



2025.9.26 第17回FC-Cubicオープンシンポジウム (京大桂)

シミュレーショングループの 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

NEDO事業

- ▶ 2020～2024年度
- ▶ 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業
共通課題解決型基盤技術開発 (燃料電池評価解析プラットフォーム)
／(シミュレーショングループ)
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
Development of design-for-purpose numerical simulators for attaining long life and high performance project
- ▶ 実施項目23個
- ▶ 2025年度～
- ▶ 水素利用拡大に向けた共通基盤強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 (燃料電池評価解析プラットフォーム)
／(シミュレーショングループ)
MEA設計提案のためのトランススケールAIシミュレーターの開発
Development of trans-scale AI simulators for proposing MEA design
- ▶ 実施項目7個(細目23個)

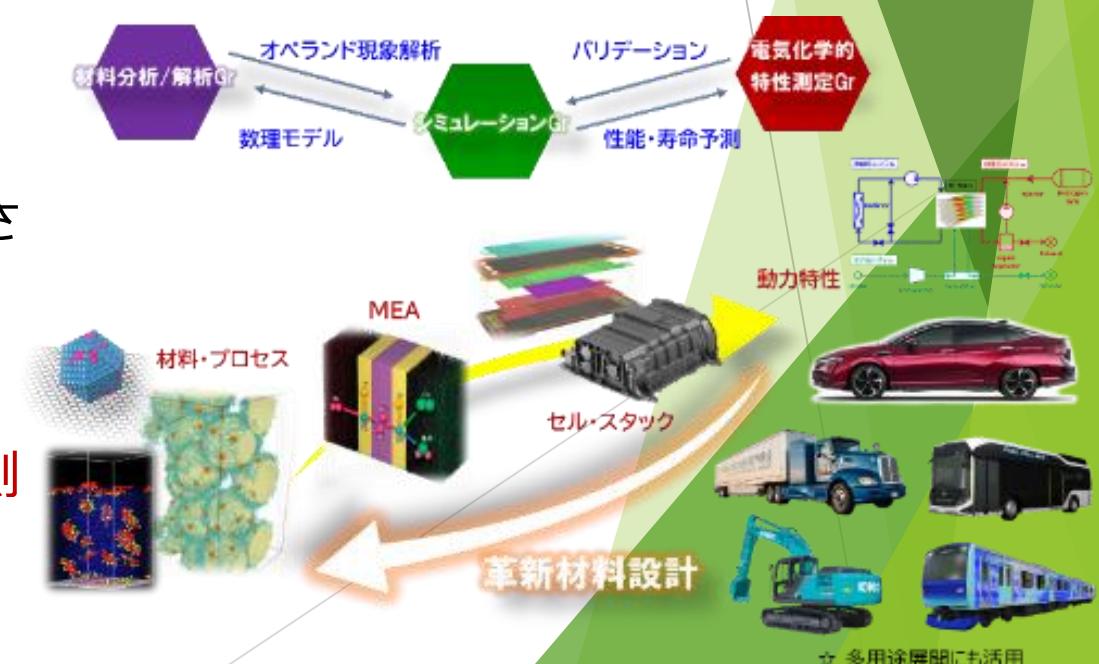
FY2020-2024 長寿命化・高性能化達成のための設計シミュレーターの開発

- 高効率、高耐久、低コストの燃料電池システムを実現するための**ユーザーニーズに基づく基盤技術**を開発 ⇒ 日本の燃料電池技術の競争力強化
- 新規に開発された材料に対して、物性値や特性値から、セルの**初期性能ならびに耐久性を予測** & **モデルベース開発 (MBD)**
 - ⇒ 多様なアプリケーション
 - ボトルネックとなる材料・MEA特性と条件を明確化
 - ⇒ 新規材料の有用性を示す & 目標達成に向けた改良指針を提示

性能を最大限発揮する条件を高速探索
各種諸元の感度評価

- シミュレーション技術を産業界および学術界へ普及させ活用してもらう
⇒ **新規プレーヤーの創出**

材料物性から最終燃料電池システム製品の特性を予測
材料からシステムへの橋渡し



▶ ミクロシミュレーション

計測の困難な現象を見る

▶ マクロシミュレーション

数字を予測する

▶ モデリング

現象を説明する

FY2020-2024 実施項目

実施項目 4, 4-2, 4-3 FCシステムモデル, MBD

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

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

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

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

3-8 PEM水収着速度モデル

3-9 GDL
伏流モデル

流路モデル

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

FY2020-2024 実施体制

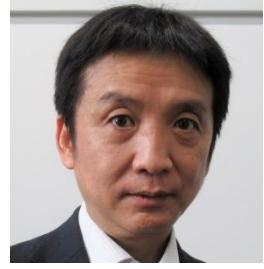
5機関 + 再委託先2機関

9研究グループ

NEDO

PL：木崎幹士

GL：京都大学・河瀬元明



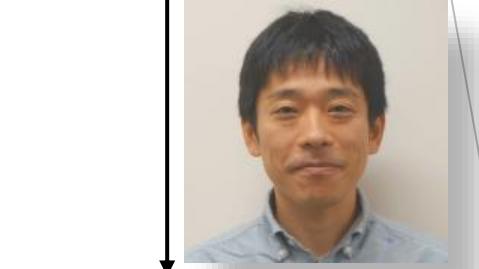
京都大学
河瀬・中川・長谷川・馬
◆研究開発テーマ
・PEMの化学・機械劣化連成シミュレーターの開発
・モデルベースのPEFCシステムシミュレーター開発 等



東北大学
久保・徳増・尾澤
◆研究開発テーマ
・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
・電極反応の大規模数値シミュレーション手法の開発 等



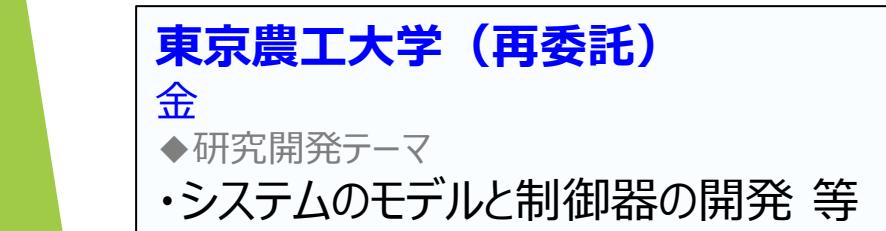
九州大学
井上
◆研究開発テーマ
・発電性能を予測するマルチスケールシミュレーターの開発
・触媒インク構造計測値からの触媒層モデル構築 等



東京大学
杵淵
◆研究開発テーマ
・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
・触媒層内液水飽和モデルの開発 等

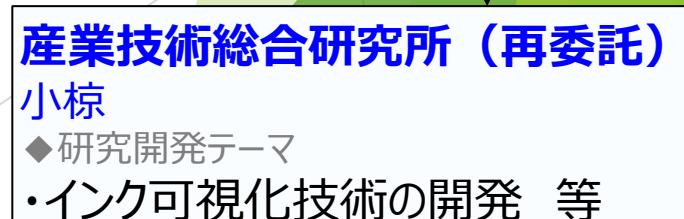


東京科学大学
平井・酒井・笠部
◆研究開発テーマ
・触媒インクからの触媒層構造形成過程の計測
・極薄自立MPLの創出と酸素輸送シミュレーション 等



東京農工大学（再委託）
金
◆研究開発テーマ
・システムのモデルと制御器の開発 等

23実施項目のうち8実施項目が機関間連携



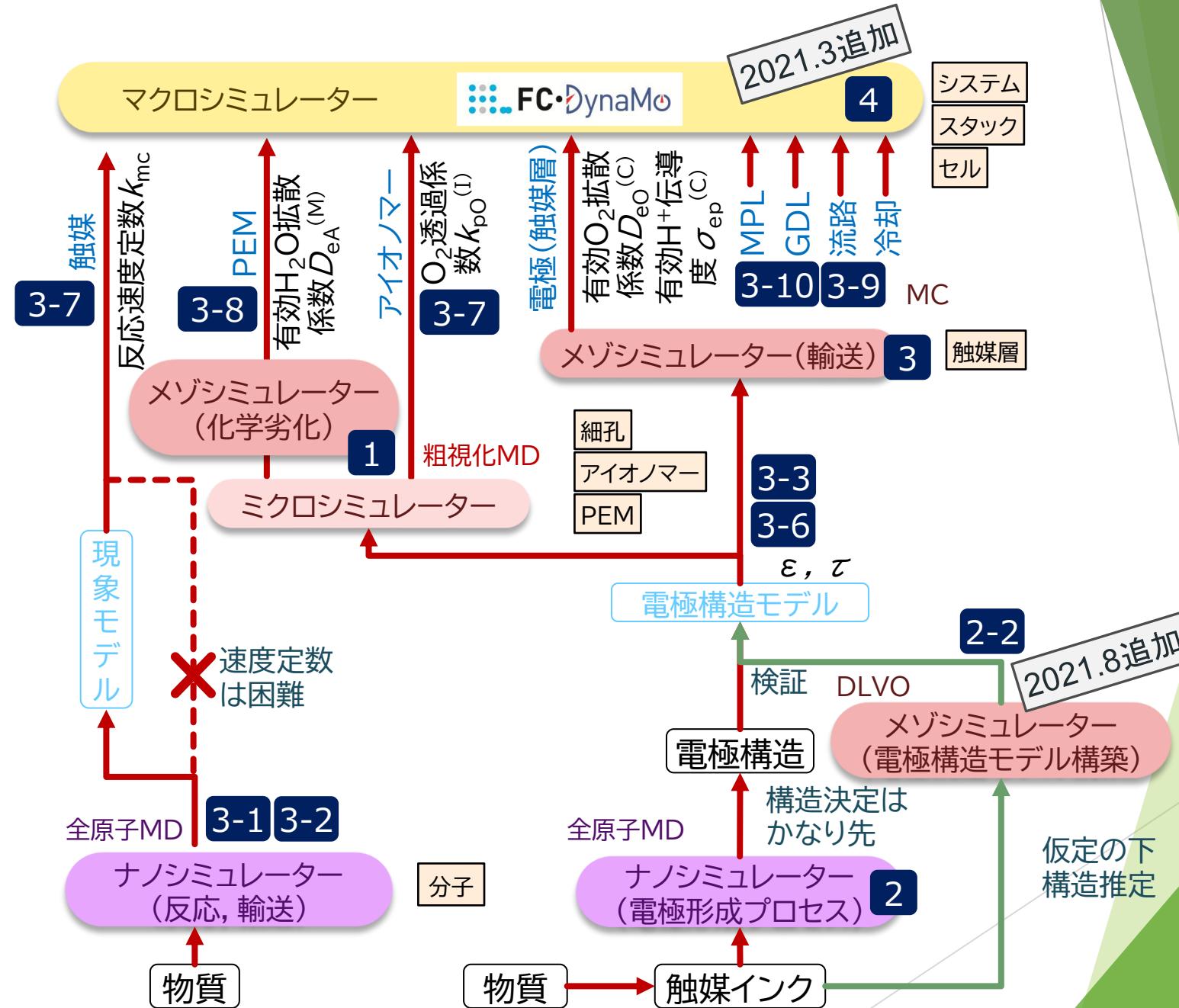
産業技術総合研究所（再委託）
小椋
◆研究開発テーマ
・インク可視化技術の開発 等

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

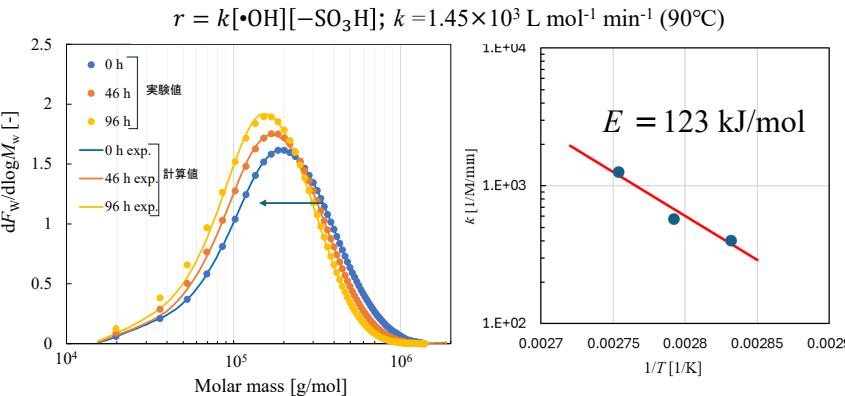
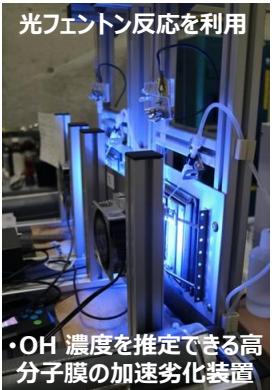
マクロシミュレーターでは、必要なパラメーターを仮決め、ミクロシミュレーションの結果が出れば差し替える

注。計測テーマは
本図には示していない



研究開発成果：実施項目1群. PEMの化学・機械劣化連成シミュレーター（内部連携）

1-1. PEM化学劣化シミュレーターの開発（京都大学）



電解質膜の化学劣化の加速装置を開発した。
化学劣化に伴う分子開裂速度を定式化した。

分子量分布
を予測可能

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に添加した CeO_2 溶出速度を予測する実験式を導出した。

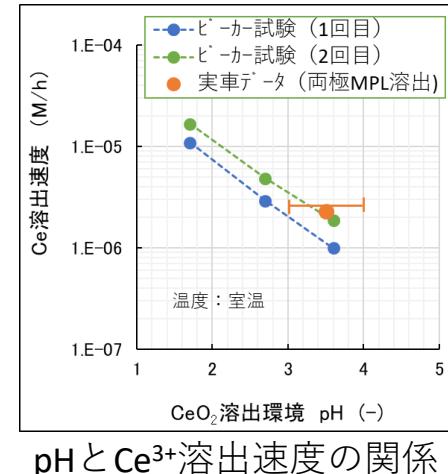
アノード側： $0.0012 \mu\text{g}/\text{cm}^2 \times \text{停止時間 [h]}$

カソード側： $0.0009 \mu\text{g}/\text{cm}^2 \times \text{停止時間 [h]}$

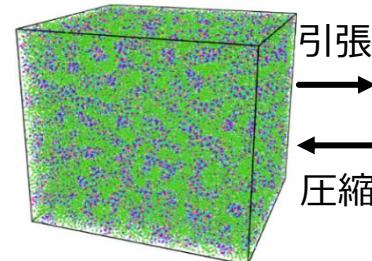
MPLへの CeO_2 仕込み量と
pH環境($\text{pH}=4$ で算出)で決定

CeO_2 溶出の制御方法を提案した。

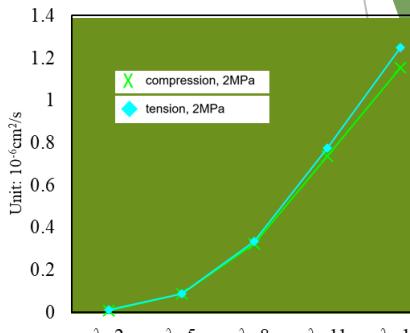
- ・溶出加速： Ce_2O_3 (III)の添加 (4倍加速)
- ・溶出抑制：FCV停止時の液水排出を促進する空気バージ



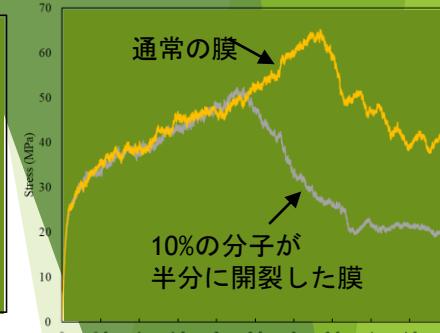
1-2. 応力下の補強膜高分子高次構造変化シミュレーターの開発（東北大学）



機械特性評価粗視化
MDシミュレーター



OHラジカルの拡散係数

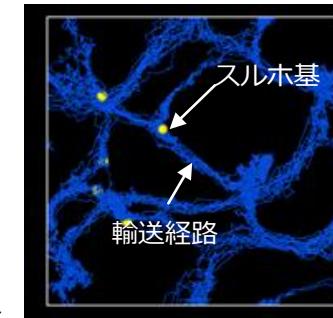
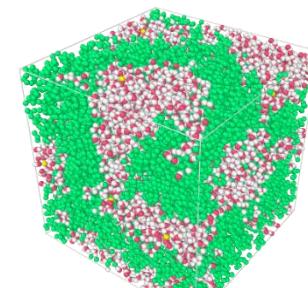


電解質膜の歪応力曲線

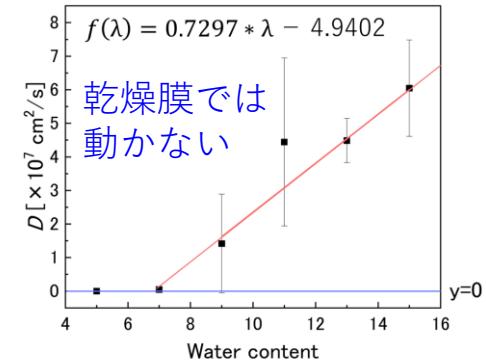
電解質膜の応力とOHラジカルの
輸送速度の関係を明らかにした。

分子量分布と電解質膜の機械
的特性の関係を明らかにした。

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（東北大学）



Ceイオン輸送経路



Ceイオン拡散係数

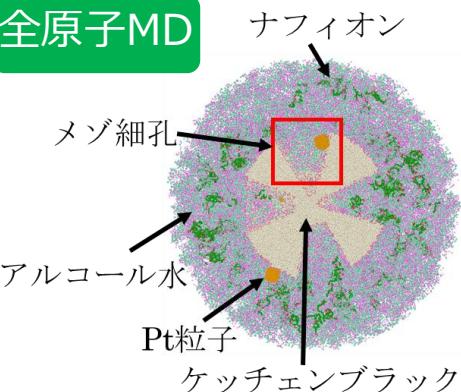
PEM内セリウムイオン輸送特性 (拡散係数、対流イオン輸送係
数) の温度、含水率依存性を定式化した。

研究開発成果：実施項目2群. 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（内部連携）

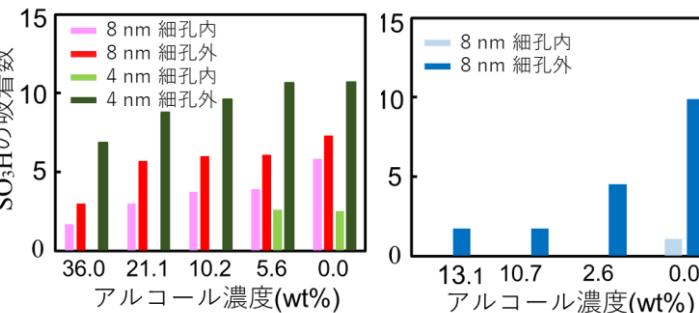
実施項目2. 製造プロセスから触媒層構造を予測するシミュレーターの開発（東北大学）

153万原子の触媒インク
モデルの断面図

全原子MD

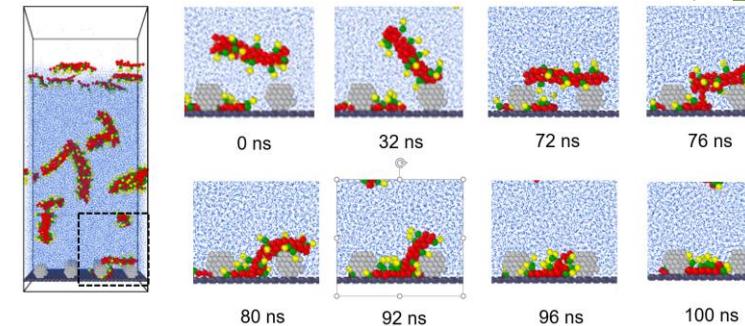


アルコールの蒸発によるPtナノ粒
子へのナフィオン吸着量の変化



炭素担体細孔内のナフィオン吸
着量のアルコール濃度と細孔径
依存性を全原子MDで計算した。

粗視化MD

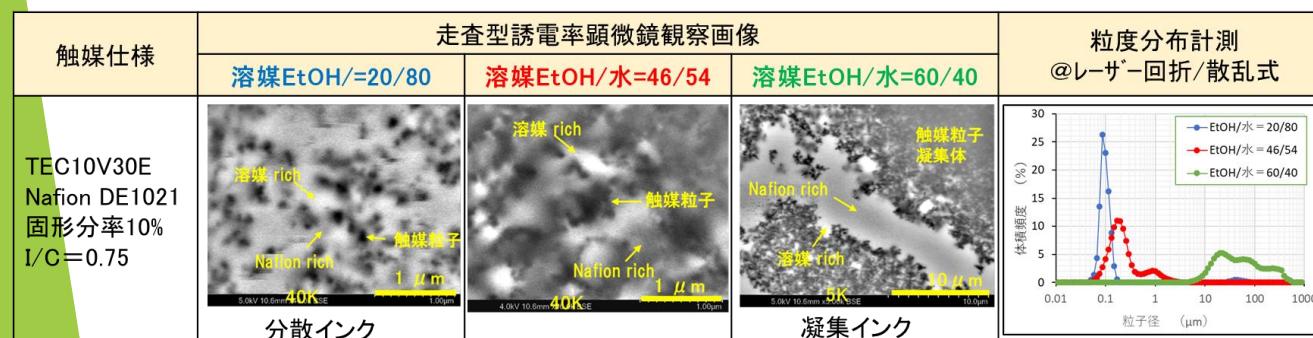


蒸発に伴う触媒インク中のアイオノマー状態
を評価できるシミュレーターを構築した。

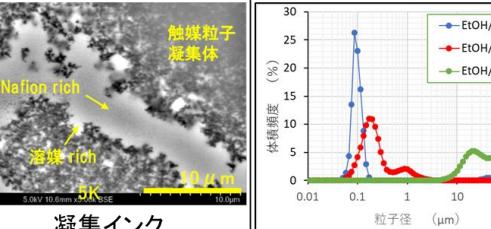
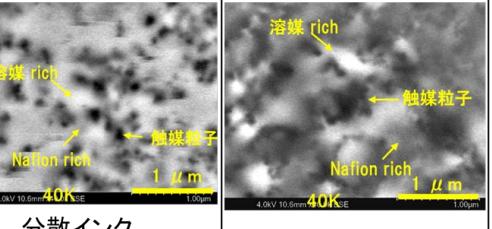
2-1. 触媒インクからの触媒層構造形成過程の計測（東京科学大学）

インク中のサブミクロンサイズの
触媒粒子・アイオノマー凝集体を
可視化できる技術を確立した。

- 溶媒組成, I/C, 搅拌工程とインク
物性の関係
- 乾燥工程（自然乾燥／強制乾燥）
と触媒層構造物性の関係

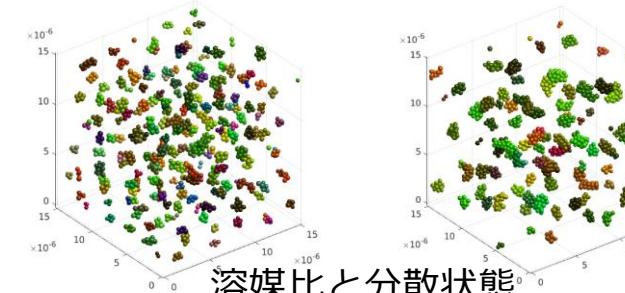


TEC10V30E
Nafion DE1021
固体分率10%
I/C=0.75

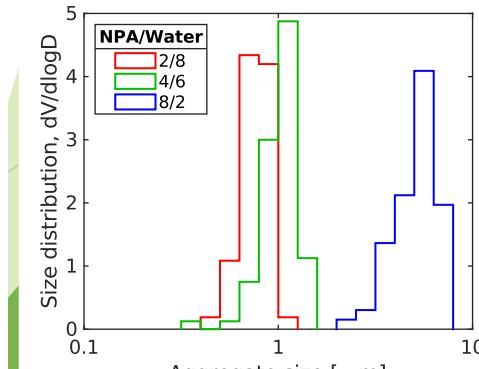


2-2. 触媒インク構造計測値からの触媒層モデル構築 (九州大学)

Ketjen-black I/C = 0.85
NPA/Water = 2/8 NPA/Water = 4/6



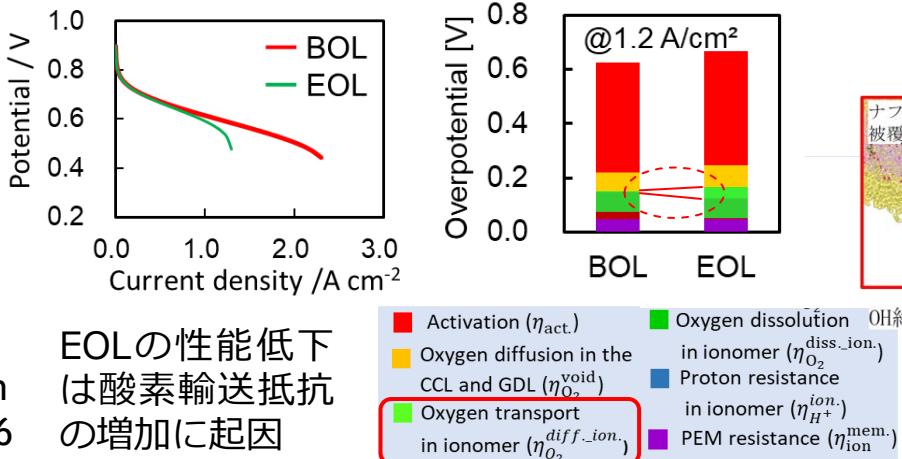
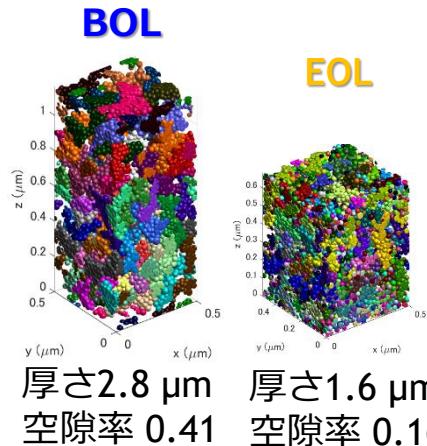
アグロメレート径の
溶媒比依存性



湿式プロセスにおける分散溶媒中の粒子凝集を再現した。

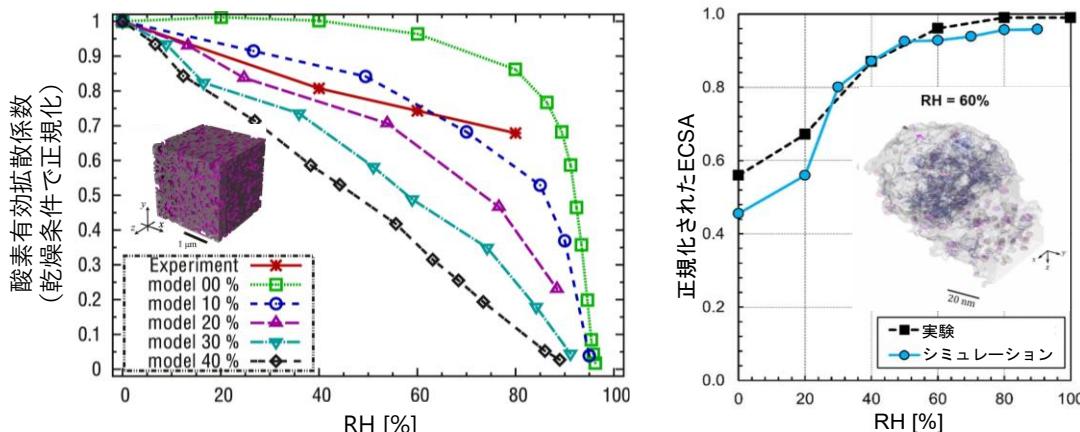
研究開発成果：実施項目3群. 発電性能を予測するマルチスケールシミュレーター（受託解析）

マルチスケールシミュレーターの開発（東北大学, 九州大学, 東京大学）



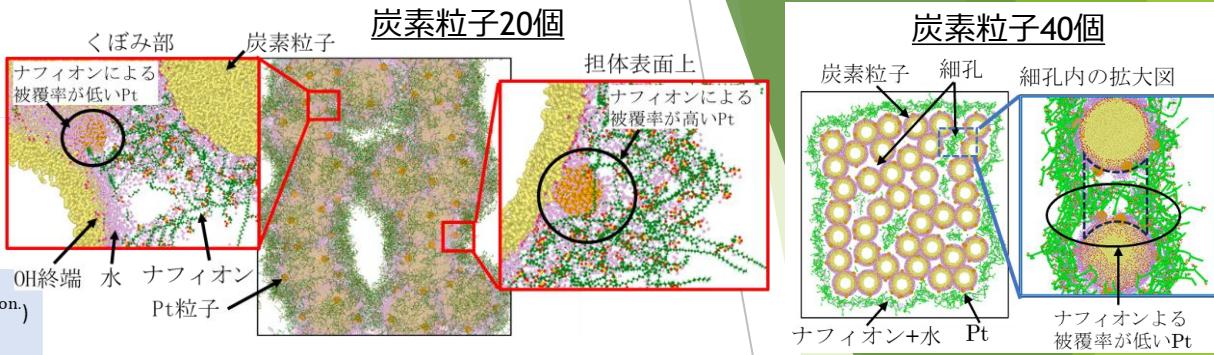
担体、Pt担持量、I/C違いのI-V性能の酸素分圧依存性を再現した。CB劣化による発電性能低下を定性的に評価した。

3 – 6. 触媒層内液水飽和モデルの開発（東京大学）



液水生成シミュレーションにより、酸素拡散および白金触媒利用率の相対湿度依存性を再現した。

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）

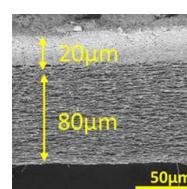


炭素担体の凝集形態とナフィオン被覆状態の関係を明らかにした。

くぼみ部及び細孔ではナフィオン被覆率が低いPt粒子が増加し、良好なプロトン伝導と酸素拡散が期待できる。

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）

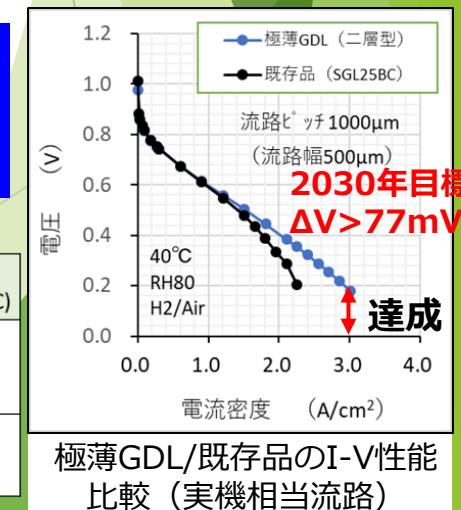
黒鉛化ナノファイバー+MPLの極薄GDLを作製し、実機相当流路で2030年目標の抵抗低減を達成した。



極薄GDL
締結時: t50 μm

GDL単体の物性値

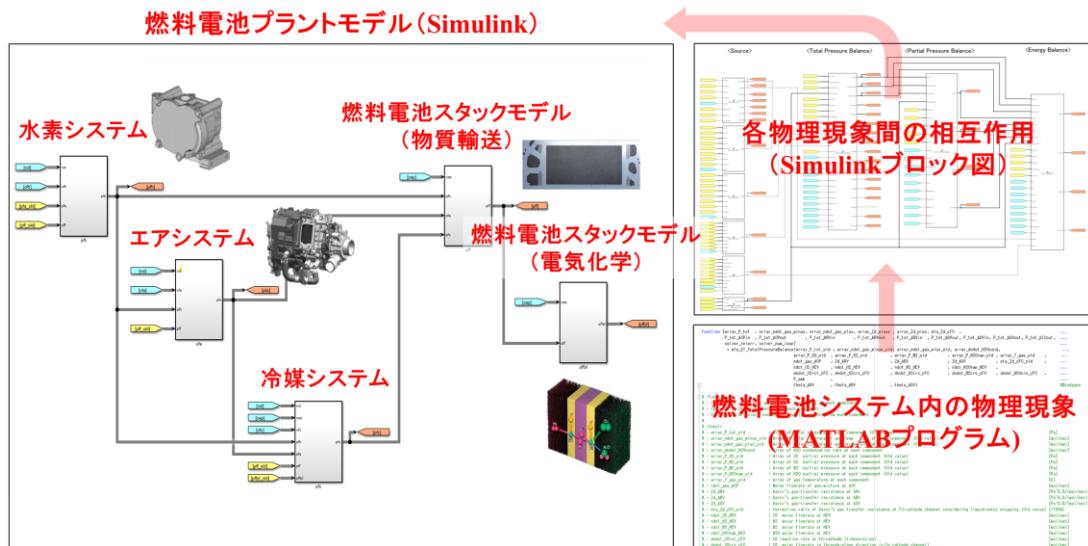
GDL物性値	2030年目標	極薄GDL (二層型)	既存品 (SGL25BC)
面積抵抗 ($\text{m}\Omega \cdot \text{cm}^2$) @面圧1MPa	<1	5	7
酸素輸送抵抗 (s/m)	<18	15	24



研究開発成果：実施項目4群. モデルベースのPEFCシステムシミュレーター（一般公開）

4-1. スタック性能・劣化モデルの開発 / 4-2. 多様なアプリケーションへ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 (京都大学、東京農工大学)

燃料電池スタックと水素システム、エアシステム、冷媒システム、および制御システムを含む包括的で革新的な燃料電池システムシミュレーターFC-DynaMoを開発した



FC-DynaMoでは、燃料電池システムの各種部品の特性や作動条件と動力、燃費、熱負荷などのシステム性能との関係を定量的にかつ実時間の約40倍速で計算することができる。構築したモデルは第2世代MIRAIを用いて収集された幅広い環境での試験データを再現できる。MEA厚さ方向の1Dモデルを厚さ方向+流路方向の1+1Dモデルに拡張した。Pt粒子成長、炭素腐食モデルを搭載した。

▶ 面内分布の積分平均値

$$F_{OL} = F_{O0} + \int_0^L r_{g0} a_h dz = F_{O0} + \overline{r_{g0}} A$$
$$\overline{r_{g0}} = \text{func}(C_{O0}, C_{OL}, C_{S0}, C_{SL})$$

積分平均の推算はMIRAI Gen2 に適合
より汎用性のあるモデルに変更予定

▶ 陽解法（と陰解法）

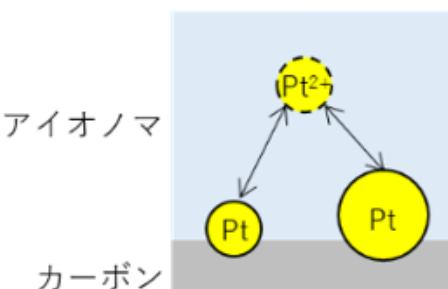
$$C_j(t + \Delta t) = C_j(t) + \int_t^{t + \Delta t} (\partial C_j / \partial t) dt$$

▶ $\partial C_j / \partial t$ を t での $\overline{r_{gj}}$ から計算

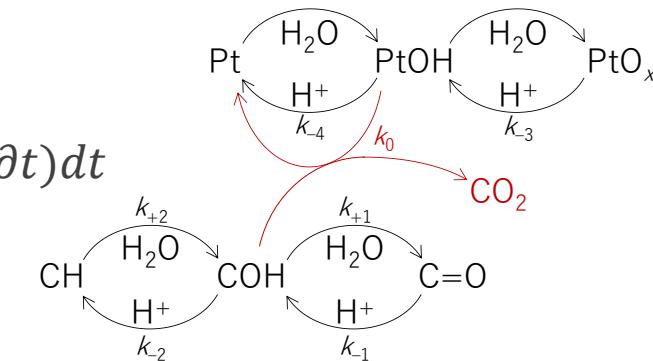
▶ 触媒層の有効係数

$$\overline{r_g} = F_u \text{func}(C_{Oc}, C_{Sc}, E_{cc})$$

反応1：Pt溶解・析出 (電気化学反応)

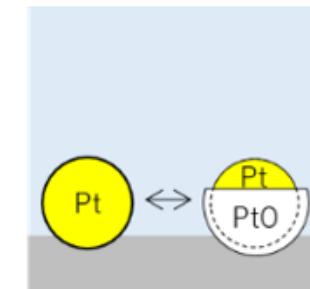


▶ 炭素腐食モデル

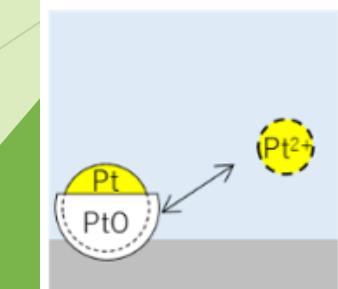


▶ 白金粒子の粗粒化モデル

反応2：PtO析出 (電気化学反応)



反応3：PtO溶解 (化学平衡)



シミュレーションGr.と材料分析解析Gr.、電気化学Gr.および材料開発者との連携

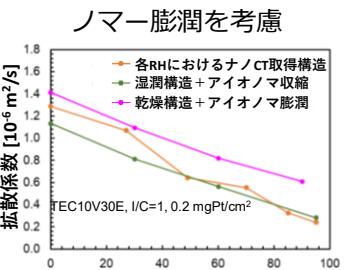
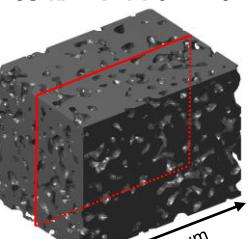
Ceイオンの拡散係数を実測値と比較検証した。
材料解析

相対湿度		RH53%	RH75%	RH100%
立命館 折笠先生 実測値	45°C		1.4×10^{-7}	
	55°C	単位 cm ² /s	1.9×10^{-7}	
	65°C		2.2×10^{-7}	
	80°C	0.29×10^{-7}	5.0×10^{-7}	3.0×10^{-6}
含水率		3(～10%)	5(～57%)	7(～77%)
計算値	50°C	0.75×10^{-7}	1.82×10^{-7}	8.06×10^{-7}
	90°C	1.70×10^{-7}	9.18×10^{-7}	11.1×10^{-7}
	130°C	7.70×10^{-7}	19.6×10^{-7}	54.9×10^{-7}

含水率→相対湿度への変換は
K-D. Kreuer, Solid State Ionics, 252, 93-101 (2013) のデータを使用 (Nafion 117の実験)

触媒層中の凝縮水をNanoCT
イメージングと比較検証した。
材料解析

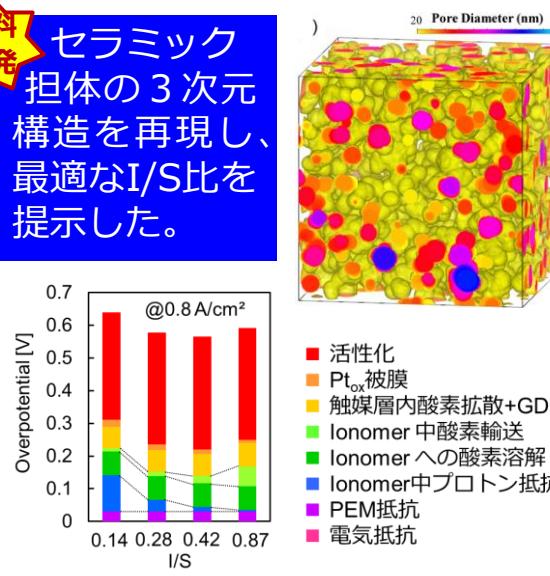
NanoCTイメージング
(京都大学 内本先生)



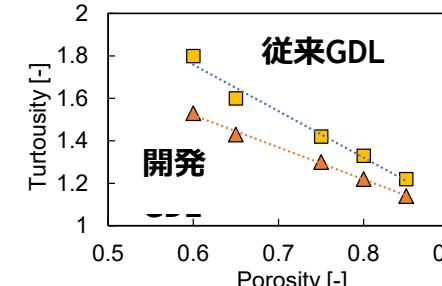
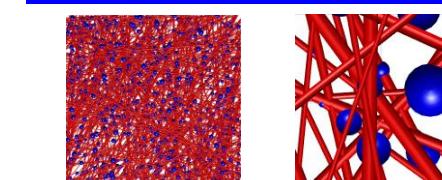
NanoCTで取得された
湿度による構造変化を
数値シミュレーション
で再現した。



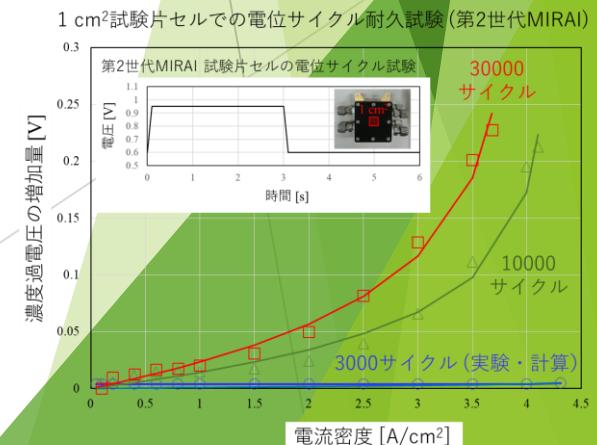
材料開発
セラミック
担体の3次元
構造を再現し、
最適なI/S比を
提示した。



材料開発
GDLの模擬構造を再現し、
ガス拡散性を評価した。



電気化学
劣化シミュレーション結果を
耐久試験実測値で検証した。



シミュレーショングループで開発したシミュレーター

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**

Pt粗粒化シミュレーター

- FC-DynaMoに組み込み - **提供中**

C腐食シミュレーター

- FC-DynaMoに組み込み - **提供中**

PEM劣化シミュレーター

- FC-DynaMoに組み込み - **予定**

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**

③ セルシミュレーター

- 受託解析 - **実施中**

④ FCシステムシミュレーター **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**

- 世界公開予定 -

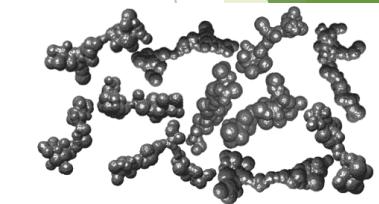
Pt粒子成長、炭素腐食、1+1D & 1Dモデル搭載

【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

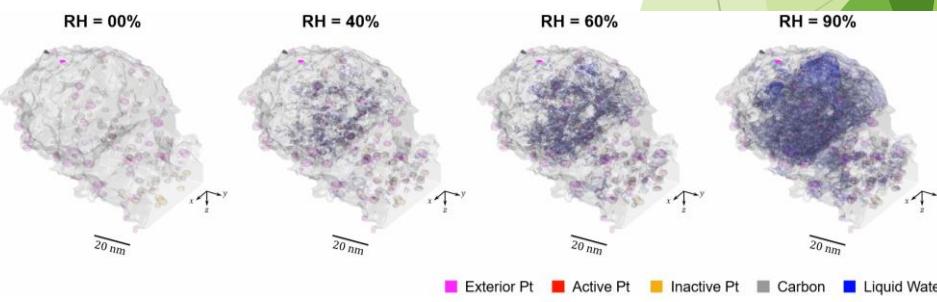
(比表面積、細孔容積、
異方性)



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

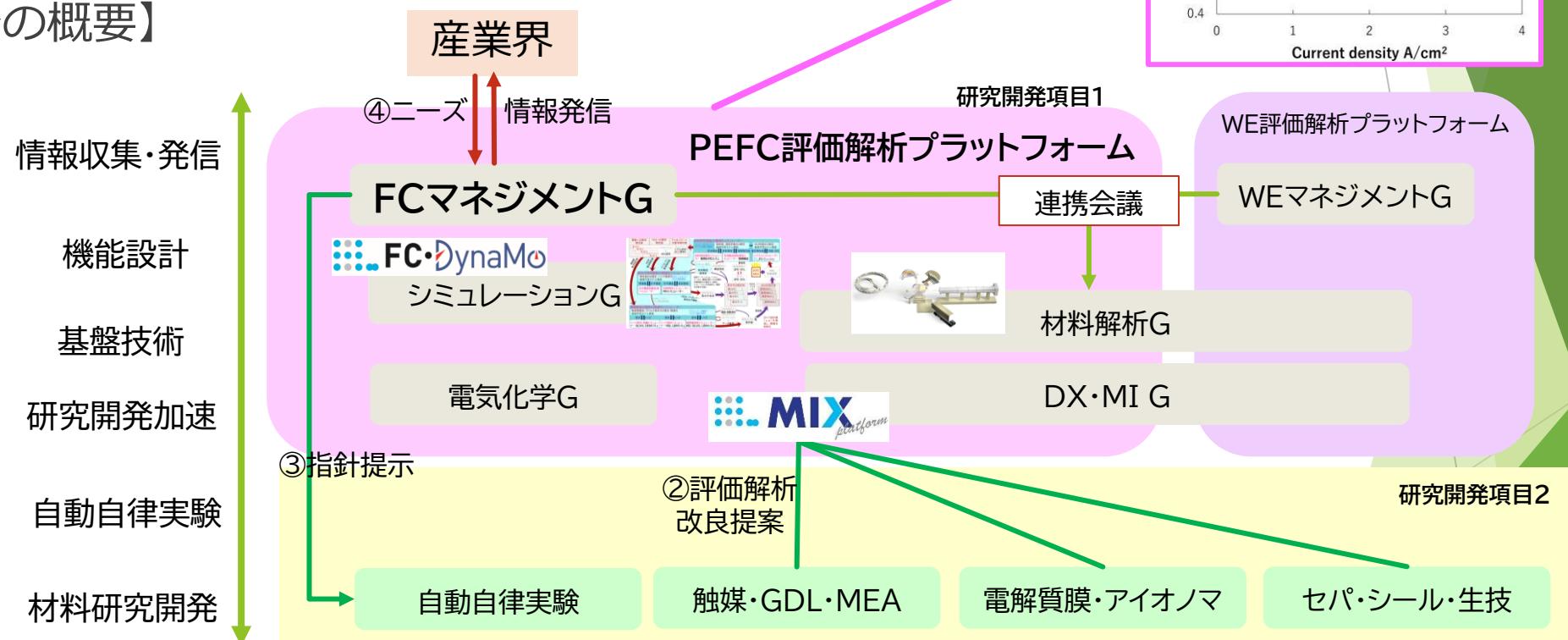


FY2025- PEFC評価解析プラットフォーム

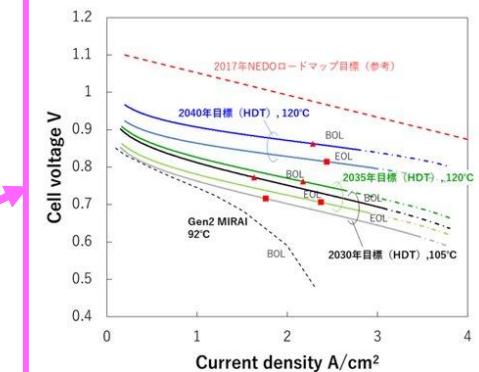
【研究開発の目標】

- ① NEDO 2035年HDV目標の達成に資するMEAを提案
- ② 材料研究Gの材料評価及び解析による改良提案
- ③ 材料開発加速への貢献
- ④ 産業界のニーズ対応

【研究開発の概要】

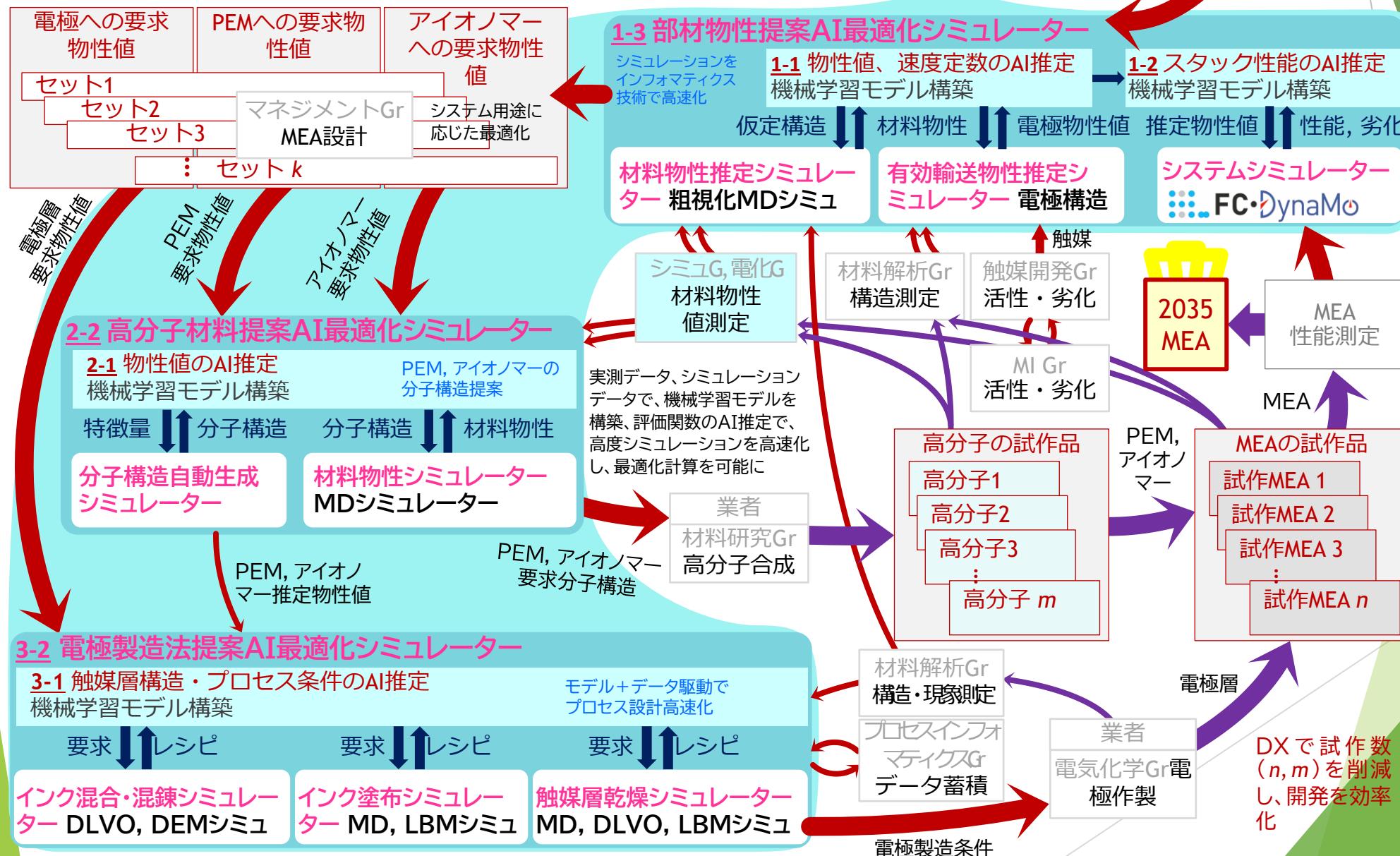


◆2035年 HDV目標



ロードマップ目標達成に向け基盤技術を構築・活用し材料研究をけん引する役割
DX技術・自動自律実験の材料研究への活用に向けた指針提示し、材料研究の開発加速に貢献
産業界のニーズ吸い上げと情報発信を通じた産学連携推進

MEA設計提案のためのトランススケールAIシミュレーターの開発



シミュレーションをAIで
加速→材料と構造を提
案し、MEA開発を加速

■AIによる最適解探索で高速化
2035年NEDOロードマップ目標達成に資するMEAの材料と諸元を提案する。

■マルチ→トランス化により、材料構造から燃料電池システムでの効果予測を一気通貫し、計算時間を1/10に短縮。

FY2020-2025 実施項目

モデリング				最適化シミュレーション
計測	推算	モデル構築	候補生成・性能予測・提案	
1-1 電極構造、材料から物性値、速度定数を推定する機械学習モデル構築				1-3 部材物性提案AI最適化シミュレーション
(1) ナノファイバー極薄GDL創出と主要物性の評価解析（北大） (2) 新規材料と劣化材料の有効輸送物性のモデリング（京大）	(3) 材料物性の分子動力学シミュレーションによる推定（東北大） (4) 全原子分子動力学法に基づく触媒反応の数値シミュレーション（東北大）	(5) 材料物性値、速度定数を推定する機械学習モデル構築（京大、農工大）	システム性能のAI推定・最適化による部材物性の提案（農工大、京大）	
1-2 システム構成、制御方針、物性値、速度定数からシステム性能を推定する機械学習モデル構築				
(1) 触媒担体炭素劣化のモデリング（京大） (2) 触媒白金粒子粗粒化のモデリング（京大）	(3) PEM内OHラジカル濃度の高精度推定とPEMの化学劣化シミュレーション（京大）	(4) 数値シミュレーションによるスタック性能を推定する機械学習モデル構築（農工大、京大）		
2-1 高分子構造から高分子材料物性を推定する機械学習モデル構築				SGL 農工大 金
[高分子材料物性の測定（文献値）]	(1) 高分子電解質膜内部の物質輸送特性の推定（東北大）	(2) 高分子材料物性を推定する機械学習モデル構築（東大）	(1) 物性値のAI推定・ベイズ最適化によるPEM材料の提案（東大） (2) 物性値のAI推定・ベイズ最適化によるアイオノマー材料の提案（東大）	SGL 東大 杵淵
実施項目3-1 インク製造法からインク物性を推定する機械学習モデル構築				実施項目3-2 電極製造法提案AI最適化シミュレーション
(1) 触媒インクのモデリング（九大） [塗膜諸元の測定（他Grと連携）] [電極構造の測定（他Grと連携）]	(2) プロセス内界面特性予測シミュレーション（東北大） (3) インク塗布工程の数値シミュレーション（北大） (4) 塗膜乾燥工程の数値シミュレーション（九大）	(5) 製造法からインク物性を推定する機械学習モデル構築（九大） (6) インク塗布法から塗膜諸元を推定する機械学習モデル構築（九大、北大） (7) 塗膜乾燥法から電極構造を推定する機械学習モデル構築（九大、北大） (8) 全原子分子動力学法に基づく触媒層構造の最適化シミュレーション（東北大）	電極構造のAI推定・最適化による電極製造法の提案（九大）	
				SGL 九大 井上

FY2025- 実施体制



6機関
8研究グループ



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、ボーディングジャパン(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

GUIを備えており、
基本的にサポートなし

Windowsアプリ版 使用許諾契約 (166)

(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)エクスモーション、(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)東京アールアンドティー、(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、日邦プレシジョン(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



市村賞

- ▶ 公益財団法人 市村清新技術財団
総裁 彬子女王殿下
会長 中村 高元 株式会社 リコー 副社長
理事長 近藤 史朗 元 株式会社 リコー 会長
- ▶ 第57回市村賞 市村地球環境学術賞貢献賞

