



2025.3.7 第16回FC-Cubicオープンシンポジウム（九大伊都）

長寿命化・高性能化達成のための 設計シミュレーターの開発 シミュレーションGr.全体の取り組み

FC-Platform シミュレーショングループGL
京都大学 河瀬 元明

実施項目 4, 4-2, 4-3 FCシステムモデル, MBD

システムシミュレーター

モデルベースのPEFCシステムシミュレーター

実施項目 4-1 スタックモデル

実施項目 3 セルモデル

発電性能を予測するマルチスケール
シミュレーター

セルシミュレーター

実施項目 1, 1-1~1-4
PEM劣化

- ・化学劣化
- ・機械劣化
- ・ラジカルクエンチャー移動

PEMの化学・機械劣化
連成シミュレーター

劣化シミュレーター

3-8 PEM
水収着速
度モデル

3-9 GDL
伏流モデル

流路モデル

電極モデル

3-1 電極活性モデル

3-2 アイオノマー被覆モデル

3-3 担体モデル

3-4 担体細孔モデル

3-5 層構造モデル

3-6 液水飽和モデル

3-7 アイオノマー酸素透過モデル

冷却
モデル
多次元
モデル

補機
モデル
多用途
対応

実施項目 2, 2-1
電極形成
プロセス

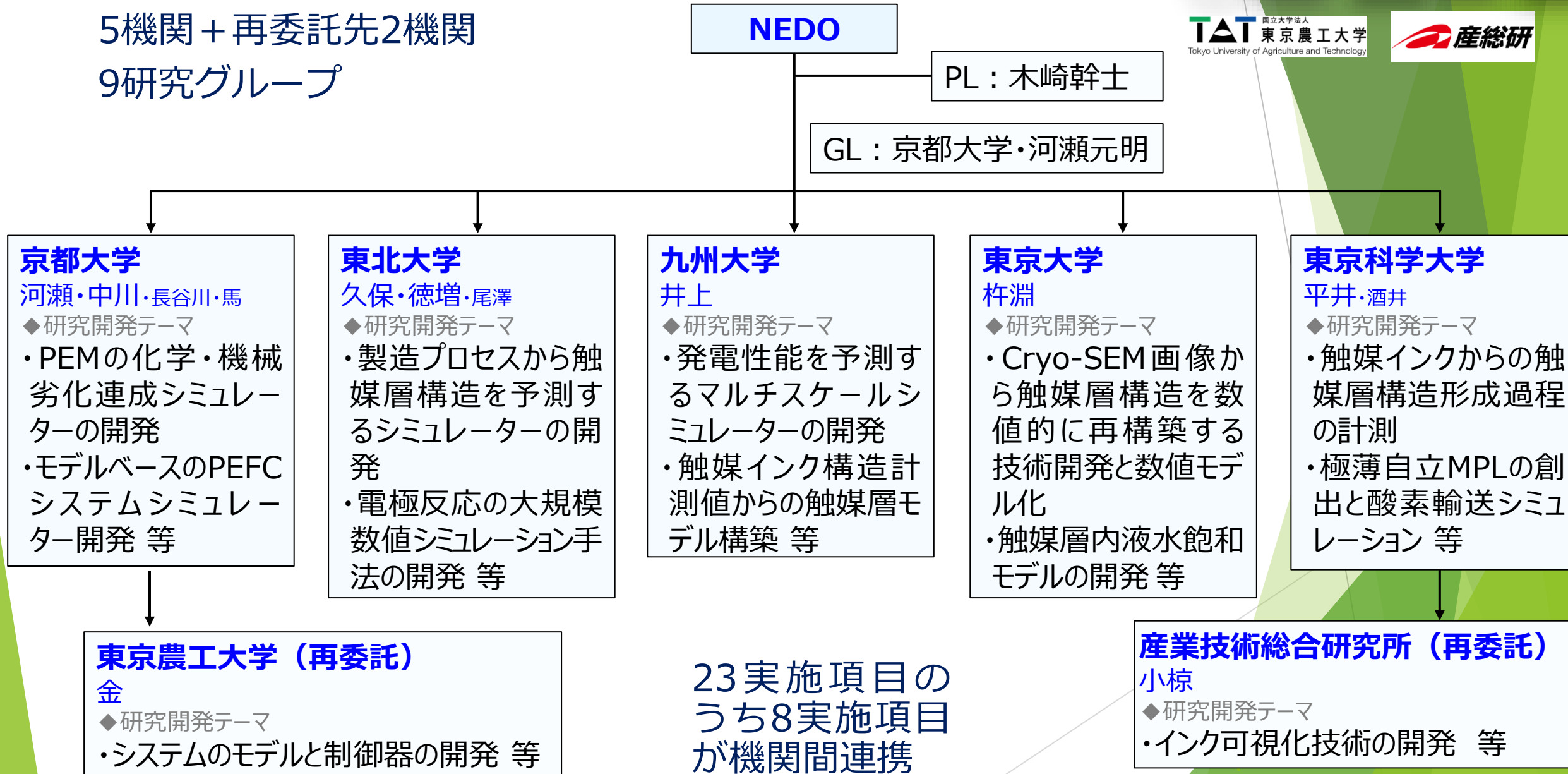
製造プロセス
から電極構造
を予測するシ
ミュレーター

プロセス
シミュレーター

分子シミュレーター

実施体制

5機関＋再委託先2機関
9研究グループ

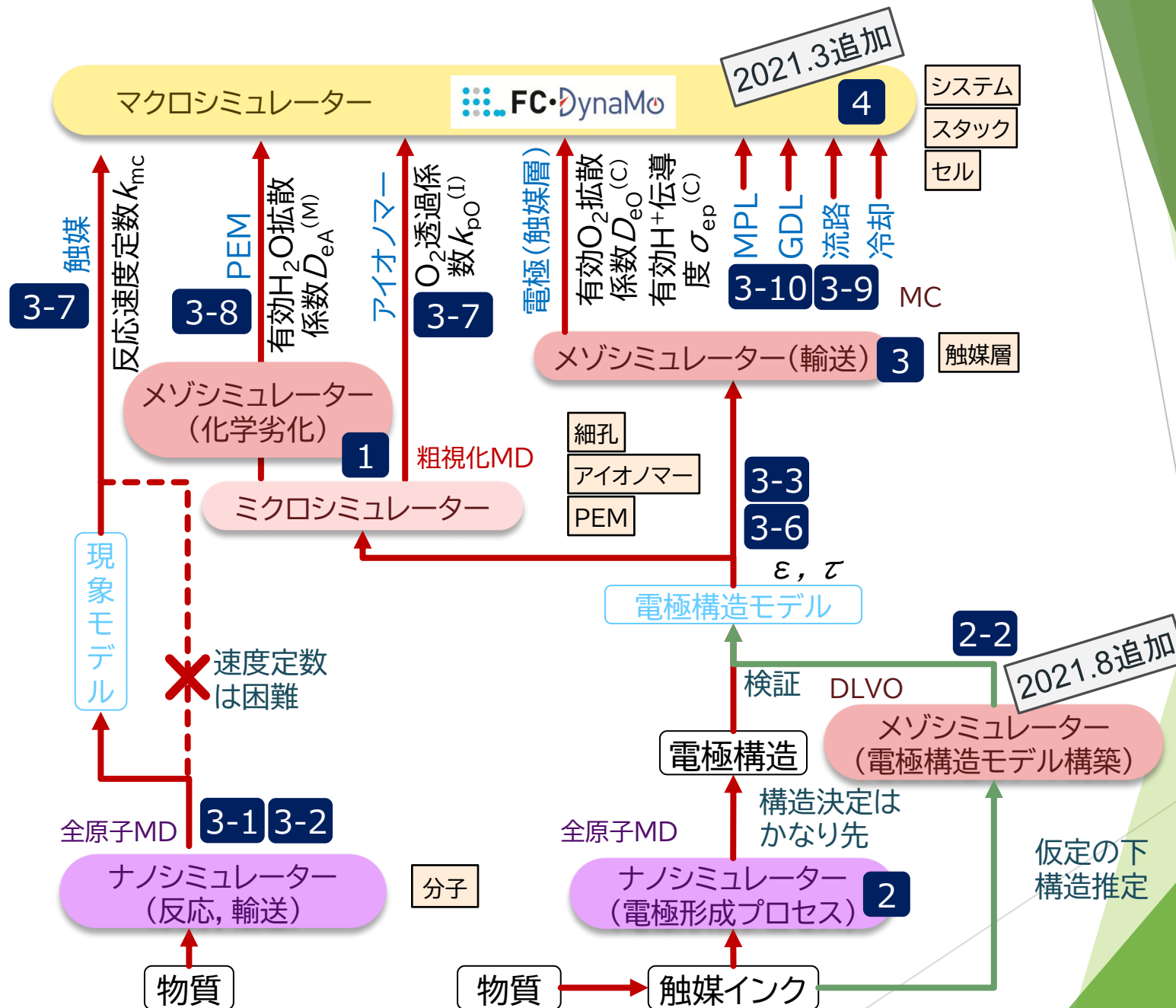


ナノメートルスケール～マクロスケールのすべての層のモデリング、シミュレーター開発を同時並行で進めている

各層の間の情報の受け渡しが連携の鍵
有効輸送物性値に集約

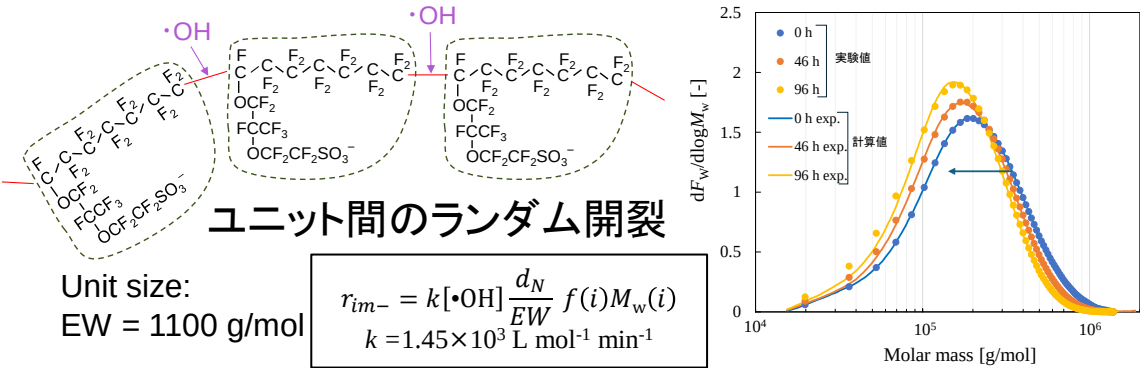
マクロシミュレーターでは、必要なパラメーターを仮決め、ミクロシミュレーションの結果が出れば差し替える

注. 計測テーマは本図には示していない



実施項目 1. PEMの化学・機械劣化連成シミュレーターの開発

1-1. PEM化学劣化シミュレーターの開発 (京大)



電解質膜の化学劣化に伴う分子開裂モデルおよび分子量分布の変化を定量的に表す化学劣化シミュレータを開発した。

1-3. 酸化セリウムからのセリウムイオン溶出速度の計測と溶出制御法の開発 (東京科学大学)

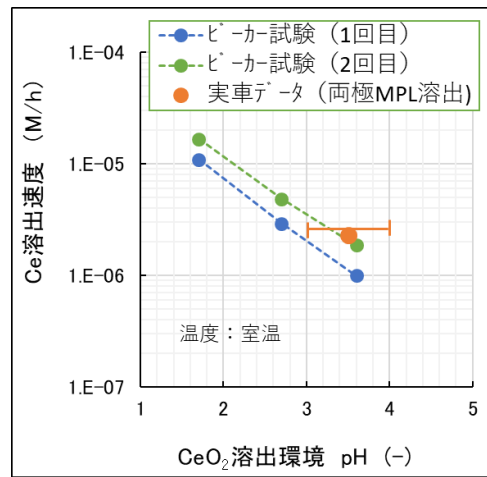
実車のMPL添加CeO₂溶出移動速度を予測する実験式を導出した。

アノード側 : 0.0012 μg/cm² × 停止時間 [h]
カソード側 : 0.0009 μg/cm² × 停止時間 [h]

MPLへのCeO₂仕込み量とpH環境(pH=4で算出)で決まる係数

CeO₂溶出移動速度の制御方法を提案

- 溶出加速 : Ce₂O₃ (Ⅲ) の添加 (4倍加速)
- 溶出抑制 : FCV停止時の空気パーズ増加



pH環境とCe³⁺溶出速度の関係

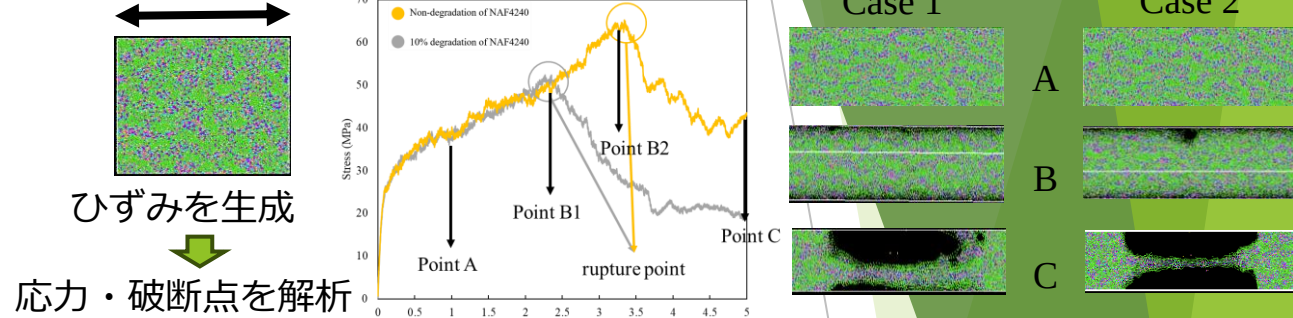
1-2. 応力下の補強膜高分子高次構造変化シミュレーターの開発(東北大)

応力-ひずみ曲線

膜の破断プロセス

Case 1

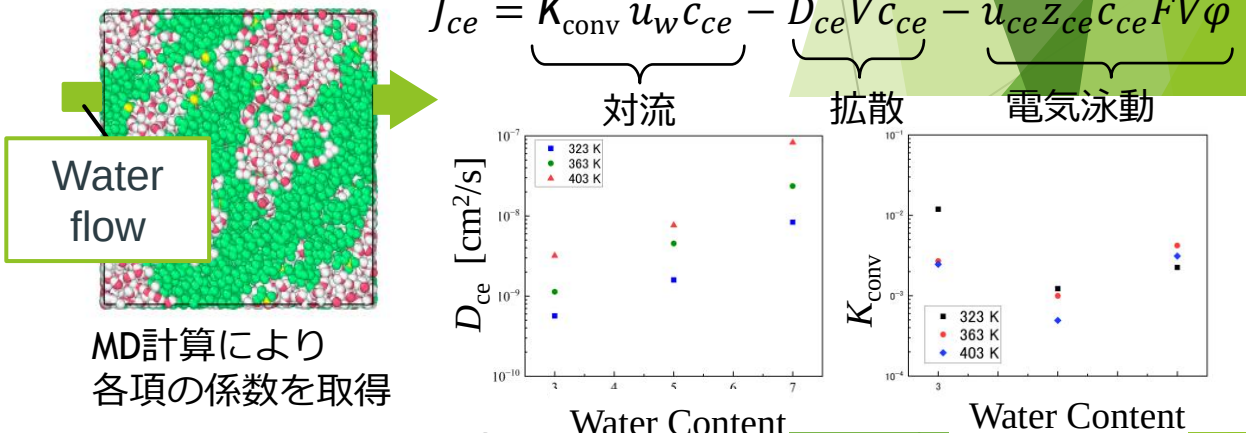
Case 2



● 高分子主鎖 ● 疎水部 ● 親水基 ● ヒドロニウムイオン ● 水の中心 ● 水の極性部分

高分子が開裂した膜の機械的強度が低下することを再現した。

1-4. セリウムイオン輸送モデルの構築とPEM内セリウムイオン分布予測シミュレーターの開発 (東北大)



● 高分子主鎖 ● スルホ基 ● 水の酸素原子 ● 水の水素原子 ● Ceイオン

Ceイオン輸送特性(拡散係数、対流イオン輸送係数)を取得した。

PEMの化学劣化 Ceイオンの影響

フェントン反応系およびセリウムの反応

1. $\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \cdot\text{OH} + \text{OH}^-$
2. $\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+$
3. $\text{Fe}^{2+} + \cdot\text{OH} + \text{H}^+ \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}$
4. $\text{Fe}^{2+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+ \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}_2$
5. $\text{Fe}^{3+} + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{Fe}^{2+} + \text{O}_2 + \text{H}^+$
6. $\cdot\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2\cdot + \text{H}_2\text{O}$
7. $\text{HO}_2\cdot + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \cdot\text{OH} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$
8. $\cdot\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$
9. $\text{HO}_2\cdot + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
10. $\cdot\text{OH} + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
11. $\text{Ce}^{3+} + \cdot\text{OH} + \text{H}^+ \rightarrow \text{Ce}^{4+} + \text{H}_2\text{O}$
12. $\text{Ce}^{3+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+ \rightarrow \text{Ce}^{4+} + \text{H}_2\text{O}_2$
13. $\text{Ce}^{4+} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Ce}^{3+} + \text{HO}_2\cdot + \text{H}^+$
14. $\text{Ce}^{4+} + \text{HO}_2\cdot \rightarrow \text{Ce}^{3+} + \text{O}_2 + \text{H}^+$
15. $\text{Ce}^{4+} + \text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Ce}^{3+} + \text{Fe}^{3+}$

Holistic approach to chemical degradation of Nafion membranes in fuel cells: modelling and predictions

Philipp Fruhwirt, Ambroz Kregar, Jens T. Topping, Tomaz Katrasnikb and Georg Gescheidt

Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 5647--5666

Exp. conditions

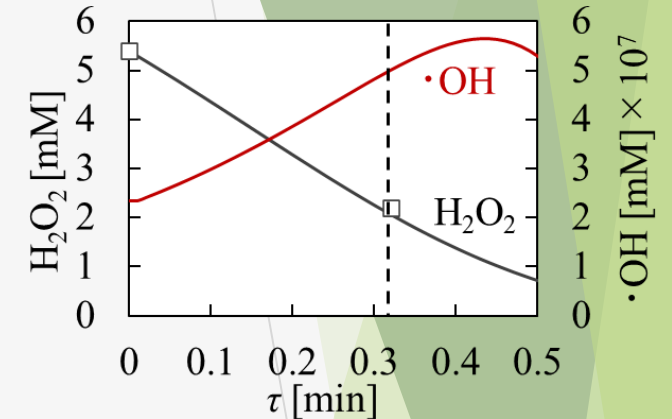
93°C $I = 2000 \mu\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$

H_2O_2 : 5.4 mM

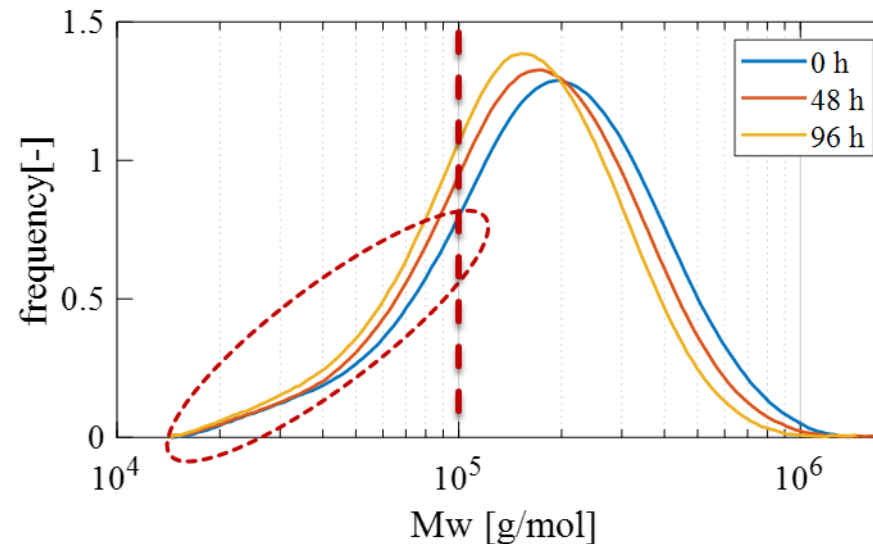
Fe^{3+} : 3 mM

流量 : 5 mL/min

時間 : 48, 96 h



Results

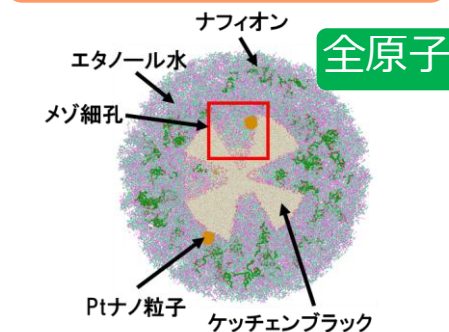


劣化の進行とともに分子量分布の低下が確認できた。

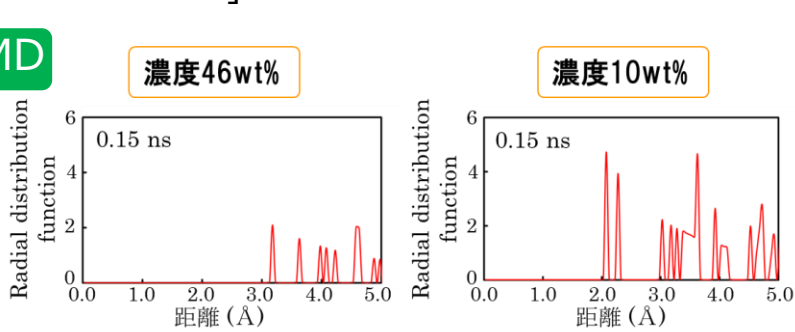
低分子量成分は液相側に溶出している。

実施項目 2. 製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレーターの開発 (東北大学)

153万原子の触媒インクモデルの断面図



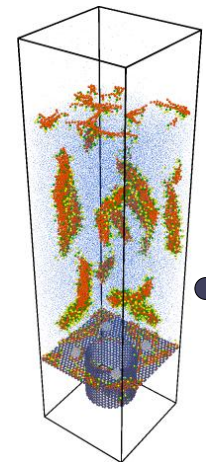
細孔内部の[Pt原子]-[ナフィオンのスルホ基のO原子]間の動径分布関数



異なるエタノール濃度の触媒インクモデルを用いた蒸発シミュレーション

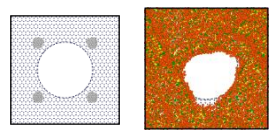
EtOH 10 wt%の方が細孔内部のナフィオン分布が増える

粗視化MD

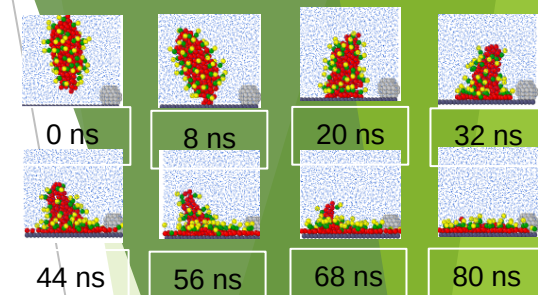
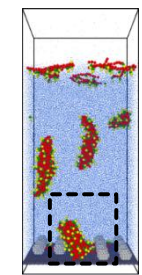


計算モデル

一次細孔上部のアイオノマー被覆状態



アイオノマー吸着プロセス



●担持カーボン ●白金粒子 ●高分子主鎖 ●疎水部 ●親水基 ●溶媒

触媒インクのアイオノマー状態、アイオノマー吸着プロセス、最終状態をMD計算により評価した。

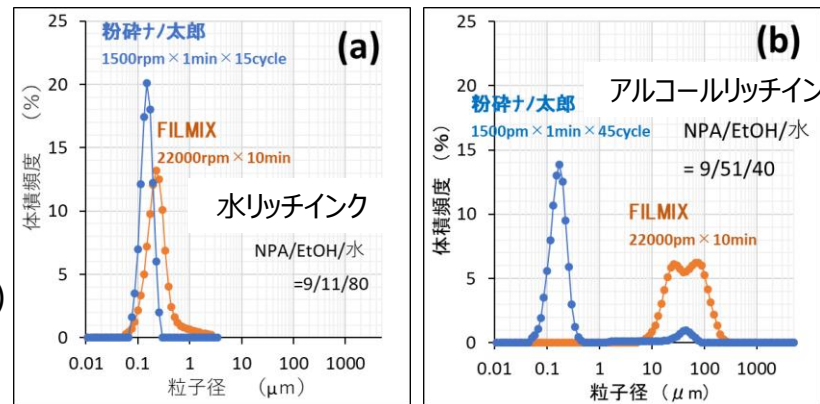
2 - 1. 触媒インクからの触媒層構造形成過程の計測 (東京科学大学)

攪拌プロセスがインク粒度分布に与える影響の検証データとして提供した。

2種の攪拌装置でインク調製

水リッチインク：インク粒度分布に攪拌装置の相違なし(a)
アルコールリッチインク：粉碎ナノ太郎®採用時に顕著な分散化を確認 (b)

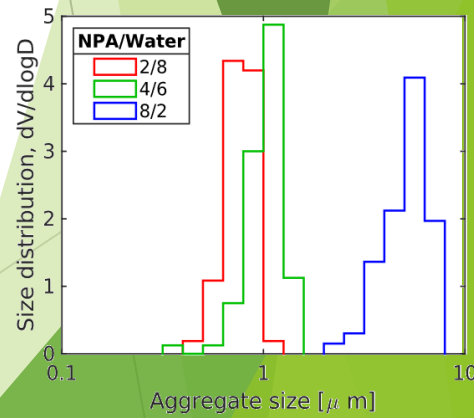
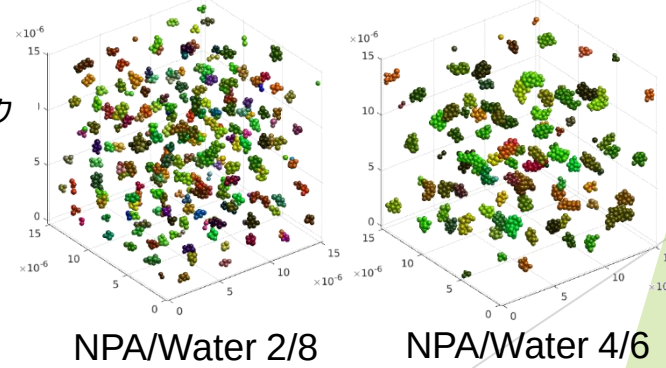
- ①薄膜旋回型高速ミキサー：FILMIX®
- ②ボールミル型粉碎機：粉碎ナノ太郎®



攪拌装置違いのインク粒度分布比較
(a) 水リッチインク (b) アルコールリッチインク

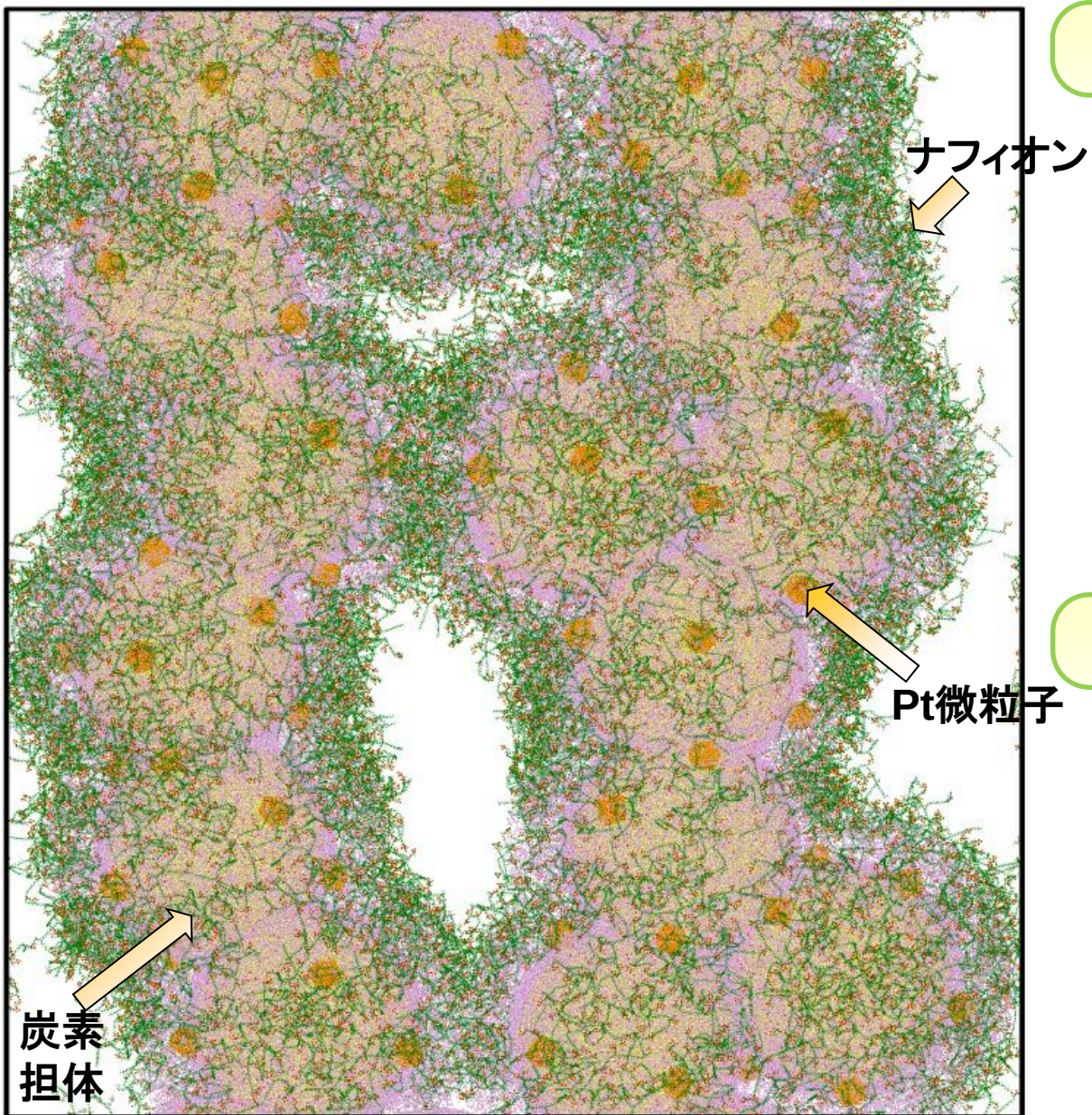
2 - 2. 触媒インク構造計測値からの触媒層モデル構築 (九州大学)

Ketjen担体 I/C : 0.85

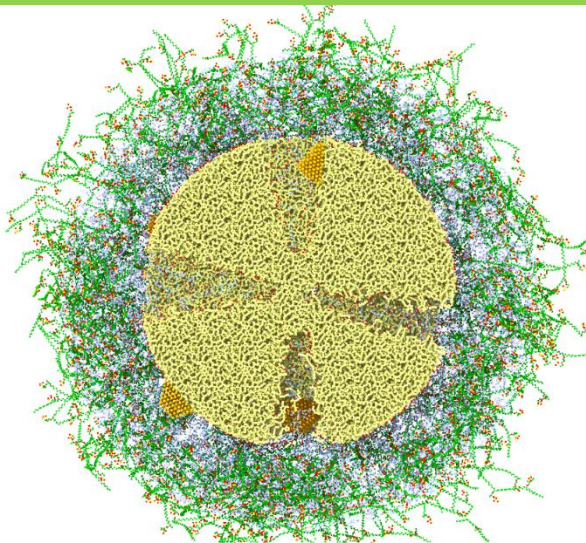


ハンセン溶解度パラメータにより、水の比率の低下によるアグロメレート径の増加傾向を再現した。

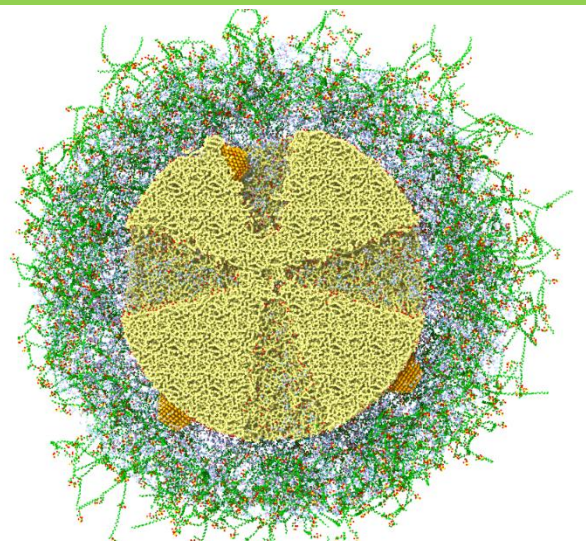
炭素担体の凝集構造を考慮した約300万原子から構成される触媒層構造のシミュレーション



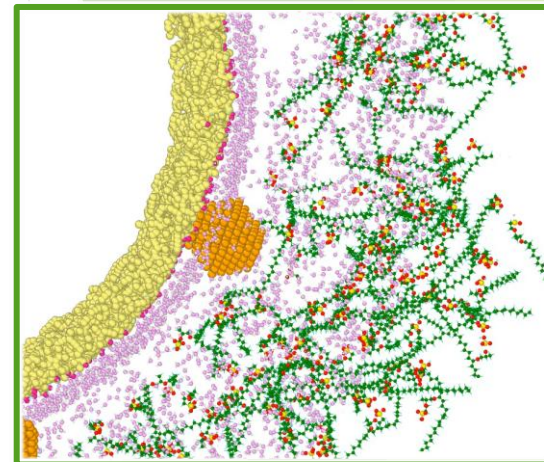
細孔径 4 nmモデル



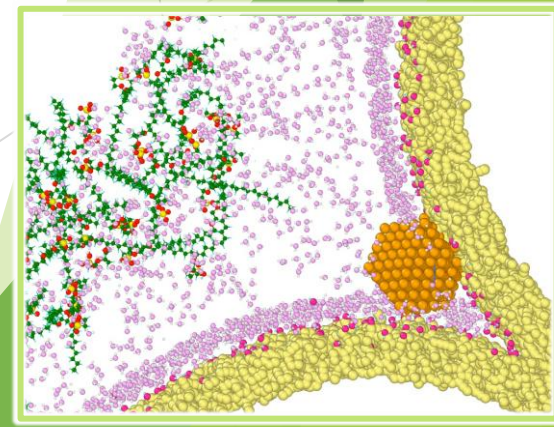
細孔径 6 nmモデル



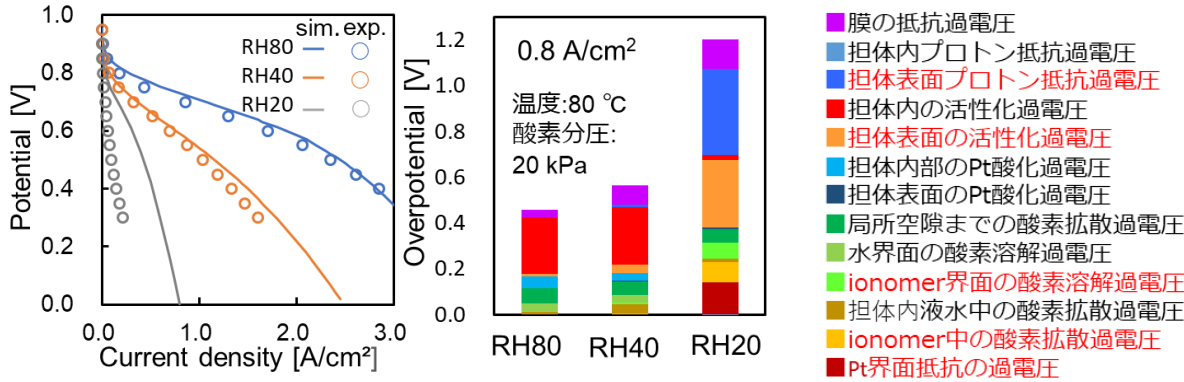
くぼみ部分
以外のPt粒子



くぼみ部分
のPt粒子



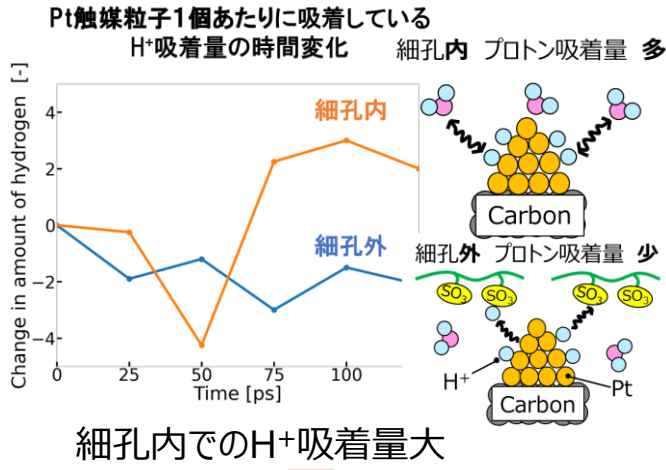
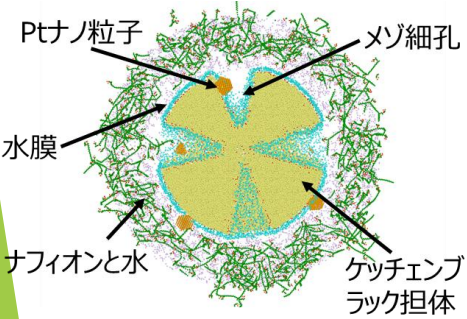
実施項目3. 発電性能を予測するマルチスケールシミュレーターの開発 (東北大, 九大, 東大)



担体内部のPt利用率のRH依存性を反映させた計算

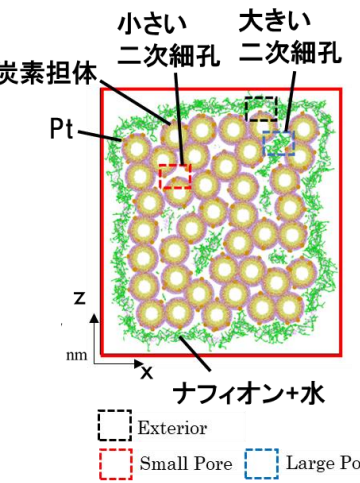
3-2. 担体の細孔構造, アイオノマー被覆を改善する担体表面の設計法の開発 (東北大学)

ケッチェンブラック担体を用いた触媒層モデルの断面図

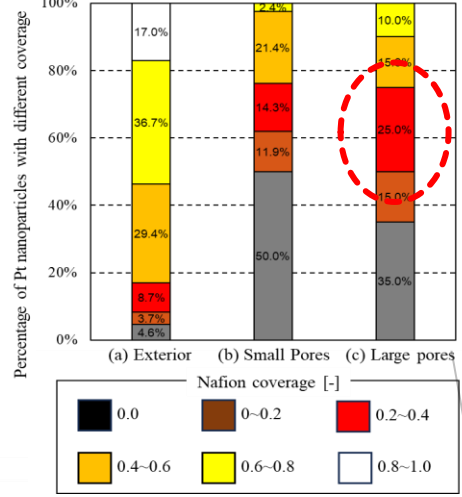


3-1. 電極反応の大規模数値シミュレーション手法の開発 (東北大)

400万原子の大規模触媒層モデルの断面図



Pt粒子に対するナフィオン被覆率の分布



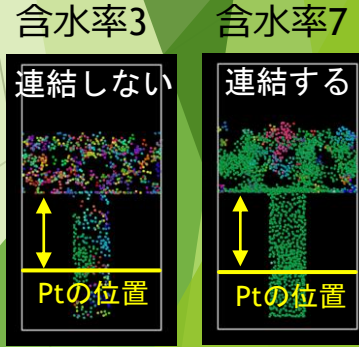
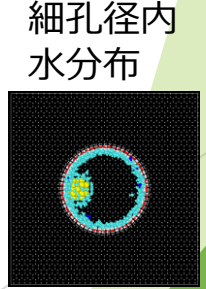
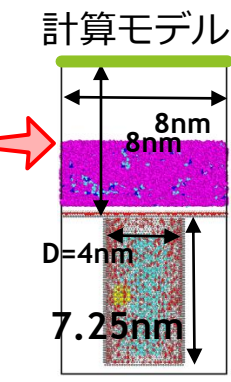
400万原子の大規模触媒層モデルを構築

炭素担体の細孔におけるナフィオン被覆状態の解明

大きな細孔において被覆率が小さいPt粒子の割合が増加

良好なプロトン伝導と酸素分子の拡散が期待

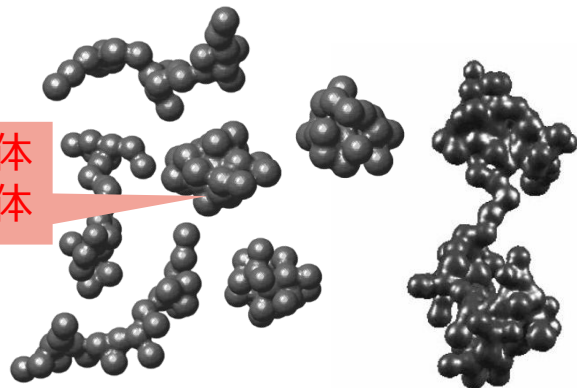
3-4. 触媒担体細孔中の水の状態および物質輸送特性の解明 (東北大学)



低含水率では連結性は温度低、細孔径大、官能基被覆率小のときに連結性が高い。

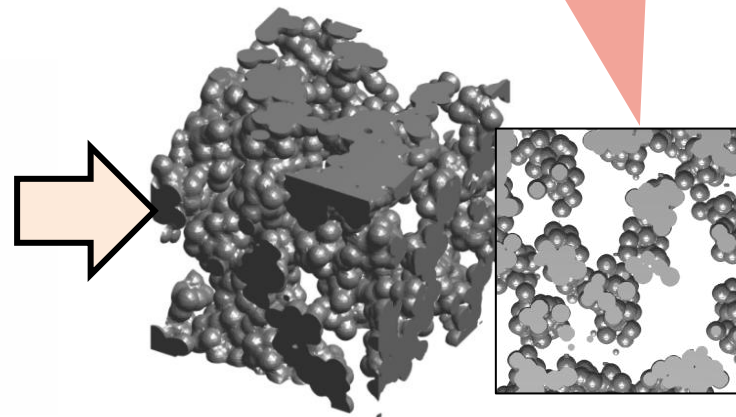
3D触媒層計算の流れ

(1) 触媒担体構造作製



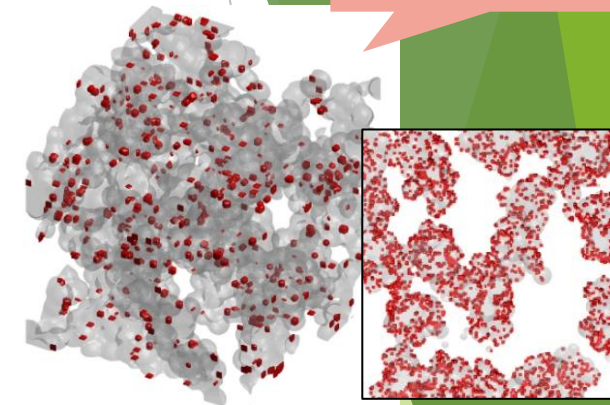
各担体構造を複数作製
(現在 1 材料で 100 個作製)

(2) 担体充填



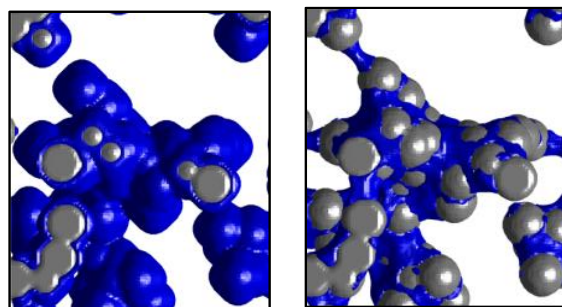
空隙率やPt loadingを設定値
として担体を充填

(3) Pt粒子担持



Pt loading、Pt粒子径を
もとに配置(担体内外)

(4) アイオノマー被覆

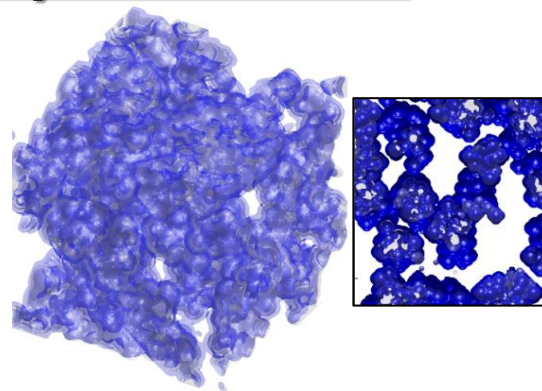


均一被覆
(Type 1)

不均一被覆
(Type 2)

担体表面性状
との相互作用

(5) 触媒層構造作製



I/C比を設定パラメータとして
担体、空隙、アイオノマーの
三相構造を作製

(6) 構造特性推算と反応輸送解析へ

構造情報

- ・ 細孔径分布
- ・ アイオノマー被覆率、厚さ

輸送特性情報

- ・ 相対拡散係数
- ・ 相対プロトン伝導度

ORR反応性能

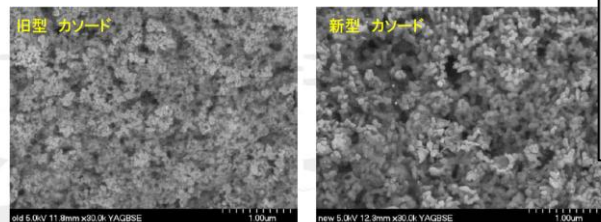
- ・ 出力特性
- ・ 反応分布 (Pt利用率)

物性反映

計算結果例、比較検証 (MIRAI比較)

評価MEAの仕様、測定条件				
	カソード	アノード	アイオノマー	電解質膜
新型MIRAI	PtCo/C 0.16mg-Pt/cm ² (XRFでの実測値)	Pt/C 0.025mg-Pt/cm ² (XRFでの実測値)	高酸素透過性 アイオノマー	フッ素系補強膜

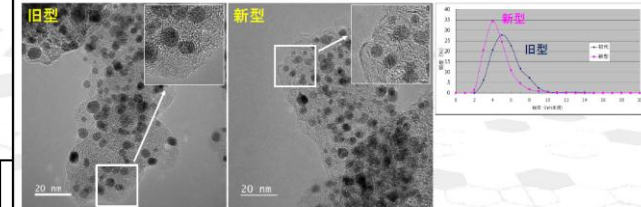
MEA カソード断面SEM



新型は旧型に比べカーボン粒子が大きい
細孔サイズは新型の方が大きく、均一と推察

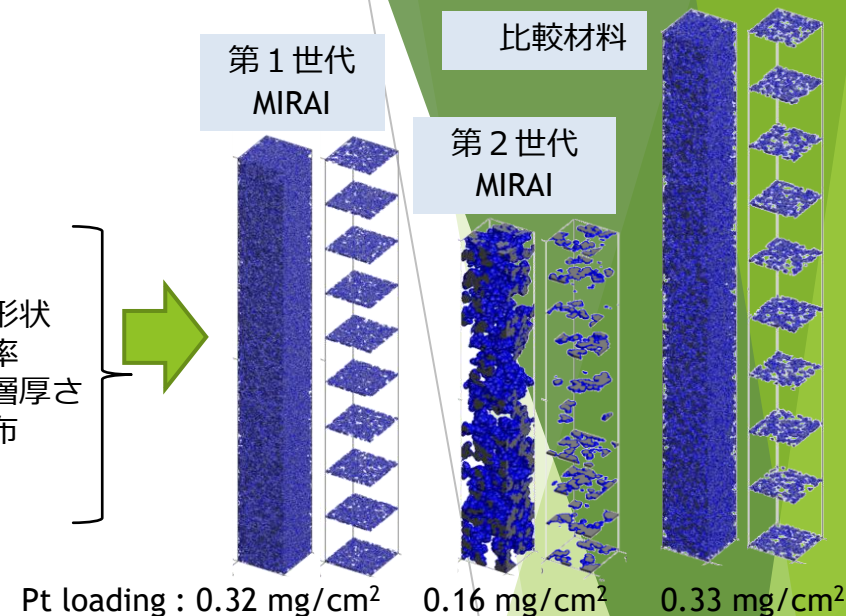
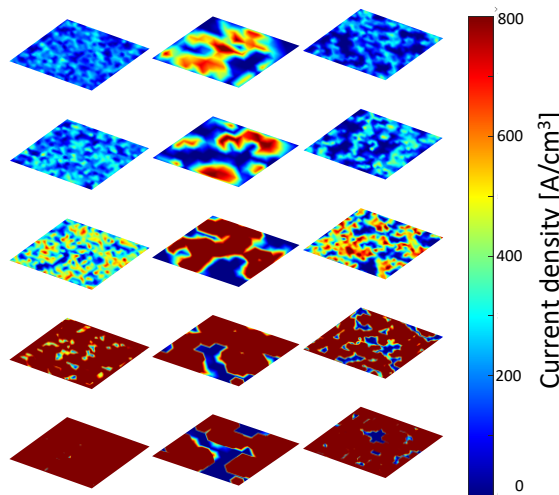
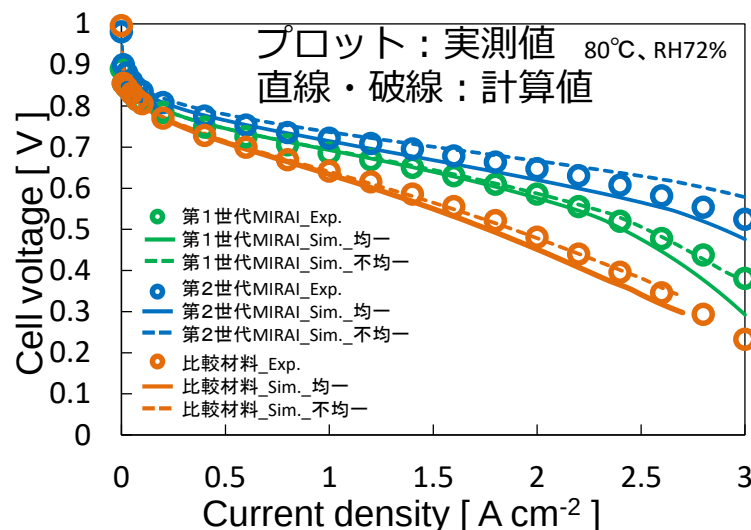
新型MIRAIの触媒進化	
【第1世代：中実カーボン担体】	【第2世代：多孔質カーボン担体】

TEM+粒径測定



新型MIRAIの触媒は粒子径が小さく均一、担体の結晶性高い
新型触媒は、平均粒径:5nm→4.1nmに減少、標準偏差も低下

第4回オープンシンポジウム評価解析プラットフォーム 新型MIRAI解析 計画と進捗状況 (2022/4/20) (FC-Cubic講演)



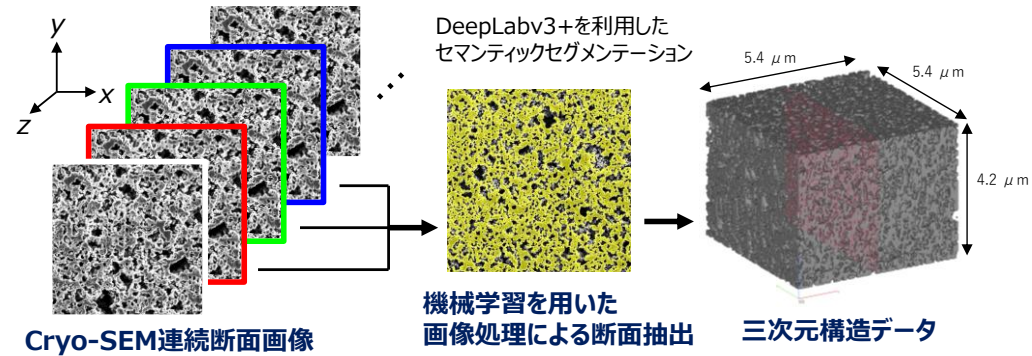
- 触媒仕込み条件
- 担体構造
- 凝集形状
- Pt粒子径分布

これらを反映した
反応輸送計算

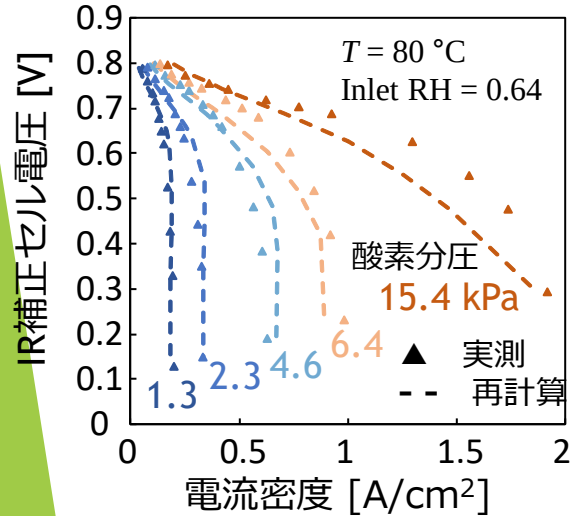
実材料・実セル計測情報を基に検証 (第1, 第2世代MIRAI, 比較材料)

3 – 5. Cryo-SEM画像から触媒層構造を数値的に再構築する技術開発と数値モデル化（東京大学）

触媒層試料のCryo FIB-SEM連続断面画像から高精度な三次元構造モデルを構築する手法を開発した。



3 – 7. 触媒層内アイオノマー薄層の酸素透過抵抗の定式化（京都大学）



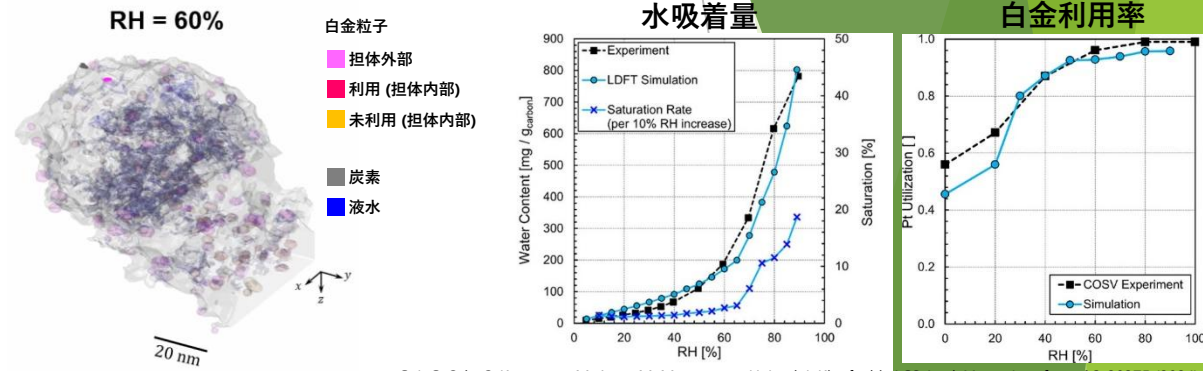
決定したパラメーター ($T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$)

$$k_{vcm}^{\circ} = 1.8 \times 10^9 \text{ mol}/(\text{Pa m}^3 \text{ s})$$
$$\times \exp\left(-\frac{E_{cm}}{0.0336 \text{ V}}\right) \text{ RH}$$
$$a_v k_{pO} = 0.22 \exp(\text{RH}) + 0.31 \text{ mol}/(\text{Pa m}^3 \text{ s})$$
$$\sigma_{ep} = (\varepsilon/\tau) \sigma_p = 0.046 \sigma_p, (0.10 \leq \sigma_{ep} \leq 0.35)$$
$$D_{eO} = 1.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$$

炭素担持白金触媒を用いて測定したIVから、パラメーター ($T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$) を決定した。

3 – 6. 触媒層内液水飽和モデルの開発（東京大学）

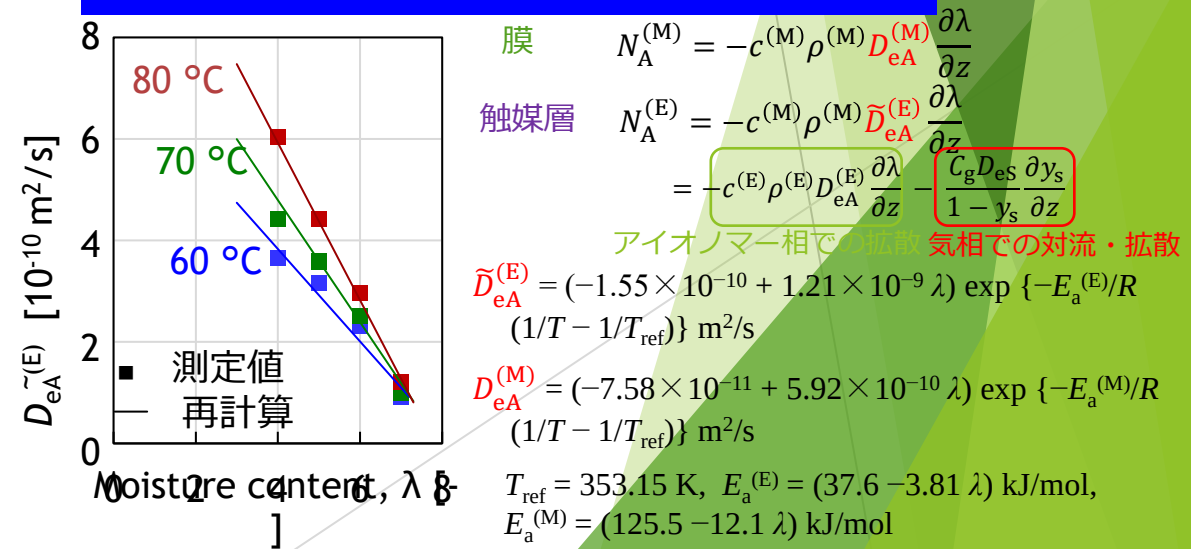
触媒担体粒子(Mirai-2G)の3D-TEM構造データを対象に水の相変化を格子DFT法により解析し、白金触媒の利用率の相対湿度依存性を再現した。



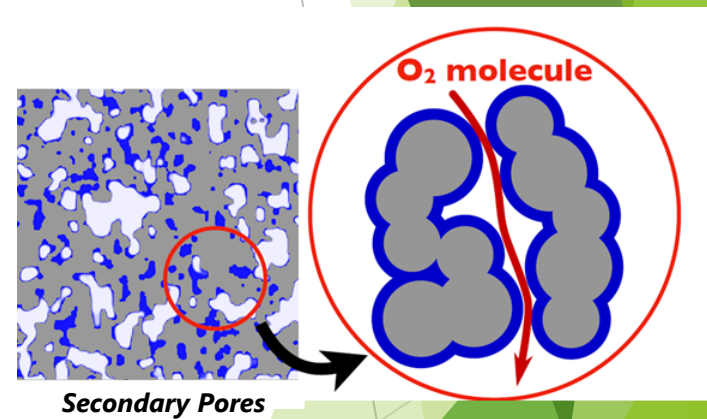
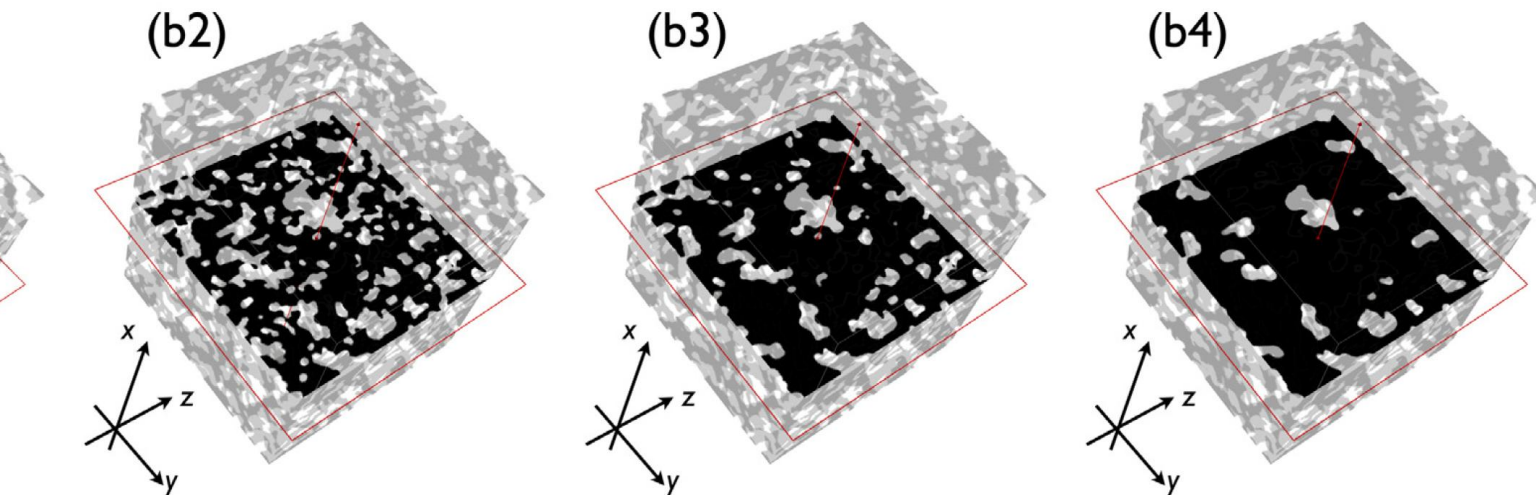
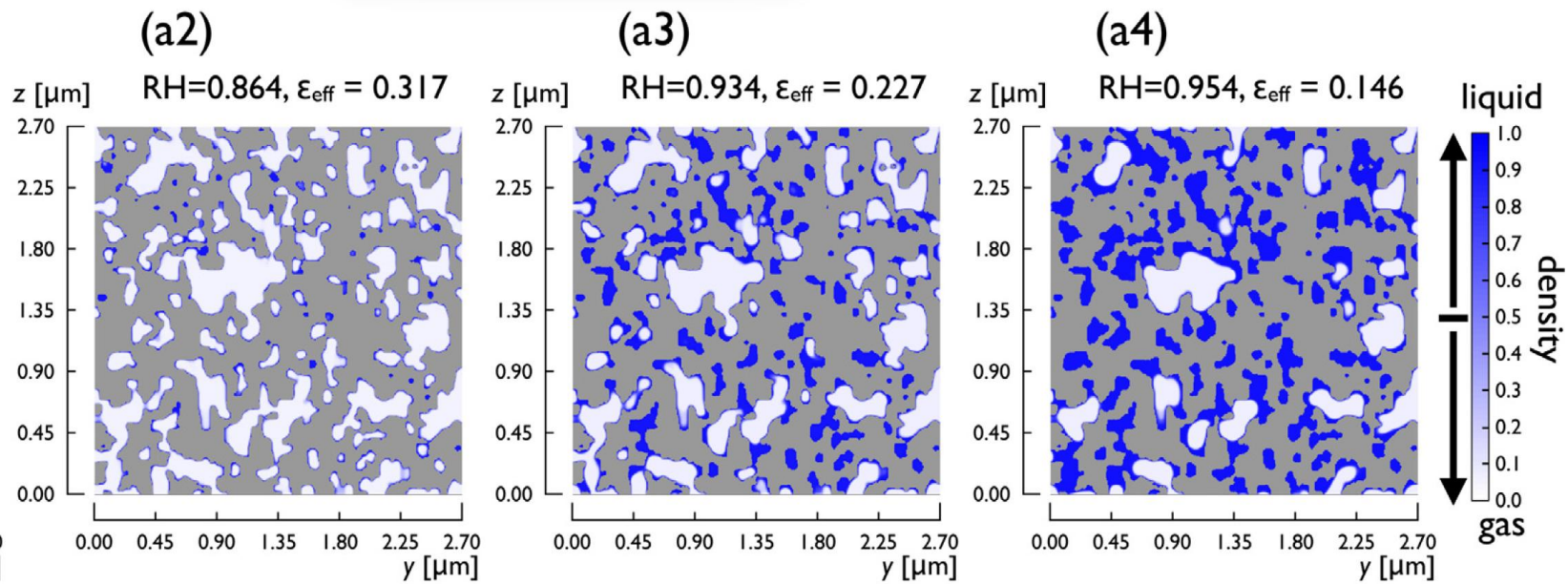
C. J. C. Otic, S. Katayama, M. Arai, M. Matsumoto, H. Imai, I. Kinefuchi, ACS Appl. Mater. Interfaces 16, 20375 (2024).

3 – 8. 電解質膜の吸水速度の定式化（京都大学）

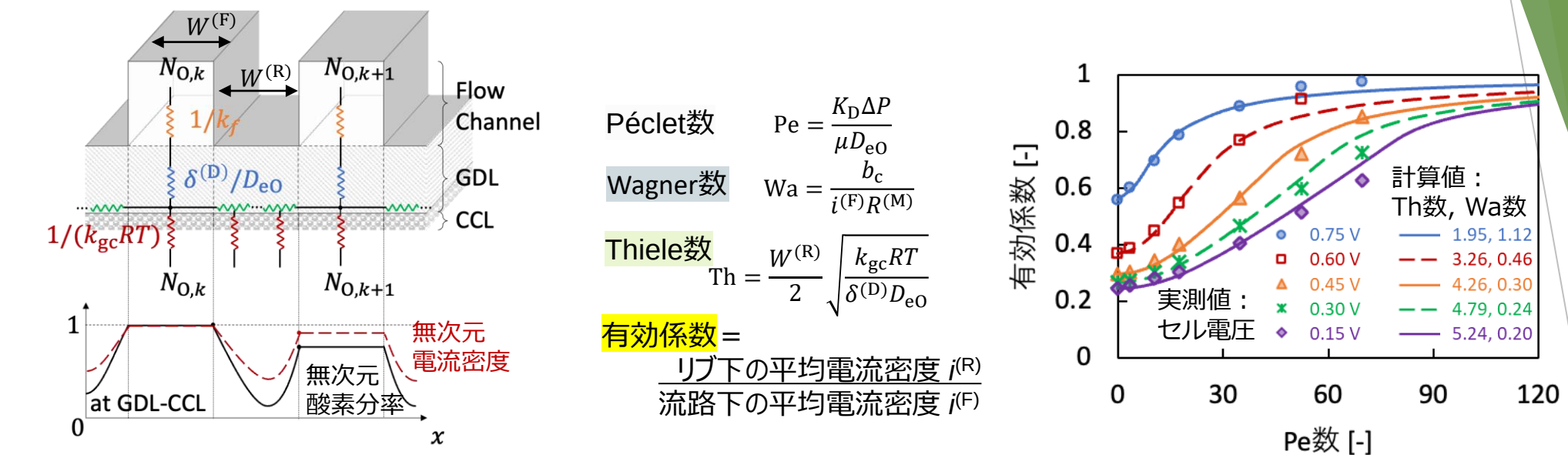
触媒層／膜中の有効拡散係数を定式化した。



多孔質構造の数値モデル化、アイオノマー被覆、有効拡散係数



実施項目 3 – 9 . 流路間伏流の定式化 (京都大学)



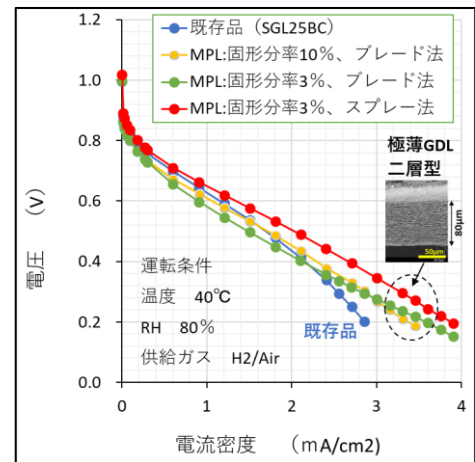
異なる流路間圧力差でのリブ下・流路下の有効電流密度比はPe数、Wa数、Th数に支配され、測定結果を精度よく再現できた。

実施項目 3 – 10 . 極薄自立MPLの創出と酸素輸送シミュレーション (東京科学大学)

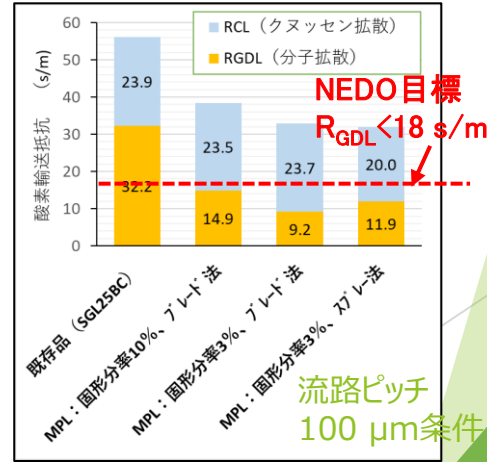
極薄GDLの第3者評価@FC-Cubicの実施にあたり、サンプルサイズアップ (1×3 mm⇒1 cm角) が必要⇒MPL健全塗布を実現するため、塗布方法の改善を行う。

MPL従来塗布仕様	塗布改善策
固形分10% + ドクターブレード ⇒1 cm角NG(未塗布部有)	固形分3% + ドクターブレード 固形分3% + スプレー ⇒1 cm角OK (健全塗布)

MPL塗布改善品の性能良好性を確認
⇒ 1 cm角サンプルの提供見通しが立った。



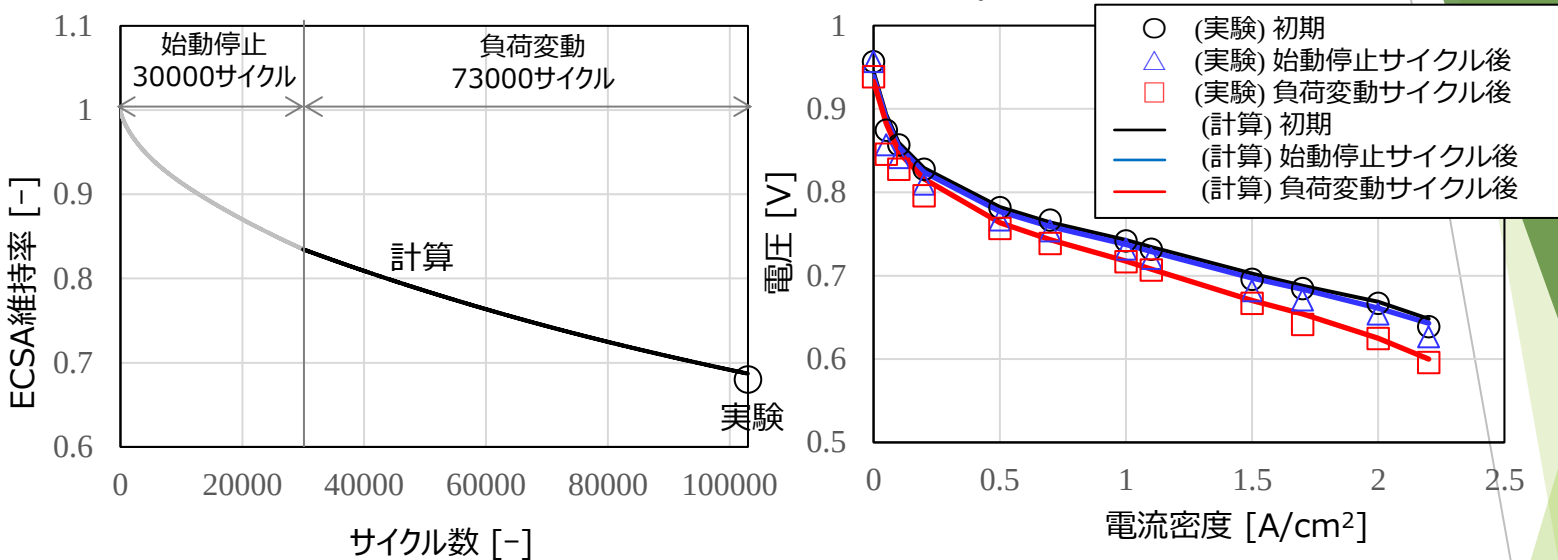
二層型MPL 塗布方法違いのi-V性能比較(流路ピッチ100 μm)



二層型MPL 塗布方法違いの酸素輸送抵抗比較

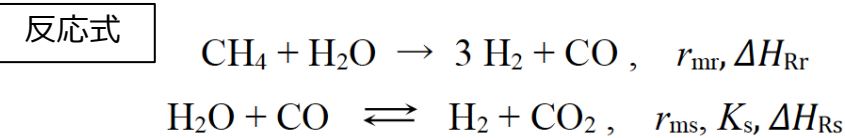
実施項目 4. モデルベースのPEFCシステムシミュレーターの開発 / 4 - 1. スタック性能・劣化モデルの開発 (京都大学、東京農工大学)

MIRAI1 3セルスタックの耐久性試験 (九州大学)



実スタックでの白金粗大化による白金表面積の低下とI-V特性の悪化を再現した。低負荷電圧の乖離にはPtCoからのCo溶出等の追加モデルが必要。

実施項目 4 - 2. 多様なアプリケーションに対応するためのシステムのモデルと制御器の開発 / 4 - 3. 活用促進に向けたユーザビリティの改善

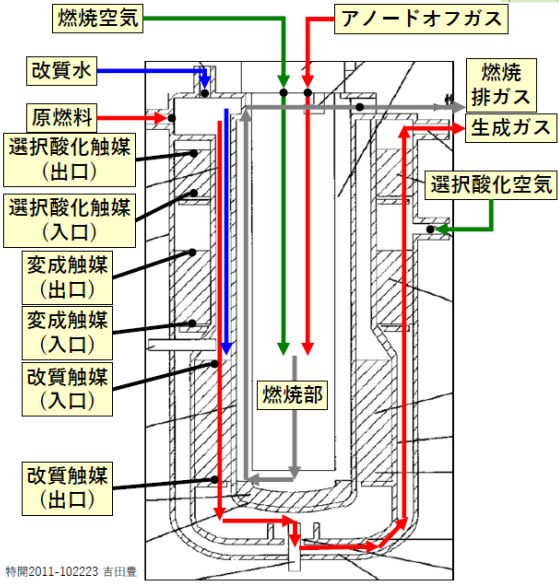


物質収支式

$$\frac{\partial}{\partial t} (C_F^{(r)} \varepsilon^{(r)} S^{(r)} dz) = -dF_F^{(r)} - r_{\text{mr}} \rho_b^{(r)} S^{(r)} dz$$

$$\varepsilon^{(r)} S^{(r)} \frac{\partial C_F^{(r)}}{\partial t} = -\frac{\partial F_F^{(r)}}{\partial z} - r_{\text{mr}} \rho_b^{(r)} S^{(r)}$$

定置用燃料電池システムのモデル式を作成した。モデル式のプログラム実装と精度検証を進めている。



シミュレーショングループで開発しているシミュレーター

④ FCシステムシミュレーター FC-DynaMo

提供中

MATLAB版 – 使用改変許諾契約、無償、商用利用可 – 34機関

Windowsアプリ版 – 使用許諾契約、無償 – 166件 – 2025.3 世界公開予定 –

Pt粒子成長、炭素腐食、1+1D & 1Dモデル搭載

③ セルシミュレーター

– 受託解析 – 実施中

② 電極製造プロセスシミュレーター

分子シミュレーター – 連携 – 予定

非速度論モデルシミュレーター – 簡易版提供 – 予定

① 部材シミュレーター

電気化学反応分子シミュレーター – 連携 – 予定

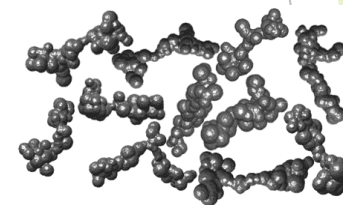
PEM劣化シミュレーター

– FC-DynaMoに組み込み – 予定

【その他公開予定】

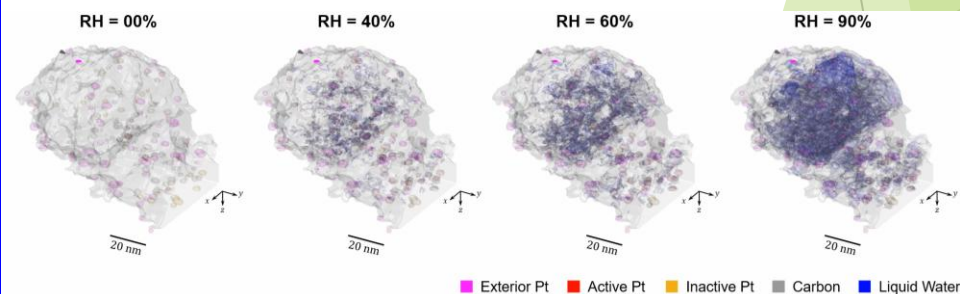
炭素担体モデルのデータベース

CB構造特性データ（比表面積、細孔容積、異方性）描画したカーボン構造



触媒担体内の水の相変化シミュレーター（簡易版）

格子密度汎関数法による水の相変化解析



関心表明書
提出MATLABソースコード版 使用改変許諾契約（34機関）

(株)本田技術研究所、日本ゴア(合同)、北海道大学、AZAPA(株)、長州産業(株)、(株)IHI、(株)豊田自動織機、パナソニック(株)エレクトリックワークス社、パーソルテクノロジースタッフ(株)、(株)SUBARU、愛三工業(株)、ヤンマーホールディングス(株)、スズキ(株)、(株)クボタ、ヤンマーパワーテクノロジー(株)、(株)いすゞ中央研究所、(株)MCOR、みずほリサーチ&テクノロジーズ(株)、日置電機(株)、(株)日進製作所、Nexus R&D、ボーイングジャパン(株)、東京大学、金沢大学、兵庫県立大学、パナソニックホールディングス(株)、(株)アイシン、L-TRiSE(株)、東芝インフラシステムズ(株)、(株)IDAJ、京都大学、デジタルプロセス(株)、富士電機(株)、九州大学

Windowsアプリ版 使用許諾契約（166）GUIを備えており、
基本的にサポートなし

(株)IDAJ、(株)JSOL、(株)MCOR、(株)SCREENファインテックソリューションズ、(株)SOKEN、(株)アイシン、(株)いすゞ中央研究所、(株)エクスマーシオン、(株)キャタラー、(株)クボタ、(株)デンソー、(株)水素パワー、(株)中央図研、(株)東京アールアンドデー、(株)日進製作所、(株)豊田自動織機、(株)本田技術研究所、AGC(株)、NOK(株)、いすゞ自動車(株)、インテグレーションテクノロジー(株)、スズキ(株)、パナソニックホールディングス(株)、ボッシュ(株)、みずほリサーチ&テクノロジーズ(株)、ヤマハモーターエンジニアリング(株)、ヤンマーパワーテクノロジー(株)、ヤンマーホールディングス(株)、愛三工業(株)、敬愛技術士事務所、長州産業(株)、帝人(株)、田中貴金属工業(株)、東京ラヂエーター製造(株)、東芝インフラシステムズ(株)、日進製作所、日置電機(株)、日本ミシュランタイヤ(株)、日本特殊陶業(株)、武蔵精密工業(株)、(株)明電舎、(株)高砂製作所、(株)東芝エネルギーシステムズ、(株)FASOTEC、計測エンジニアリングシステム、(株)IHIエアロスペース、日邦プレジジョン(株)、トヨタ自動車(株)、(一財)日本自動車研究所、(技組)FC-Cubic、(国研)水産研究・教育機構水産技術研究所、九州大学、大阪産業大学、東京工業大学、東京大学、東北大学、北海道大学、名古屋大学、金沢大学、東京電機大学、個人ほか

※現契約では、本事業終了から1年後の2026年3月31日まで使用可

I01Z - Plenary Session

- I01Z - PEFC&WE24 Plenary 1
- I01Z - PEFC&WE24 Panel Discussion
- I01Z - PEFC&WE24 Plenary 2

I01A - Fuel Cell Electrocatalyst Activity and Durability

- I01A - 01 Pt-Based Cathode Catalysts 2件 担体も
- I01A - 01 Pt-Based Cathode Catalyst Layers 2件
- I01A Poster Session
- I01A - 03 Pt and Pt-Alloy Cathode Catalysts
- I01A - 03 Non-PGM Cathode Catalysts
- I01A - 04 Pt-Alloy Cathode Catalysts with C. Supports
- I01A - 04 New Support Mater. Based on Carbon 1件
- I01A - 05 New Support Materials & HT-PEMFC
- I01A - 05 Electrocatalysts for AEMFC
- I01A - 05C Pt-Based Anode Catalysts

I01B - Electrolyzer Electrocatalyst Activity and Durability

I01C - Ionomers, Membranes and Separators for Fuel Cells and Electrolyzers

- I01C - Membr. Development: Electrolysis
- I01C - Electrode Ionomers and Interfaces
- I01C Poster Session
- I01C - Membr. Development: Fuel Cells
- I01C - Membr. Development & Characterization
- I01C - Membr. Durability: Degrad. and Diagnos. 2件
- I01C - Membr. Durability: Additives 3件

I01D - Fuel Cell Electrodes, MEAs and Diagnostics

- I01D - Modeling 1 9件
- I01D - Modeling 2 11件
- I01D Poster Session
- I01D - Catalyst Layer 1
- I01D - Catalyst Layer 2 1件
- I01D - Catalyst Layer 3 3件
- I01D - Durability 1件
- I01D - Diagnostics 2件
- I01D - GDL/MPL 2件
- I01D - Imaging 1件
- I01D - Flow Field 2件
- I01D - Digital Only Presentations

I01E - Electrolyzer Electrodes, MEAs and Diagnostics

I01F - Cells, Stacks and Systems for Fuel Cells and Electrolyzers

- I01F - Porous Transport, Gas Diffusion and Electrode Design 3件
- I01F - Manufacturing, Recycling and Scale-up Considerations 1件
- I01F Poster Session
- I01F - Fuel Cell and Electrolyzer Stacks
- I01F - BPP Design and Manufacture 1件
- I01F - Stack and System: Designs and Testing 1 1件
- I01F - Stack and System: Designs and Testing 2
- I01F - Stack and System Modelling 1 5件
- I01F - Stack and System Modelling 2 2件

計算技術の高度化（計算手法、アルゴリズム提案、マルチフィジックス連携）よりも、実際の材料開発、触媒層開発、プロセス高度化に直結する計算の取り組みが増加している印象

米国からは依然 MPL、GDL、流路内の二相流CFDも