膜劣化モデルの解説

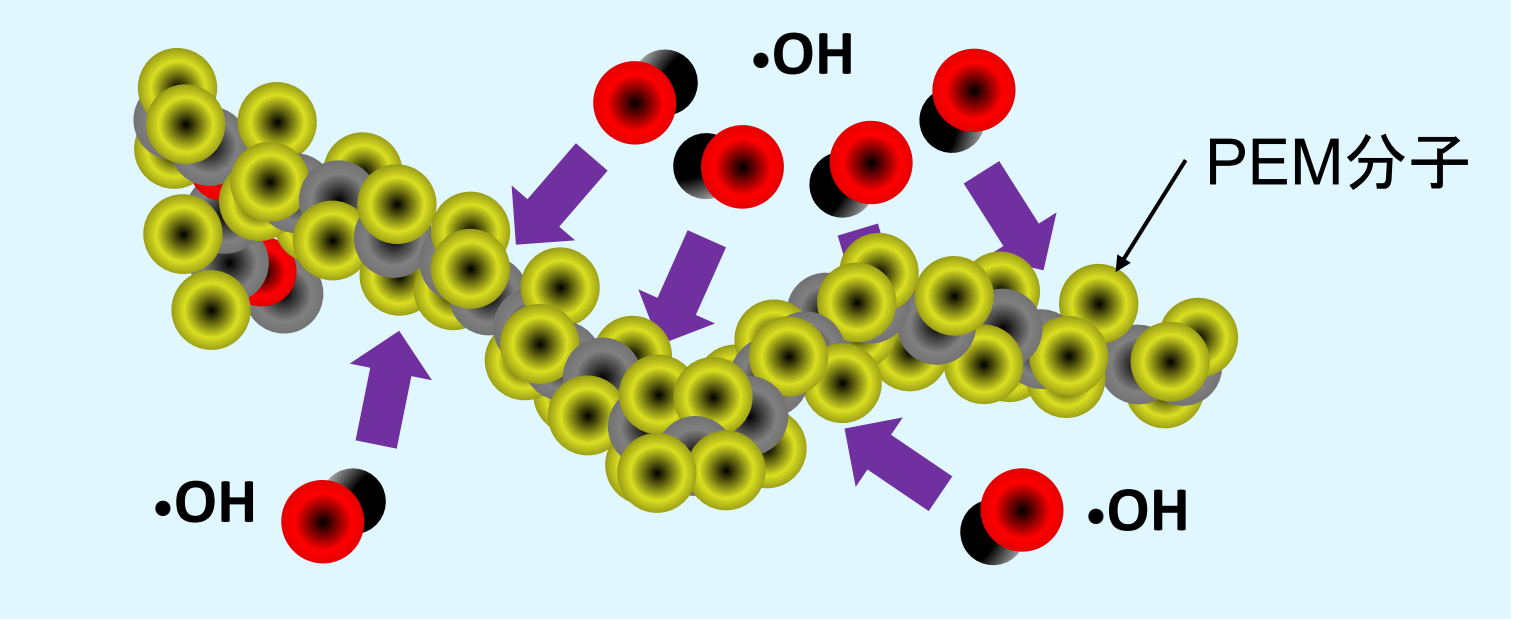
京都大学工学研究科化学理工学専攻
中川浩行

化学劣化シミュレーターの目的

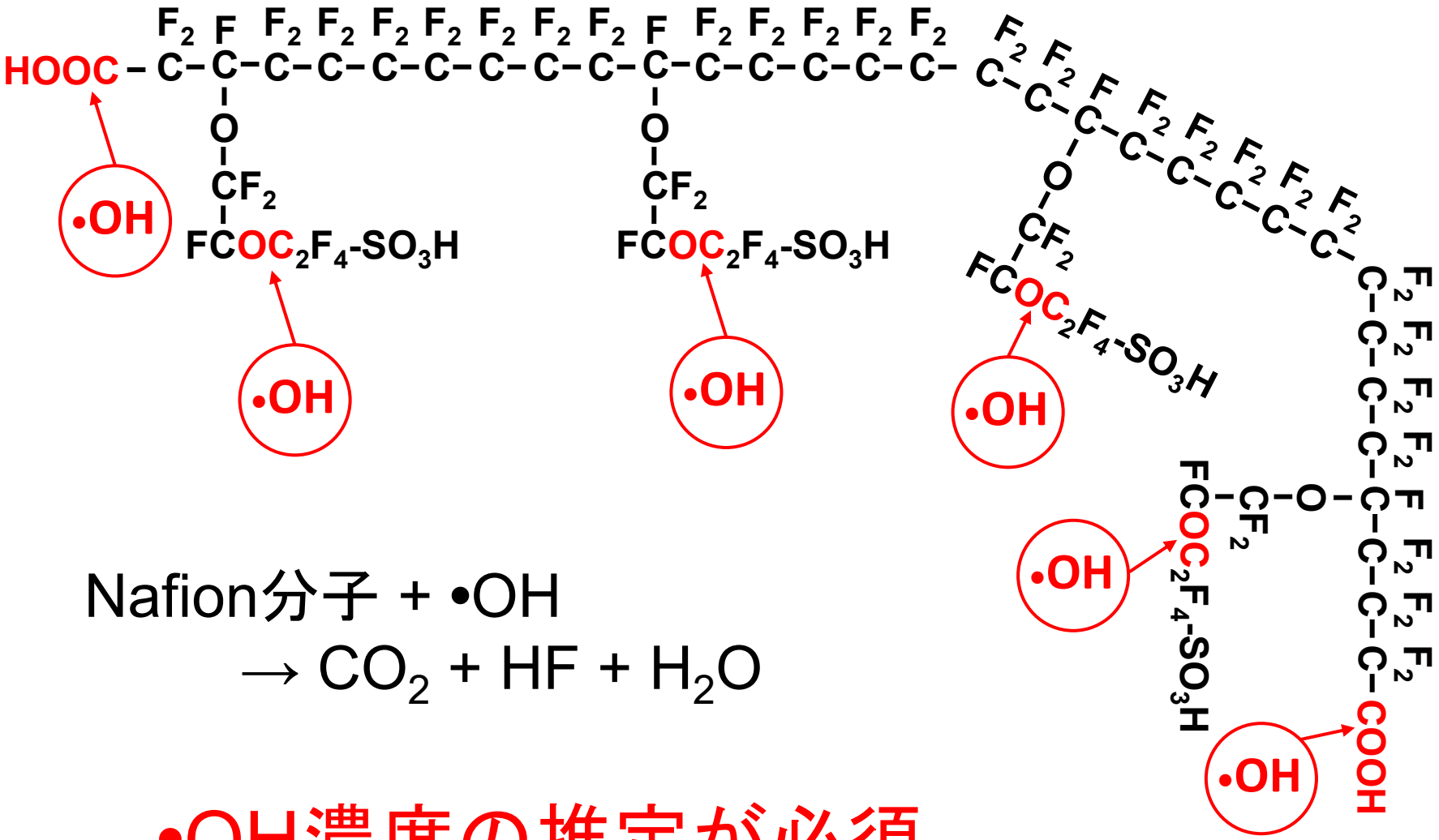
- 膜の化学劣化反応のモデル化
- 反応速度の定式化
- 運転条件での劣化反応速度の定量計算
- 反応進行度と劣化指標の関係の提示
- 劣化指標に基づく膜寿命の推定

PEMのセル内での化学劣化

- セル内で生成した活性なラジカルと膜の反応
- 酸化分解により、膜が壊されていく
- 活性なラジカルは主に酸化還元電位が高い•OH



薄肉化、脆弱化→物理的応力→穿孔×

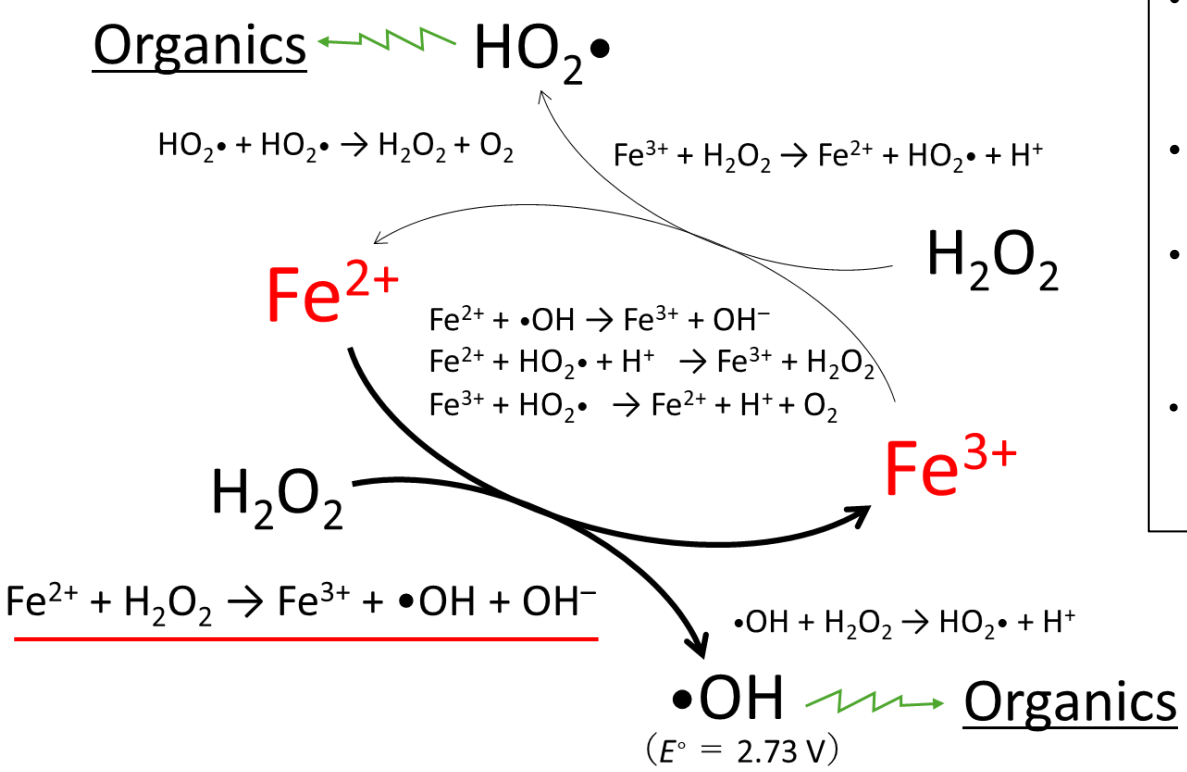


Nafion分子 + •OH

→ CO_2 + HF + H_2O

•OH濃度の推定が必須

Fenton反応と•OH



- Fe^{2+}はH_2O_2との反応性が高く、瞬時に•OHを生成するとともにFe^{3+}を生成する（Fenton反応）。
- Fe^{3+}はH_2O_2によって還元され、Fe^{2+}が再生する。
- 上記のサイクルでFeイオンとH_2O_2共存下では持続的に•OHが生成し、膜の化学劣化が進行する。
- •OH以外にも$HO_2•$も生成し、種々のラジカル伝播反応も同時に起こる。（Fenton反応サイクル）

Fenton, H.J.H., Oxidation of tartaric acid in the presence of iron, *Chem. Soc. J. Lond.*, **65**, 899-910 (1894)
Fritz Haber, Joseph Weiss, The Catalytic Decomposition of Hydrogen Peroxide by Iron Salts, *Proc. Roy. Soc. A*, 147, 332-351 (1934)
Barb, W.G. et al., Reactions of ferrous and ferric ions with hydrogen peroxide, *Nature*, **163**, 692–694(1949)

Reactions in a cell

Table 1 Summary of kinetic data used in this study. For each reaction (R_1–R_{23}), rate constant k at 25 °C (= 298.15 K) in L mol^{-1} s^{-1}, activation energy E_a in kJ mol^{-1} and pre-exponential factor A in L mol^{-1} s^{-1} are given

Reaction			k (T = 298.15 K) [L mol^{-1} s^{-1}]	E_a [kJ mol^{-1}]	A [L mol^{-1} s^{-1}]
R_1	$Fe^{2+} + H_2O_2 + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + {}^\bullet OH + H_2O$	$r_1 = k_1[Fe^{2+}][H_2O_2]$	66	35.4^{15}	$1.05 \times 10^{8\ 15}$
R_2	$Fe^{3+} + H_2O_2 \rightarrow Fe^{2+} + {}^\bullet OOH + H^+$	$r_2 = k_2[Fe^{3+}][H_2O_2]$	8.6×10^{-4}	126^{22}	$8.43 \times 10^{18\ 22}$
R_3	$Fe^{2+} + {}^\bullet OH + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + H_2O$	$r_3 = k_3[Fe^{2+}][{}^\bullet OH]$	$3.6 \times 10^{8\ 19\ a}$	9^{19}	1.37×10^{10}
R_4	$Fe^{2+} + {}^\bullet OOH + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + H_2O_2$	$r_4 = k_4[Fe^{2+}][{}^\bullet OOH]$	$1.2 \times 10^{6\ 23}$	42^{23}	2.74×10^{13}
R_5	$Fe^{3+} + {}^\bullet OOH \rightarrow Fe^{2+} + H^+ + O_2$	$r_5 = k_5[Fe^{3+}][{}^\bullet OOH]$	$8.1 \times 10^{4\ 18}$	$33^{17,18}$	4.9×10^{10}
R_6	$H_2O_2 \rightarrow 2{}^\bullet OH$	$r_6 = k_6[H_2O_2]$	6.5×10^{-23} [s^{-1}]	201^{21}	10^{13} [s^{-1}]^{21}
R_7	${}^\bullet OH + H_2O_2 \rightarrow {}^\bullet OOH + H_2O$	$r_7 = k_7[{}^\bullet OH][H_2O_2]$	$3.0 \times 10^{7\ 26\ a}$	14^{26}	8.43×10^9
R_8	${}^\bullet OOH + H_2O_2 \rightarrow {}^\bullet OH + H_2O + O_2$	$r_8 = k_8[{}^\bullet OOH][H_2O_2]$	3.7^{14}	$33.5^{14\ b}$	2.71×10^6
R_9	$2{}^\bullet OOH \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$r_9 = k_9[{}^\bullet OOH]^2$	$9.1 \times 10^{5\ 24\ a}$	20.6^{16}	3.70×10^9
R_{10}	$2{}^\bullet OH \rightarrow H_2O_2$	$r_{10} = k_{10}[{}^\bullet OH]^2$	$5.3 \times 10^{9\ 27\ a}$	8^{25}	1.33×10^{11}
R_{11}	${}^\bullet OOH + {}^\bullet OH \rightarrow H_2O + O_2$	$r_{11} = k_{11}[{}^\bullet OOH][{}^\bullet OH]$	$1.1 \times 10^{10\ 27\ a}$	14.2^{16}	3.39×10^{12}
R_{12}	${}^\bullet OH + H_2 \rightarrow H_2O + {}^\bullet H$	$r_{12} = k_{12}[{}^\bullet OH][H_2]$	$3.9 \times 10^{7\ 27\ a}$	19.2^{27}	9.14×10^{10}
R_{13}	${}^\bullet H + O_2 \rightarrow {}^\bullet OOH$	$r_{13} = k_{13}[{}^\bullet H][O_2]$	$2.2 \times 10^{10\ 27\ a}$	10.3^{16}	1.37×10^{12}
R_{14}	$SC\text{–}SO_3H + {}^\bullet OH \rightarrow SC\text{–}O^\bullet + HOCF_2CF_2SO_3H$	$r_{14} = k_{14}[SC\text{–}SO_3H][{}^\bullet OH]$	$3.7 \times 10^{6\ 20}$	70^c	6.80×10^{18}
R_{15}	$SC\text{–}O^\bullet + 3{}^\bullet OH \rightarrow BB\text{–}O^\bullet + 6HF + 3CO_2$	$r_{15} = k_{15}[SC\text{–}O^\bullet][{}^\bullet OH]$	$3 \times 10^{7\ 33}$	70^c	5.51×10^{19}
R_{16}	$BB\text{–}O^\bullet + {}^\bullet OH \rightarrow 2\text{–}(CF_2)_nCOOH + 3HF$	$r_{16} = k_{16}[BB\text{–}O^\bullet][{}^\bullet OH]$	$8.5 \times 10^{7\ 33}$	70^c	1.56×10^{20}
R_{17}–R_{23} $(7 \leq n \leq 1)$	$\text{–}(CF_2)_nCOOH + 2{}^\bullet OH \rightarrow \text{–}(CF_2)_{n-1}COOH + CO_2 + 2HF$	$r_{un} = k_{un}[\text{–}(CF_2)_nCOOH][{}^\bullet OH]$	$1.0 \times 10^{6\ 28\ d}$	70^c	1.84×10^{18}

[a] Rate constants were recalculated for T = 298.15 K. [b] Activation energy is estimated between 6 and 10 kcal mol^{-1}. [c] Average activation energy found in various degradation experiments.[31,86] [d] Upper limit for the attack of ${}^\bullet OH$ on CF_3COOH.[28]

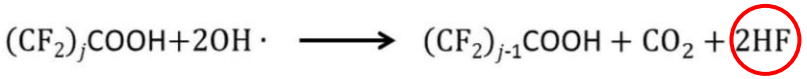
Philipp Frühwirt et al., Holistic approach to chemical degradationof Nafion membranes in fuel cells: modellingand predictions, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2020, 22, 5647—5666.

これらの中から主要な反応を選定しラジカル濃度を算出

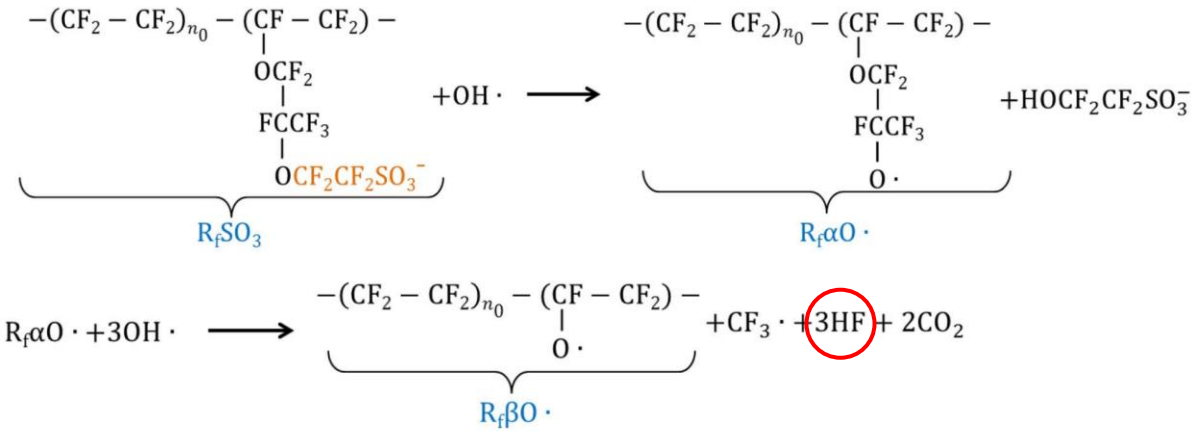
Nafion膜の化学劣化反応

K.H Wong, E.Kleang, *J. Electrochem.***161** (9) F823-F832 (2014)

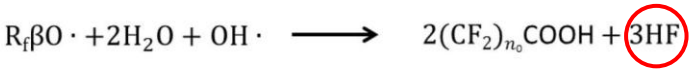
End group



Side chain



Main chain



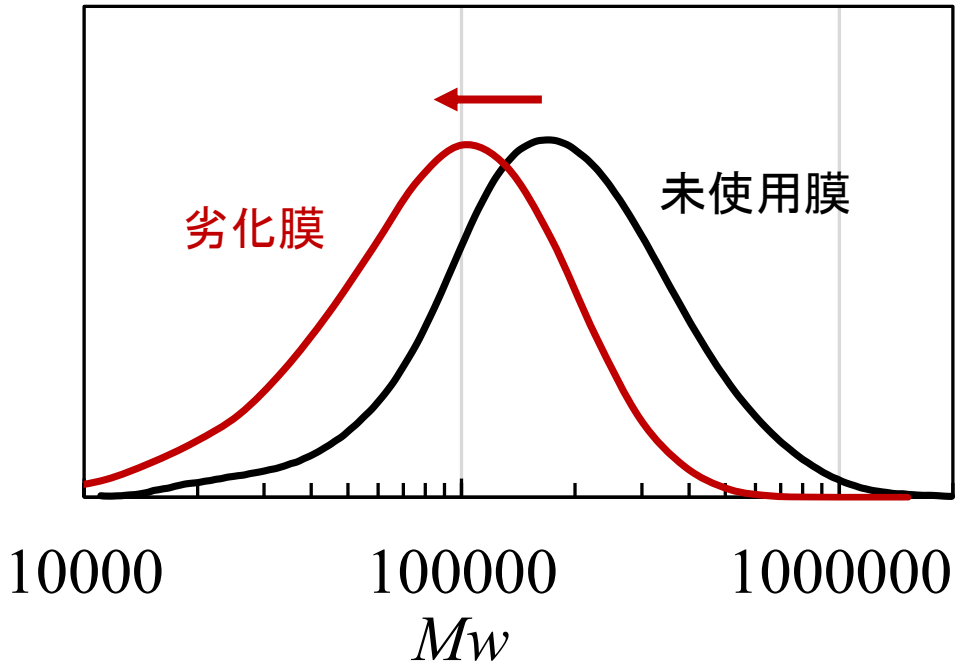
- Unzipping reaction：末端基（-COOH）が分解し、CO_2とHFを生成
- 側鎖の分解が段階的に進行し、CO_2とHFを生成を伴って主鎖まで開裂する。

劣化の指標

- HFの発生量（Fリリース量）が一般的に使用されている劣化の指標
- HFは分解生成物
- 膜から脱離した分子の分解からもHFは生成
- Fリリース量は、•OH濃度の指標（膜の状態を表すには不適）
- 膜の状態を表す指標として膜の分子量分布に着目

膜の化学劣化と分子量分布

- 化学劣化反応により、膜が•OHによって酸化分解され、低分子化が進行する。
- 分子量分布の変化から、Unzipping reactionはほとんど分子量分布の変化に影響を与えないことが示唆された。
- 主鎖の分解が低分子化の主要因



分子量分布の変化の概念図

FC-DynaMoとの連携

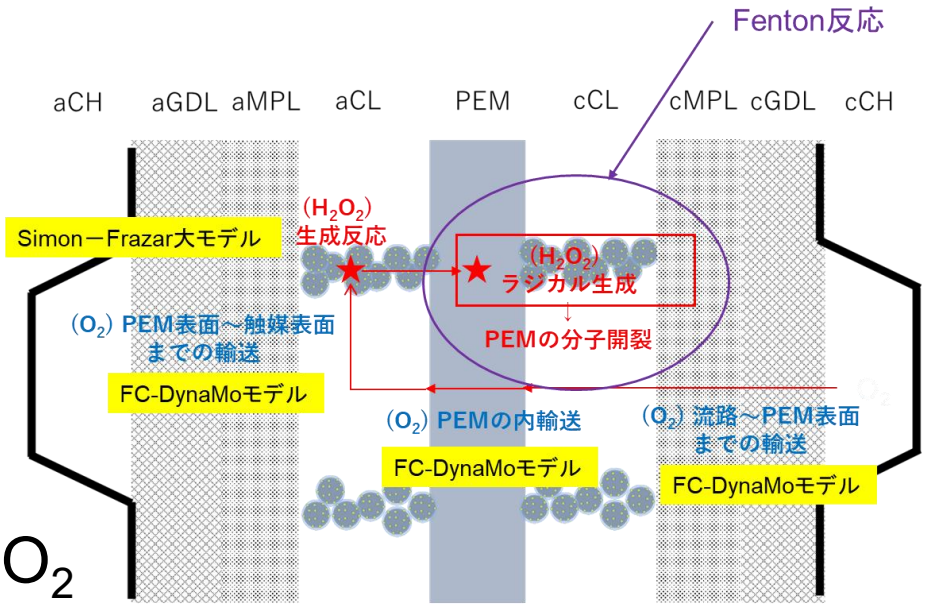
Cathode内の酸素

↓ MEA内を拡散

Anode触媒上での還元

→H_2O_2の生成

$O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O_2$



↓

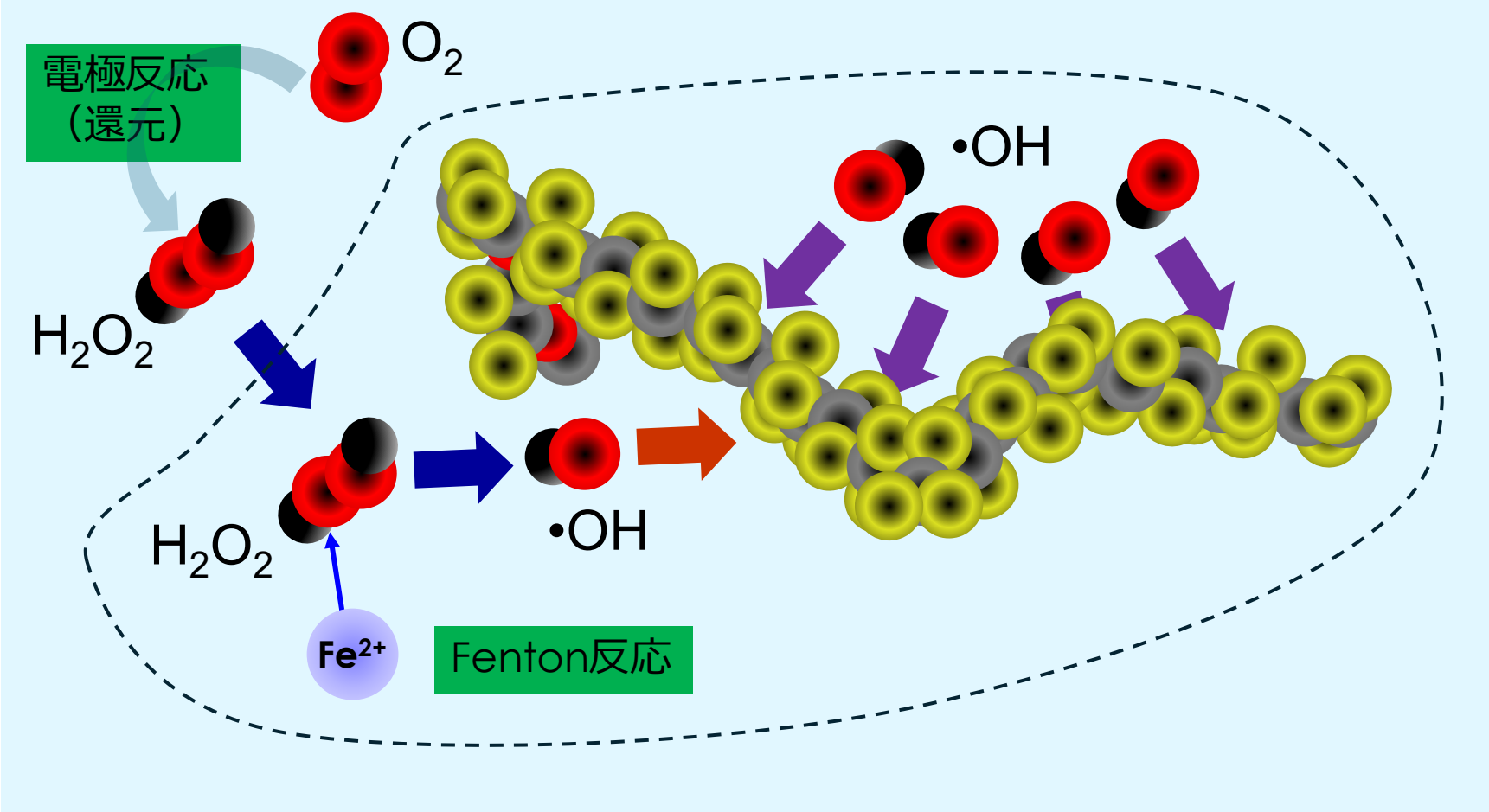
H_2O_2によるPEM内のFeイオン（Fe^{3+}）の還元と
Fenton反応による•OHの生成

↓

•OHによる膜の酸化分解

1+1Dモデルの計算領域内の各成分濃度は均一（0次元モデル）

膜内での反応



シミュレーターの概要

入力パラメータ
- 全Fe濃度
- •OHによる膜分解反応の速度定数
- 未使用膜の分子量分布

1+1Dモデル
- 温度
- H_2O_2生成速度

化学劣化シミュレーター

Fenton反応系シミュレーション
酸化分解反応シミュレーション

Nafion膜を想定

出力項目
- 膜の主鎖解離度
- 膜の分子量分布

Selected reactions

		[$M^{-1}\,s^{-1}$] (25 °C)	E_a [kJ mol^{-1}]
1.	$Fe^{2+} + H_2O_2 \rightarrow Fe^{3+} + {\cdot}OH + OH^-$	$k_1 = 66$	35.4
2.	$Fe^{3+} + H_2O_2 \rightarrow Fe^{2+} + HO_2{\cdot} + H^+$	$k_2 = 8.6 \times 10^{-4}$	129
3.	$Fe^{2+} + {\cdot}OH + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + H_2O$	$k_3 = 3.6 \times 10^8$	9
4.	$Fe^{2+} + HO_2{\cdot} + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + H_2O_2$	$k_4 = 1.2 \times 10^6$	42
5.	$Fe^{3+} + HO_2{\cdot} \rightarrow Fe^{2+} + O_2 + H^+$	$k_5 = 8.1 \times 10^4$	33
6.	${\cdot}OH + H_2O_2 \rightarrow HO_2{\cdot} + H_2O$	$k_6 = 3.0 \times 10^7$	14
7.	$HO_2{\cdot} + H_2O_2 \rightarrow {\cdot}OH + O_2 + H_2O$	$k_7 = 3.7$	33.5
8.	${\cdot}OH + {\cdot}OH \rightarrow H_2O_2$	$k_8 = 5.3 \times 10^9$	8
9.	$HO_2{\cdot} + HO_2{\cdot} \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$k_9 = 9.1 \times 10^5$	20.6
10.	${\cdot}OH + HO_2{\cdot} \rightarrow H_2O + O_2$	$k_{10} = 1.1 \times 10^{10}$	14.2

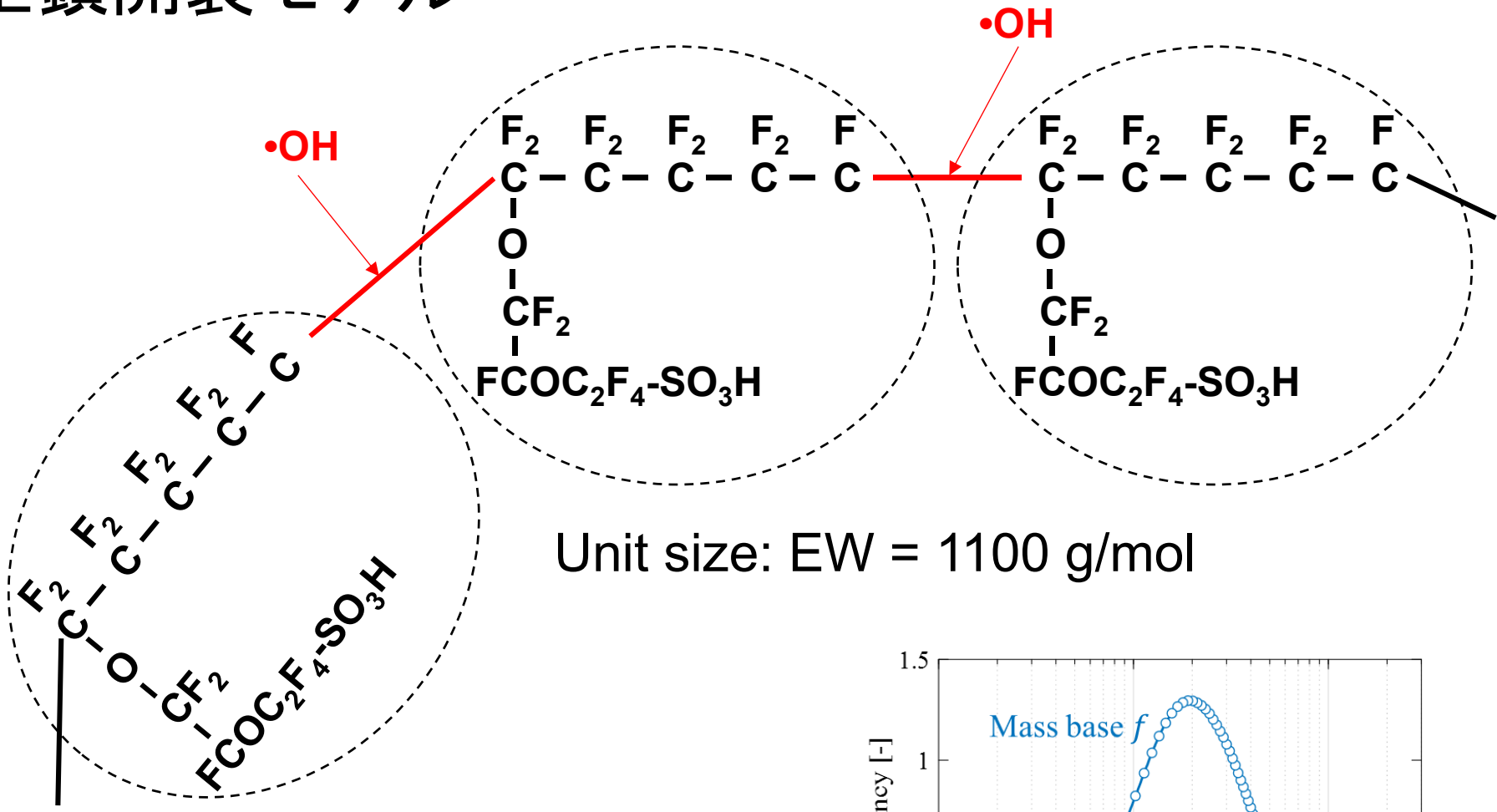
ラジカル濃度の推算

- ラジカル（ •OHとHO$_2$• ）の反応活性は非常に高いため、定常状態近似が成立するとして以下の式より濃度を算出
- 開発した加速劣化装置（流通系）および回分反応器により、ラジカル濃度の妥当性を検証済

$$k_3[Fe^{2+}][\cdot OH]+k_6[\cdot OH][H_2O_2]+2k_8[\cdot OH][\cdot OH]+k_{10}[\cdot OH][HO_2\cdot]+k_{11}[\cdot OH][C_2O_4^{2-}]$$
$$=k_1[Fe^{2+}][H_2O_2]+k_7[HO_2\cdot][H_2O_2]$$

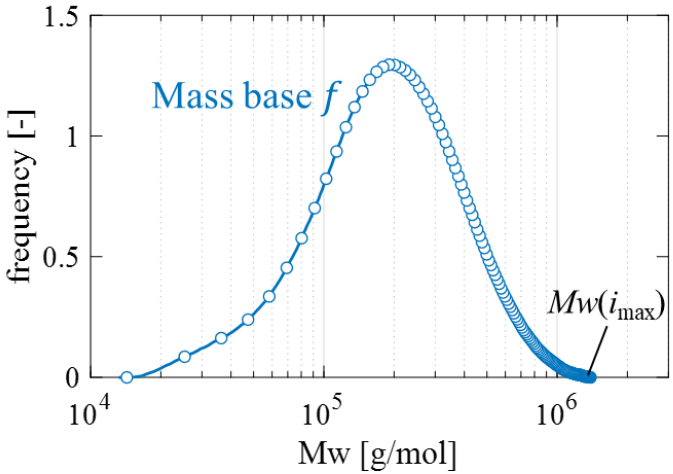
$$k_4[Fe^{2+}][HO_2\cdot]+k_5[Fe^{3+}][HO_2\cdot]+k_7[HO_2\cdot][H_2O_2]+2k_9[HO_2\cdot][HO_2\cdot]+k_{10}[\cdot OH][HO_2\cdot]$$
$$=k_2[Fe^{3+}][H_2O_2]+k_6[\cdot OH][H_2O_2]$$

主鎖開裂モデル



Unit size: EW = 1100 g/mol

主鎖の開裂ポイントは側鎖が結合している部分

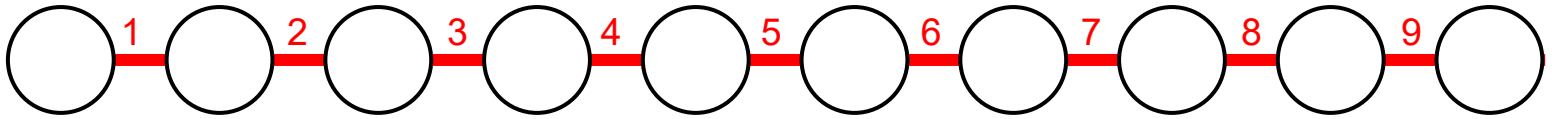


分子モデル

- 各分子はイオン交換基を1個含むユニットが分岐のない直鎖で結合
- ユニットサイズはEW値で均一
- 主鎖の開裂で分子量が低下する
- Unzipping反応は考慮しない
- 主鎖の開裂はユニット間のみ起こる
- 各結合の反応性は同じである
- ランダム開裂

分子量の変化

- i 成分： i 個のユニットからなる分子
  - モル質量 $i \times$ EW
- i 成分の分布の変化を計算
- 消費項: i 成分の分解
- 生成項: i 個を超えるユニットからなる分子の分解
  - 各結合が等しい確率で分解



i =10の場合

・開裂ポイント9個

・ i = 3の成分は3と7の位置で切断すると生成する

i < 10の各成分の生成確率はすべて2/(i-1)

分子量分布の推定：方程式

$$r = k[\bullet OH][-SO_3H]$$

$$[-SO_3H] = \frac{d_N}{EW}$$

$$r_{i-} = k[\bullet OH]\frac{d_N}{EW} f_w(i)$$

$$r_{im-} = k[\bullet OH]\frac{d_N}{EW} f_w(i)Mw(i)$$

r : Scission rate of the whole membrane [mol L^{-1} min^{-1}]

[$-SO_3H$] : Concentration of the unit [mol L^{-1}]

r_{i-} : Scission rate of fraction i molecules [mol L^{-1} min^{-1}]

r_{im-} : Scission rate of fraction i molecules [g L^{-1} min^{-1}]

d_N : Density of Nafion membrane [g L^{-1}]

EW : Equivalent weight [g mol^{-1}]

$Mw(i)$: Molar mass of fraction i [g mol^{-1}]

$f_w(i)$: Weight ratio of fraction i [–]

P_j : Probability of the generation of fraction i from fraction j

$$P_j = \frac{2}{j-1}$$

$$d_N \frac{df_w(i)}{dt} = -r_{im-} + r_{im+} = -r_{im-} + \sum_{j=i+1}^{i_{max}} P_j \times \frac{i}{j} \times r_{jm-}$$

$$\text{開裂度 } X = 1 - \frac{[-SO_3H]}{[-SO_3H]_0} = \frac{EW}{d_N}\int_0^t r dt$$

シミュレーターのdefault値

- 全Fe濃度： 1 mg/L
- 速度定数：NR211
- 膜のEW値： 1100 g/mol
- 膜密度：2.0 g/mL
- 分子量分布：NR211

- 膜物性値はNafion NR211膜
- 分子量分布は、GPC分析の溶出曲線により得られた重量基準分子量分布から、各重合度（ユニット数：15～1500）の累積分布、個数分布（mol/kg）を算出
- 分子量は屈折計と光散乱計を併用して絶対分子量としている

材料研究におけるFC-DynaMoの利用価値



東京農工大学大学
金尚弘

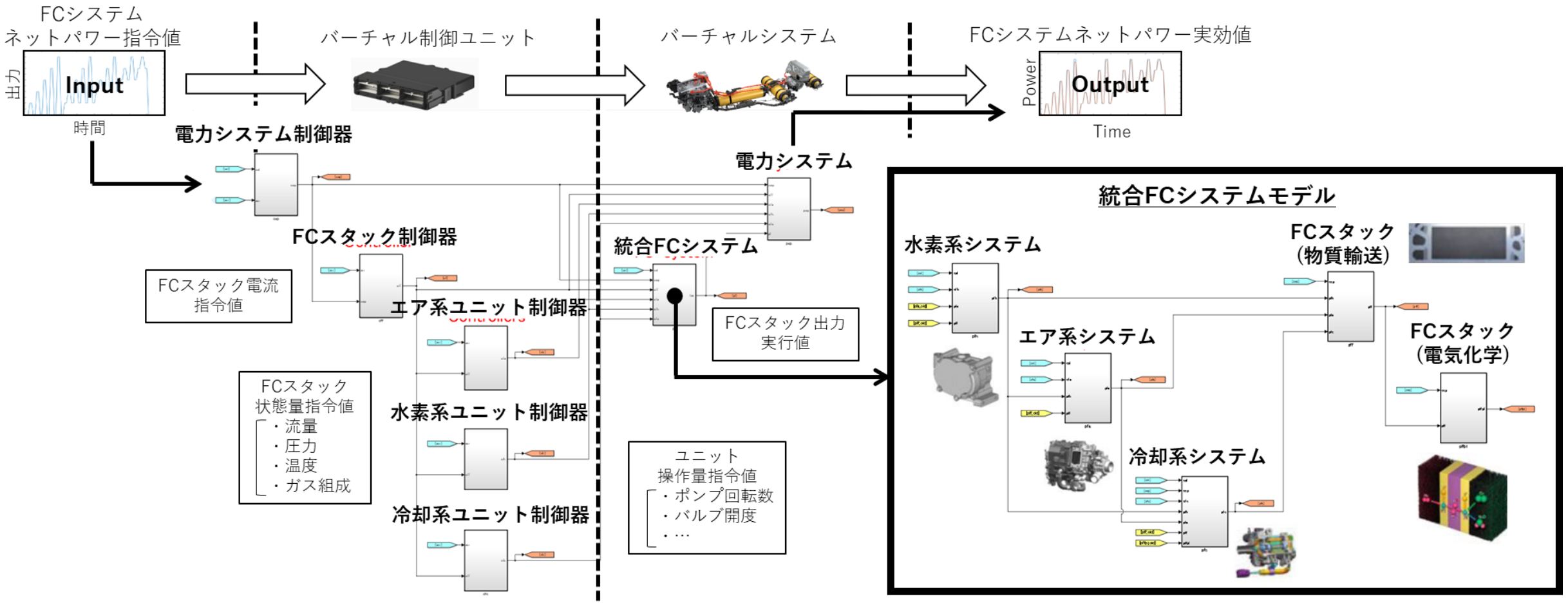
第13回 FCワークショップ　PEFC開発を加速するモデルベース開発の最新技術の体験と実践
2026年9月11日＠みずほ丸の内タワー

材料研究，材料メーカーの悩みと原因？？？

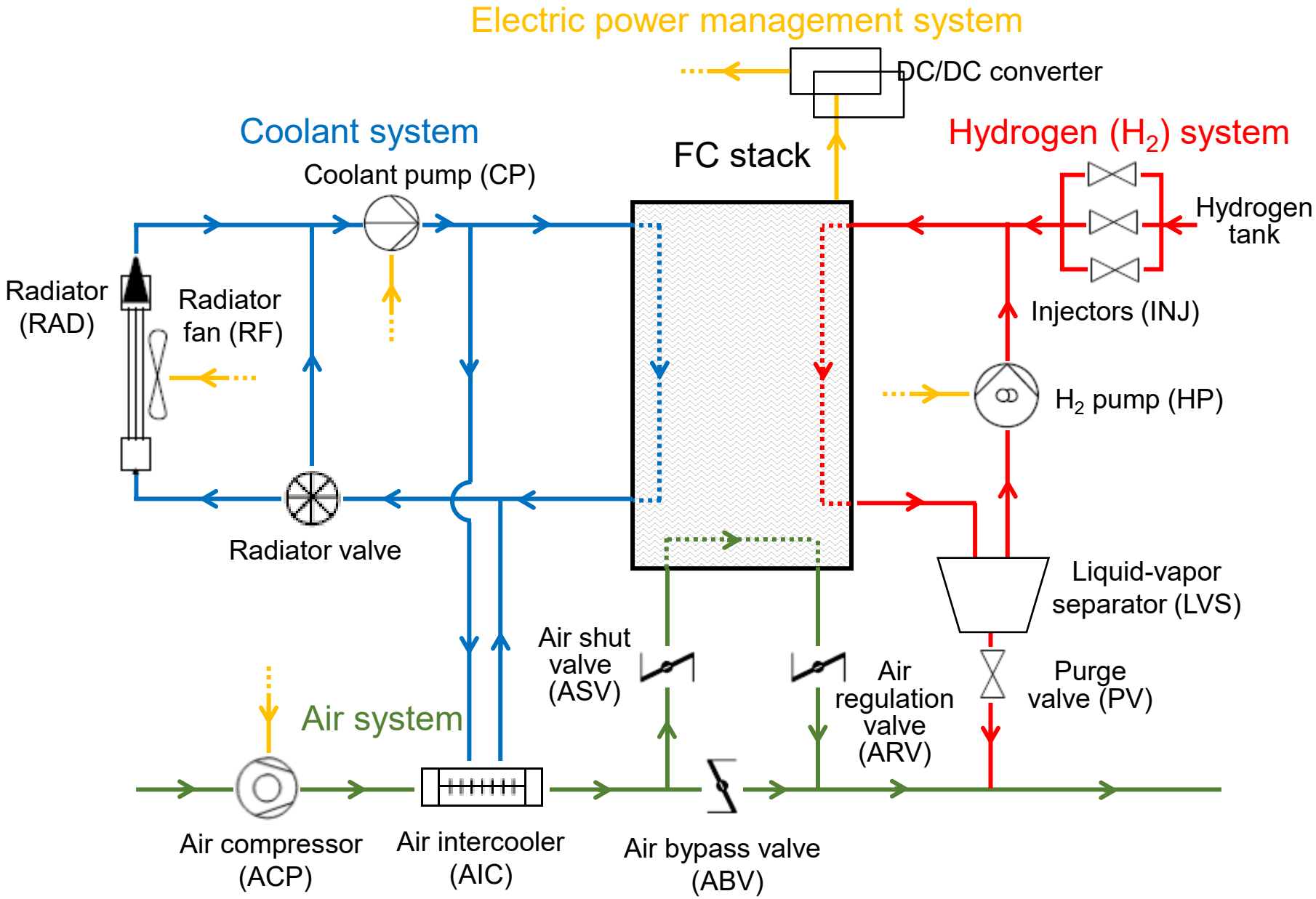
- お悩み？
  - 実験室でできる／やりやすい評価と実用化に必要な評価に大きな乖離がある.
    - 定常 vs 非定常
    - 短期 vs 長期
    - 一部 vs 全体
  - 製品メーカーに材料を提案／試供しても，理由も言われず却下される.

- 原因
  - FC製品中では多様な現象が同時に起こる
  - FC製品開発には他分野の知識が必要となる

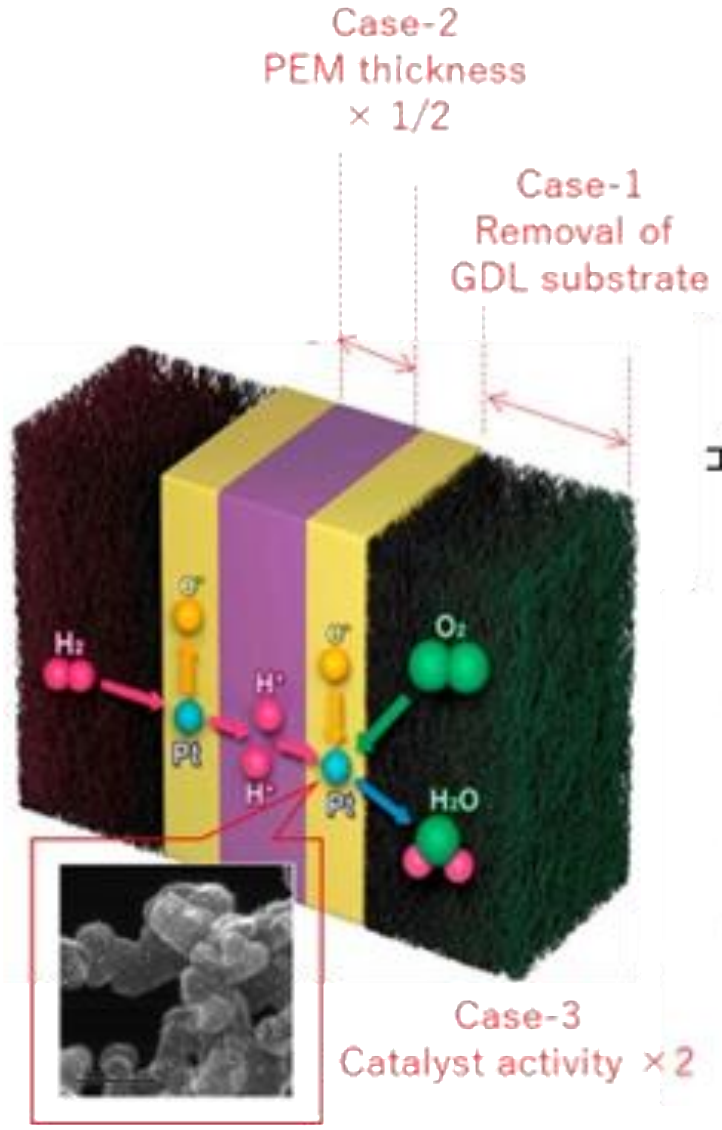
- 多様な条件下での高速な評価が可能
- FC製品の主要構成要素がほぼ全て入っている

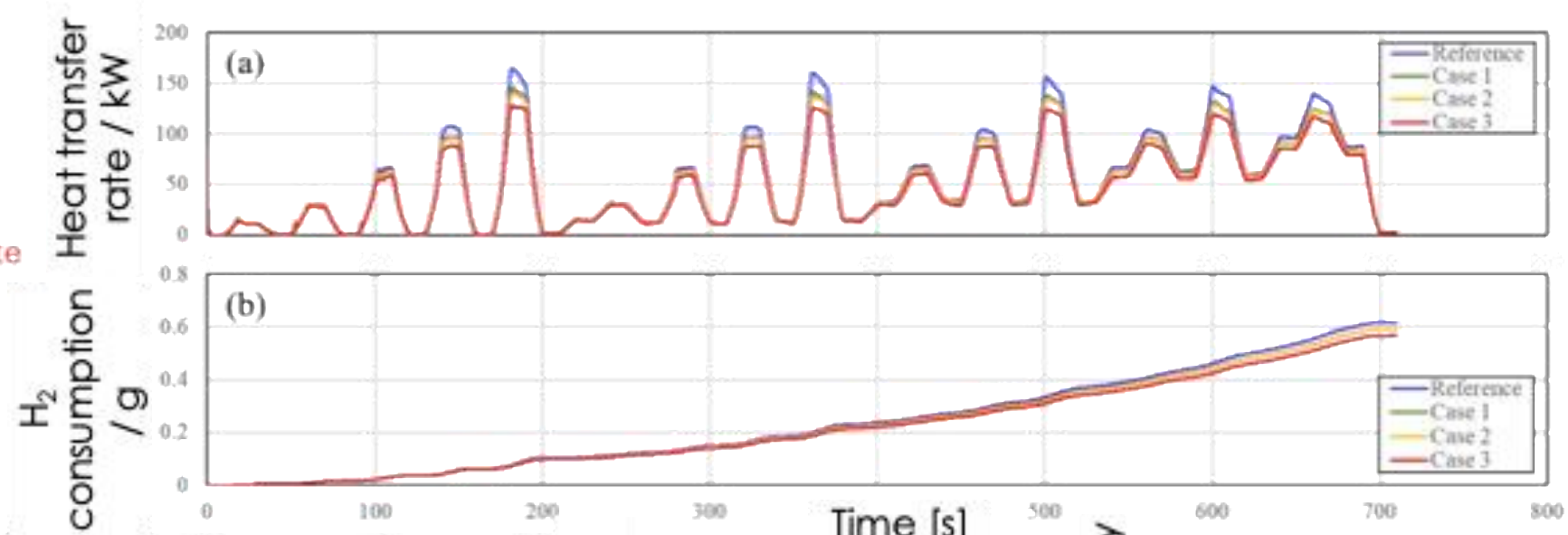


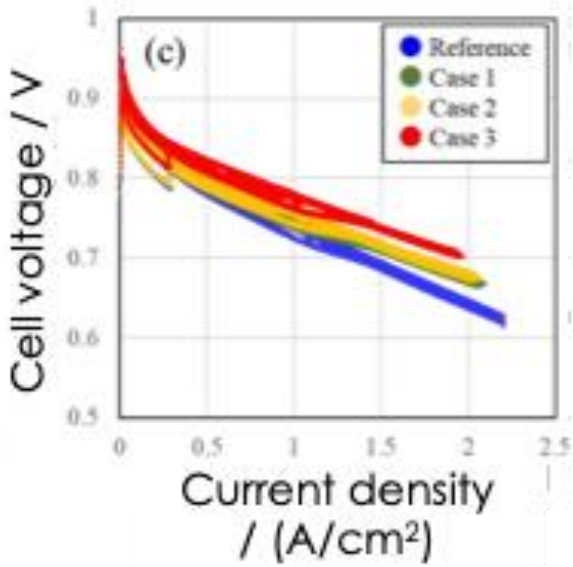
FC-DynaMoで想定しているシステム構成

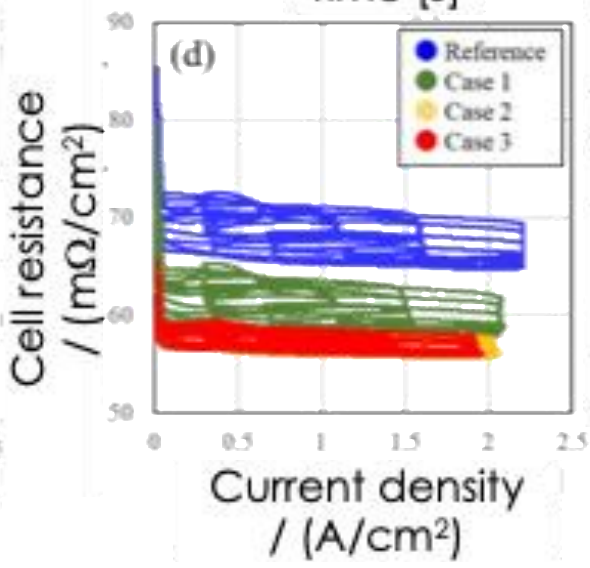


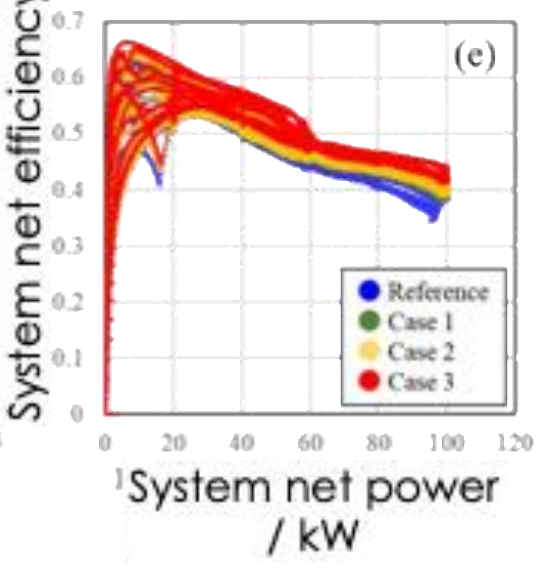
材料改善のシステム性能への影響定量化の例







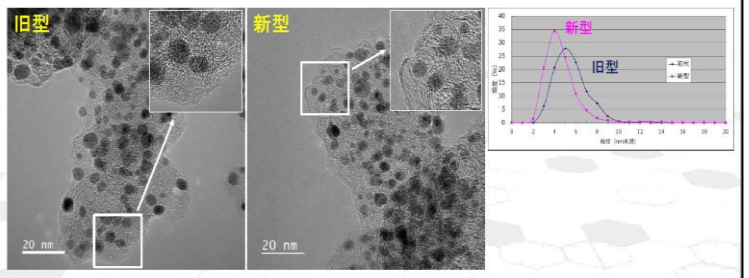




Meso-scale Simulation

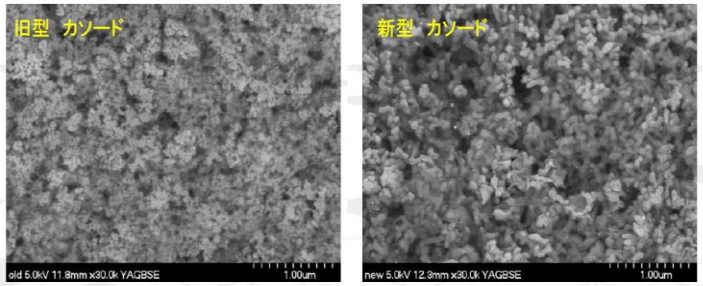
Detailed information on the catalyst in Toyota MIRAI

Pt particle size distribution



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

Size of carbon agglomerate

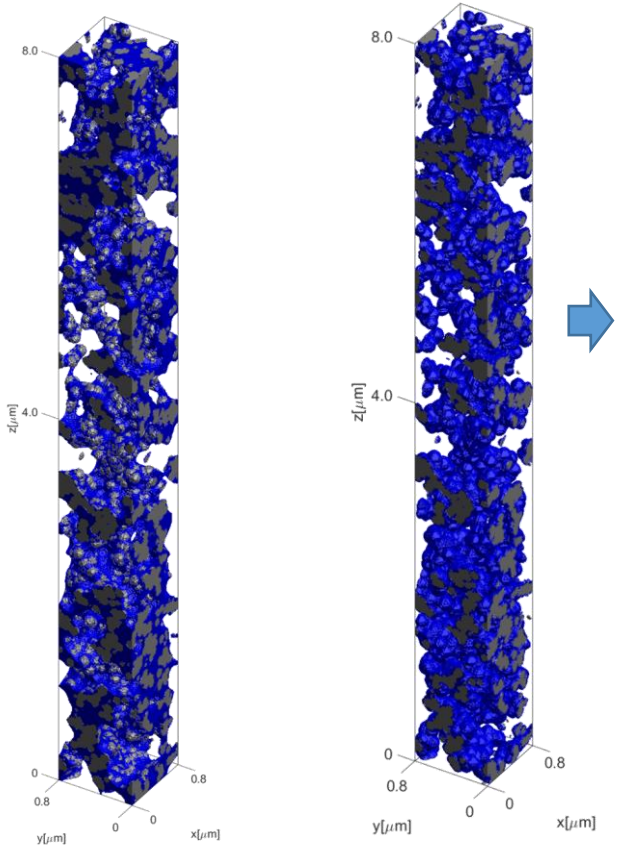


新型は旧型に比べカーボン粒子が大きい
細孔サイズは新型の方が大きく、均一と推察

Simulated structure of catalyst layer

MIRAI with fresh catalyst

MIRAI with degraded catalyst

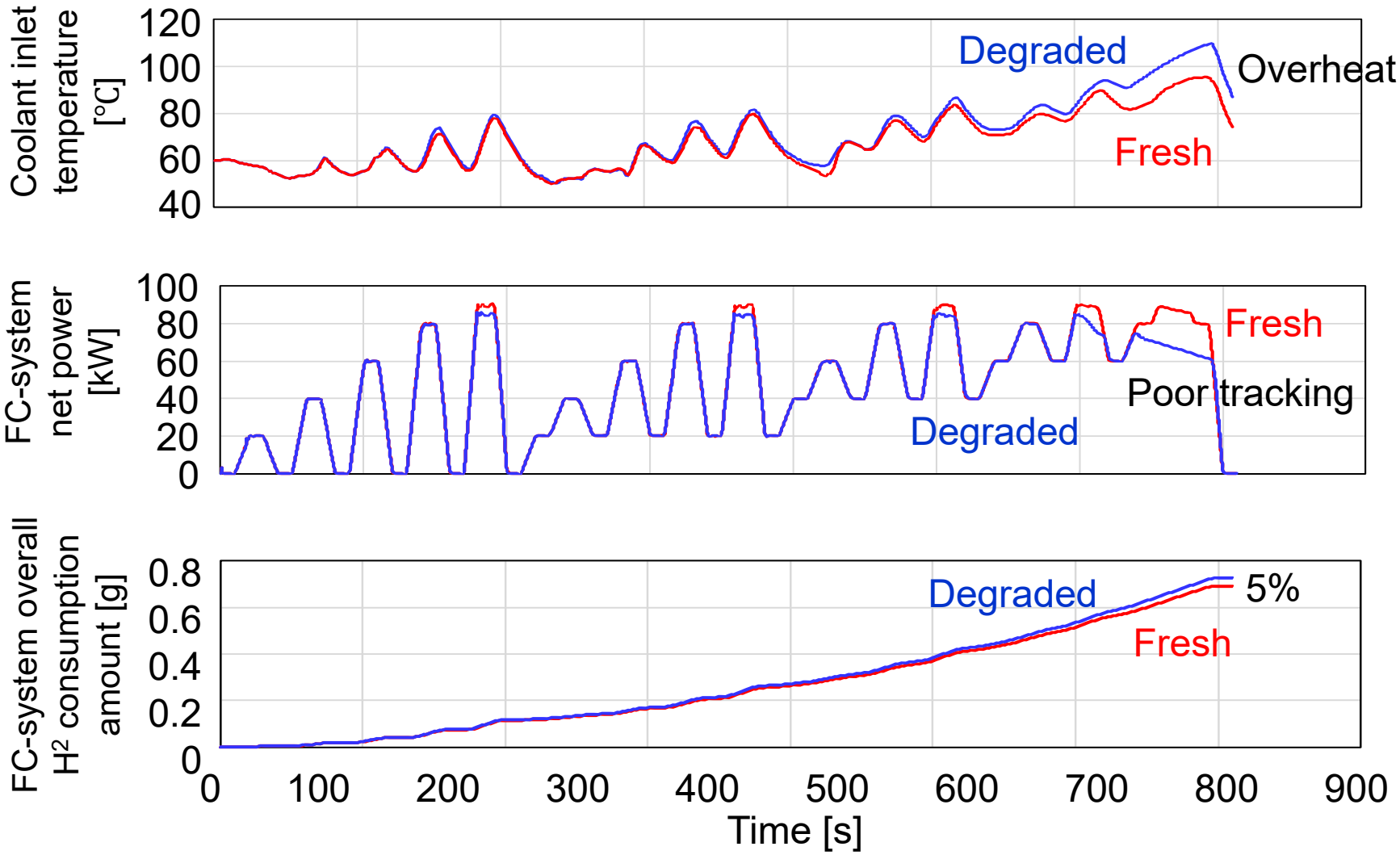


Cell performance

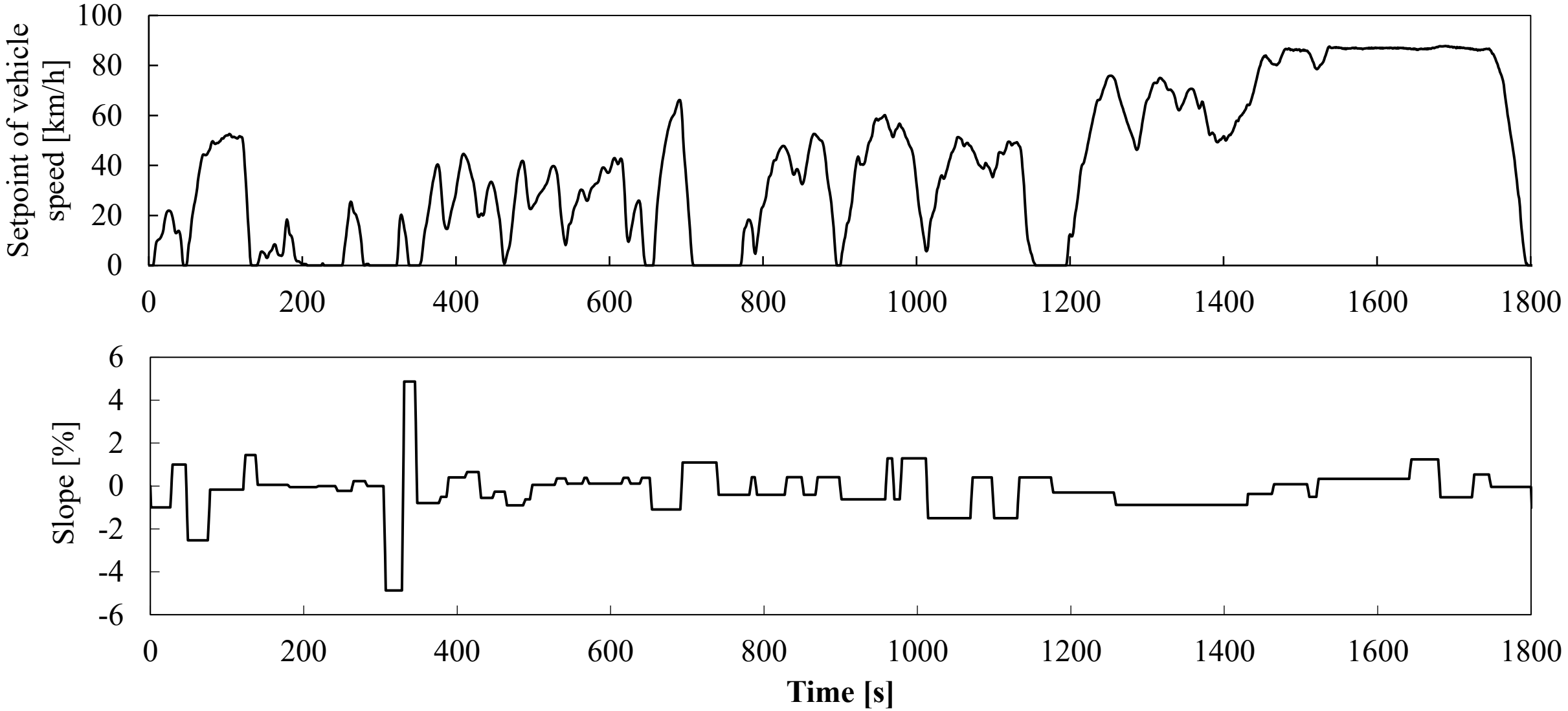
Parameter determination for macro-scale simulation

System performance results

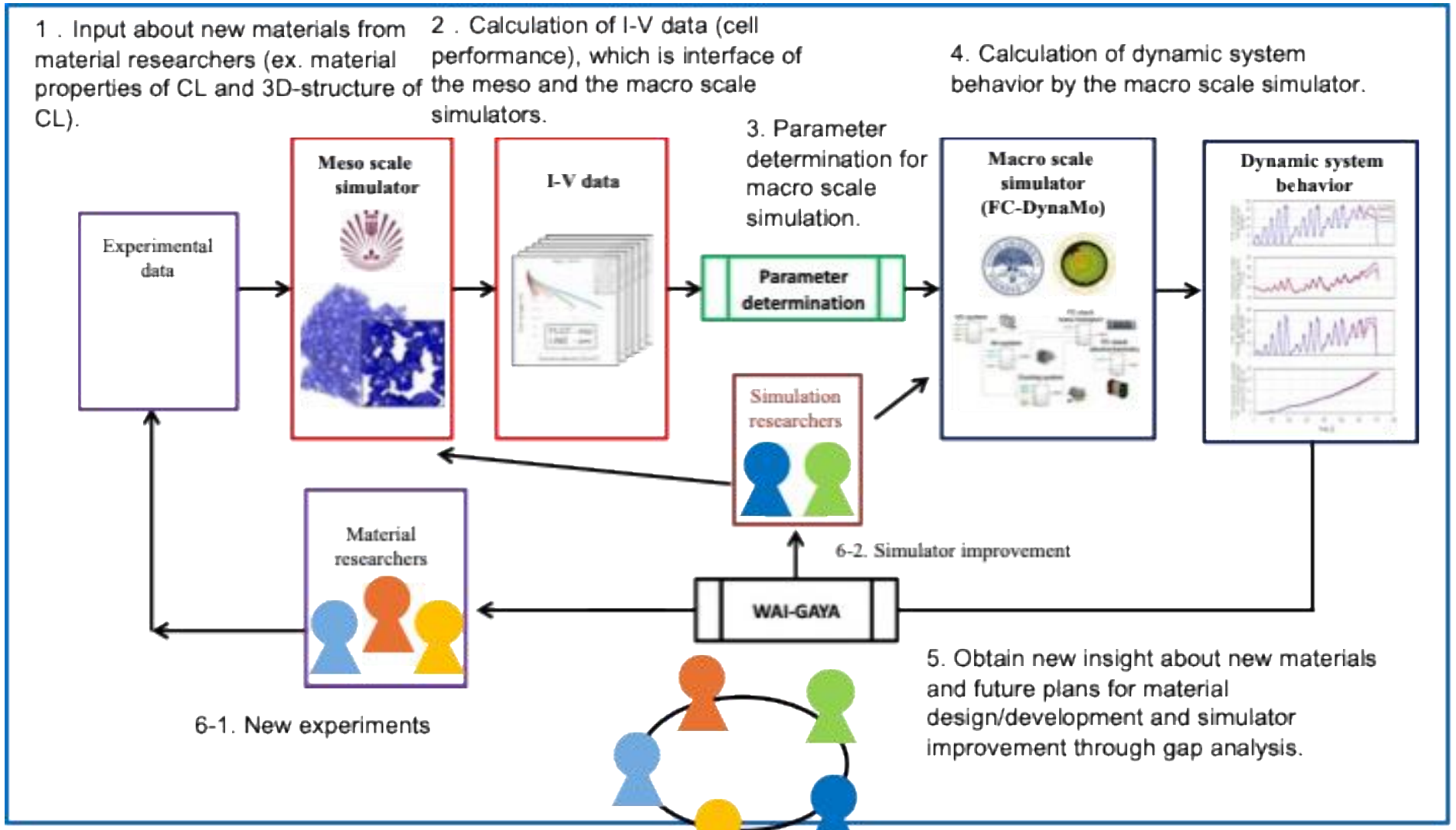
- System performance can be evaluated on the basis of the detailed measurements of the catalyst.



WHVCモードでの車速の設定値と勾配



拡大版FCプラットフォーム構想



まとめ

- FC-DynaMoを使うと，個別の材料の変更がどの程度製品の性能に影響するかを実用的な条件下で簡便に評価できる

- 評価結果から材料の特徴把握，材料開発の方針の妥当性検証が可能となり，新規材料開発が加速されることが期待される

FC-DynaMoの解説

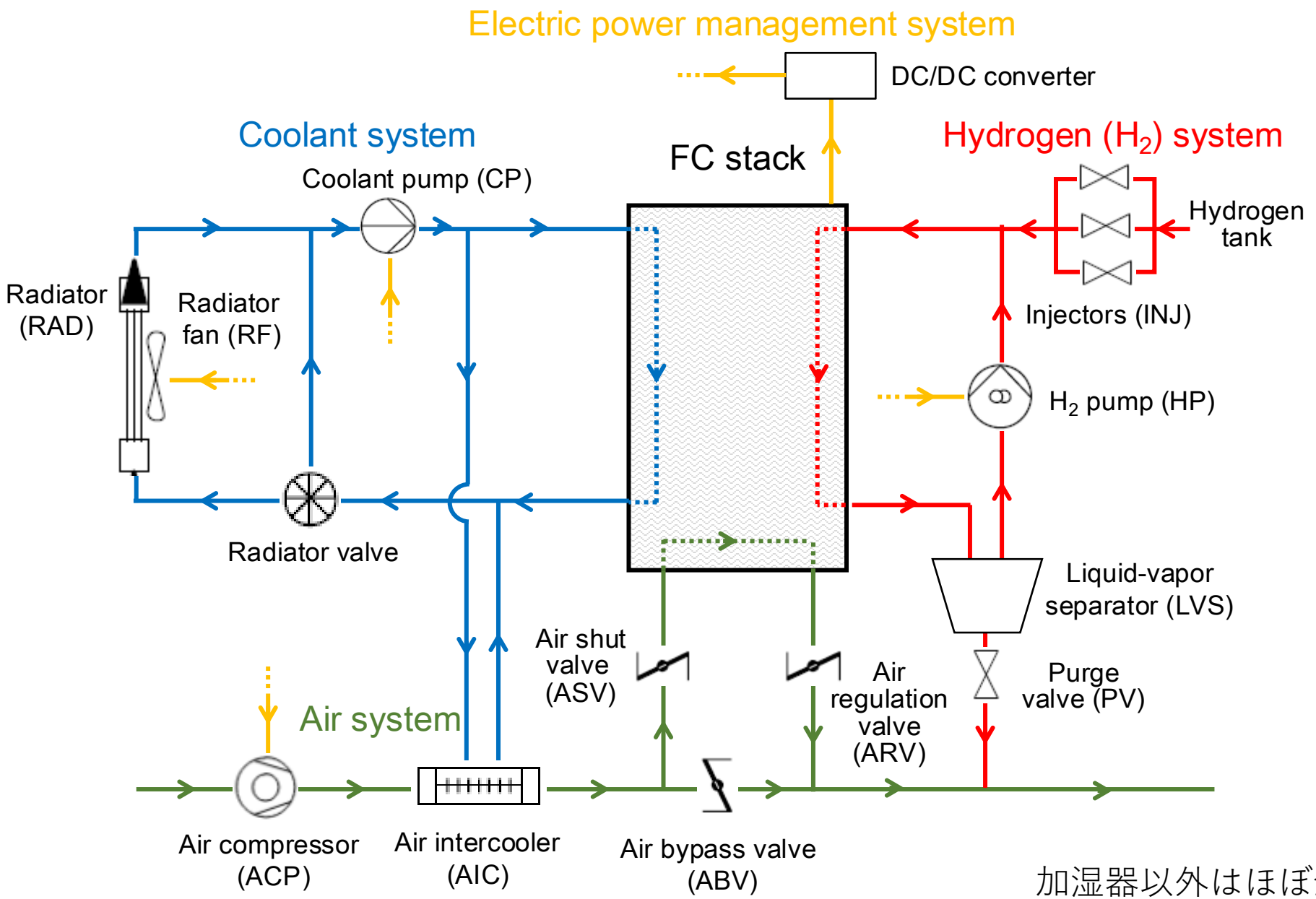


東京農工大学大学
金尚弘

第13回 FCワークショップ　PEFC開発を加速するモデルベース開発の最新技術の体験と実践

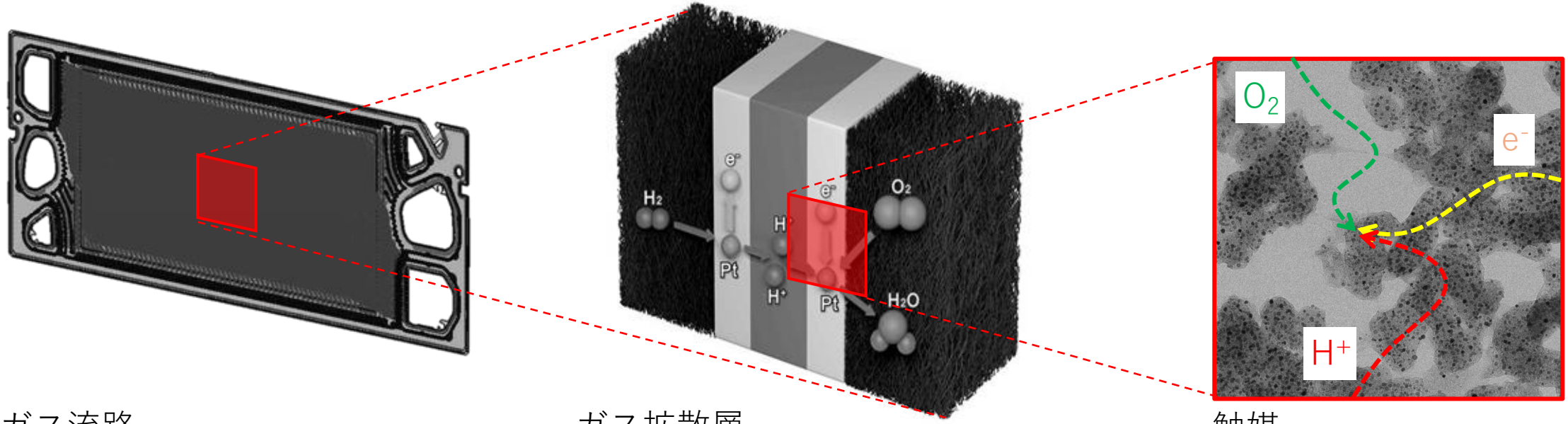
2026年9月11日@みずほ丸の内タワー

FC-DynaMoで想定しているシステム構成



加湿器以外はほぼ全ての要素が入っている

FCスタックモデル：対象とするセル内部の物理現象



ガス流路
- 保存則
  - 運動量保存
  - モル保存
  - エネルギー保存
- 面内分布
- 流路内の液滴閉塞による圧損増加

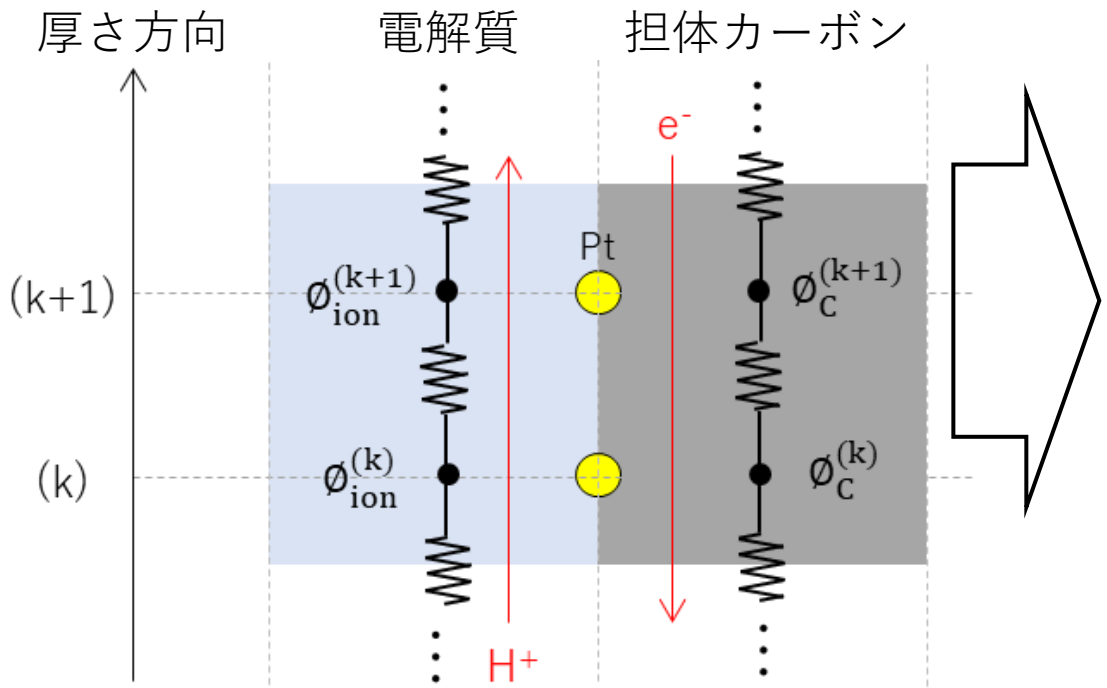
ガス拡散層
- 多孔質内の多成分ガス拡散
- 電気伝導

電解質膜
- H_2O輸送
  - 界面での吸着・脱離
  - 拡散
  - 電気浸透
- O_2, H_2, N_2輸送
- H^+輸送

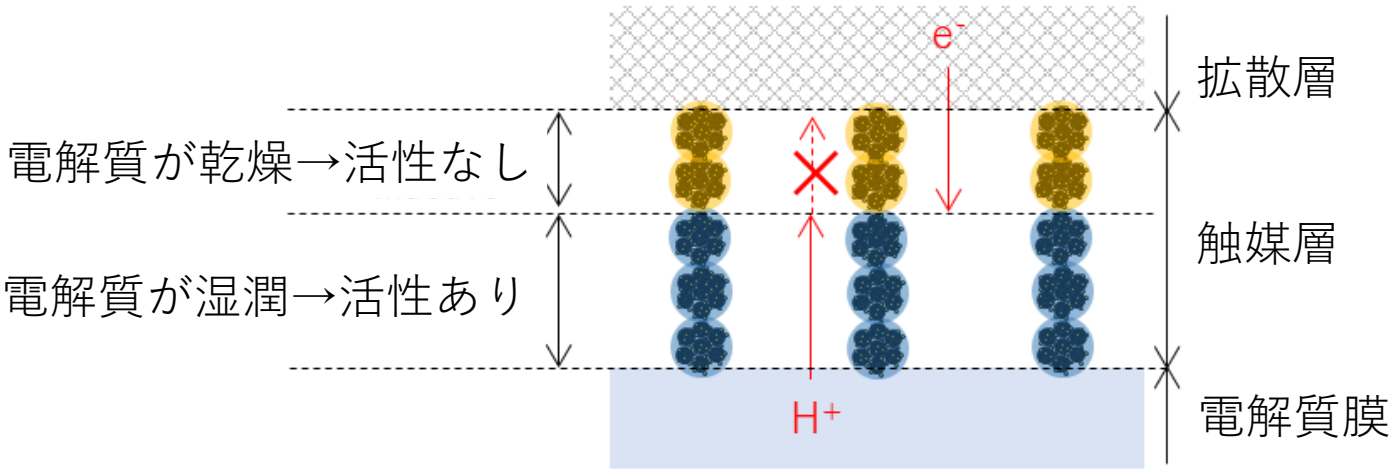
触媒
- 電解質の感想を考慮した H^+ 輸送律速
- 電解質の乾燥・細孔内の液滴閉塞を考慮した O_2, H_2 輸送律速

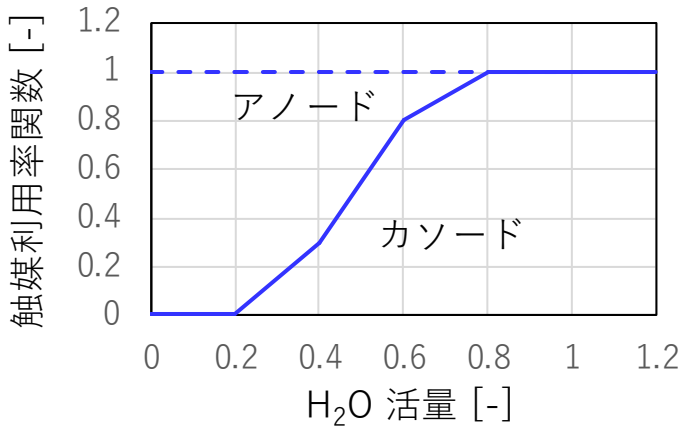
触媒層内のH⁺輸送の湿度依存モデル

厚さ方向のH⁺, e⁻の電荷保存



厚さ方向の触媒利用率の工学モデル





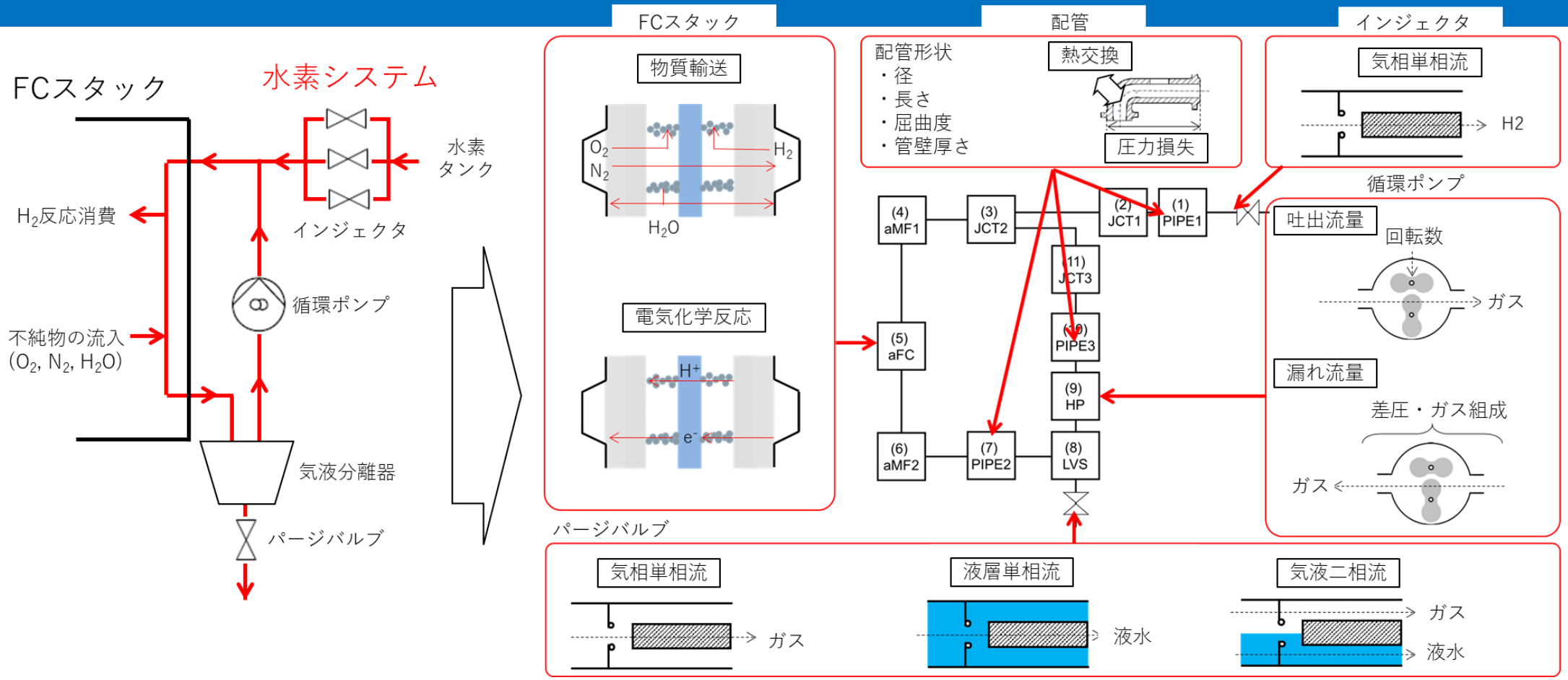
活性化過電圧（Butler-Volmer式）

$$\Delta\Phi = \frac{RT}{\alpha_c F} ln\left(\frac{i}{i_0}\right)$$

触媒活性パラメーター
（交換電流密度）

電解質・単体カーボン内のH⁺/e⁻輸送の微分方程式を解くための
収束演算にかかるコストを、工学モデル導入により回避する

補機システムモデル



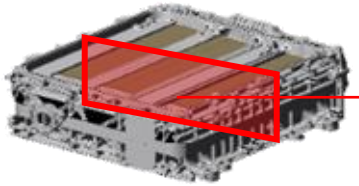
機能ブロック

- システム全体を、「部品単位」の粒度で分解（部品内部の分布は考慮しない）
- 各ブロックには、状態量を格納（流量・圧力・温度・ガス組成）
- 各ブロックには、部品固有の物理モデルを格納（物質輸送・熱輸送・反応）

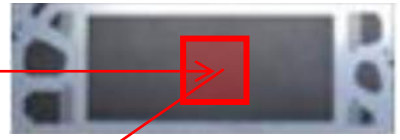
機能ブロックを「レゴブロック」的に挿替えることで種々のシステムを容易に表現可能

モデルパラメータ同定手法：FCスタック

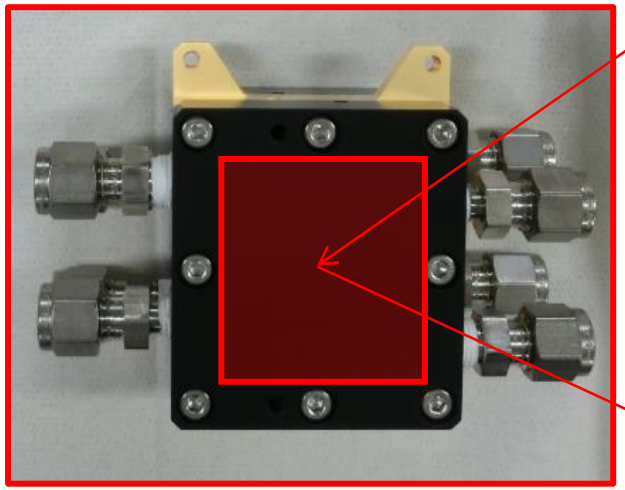
FCスタック

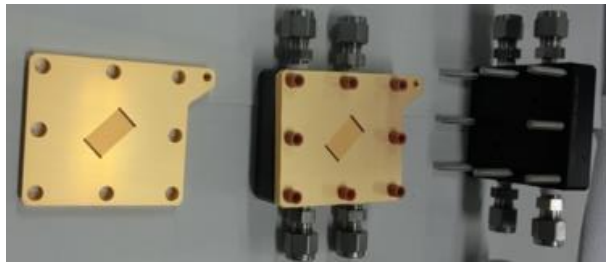


単セル

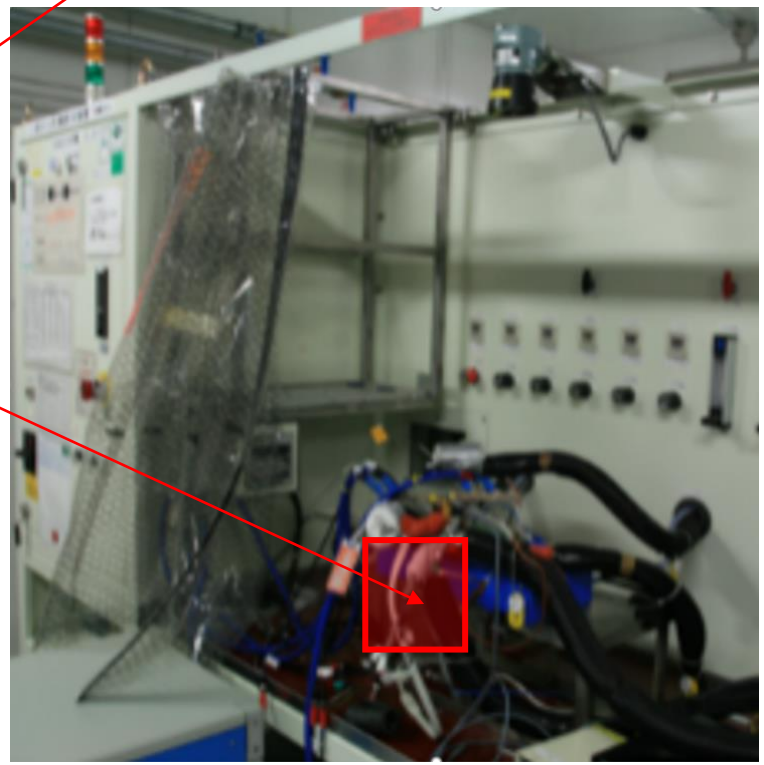


小セル（1cm2）

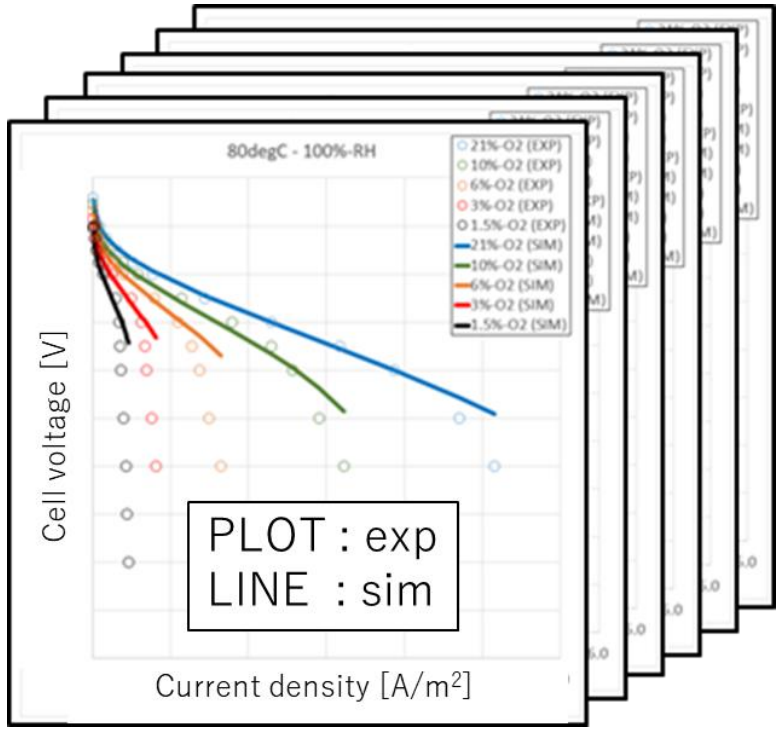




小セルベンチ



小セル実験データ（MIRAI MEA）



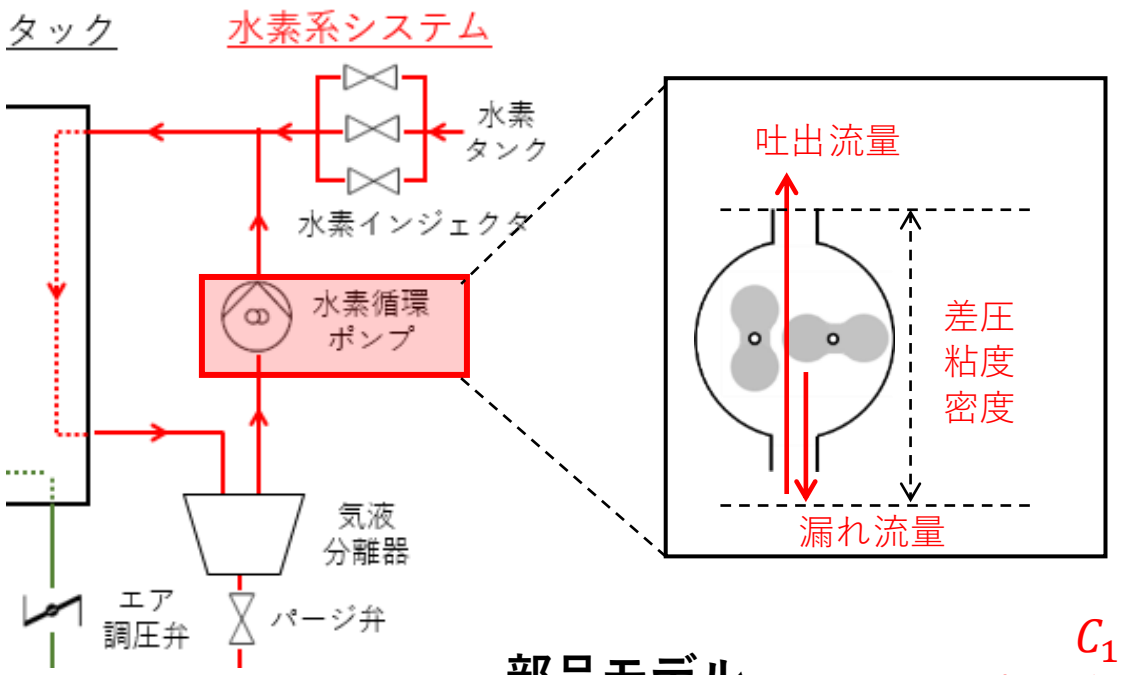
小セル境界条件

27条件の
I-V、I-R特性
（5×5+2）

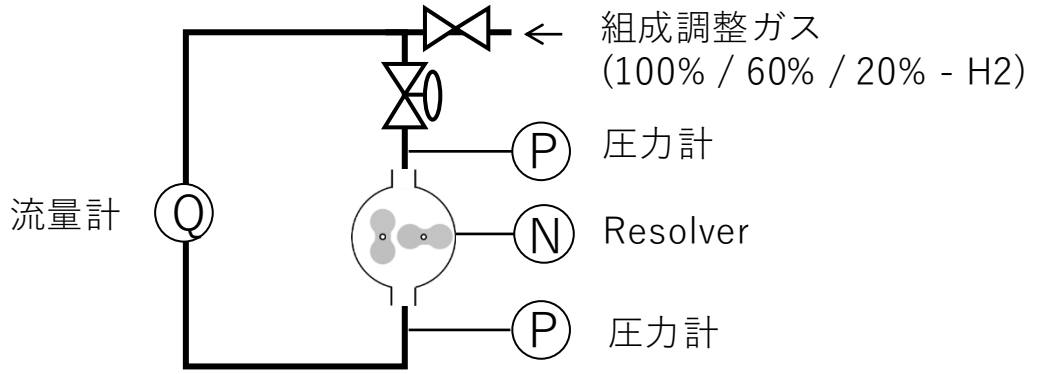
- 5 湿度（100, 80, 60, 40, 20%）
- 5 O_2 濃度（21, 10, 6, 3, 1%）
- 3 冷却水温度（80 + 40, 60 °C）

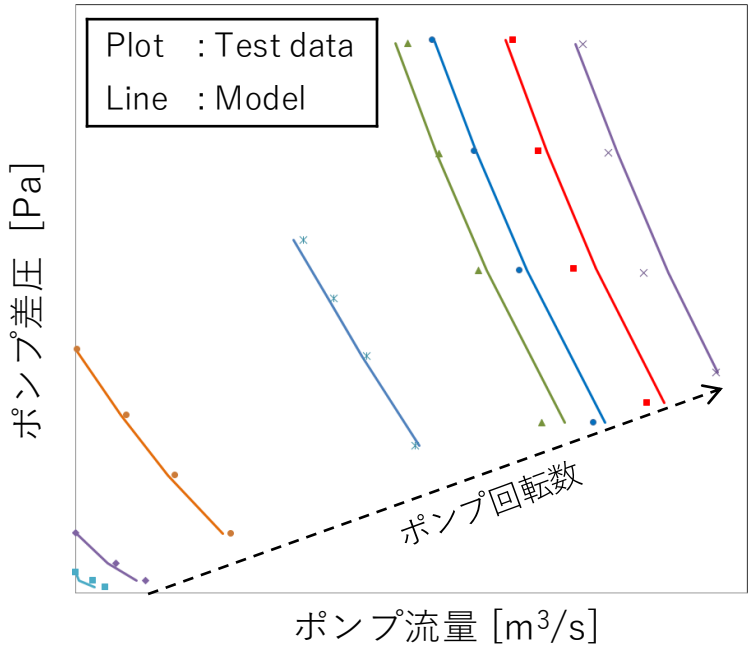
SEM画像（厚さ・気孔率・気孔径 etc.）＋小セルデータから、FC材料パラメータを決定
パラメータ決定のために、フルサイズのセル・スタックでの試験データを必要としない

MIRAIシステム部品



単体試験データ取得（≠システムデータ）





部品モデル

$$\text{総流量 } \dot{v} = C_1 N - C_2 \frac{\Delta P^{C_3}}{\mu^{C_4} \rho^{C_5}}$$

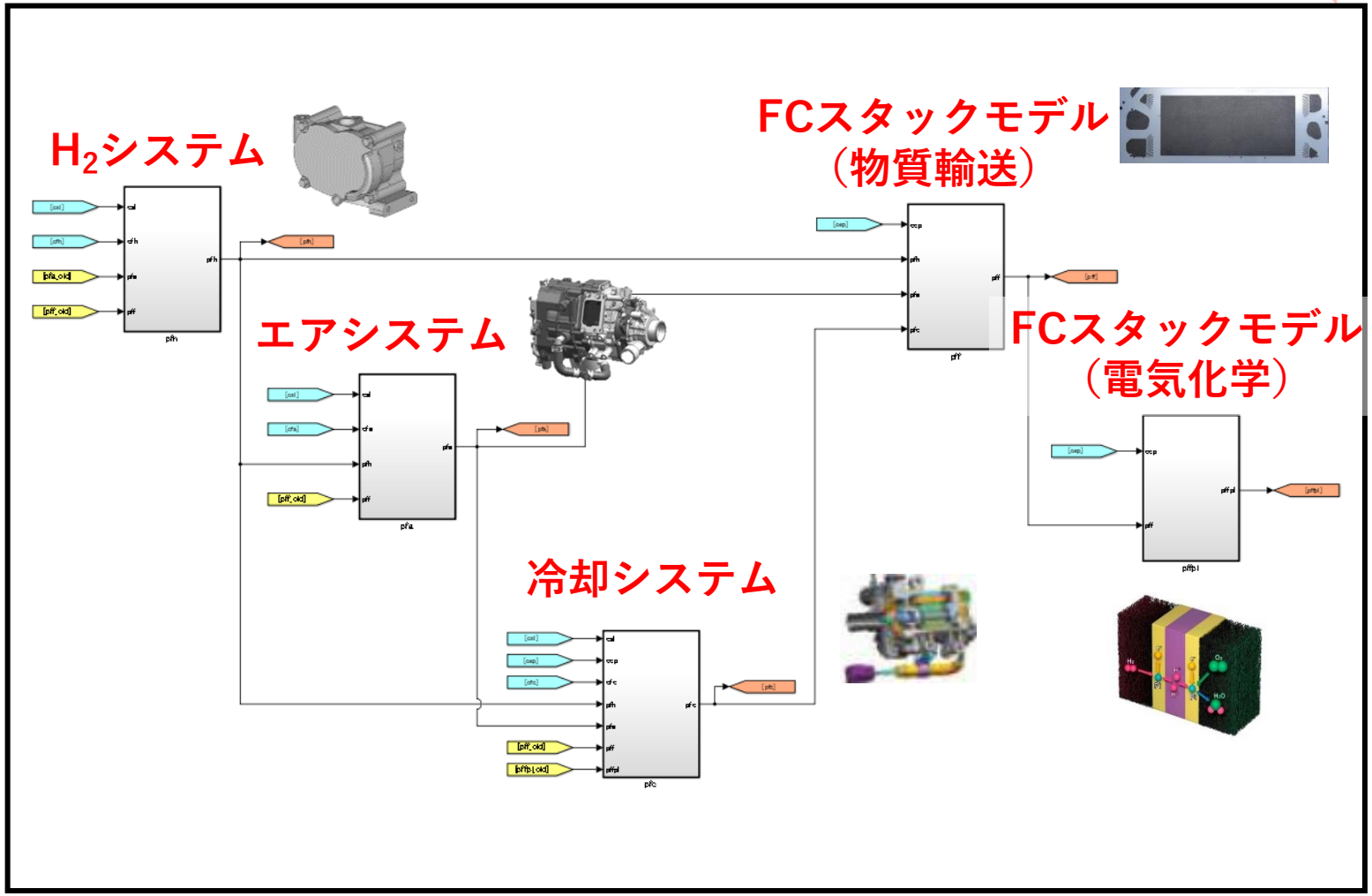
回転数　差圧　粘度　密度

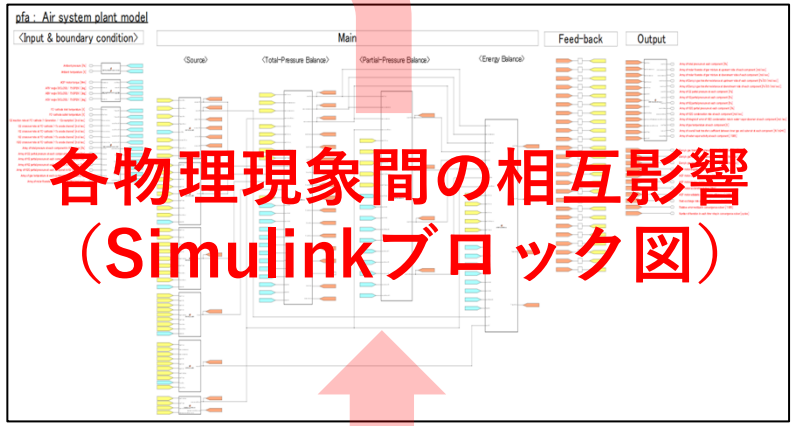
C_1-C_5
パラメータ同定
非線形最小二乗法

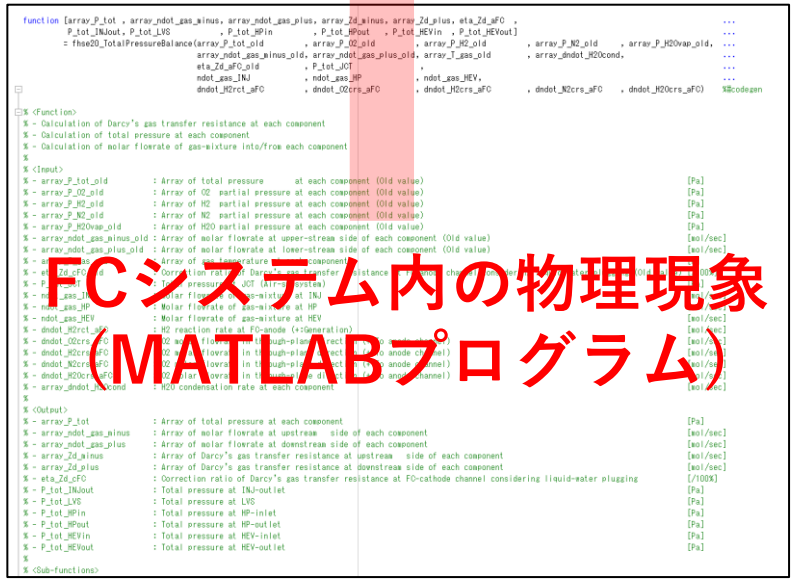
部品単体で体系的に取得された実験データを基に、部品モデルのパラメータを同定
パラメータ決定のために、車両・システムでの試験データを必要としない

MATLAB/Simulinkへの実装手法

統合FCシステムプラントモデル（Simulink）





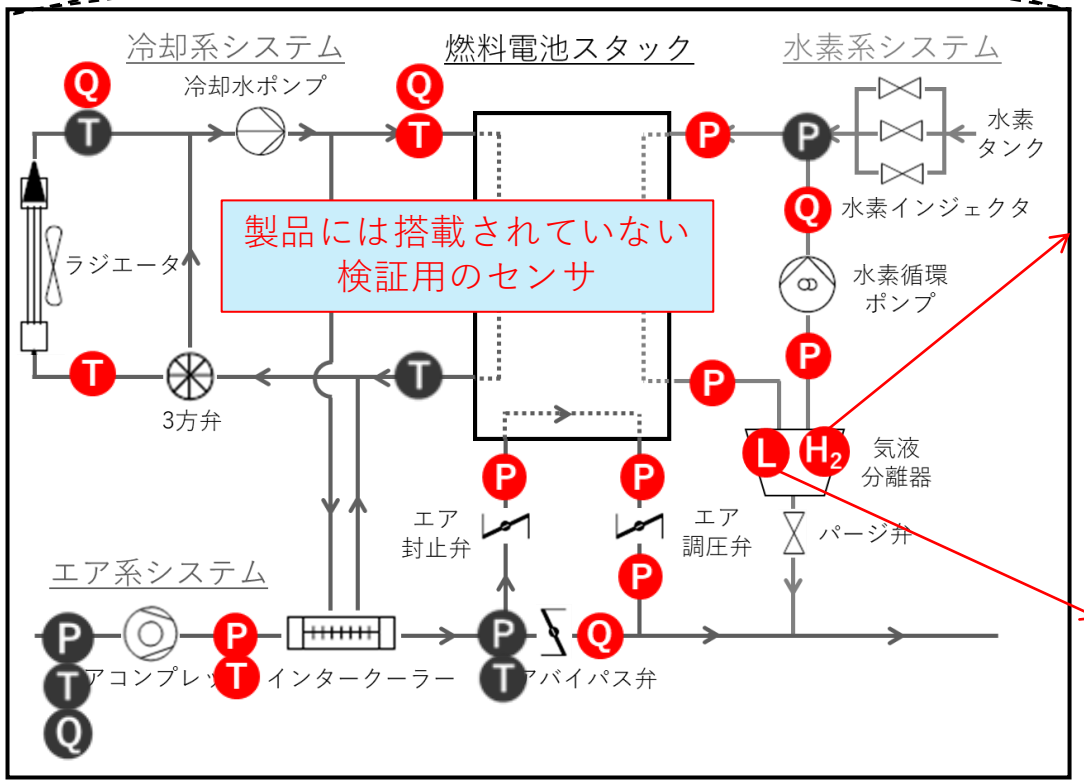


個々の物理現象 → FCスタック・補器システムモデル → 統合FCシステムモデル に組上げ
→ システム構成の変更発生時には、必要な箇所のみを「レゴブロック的」にカスタマイズ可能

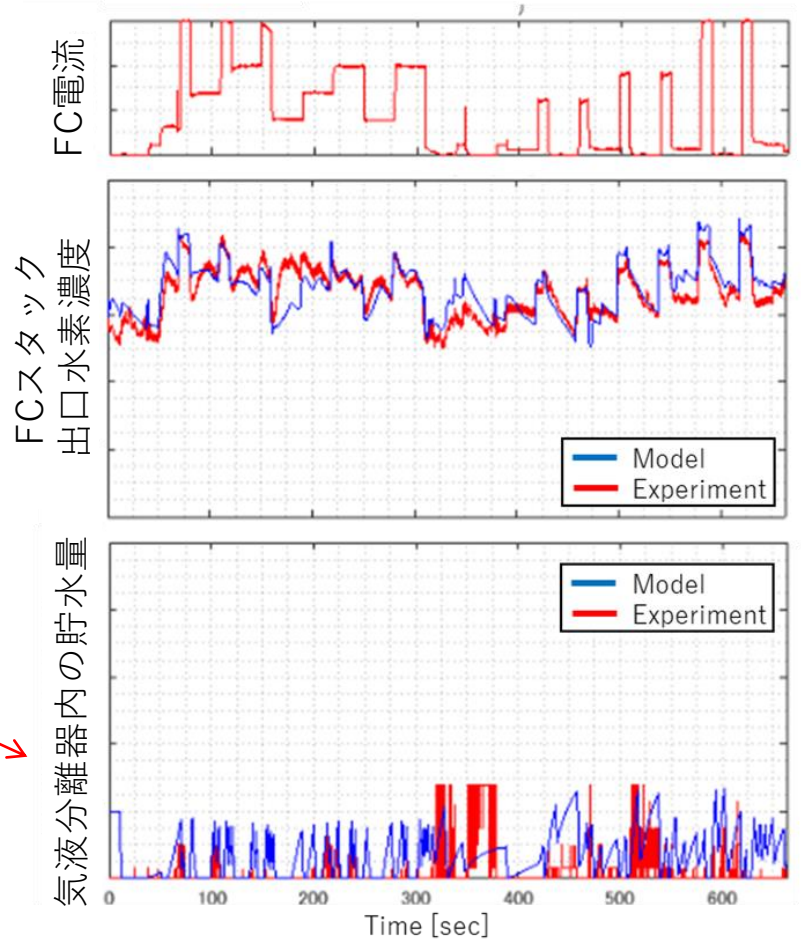
モデル精度検証

プロト車両・システム

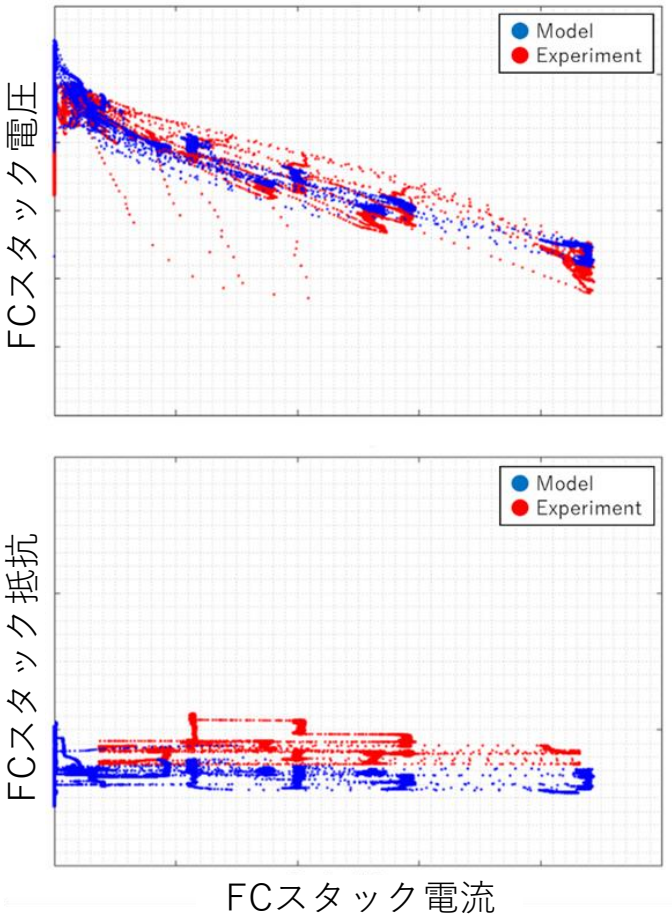




システム動特性（水素系）



FCスタック性能

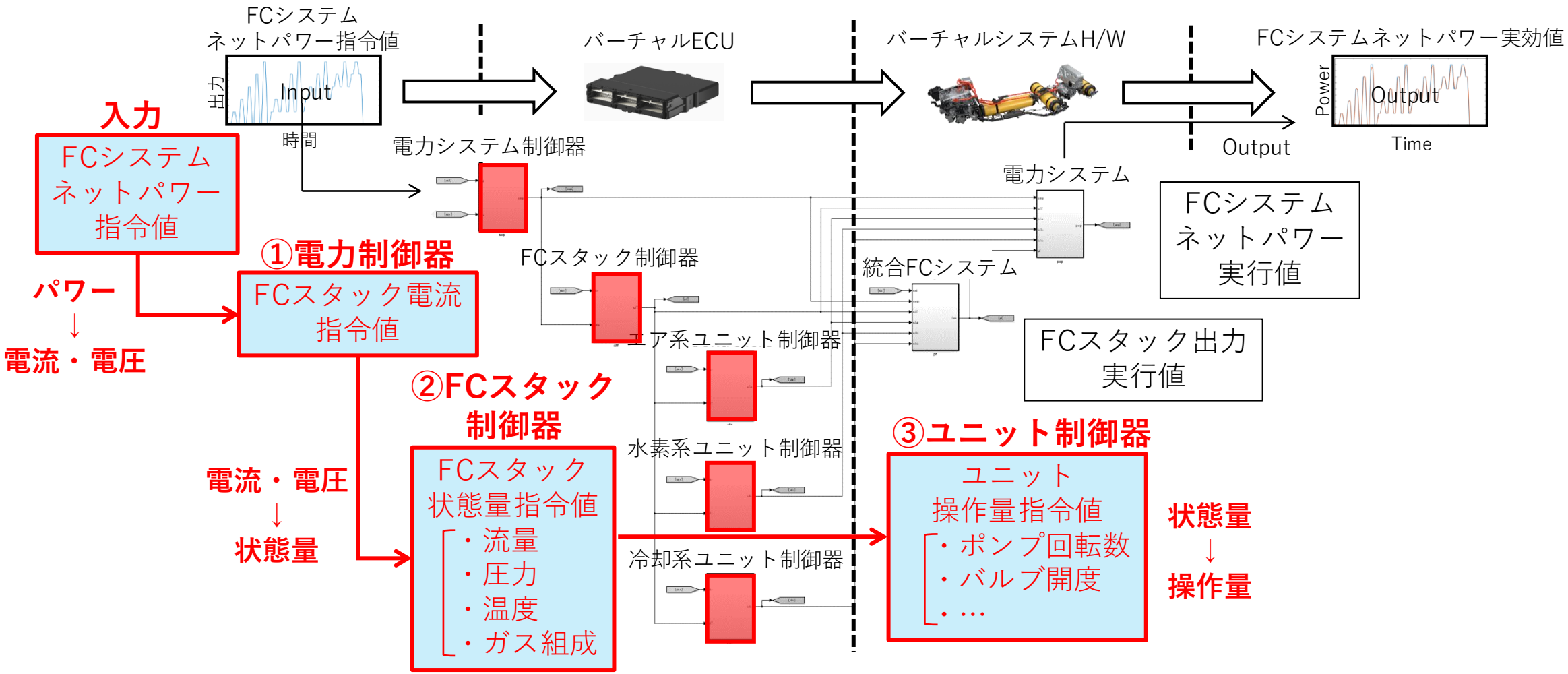


常温－高温(～95°C)、低－高負荷(～130 kW)、定常＆過渡の大規模データベースに基く精度検証の実績

- 個別のFC材料・システム部品モデルを結合することで、システム全体のモデルが構築できた
- モデル「検証」の懸念・手間を省き、FC材料・システム開発のためのモデル「活用」に専念できる

制御器システムの概要

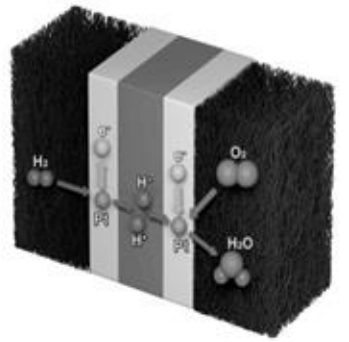
今後、企業・アカデミアで独自の制御器を実装していくためのベースとなる、拡張性の高い制御器を統合



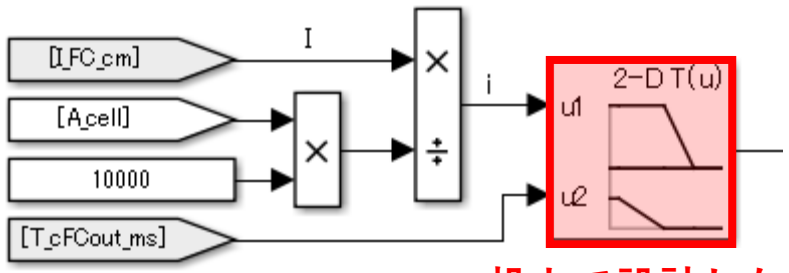
① 指令システムネットパワーを実現させるための電力制御器
② FCスタックを高効率で動作させるための状態量制御器
③ 狙いの状態量を実現するためのユニット操作量制御器

} 部品の変更が生じた場合
対象部品の制御器・定数を変更するだけで
「レゴブロック的」に変更が完結する機能配置

エア系状態量制御器



目標エア流量



入力：
- **FC電流密度の設定値**
- **FC冷却水温度の実効値**

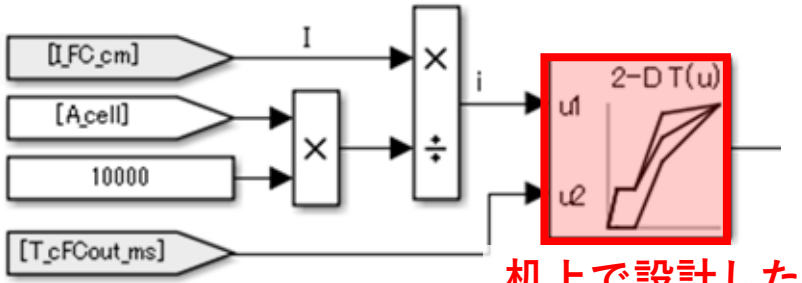
机上で設計した作動条件マップ

目標エア圧力 [kPa]		目標FC電流密度 [A/cm²]				
		0	0.2	0.5	1.0	2.0
FC冷却水温度の実効値 [°C]	65	100	100	100	180	250
	70	100	150	150	210	250
	95	100	150	150	240	250

補機消費電力の最小化

O_2 供給促進

Target air pressure



机上で設計した作動条件マップ

目標エアストイキ比 [－]		目標FC電流密度 [A/cm²]				
		0	0.2	1.0	1.0	2.0
FC冷却水温度の実効値 [°C]	50	1.7	1.7	1.7	1.5	1.5
	65	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
	80	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
	85	1.4	1.4	1.3	1.3	1.3

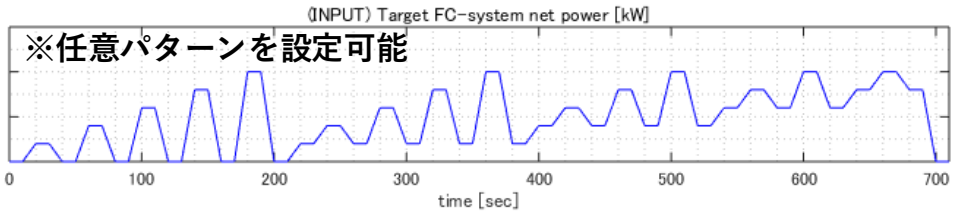
セル内の液滴による閉塞抑制

セル内部の乾燥抑制

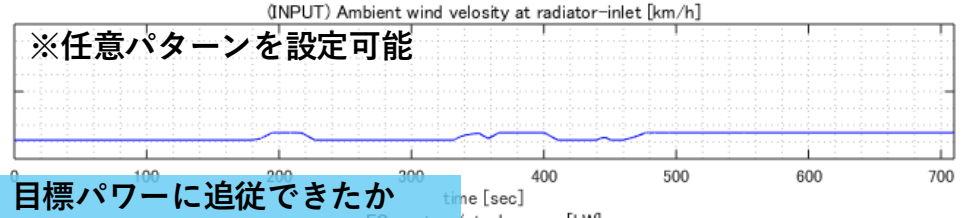
FCスタック・システム部品の物理現象を考慮した設計者の意図を反映しやすい＆機器仕様の変更時に変更が容易な制御器構成

シミュレーション例：システム全体性能とFC内部状態

（入力）
FCシステム
ネットパワー
指令値

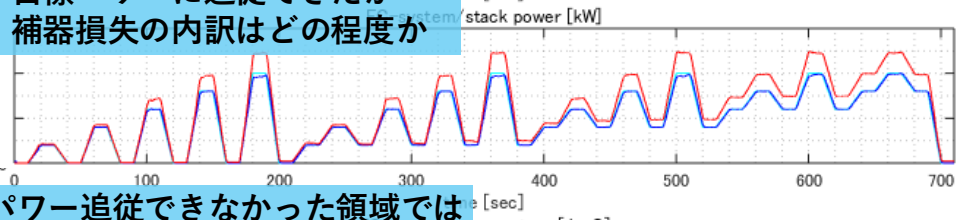


（入力）
ラジエータ
前風速



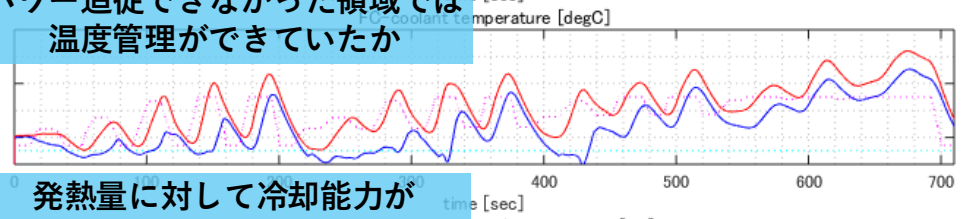
・目標パワーに追従できたか
・補器損失の内訳はどの程度か

FCスタック・
システムパワー



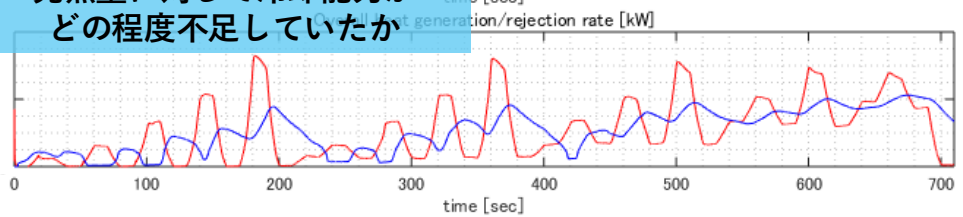
パワー追従できなかった領域では
温度管理ができていたか

FCスタック
入口/出口温度



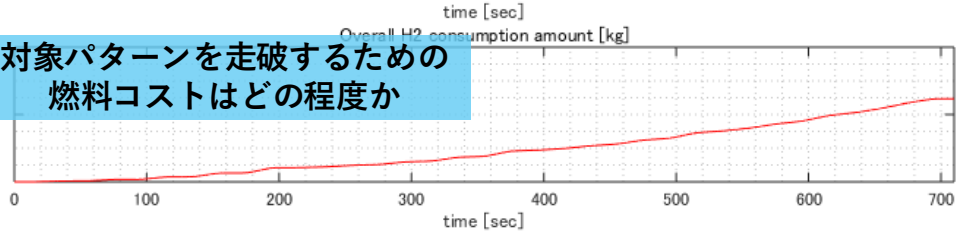
発熱量に対して冷却能力が
どの程度不足していたか

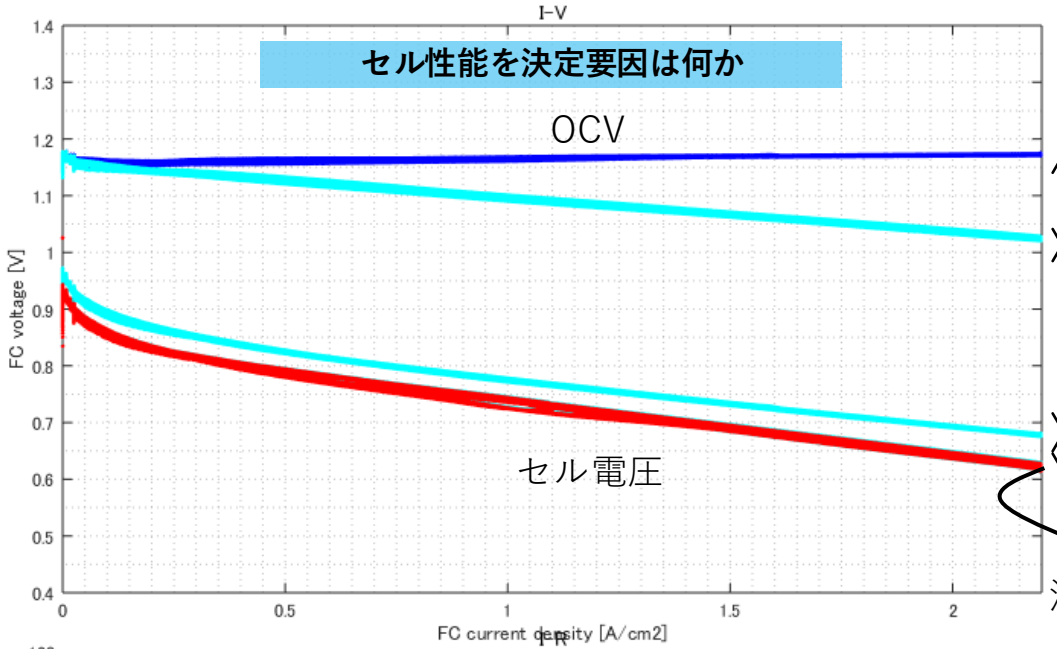
FCシステム
発熱/放熱量

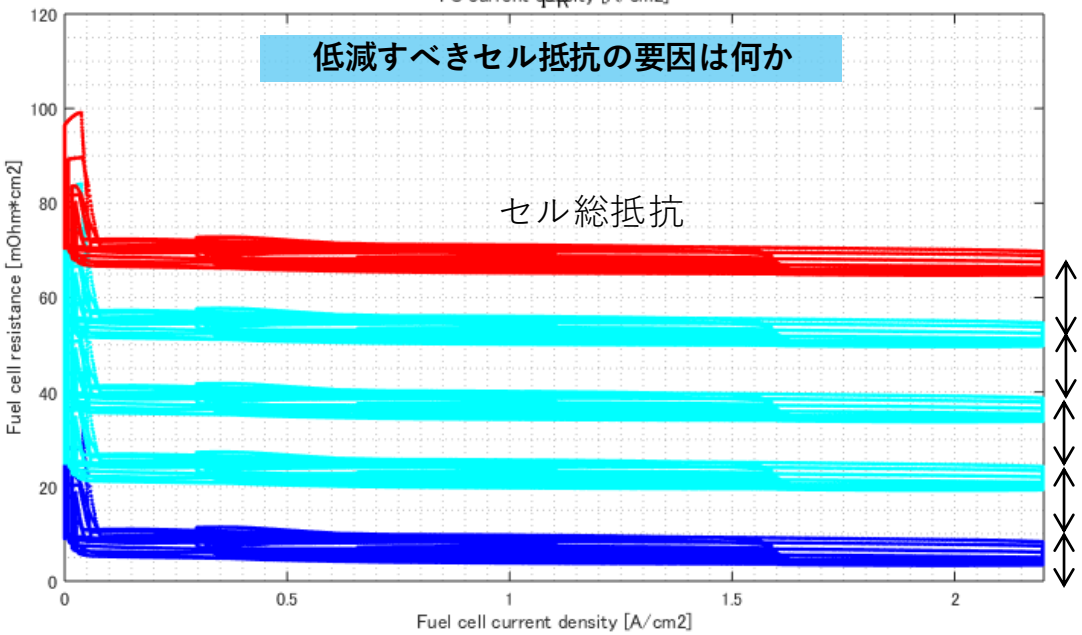


対象パターンを走破するための
燃料コストはどの程度か

水素消費量
（燃費）







まとめ

- FC-DynaMoの概要を紹介した
  - 全体
    - 主要要素はほぼ入っている
  - プラントモデル
    - 正確，計算負荷が小さい，物理イメージが持てるモデルを構築した
    - モデルパラメータは小規模実験で決定できる
  - 制御システム
    - パワー，状態量，ユニットの3段構成
    - 個別の制御器の役割が明確で，変更が容易な構成を採用した

2026.9.11
みずほ丸の内タワー

第13回 FCワークショップ
FC-DynaMoアプリ版を用いた演習

京都大学工学研究科 化学理工学専攻
影山美帆

本日紹介する内容

- ✓ FC-DynaMoの概要
  - 開発履歴
  - 機能
- ✓ アプリ版の概要
  - 入手方法
  - 使用環境
  - 適用システムと計算モード
- ✓ アプリ版の使用方法
  - メニュータブの紹介
  - パラメーターの設定方法
  - 実行方法
  - 結果の表示
- ✓ 使用例
  - 計算モード3種

FCシステムシミュレーター FC-DynaMoの開発過程履歴

バージョン	リリース	機能	アプリ版
v1.0–v1.4	2022.3	プラントモデルと制御器を結合し、1Dモデル（発電機）としてリリース。 解説書を整備。	v1.4
v2.0–v2.1	2023.11	セル内1+1D分布モデル追加 水冷式熱交換器（船舶システム対応）追加	v2.1
v3.0–v3.2	2024.5	Pt・担体カーボン劣化モデル追加 ドライ性能の再現性向上 計算精度と安定性の改善	v3.3
v4	2026.6	PEM劣化モデル追加 高電位回避制御器の追加	未公開
車両版	近日公開	バッテリー追加。車速、勾配を入力。	未公開

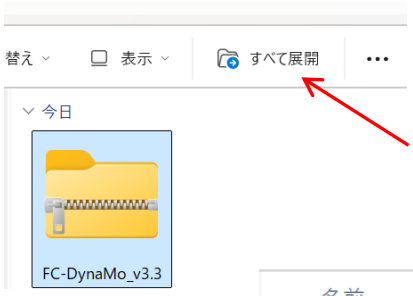
ユーザーからのフィードバックを受けて、機能や利便性を充実。

- 水冷式熱交換器の追加
- アプリ版の出力項目の追加
- 各種マニュアルの整備
- ポストプロセッサーの充実
- MEA同定ツールの追加、制御マップ最適化ツールの追加

FC-DynaMoを使うには

MATLAB版：使用者–京都大学–東京農工大学–FC-Cubicの4者間契約
問い合わせ・契約窓口はFC-Cubicの田中様

アプリ版：京都大学の河瀬が使用許諾
webより個人単位で申し込みください。
使用許諾契約書、MS Windows用バイナリーのZIPファイル
及びユーザーズガイドのダウンロードリンクを送付します。



ZIPファイルがダウンロードされますので、展開してください。



ダブルクリックで起動

アプリ版でできること

FC-DynaMo MATLAB版をコンパイル。基本的にはMATLAB版とアプリ版は同じことができる。
ただし、システム構成の変更やGUIに表示されない定数や変数の変更はアプリ版ではできない。
材料物性からシステム性能を簡易に評価したい場合に有効。
アプリ版はMATLAB版より遅れてリリースされる。

初期性能評価

耐久性能評価

	Normal 厚さ方向の1次元計算	1+1D 厚さ＋流路方向のセル内分布計算	Degradation Ptと担体カーボンの劣化計算
Application 1 空冷式熱交換器採用 車両等を想定※	○	○	○ レーダーチャートを用いた性能比較可
Application 2 水冷式熱交換器採用 船舶を想定	○	○	○

スタックや補機を含めた発電システムの性能評価

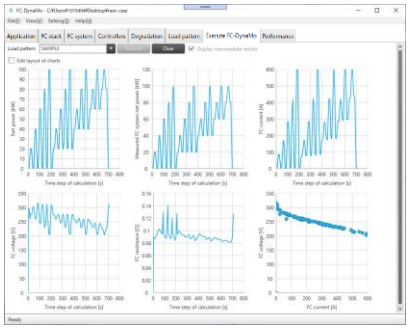
※MIRAI#2のデータで検証済み

スタックのネットパワーは？
I–Vの挙動は？
水素消費量は？
スタック出入口の冷媒温度は？
スタック出口ガスの濃度は？

ECSA維持率
カーボン維持率

アプリ版の実行環境

- ✓ アプリ版は、MATLAB版FC-DynaMoをコンパイルして作成したFC-DynaMo.exe（本体）を実行するためのグラフィカルユーザーインターフェースを有する。
- ✓ アプリ版をインストールすると、FC-DynaMo.exeも合わせてインストールされる。
- ✓ FC-DynaMo.exeの実行にはMATLAB Runtime が必要で、別途インストールする必要がある。



アプリ版FC-DynaMo

実行命令

計算結果

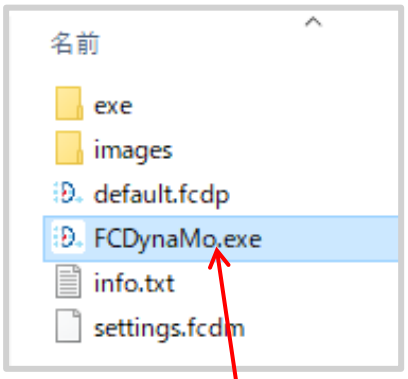


FC-DynaMo本体

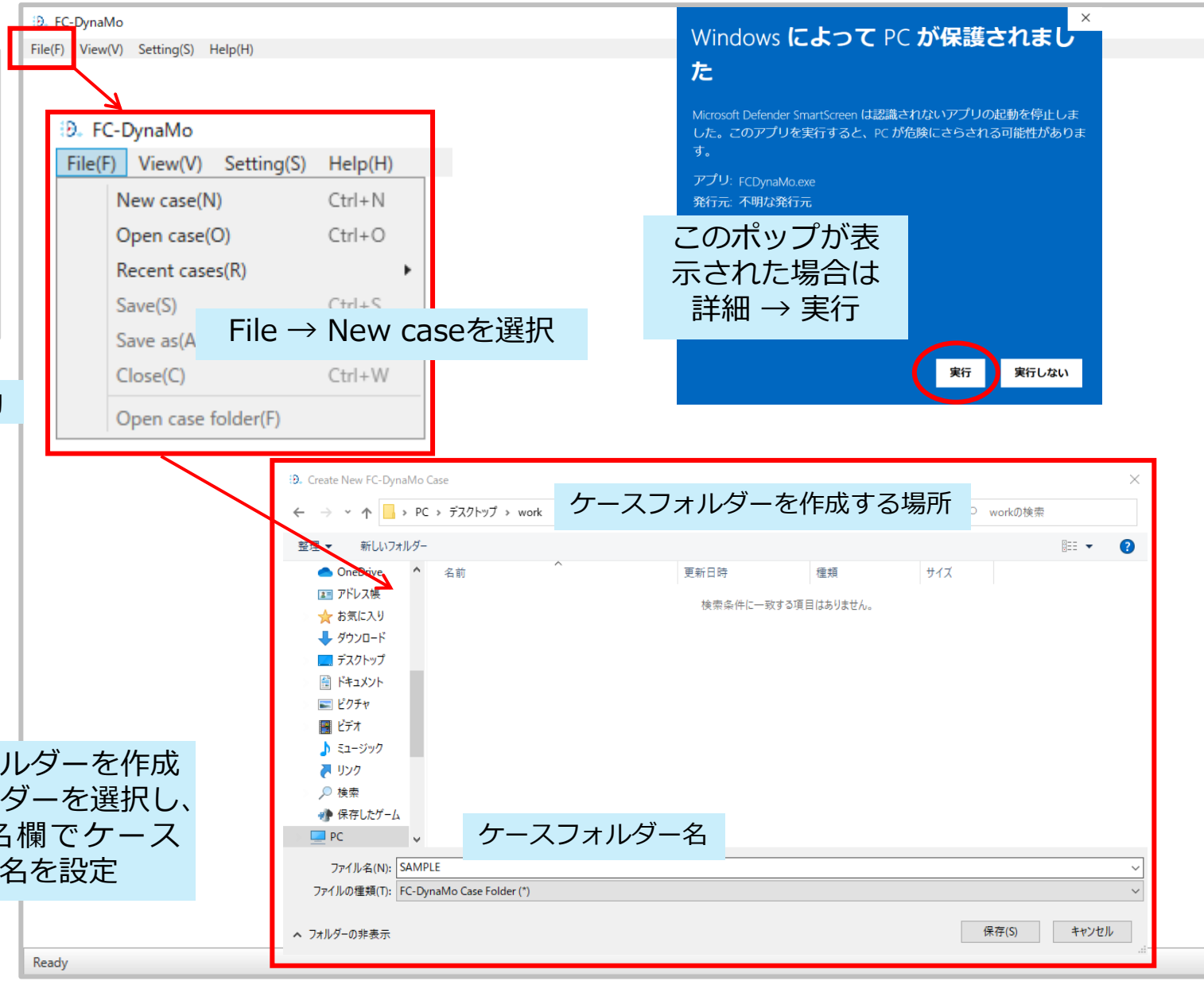
動作環境

OS	Microsoft Windows （Windows 11 推奨） Microsoft .NET Framework 4.5.2以上
MATLAB Runtime	Release R2021a (MATLAB Runtime Version 9.10), Windows 64-bit 版を推奨
インストールに必要なディスク空き容量	10 GB 程度 （主にMATLAB Runtime用）

アプリの起動

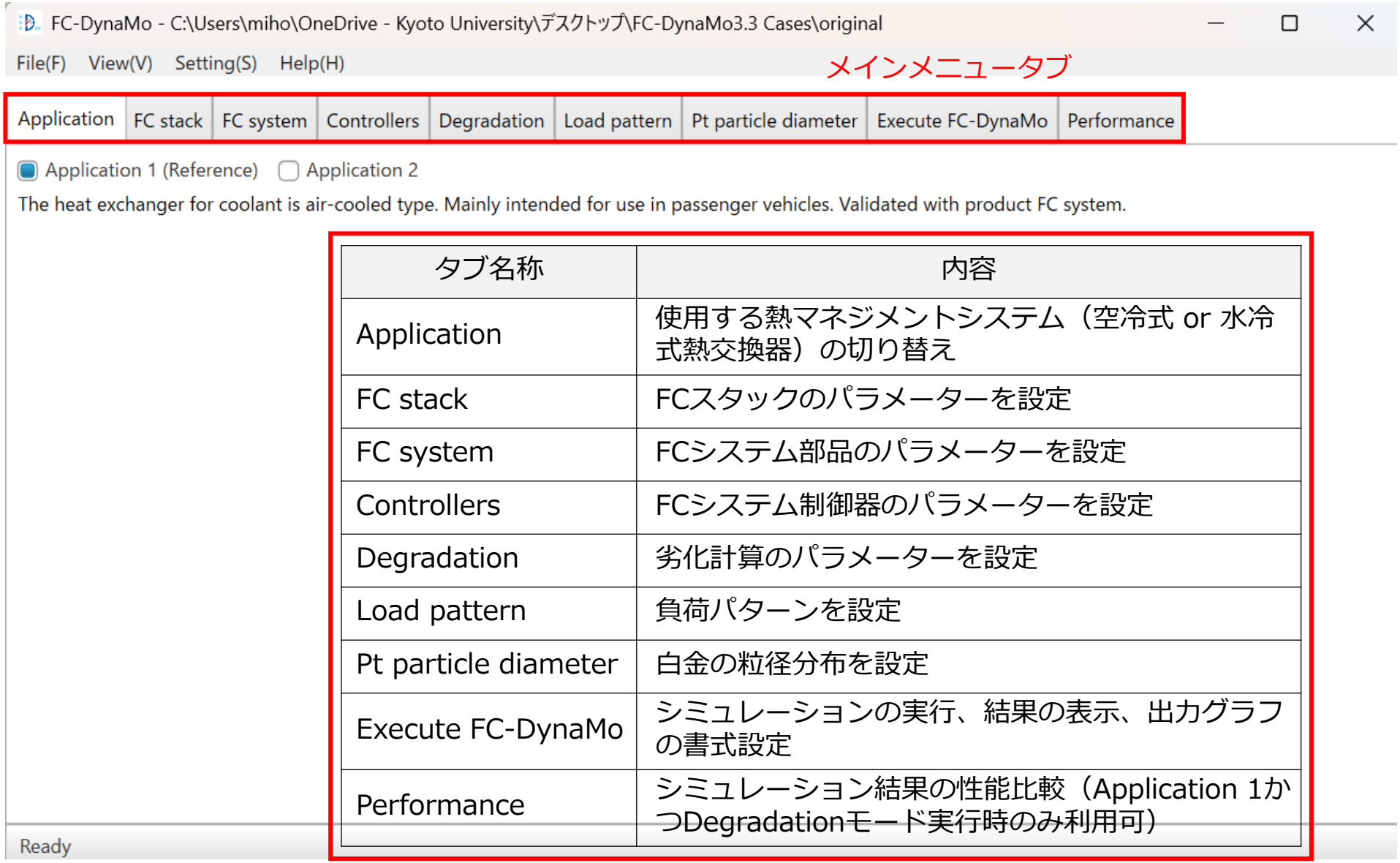


ダブルクリックで起動



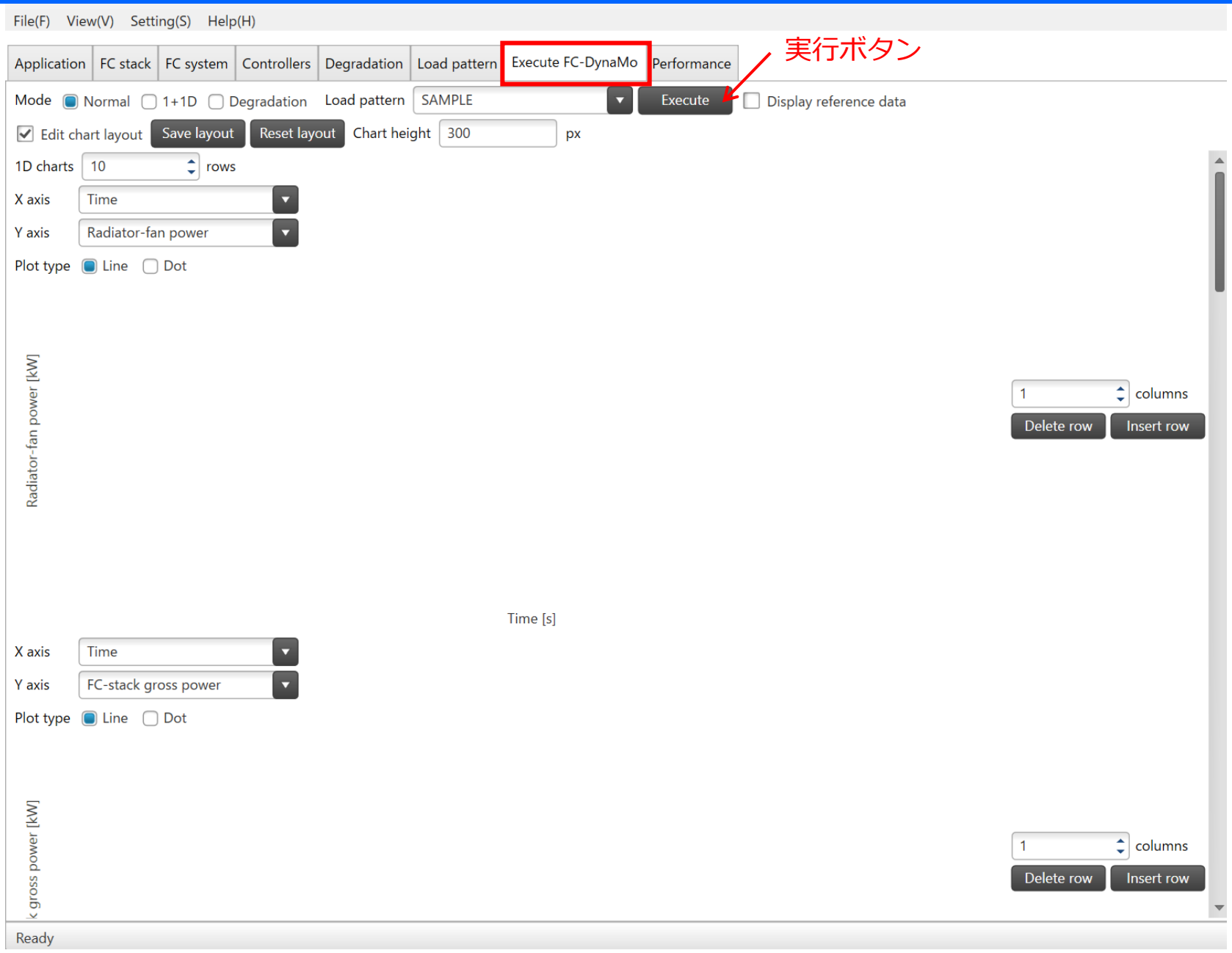
ケースフォルダーを作成するフォルダーを選択し、ファイル名欄でケースフォルダー名を設定

メインメニュー概要

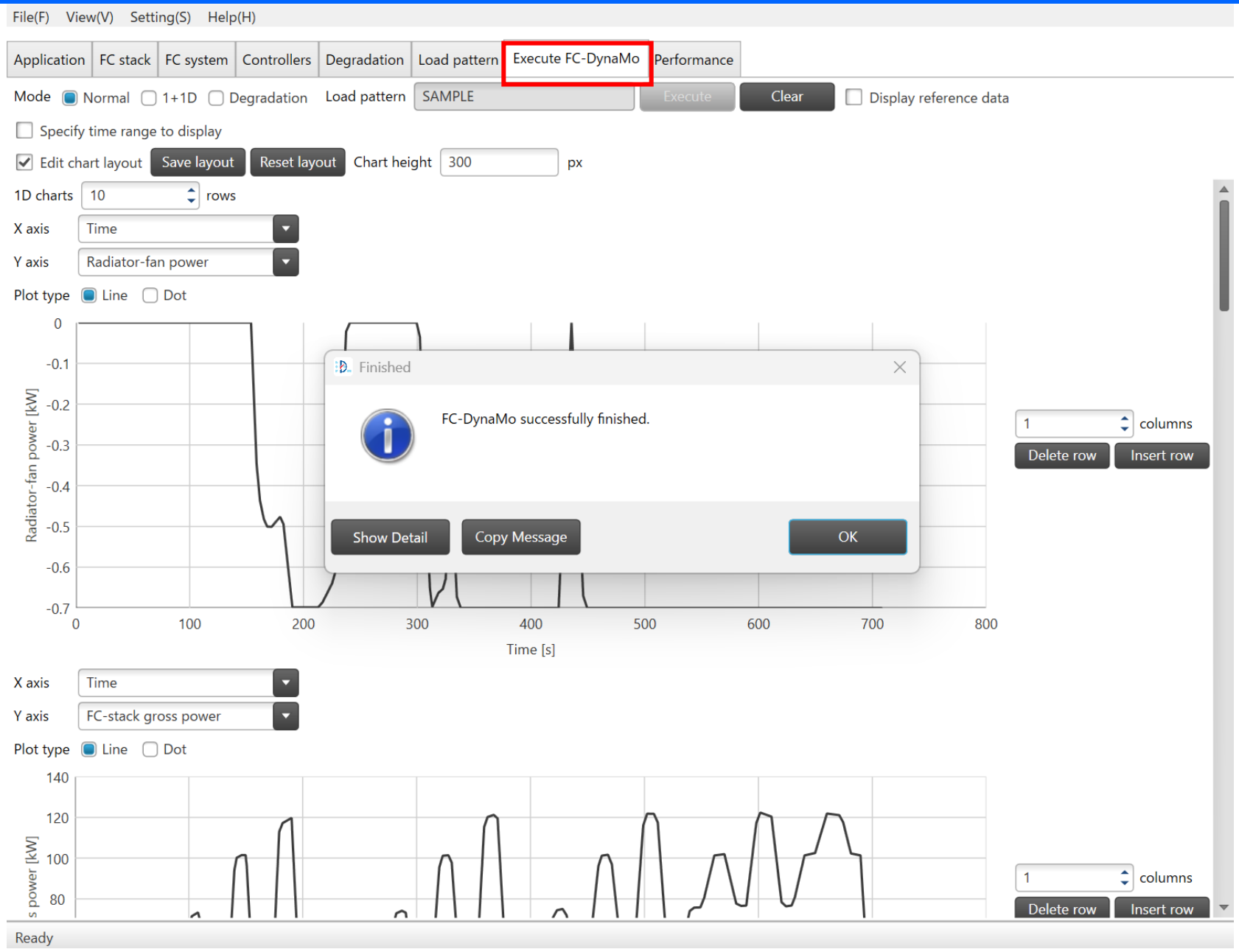


タブ名称	内容
Application	使用する熱マネジメントシステム（空冷式 or 水冷式熱交換器）の切り替え
FC stack	FCスタックのパラメーターを設定
FC system	FCシステム部品のパラメーターを設定
Controllers	FCシステム制御器のパラメーターを設定
Degradation	劣化計算のパラメーターを設定
Load pattern	負荷パターンを設定
Pt particle diameter	白金の粒径分布を設定
Execute FC-DynaMo	シミュレーションの実行、結果の表示、出力グラフの書式設定
Performance	シミュレーション結果の性能比較（Application 1かつDegradationモード実行時のみ利用可）

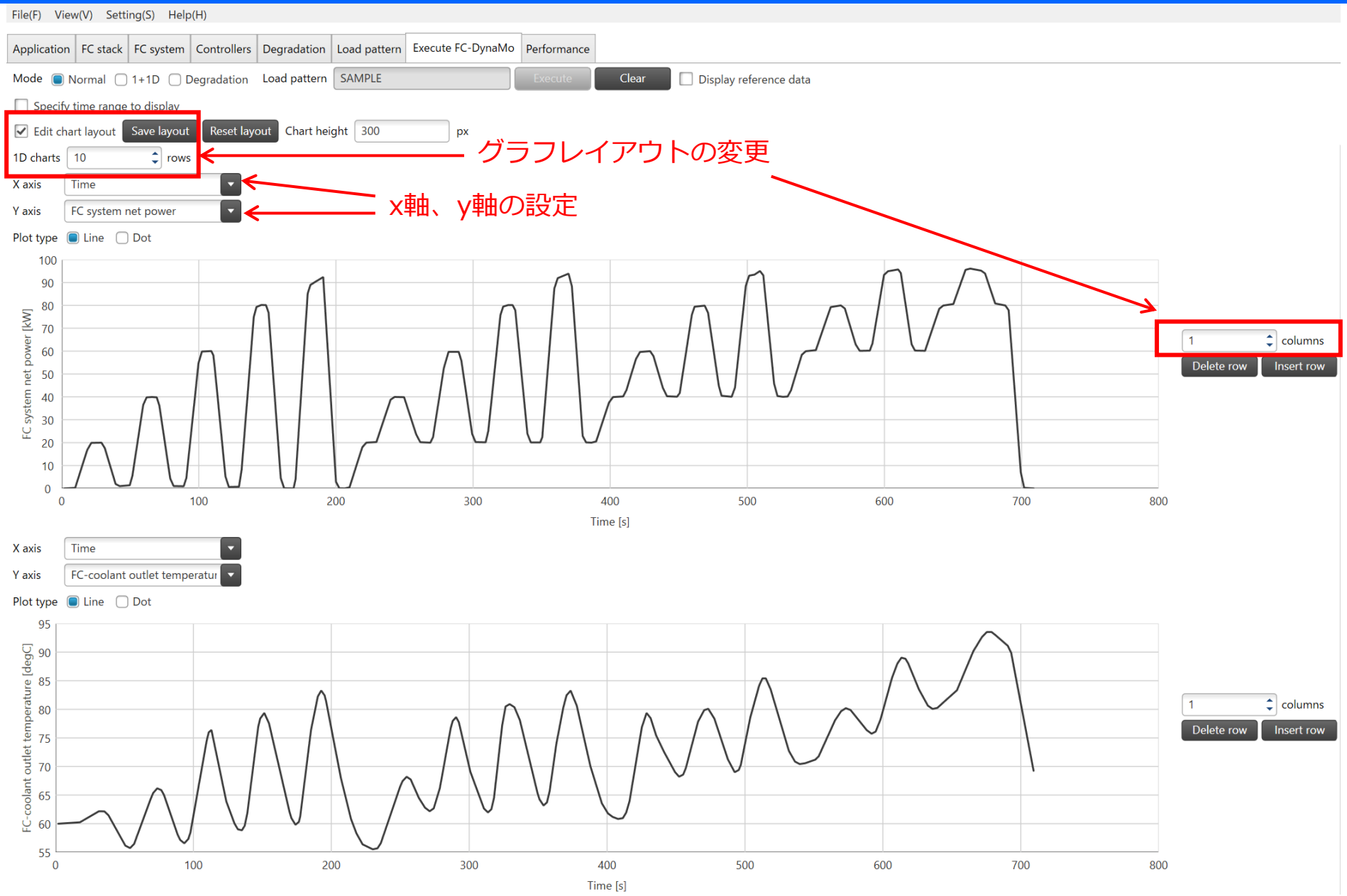
シミュレーションの実行



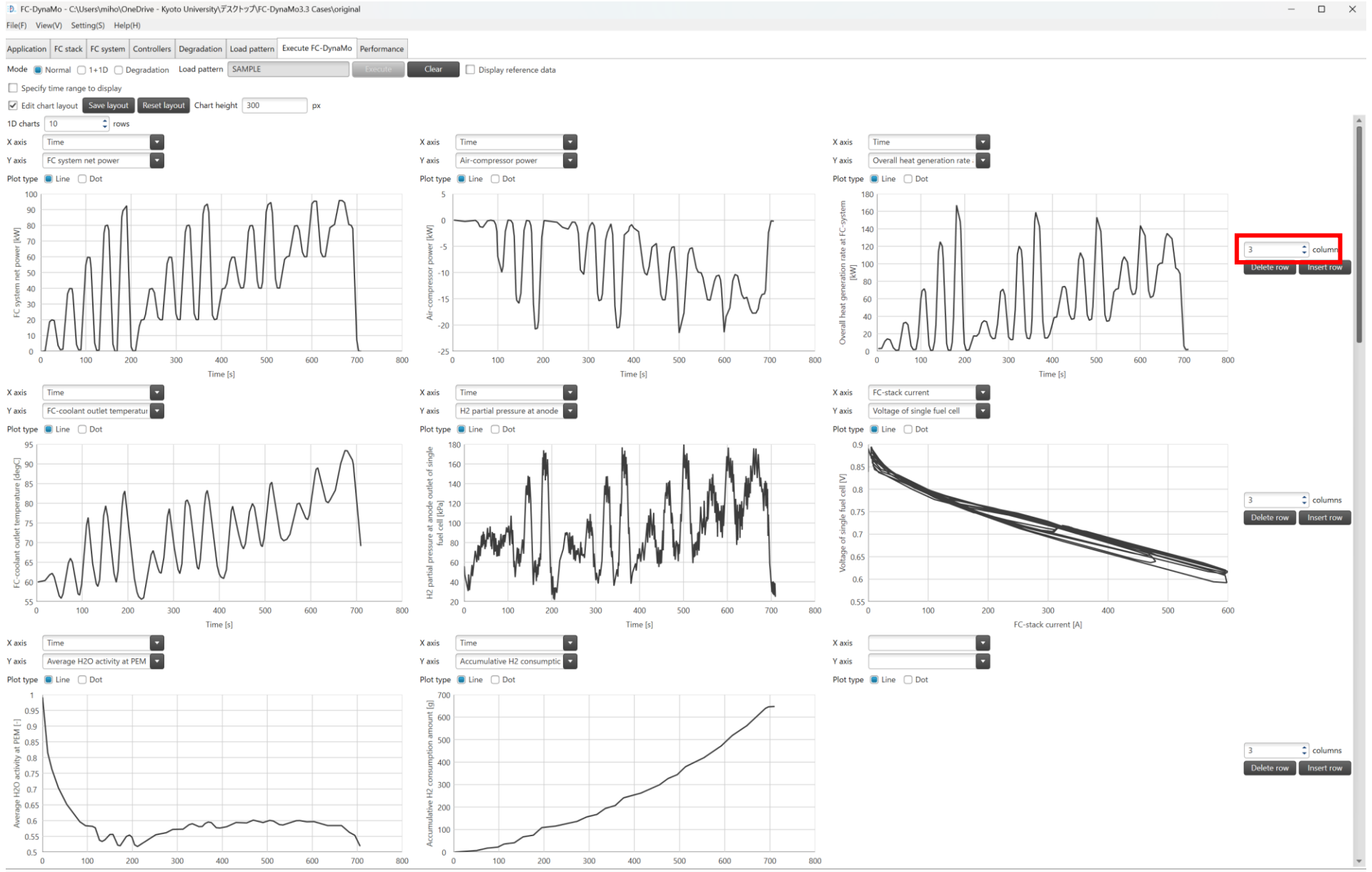
シミュレーションの実行



シミュレーション結果の表示



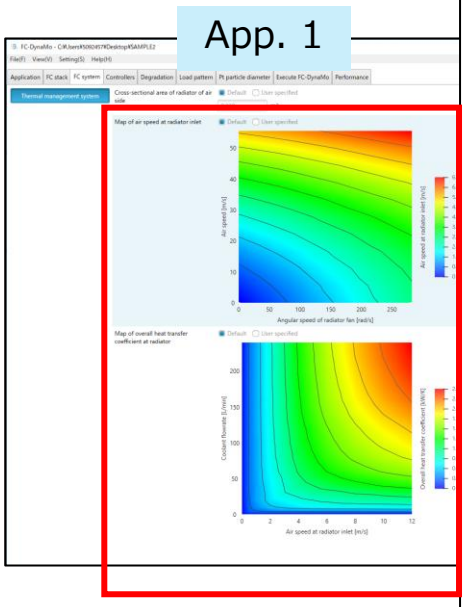
シミュレーション結果の表示

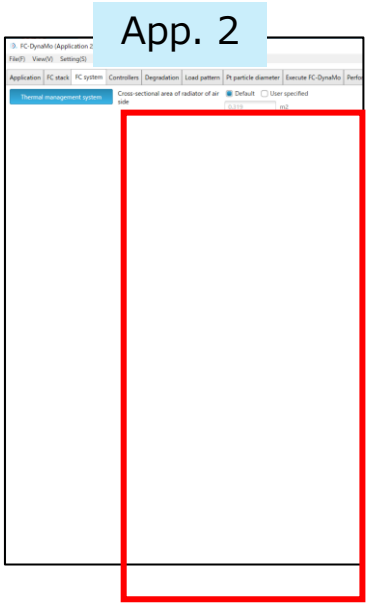


Applicationの切り替え

Application 1:空冷式熱交換器（車両等）
Application 2:水冷式熱交換器（船舶）

アプリケーションによって
表示されるパラメーターが異なる





FC材料のパラメーター設定

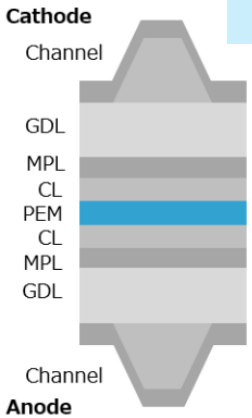
File(F) View(V) Setting(S) Help(H)

①FC stackタブ選択

Application | FC stack | FC system | Controllers | Degradation | Load pattern | Pt particle diameter | Execute FC-DynaMo | Performance

- Cathode GDL
- Cathode MPL
- Cathode CL
- PEM
- Anode CL
- Anode MPL
- Anode GDL
- General

②部品選択



③パラメーター設定

PEM thickness		Default / User specified	8.5 µm
Dry density of PEM		Default / User specified	1858 kg/m3
Equivalent weight of PEM (Polymer weight per mole of sulfonic ion)		Default / User specified	0.98 kg/mol-SO3-
O2 diffusivity through PEM	Reference value	Default / User specified	2.267E-11 m2/s
	Humidity dependency factor	Default / User specified	7.757E-12 -
	Activation energy	Default / User specified	11000 J/mol
	Reference temperature	Default / User specified	80 ˚C
H2 diffusivity through PEM	Reference value	Default / User specified	5.106E-11 m2/s
	Humidity dependency factor	Default / User specified	2.065E-11 -
	Activation energy	Default / User specified	20000 J/mol
	Reference temperature	Default / User specified	80 ˚C
N2 diffusivity through PEM	Reference value	Default / User specified	2.267E-11 m2/s

Default / User specified 5 µm

指定値



設定できる主なパラメーター

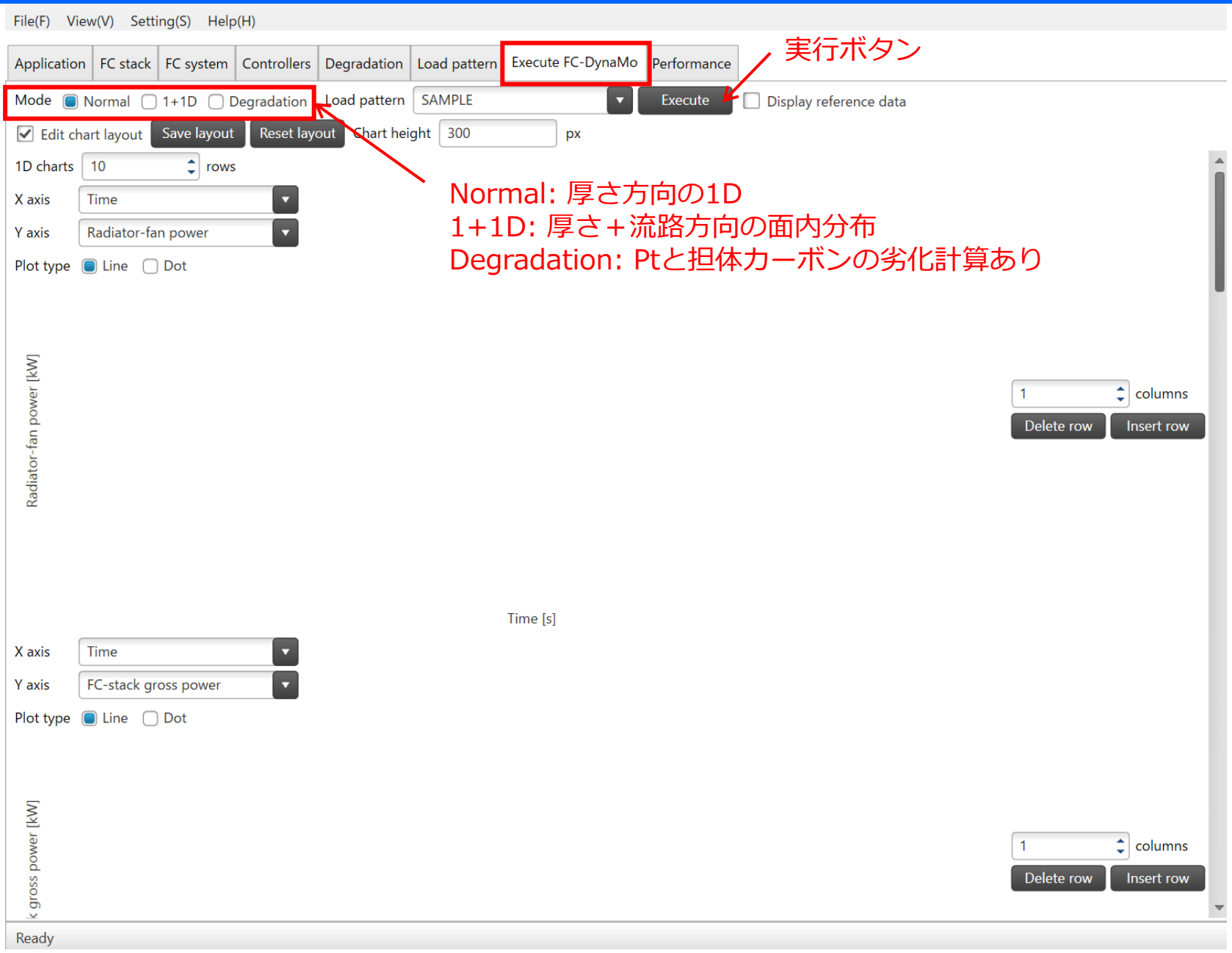
スタック

部材	設定できる主なパラメーター
GDL Anode/Cathode	厚さ、空隙率、屈曲係数、細孔径、電気抵抗
MPL Anode/Cathode	厚さ、空隙率、屈曲係数、細孔径、電気抵抗
CL Anode/Cathode	ECSA、酸素輸送抵抗(R_{O2})、アグロメレート係数、交換電流密度、ORR/HOR反応の反応次数、反応の活性化エネルギー等
PEM	膜厚、密度、EW、酸素透過係数、水素透過係数、窒素透過係数、水の透過係数、電気浸透係数、プロトン伝導度等
General	セル枚数

システム、制御器

	設定できる主なパラメーター
熱マネジメント	ラジエーターの断面積、ラジエーターの総括伝熱係数等
状態量制御器	冷媒の温度、水素のセル出口分圧、セル入口の全圧等の設定値
ユニット制御器	コンプレッサーやインジェクター、バルブなどを操作するための P-gain、I-gain

計算モードの選択


File(F) View(V) Setting(S) Help(H)
Application FC stack FC system Controllers Degradation Load pattern Execute FC-DynaMo Performance
実行ボタン
Mode Normal 1+1D Degradation
Load pattern SAMPLE
Execute
Display reference data
Edit chart layout
Save layout
Reset layout
Chart height 300 px
1D charts 10 rows
X axis Time
Y axis Radiator-fan power
Plot type Line Dot
Normal: 厚さ方向の1D
1+1D: 厚さ＋流路方向の面内分布
Degradation: Ptと担体カーボンの劣化計算あり
Radiator-fan power [kW]
1 columns
Delete row
Insert row
Time [s]
X axis Time
Y axis FC-stack gross power
Plot type Line Dot
k gross power [kW]
1 columns
Delete row
Insert row
Ready

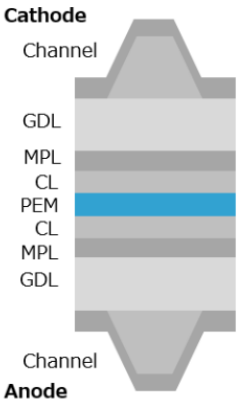
例題1　物性変更時の初期性能

Mode: Normal
Load pattern: SAMPLE4

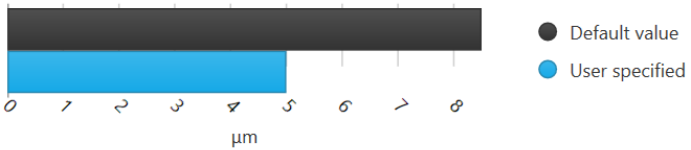
File(F)　View(V)　Setting(S)　Help(H)

Application | FC stack | FC system | Controllers | Degradation | Load pattern | Execute FC-DynaMo

- Cathode GDL
- Cathode MPL
- Cathode CL
- PEM
- Anode CL
- Anode MPL
- Anode GDL
- General



PEM thickness　Default　User specified　5　μm



Dry density of PEM　Default　User specified　1858　kg/m3

Equivalent weight of PEM (Polymer weight per mole of sulfonic ion)　Default　User specified　0.98　kg/mol-SO3-

O2 diffusivity through PEM

- Reference value　Default　User specified　2.267E-11　m2/s
- Humidity dependency factor　Default　User specified　7.757E-12　-
- Activation energy　Default　User specified　11000　J/mol
- Reference temperature　Default　User specified　80　˚C

H2 diffusivity through PEM

- Reference value　Default　User specified　5.106E-11　m2/s
- Humidity dependency factor　Default　User specified　2.065E-11　-
- Activation energy　Default　User specified　20000　J/mol
- Reference temperature　Default　User specified　80　˚C

例題1　物性変更時の初期性能

Mode: Normal
Load pattern: SAMPLE4



例題2　初期性能と耐久性

Mode: Degradation
Load pattern: SAMPLE



例題2　初期性能と耐久性

Mode: Degradation
Load pattern: SAMPLE

Application | FC stack | FC system | Controllers | Degradation | Load pattern | Pt particle diameter | Execute FC-DynaMo | Performance

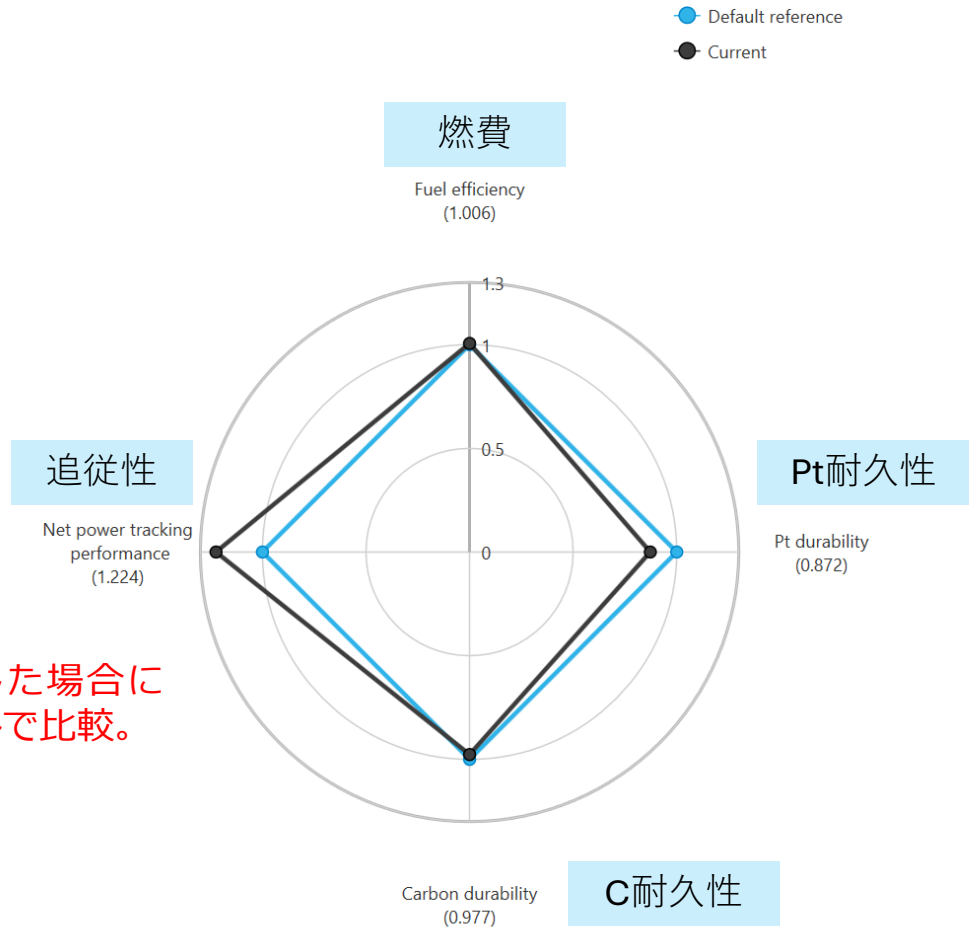
Application1かつDegradation mode選択時のみPerformanceタブが有効になる。

☐ Display reference data

Performance of first cycle

	Current	Default reference	
Hydrogen consumption	0.67495672	0.679047367	kg
ECSA loss	0.030167086	0.026313783	m2
Carbon loss	0.003087553	0.003015536	g
Average absolute error of net power	1.197304261	1.465533741	kW

Default referenceに記載されている数字は、白金の粒径分布がPt particle diameterにある初期分布で、物性等のパラメーターがデフォルト値での計算結果



負荷パターンを繰り返した場合にも1サイクル目の結果のみで比較。

例題3　面内の分布計算

Mode: 1+1D
Load pattern: SAMPLE3

