.000

RMSE: NaN $\pm$ 0.000

MAE: NaN $\pm$ 0.000

RMSE: 0.013

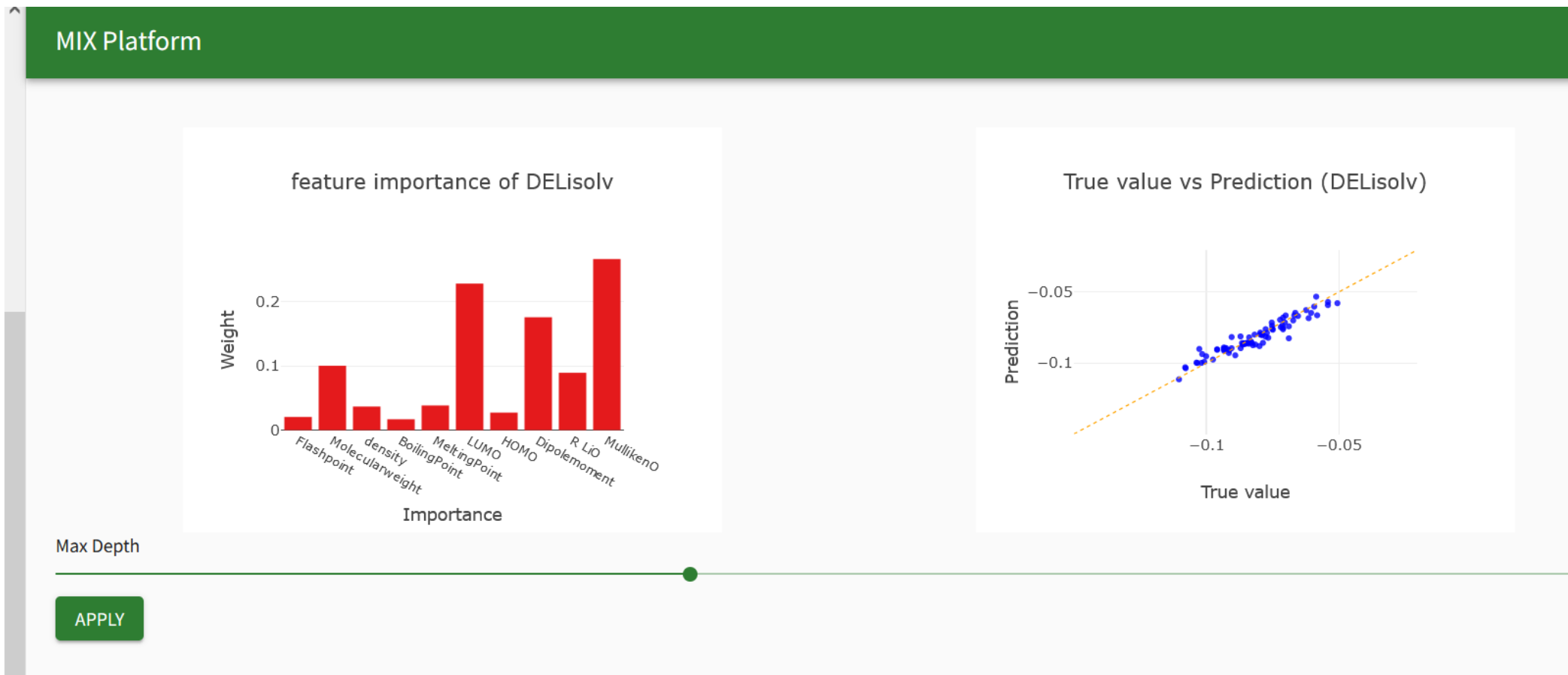
MAE: 0.096

ハイパーパラメータの
手動選択

MIX Platformでできること (MI解析)

非線形回帰分析(Random Forest) [新機能]

- データ閲覧
- データ修正
- プロット (散布図)
- ヒストグラム (データ分布)
- 相関係数のヒートマップ
- ベイズ最適化
- 線形回帰
- 非線形回帰**
- 非線形回帰パート**
- 決定木
- Random Forest**
- XGBoost



MIX Platformでできること (MI解析)

ベイズ最適化

例：2次元空間における最大値を探す

①. 初期値

x	y	z
-6	-8	3.07E-23
2	-1	0.013064
-3	2	0.0002
-10	5	1.14E-28
5	9	1.53E-24



②. 次の実験すべき点の提案

MIX Platform

NEXT EXPERIMENT

Bayes Optimization

Target



Enabled

Name

x

y

z



Suggestion1

1.888

-0.9462



1

-6.000

-8.000

3.070e-23



2

2.000

-1.000

0.01306



3

-3.000

2.000

0.0002000



4

-10.00

5.000

1.140e-28

Rows per page: 5

1-5 of 6



Dense padding

MIX Platformでできること (MI解析)

ベイズ最適化

例：2次元空間における最大値を探す

①. 初期値

x	y	z
-6	-8	3.07E-23
2	-1	0.013064
-3	2	0.0002
-10	5	1.14E-28
5	9	1.53E-24



②. 次の実験すべき点の提案

Enabled	Name	x	y	z
☒	Suggestion1	1.888	-0.9462	

MIX Platform

NEXT EXPERIMENT

Target

Enabled	Name	x	y	z
☒	Suggestion1	1.888	-0.9462	0.015300018
☒	1	-6.000	-8.000	3.070e-23
☒	2	2.000	-1.000	0.01306
☒	3	-3.000	2.000	0.0002000
☒	4	-10.00	5.000	1.140e-28

Rows per page: 5 1-5 of 6

③. 実験実施

(②の値で実施)



④. 実験値をMIXに代入

まとめ

- ・マテリアルズ・インフォマティクスを用いた事例を紹介した。

アクティブラーニングを用いた解析

1. エポキシ系接着剤の実験条件最適化
2. 触媒の組成最適化 1
3. 触媒の組成最適化 2

AIによる分子組成の自動生成

4. ポリマー材料

データベース構築

5. NEDO燃料電池課題におけるデータ蓄積⇒データ連携が課題
6. MI解析基盤 (MIX platform)の紹介

ご興味のある方は、ぜひご連絡ください。

SODEYAMA.Keitaro@ nims.go.jp