

## 1 GX

多彩なテクノロジーと広領域の知見を強みに  
グリーントランスフォーメーションを支援

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社（以下、CTC）は、企業の温室効果ガス排出量の可視化や削減支援、再生可能エネルギーの導入、関連データ活用基盤の構築等カーボンニュートラルに資するサービスをメニュー化／体系化している。本稿では、企業のグリーントランスフォーメーションに繋がるシミュレーション技術に焦点を当て、実験結果を交えて紹介する。

テクノロジー×  
幅広い領域の知見が  
最適解を導く

CTC 科学システム本部は、主に数値シミュレーション、システム構築、解析、コンサルティングといった科学・工学系分野の IT ソリューションに関するビジネスを推進している。博士号、計算力学技術者、気象予報士、一級建築士といった様々な資格を有するメンバーが揃っている点においては、ある意味、異色とも言える本部だ。「シミュレーション、AI、アナリティクス、IT を用い、お客様それぞれの課題や目的に合わせて、自由な形で最適解を導き出すことが我々の目指すトランスシミュレーションです。」と太田垣氏が語るとおり、多彩なテクノロジーと、資源・エネルギー、建設、原子力・プラント、材料・CAE (Computer Aided Engineering) 等、広領域にわたる知見を掛け合わせて、お客様をサポートできる点が同本部の大きな強みである。

## グリーントランスフォーメーション実現へのアプローチ

2021 年、政府は温室効果ガス



伊藤忠テクノソリューションズ株式会社  
エンタープライズ事業グループ 科学システム本部  
(左から) 科学ビジネス企画推進部 GX ビジネス推進課 エキスパートエンジニア 太田垣 良氏  
材料・CAE ビジネス部 営業第2課 小椋 一秀氏  
科学ビジネス企画推進部 プロダクトビジネス課 主任 森田 敬大氏

(Greenhouse Gas :GHG) の排出量を 2030 年度に 46%削減し、2050 年迄にゼロにするカーボンニュートラルを宣言した。国からの要望・期待に加え、ステークホルダーからの圧力もあり、カーボンニュートラルの必要性を強く意識しながらも、具体的な行動を模索している企業は少なくない。

一方、グリーントランスフォーメーション (以下、GX) とは、カーボンニュートラルにいち早く移行するために必要な経済社会システム全体の変革を意味する成長戦略をいう。企業としては、GX 推進を行うことにより、リスク回避・競争優位性・新事業機会を創出して、事業価値や社会的存在価値を高められる。

企業では、従来から GHG 排出量

の削減を図ろうという動きはあったものの、それは多くの場合、事業部ごとの取り組みに過ぎなかった。しかし、カーボンニュートラル宣言以降、企業内に専門の対応組織を作り、それまで個別に行ってきた最適化を全社で一つにまとめる動きが出てきた。

こうした動きに着目し、CTC は、企業の「経営企画部門 (戦略策定部署)」と「事業・拠点部門 (施策実施部署)」をターゲットとし、「GX ソリューションフレーム」を作成し、お客様の課題や要望に即したアプローチを推進している。

具体的には、経営企画部門に対して GHG 可視化ツールの導入や GX 戦略立案の支援、事業・拠点部門に対して GHG 削減の具体施策のソ

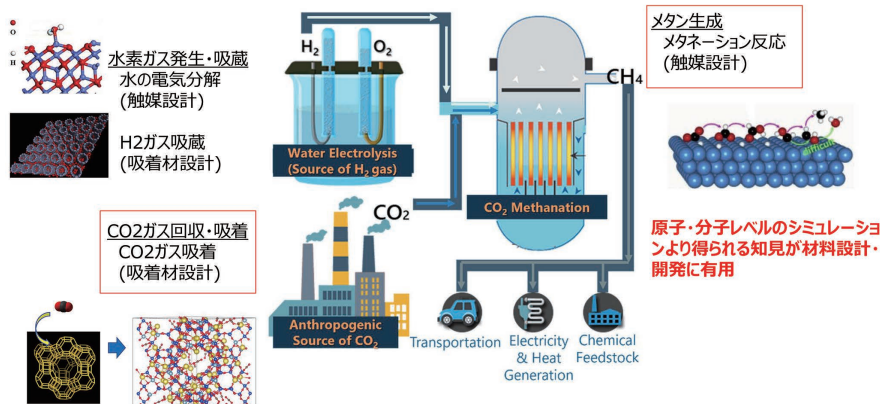


図1 メタネーション

リユースを提供を行っている。GHG削減の手段のうち、化石燃料に替わる燃料として期待されているのが水素や合成メタンである。

## カーボンニュートラル実現に向けたメタネーション反応のシミュレーション

触媒を介して二酸化炭素と水素を反応させ、天然ガスの主成分であるメタン（以下、合成メタン）を生成する方法をメタネーションという（図1）。メタネーションは、化石燃料である天然ガスの使用量を削減し、新たなCO<sub>2</sub>の生成を抑制し、尚且つ工場等の既存設備を有効に活用できることから、GXに貢献するとして近年注目が集まっている。また、メタネーションは、経済産業省が2021年6月に策定した「2050年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略」においても「次世代熱エネルギー産業」に位置付けられる重要な分野である。

メタネーションにおいて合成メタンを効率よく生成するためには、排ガス内のCO<sub>2</sub>を効率良く吸収させる触媒や吸着剤が必要だ。原子分子レベルといった微細な現象の解析に対し、CTCが得意とするシミュレ

ーション手法を用いて知見を得ることができれば、カーボンニュートラルに向けて、企業工場内のCO<sub>2</sub>を吸着させるための触媒や吸着剤の設計／開発につなげることができる。

## 材料系ナノシミュレーションの代表的二つの手法

ここで一旦、シミュレーション技術について触れておきたい。材料系のシミュレーションを実施する際の代表的手法としては「第一原理計算」と「分子動力学計算」があり、それぞれにメリット・デメリットを有する。「第一原理計算」は、経験的なパラメータに因らず、材料の構成原子と構造の情報のみから各種物性値を高精度に評価することが可能である。計算精度は高いもののコストも高い。

一方、「分子動力学計算」は、経験的なパラメータを含む原子間相互作用ポテンシャルを用いて材料の各種物性値（主に熱物性、機械特性）を評価することが可能であるものの、計算精度はパラメータに依存する。しかし、計算コストは小さく、数百万原子の問題を数ナノ秒程度で解析することも可能だ。

## CO<sub>2</sub>吸着材の探索に関する2つのシミュレーション実験

以下に、CTCが実施したメタネーションにおけるCO<sub>2</sub>吸着材料の探索に関する2つのシミュレーション実験について紹介する。

### 【実験1】

分子動力学法を用いた

ゼオライト中への

CO<sub>2</sub>吸着シミュレーション

CO<sub>2</sub>の吸着剤としては、多孔質材であるゼオライト等の鉱物・カーボン材料、アミン系材料としてアミン溶液・ポリマー、有機金属錯体等が知られている。これらの材料のうち、CTCはゼオライトをターゲットとして、CO<sub>2</sub>吸着材探索のためのシミュレーション実験を実施した（図2赤枠内）。

ゼオライトは、結晶構造内に多数の空孔を持っており、その空孔に様々なガス・イオンを吸着・脱離させることが可能だ。そこでCTCは、Si（ケイ素）／Al（アルミニウム）比、イオン種、水分子量のガス吸着量に差があることに注目し、分子動力学法を用いてゼオライト中のCO<sub>2</sub>分子吸着量をシミュレーションすることで、吸着剤の開発の知見を得ることを考えた。

ゼオライトの結晶構造は、SiO<sub>2</sub>からなる四面体構造を基本骨格とした単純な構造であるが、その骨格の組み合わせにより、200種類以上の異なる構造が存在している。そこで、まず、200種以上のゼオライト構造のデータベースからFAU型と呼ばれる骨格の結晶構造をモデル化し、Si／Al比に応じてNa（ナトリウム）+イオンを挿入した（図3）。

その後目的の温度・圧力に平衡化し、続いて平衡化・CO<sub>2</sub>挿入を繰り返した。これにより、材料組成や、圧力、熱、電場等の外部条件の違いによるCO<sub>2</sub>吸着のメカニズムを明らかにできる。それにより効率良くCO<sub>2</sub>吸着量を回収できる吸着材量探索に有用な知見を得ることが期待できる。

シミュレーション実験の結果、シミュレーションは、実測に対して計算結果のCO<sub>2</sub>吸着量は1.3倍程度過大評価しているが、CO<sub>2</sub>分圧や温度に対する吸着量の傾向は実測と計算とで概ね一致を示した(図4)。従って、シミュレーションによるCO<sub>2</sub>吸着量は有効に予想できると考えられる。

尚、実験における計算はCTCが提供するクラウドサービス上で行った。そのため通常約10日を有する計算を約6時間で終了することができた。また、CO<sub>2</sub>が空孔内に吸着される軌跡を可視化することで、吸着の様子を詳細に解析することができた。

**【実験2】**

**機械学習技術を用いた**

**CO<sub>2</sub>のメタネーション反応シミュレーション**

CO<sub>2</sub>のメタネーション反応には、反応を促進させるために触媒が利用されているが、エネルギー効率を考えると、より低温で駆動する触媒を利用することが望ましい。一方で、メタネーション反応は発熱反応であるため、反応の進行に伴い触媒は非常に高温となるため、触媒の劣化により触媒活性が低下する恐れがある。よって、低温でも駆動し、且つ高温でも安定して駆動する触媒を利

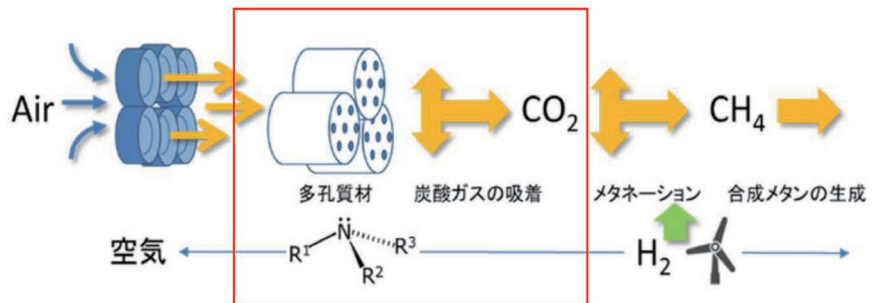
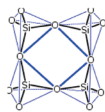


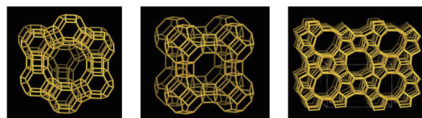
図2 「実験1：分子動力学法を用いたゼオライト中へのCO<sub>2</sub>吸着シミュレーション」(赤枠内)と「実験2：機械学習技術を用いたCO<sub>2</sub>メタネーション反応シミュレーション」(青枠内)

**ゼオライトの化学構造**



- 基本骨格：SiO<sub>2</sub> (四面体構造)
- 組成：M<sub>n</sub><sup>+</sup>/n(AlO<sub>2</sub>)<sup>-</sup>(SiO<sub>2</sub>)<sub>x</sub> (M=Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>など)
- 骨格中に水分子(結晶水)を含む
- 骨格の組み合わせで200種類以上の構造を有する

**ゼオライト構造の例**

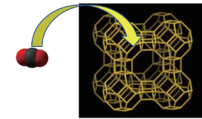


FAU型

LTA型

MFI型

**ゼオライトへのCO<sub>2</sub>吸着**



- 骨格内の空孔に様々なガス、イオンを吸着・脱離
- 構造やSi/Al比、イオン種、水分子量のよりガス吸着量に差がある

図3 実験1：ゼオライトの化学構造とCO<sub>2</sub>吸着

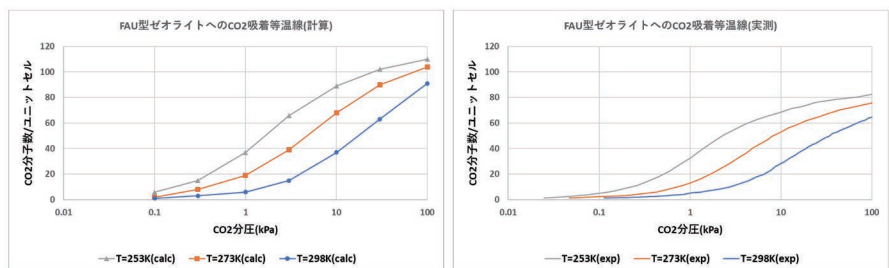


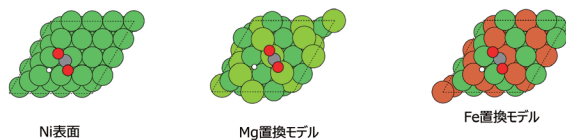
図4 実験1：実験結果

用することが望ましい。CTCは、こうした要件を満たすメタネーションに最適な触媒を探索するために、Ni(ニッケル)触媒に対して、第2、第3の元素を置換した場合の触媒活性のシミュレーション実験を実施した(図2右)。

まず、CO<sub>2</sub>触媒表面上に吸着したCO<sub>2</sub>分子に対して、次々とH(水素)を付加させた化学反応をシミュレーションし、反応の活性化エネルギーを評価した。次に、Mg(マグネシウム)やFe(鉄)にも置換して活性化エネルギーがどのように変

化するかを評価した。

一般的に、原子・分子レベルで化学反応のシミュレーションを行う場合には、第一原理計算を用いる必要がある。しかし既述のとおり、第一原理計算は時間とコストがかかる点にデメリットがある。そこで本実験では、Open Catalyst Projectが開発した予測モデルを利用した。Open Catalyst Project(以下、OCP)とは、メタ・プラットフォームズ(Meta Platforms, Inc.、旧称: Facebook, Inc.)社と米カーネギーメロン大学とが連携して進めているAIを用



材料	律速過程の活性化エネルギー(eV)
Ni	1.64552
NiMg	1.63204
NiFe	1.78621

Mgに置換することで活性化エネルギーが減少して触媒活性が向上する可能性を示唆

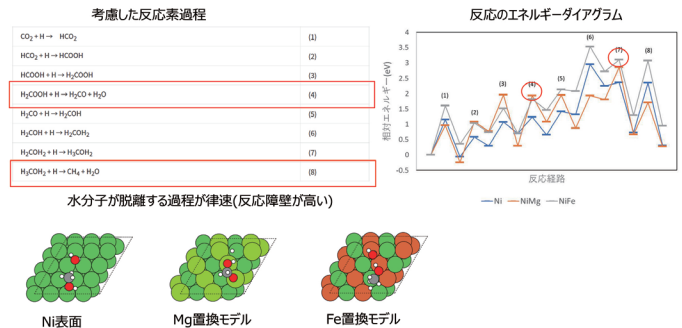


図5 実験2：実験結果

いた再生可能エネルギー開発プロジェクトである。OCPは、様々な触媒材料と吸着種に対して機械学習を用いて約1億3千の学習データを用いて吸着エネルギーを予測するモデルを構築している。CTCはこの予測モデルを利用することで、第一原理計算と同精度の予測を、200分の1のコストで実現した。

実験の結果、CO<sub>2</sub>の酸素原子にHが付加して水分子が脱離する過程が最もエネルギー障壁が高いことがわかった(図5)。また、Hの一部をMgに置換することにより、活性

化エネルギーが減少し触媒活性が向上する可能性が示唆された。

今後、同様のシミュレーションを実施し、さまざまな組成で解析することにより、高活性な触媒を予測できることが期待される。

### 【実験のまとめ】

以上2つの実験から、カーボンリサイクル技術の材料開発についての知見を得ることができた。

今後、シミュレーション結果と実験結果を同時に行い、シミュレーション結果から高速で大量にデータベ

スを取得し、その後機械学習の予測モデルを使って最適化組成を探索し、実験を重ねる、といったプラットフォームが構築できれば、有用な材料開発が実現できると考えられる。

## スクラップ材を用いた材料リサイクル設計

2020年、CTCは米ベンチャー企業 QuesTek International LLC(以下、QuesTek)と QuesTek Japan を設立し、材料設計サービスの提供や合金ライセンスの販売を行う合併事業を開始した。QuesTekは、データ

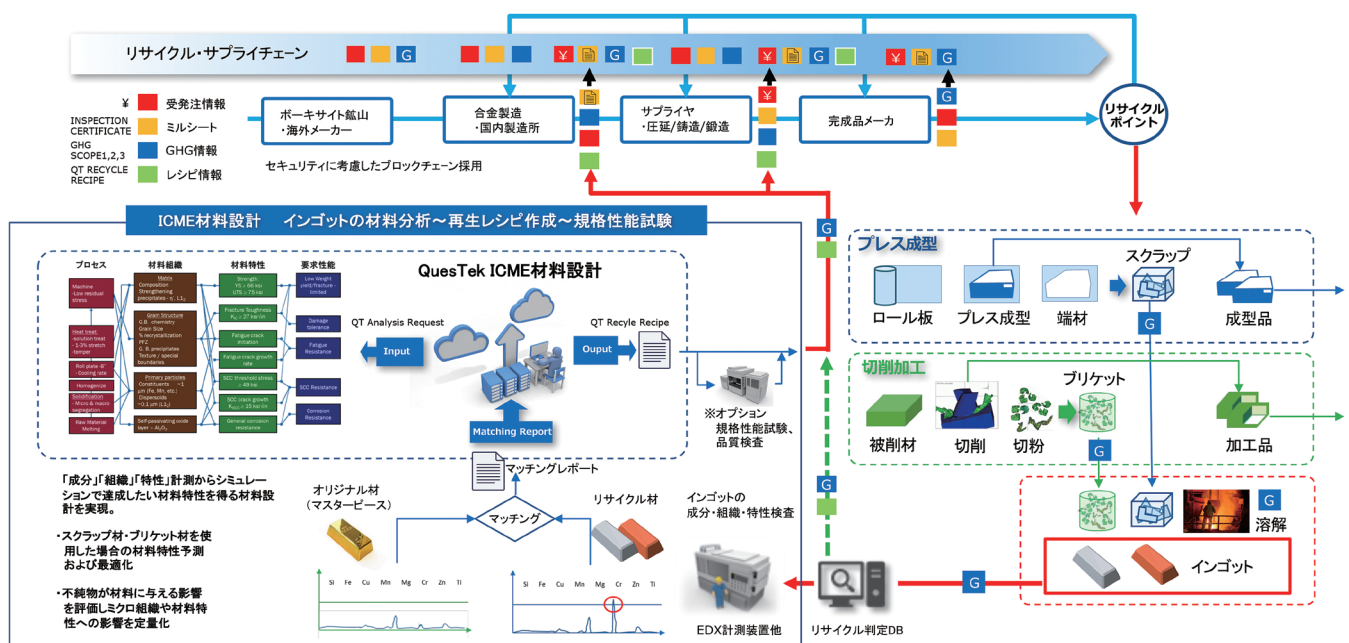


図6 ICME 材料設計を用いたリサイクル・サプライチェーン

豊かな未来に向けてITの可能性に挑戦する  
伊藤忠テクノソリューションズ

ベースや計算工学、シミュレーションをフルに活用し、材料設計やプロセスの最適化を行う計算材料設計技術（ICME）の先駆者である。

企業内工場で使用された材料のリサイクルは従来から行われてきたものの、強度や耐性においては元の材料に戻ることはなく、実際には簡易な商品に変換されていた。そうした背景の下、CTCは高額な金属を元の性能に再生し、新材料を生成するよりもカーボンニュートラルに貢献するリサイクル・サプライチェーンのコンサルティングを開始する(図6)。

具体的には、QuesTekの熱処理・材料特性を関連づけてモデル化するシステムデザインチャートを利用して、「成分」「組織」「特性」計測からシミュレーションで達成したい材料設計を行う。スクラップ材を使用した場合の材料特性予測や最適化、不純物が材料に与える影響を評価することも可能だ。

デジタルツインを活用した  
カーボンニュートラルへの  
対応とユースケース

GXを推進していく中で蓄積されたデータをどのように活かすべき

か？この課題に対しCTCは、再エネ発電量データ・再エネ発電量予測・設備稼働状況・限界削減費用・生産計画・人員配置等の活用データと、シミュレーション・数理最適・AI等のテクノロジーを掛け合わせてデジタルツインを創造し、カーボンニュートラルに資する工程・スケジュールの最適化につなげるシナリオを描いている(図7)。

以下に三つのユースケースを簡単に紹介する。

【ユースケース①】

データ×シミュレーション

→ 電力量及びCO2排出量分析

各工程の詳細なプロセスやオペレーション別炭素排出量のデータと、工程ごとに再現したシミュレーションモデルから、工程ごとのCO2排出量やコスト分析を実施する。得られた分析を元に最も消費電力が少なく、且つ生産効率に影響しない運用を策定する。

【ユースケース②】

データ×シミュレーション

→ GHG削減に向けた生産設備更新計画の最適化

工程全体のプロセスや生産計画、工程ごとの炭素排出量のデータと、

工程を再現したシミュレーションモデルから、生産計画を考慮したCO2削減につながる最適化計算を実施する。得られた結果を元に生産設備更新計画の予算・目標を検討する。

【ユースケース③】

データ×数理技術

→ CO2削減量を考慮したスケジュール最適化

数理最適化の適用事例として「巡回セールスマン問題」がある。これは、セールスマンがいくつかの都市を一度ずつ訪問し、出発地点に戻ってくる巡回路において、時間等の移動コストが最小となる経路を求めるといったものだ。CTCはこの数理最適化を生産計画に落とし込み、企業の生産スケジュールや再エネ発電量のデータの活用を考えている。

例えば、再エネのみで工場を稼働させるにはどのような生産工程を組めば良いのか、使用可能な電力量を十分に満たすにはどのような計画を立てれば良いのか、といった予測を行う。このシナリオが実施されることにより、ピーク電力や消費電力量を削減したり、再エネを最大限に活用したり、蓄電池の導入効果を検証したり、といった効果が期待される。

今後に向けて

CTCは、今後も材料のコンセプト設計から、既存材料に対する材料性能の向上、コスト削減、生産プロセスの短縮化等、多彩なテクノロジーと広領域の知見を強みに企業のGXをサポートしていく。

本記事に関するお問い合わせは下記へ  
cndx\_solution@ctc-g.co.jp

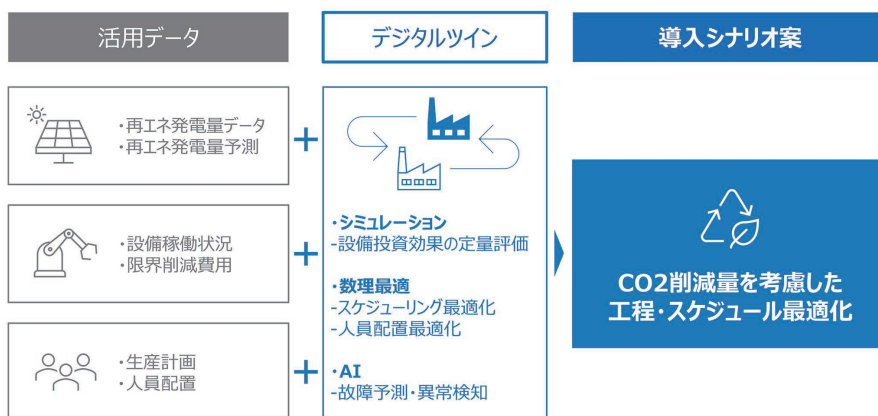


図7 デジタルツインを活用したカーボンニュートラルへの対応