

天気予報の手法で革新！水電解電極材料の劣化を短時間で予測

配布日時：2024 年 12 月 12 日 14 時

NIMS（国立研究開発法人物質・材料研究機構）

概要

1. NIMS の研究チームは、水電解装置用の電極触媒の劣化を、短時間の実験で高精度に予測できる手法を開発しました。天気予報でも使われるデータ同化という手法を組み合わせることで、約 900 時間で急速に劣化する材料を、300 時間の実験結果から正確に予測することに成功しました。劣化予測が高速化され、さまざまな触媒材料の劣化の比較が容易となることで、劣化の仕組みの解明が進み、高効率かつ安価で寿命の長い触媒材料の開発が加速することが期待されます。

2. 持続可能な社会構築に向け、二酸化炭素を出さずに水素を製造できる水の電気分解装置の大規模導入が求められています。装置を高効率で長期間運用するには、電極触媒の劣化を抑えることが極めて重要です。しかし電極触媒の耐久性評価には、通常数千時間、場合によっては数万時間という長い時間を要するため、短時間で電極触媒の劣化を正確に予測できる信頼性の高い手法の開発が強く求められていました。

3. 今回、NIMS の研究チームは、電極触媒の劣化予測にデータ同化と呼ばれる手法を組み合わせました。データ同化とは天気予報でも使われる手法で、実験結果にばらつきがあることを想定し、一定数のフィッティング計算を繰り返してパラメータの最適化を行います。研究では、触媒の表面が溶出などで劣化する様子をシンプルな数理モデルで表現し、まずは数時間の劣化試験によく当てはまることを確認しました。次に長時間（約 900 時間）分のデータをもとに、データ同化を用いて劣化予測を行ったところ、わずか 300 時間分の実験データを使ってパラメータ推定を行うことで、900 時間後の劣化を 4% の誤差で予測することに成功しました。



水の電気分解の様子。中央の曲がった構造の材料が今回対象とした電極。

4. 今後はアルゴリズムを改良してより短時間での予測を目指すとともに、触媒材料が劣化するメカニズムの解明を進めます。それにより、材料の高特性化を実現させ、カーボンニュートラル実現のための水電解装置の普及につなげます。

5. 本研究は、文部科学省におけるデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（JPMXP1121467561）の一環として、エネルギー・環境材料研究センター電気化学エネルギー変換チームの Miao Wang NIMS ポスドク研究員と坂牛健チームリーダー、および若手国際研究センター（ICYS）の石井秋光 ICYS 研究員によって行われました。

6. 本研究成果は、2024 年 12 月 9 日に米国化学会誌 ACS Energy Letters（DOI: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsenenergylett.4c02868>）のオンライン版に掲載されました。

研究の背景

2050 年までにカーボンニュートラルを達成するためには、クリーンエネルギー技術の加速的開発が必要です。酸素発生反応 (OER) ⁽¹⁾ は、グリーン水素製造のための水素発生反応や、高付加価値分子合成のための二酸化炭素の還元反応、アンモニア合成のための窒素還元反応など、持続可能社会で必要とされる多くの電気化学変換プロセスにおいて重要な対反応です。このため、OER 電極触媒材料が 10 年以上にもものぼる電解槽⁽²⁾の運転期間中に高いエネルギー効率を維持するためには、電極触媒の耐久性が極めて重要となります。しかし、電極触媒の耐久性評価には、通常長期間の運転が必要であり、時には数年にもわたってしまいます。したがって、短期間で電極触媒の寿命を正確に予測できる信頼性の高い方法は、先進電解槽の開発を加速するために不可欠といえます。

このような予測に効果的なデータ駆動型手法の 1 つにデータ同化 (DA) ⁽³⁾ があります。DA は、数理的に定義されたシミュレーションモデルと実験データを動的に組み合わせることを特徴としており、この動的にモデル内のパラメータを適宜修正することにより予測されるデータの推定を短期間で高精度に行えることが特徴です。DA の典型的な応用例は、気象学や海洋学に見ることができ、高精度な天気予報に展開されています。

研究内容と成果

NIMS の研究チームは、OER における電極触媒の溶解に焦点を当てることにより新しい速度論的電極触媒劣化モデルを構築することに成功しました。本研究では、劣化機構を数理的に表現するために多段階反応理論の 1 つであるエネルギー・スパンモデルを採用し、ここで自由エネルギーと電位を一次近似で関係することにより OER の微視的な速度論的描像を比較的単純に記述しました。この近似的処理を用いることにより、最低限のパラメータ数 (OER 反応に 2 つ、電極触媒溶解にもう 2 つ) を用いて、劣化過程における印加電位、電流、時間の関係を定量的に記述することができました。この劣化モデルに DA を適用してモデル内のパラメータを効率的に最適化し、そこから電位-時間関係を外挿することで寿命予測する DA 型劣化解析アプローチを開発しました (図 1)。

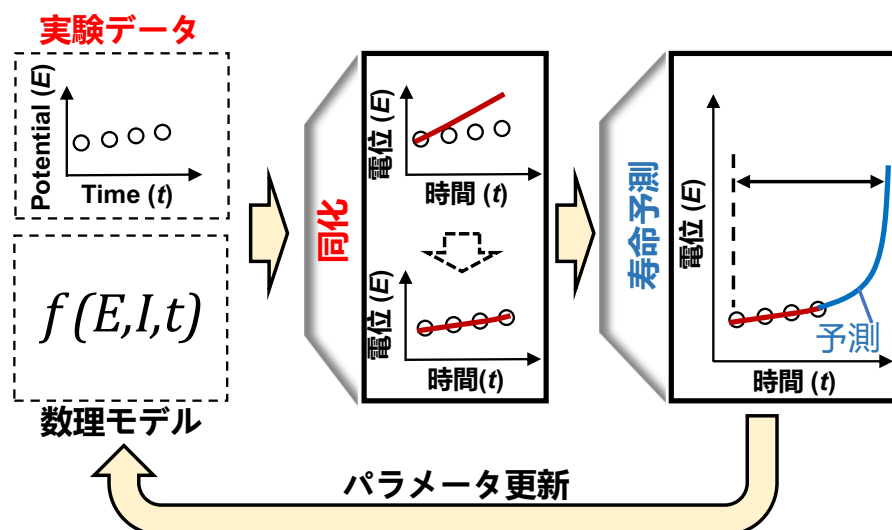


図 1 データ同化の概要

この DA 型劣化解析アプローチは、全実験期間の 34% の時点で誤差 10% 以下の信頼性の高い劣化寿命予測を達成しました (図 2 青線)。一方で、単純なフィッティング (図 2 赤線) のような他の方法は、DA 型劣化解析アプローチのような予測能力を示すことができませんでした。これは DA を用いることにより、実験データに含まれる有用な情報や劣化に関する事前知識を物理化学モデルに効果的に融合させることができたためと考えられます。

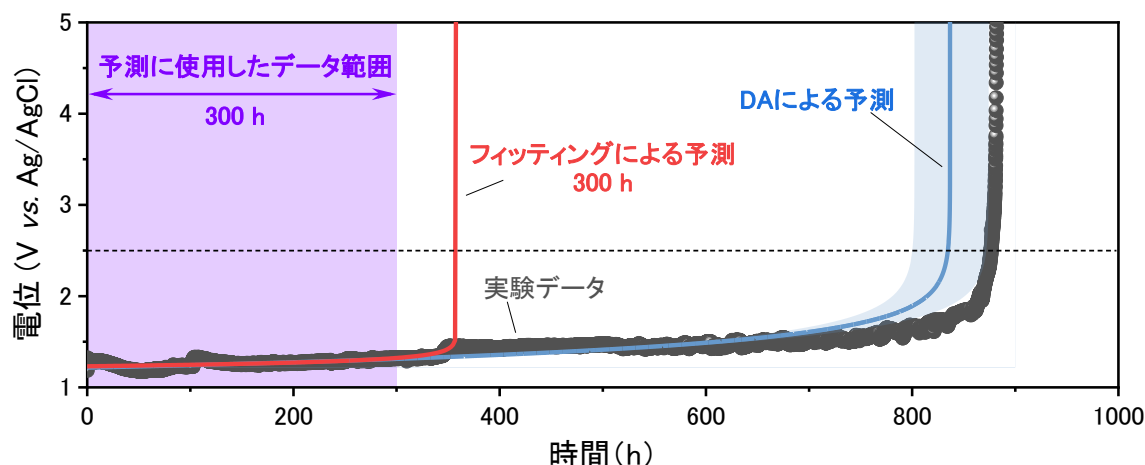


図 2 データ同化による電極触媒の寿命予測の結果

今後の展開

本研究は、膨大な時間が必要な実験の目的を、データ駆動型手法で短時間のうちに達成できたという点で、データの有効な利活用するための方法論を示したと言えます。今後、本成果を基盤に水電解向け電極材料開発を筆頭に、様々な電解電極材料の高特性化を実現する新材料開発およびデバイス開発を加速し、カーボンニュートラル実現のための実用技術開発につなげます。

掲載論文

題目：Accelerated Electrocatalyst Degradation Testing by Accurate and Robust Forecasting of Multidimensional Kinetic Model with Bayesian Data Assimilation

著者：Miao Wang, Akimitsu Ishii, Ken Sakaushi

雑誌：ACS Energy Letters (<https://doi.org/10.1021/acseenergylett.4c02868>)

掲載日時：2024年12月9日

用語解説

(1) 酸素発生反応：水などの酸素含有化合物を酸化させて酸素ガスを発生させる電気化学反応。この反応は、CO₂電解やアンモニア電解合成、金属空気電池などさまざまなエネルギー変換・貯蔵システムで重要な役割を果たしています。例えば水電解の場合は、カソードで水素が発生し、アノードで酸素が発生します。

(2) 電解槽：電気分解を行うことにより目的の化学物質を取り出す装置部位のこと。主にカソード側とアノード側の電極触媒とそれを隔てる膜で構成されています。この電解槽がどれだけ長く機能できるかの決め手の一つに電極触媒の耐久性があります。

(3) データ同化：観測データと数理モデルに統合し、その精度と予測能力を向上させるデータ駆動型手法。気象学、海洋学、水文学、環境科学などの分野で広く用いられています。データ同化は、不確実性を統計的に低下させ、予測対象のより信頼性の高い推定値を生成するために、実際の測定値を予測モデルに統合させることが大きな特徴です。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

NIMS エネルギー・環境材料研究センター電気化学エネルギー変換チーム
チームリーダー 坂牛 健(さかうし けん) ”

E-mail: SAKAUSHI.Ken@nims.go.jp

TEL:029-860-4945

URL: <https://www.nims.go.jp/group/eec/en/index.html>

(報道・広報に関すること)

NIMS 国際・広報部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017