NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026
発表No.：a-07

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

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

団体名：(国)京都大学、(国)九州大学、(国)東京大学、(国)東京農工大学、(国)東北大学、(国)北海道大学
発表日：2026年7月22日

■事業の目的・目標

数値シミュレーションをAIで高速化し、最適化計算を実現、2035年NEDO目標に必要な材料と製造プロセスを提案する。

■2025年の主な成果

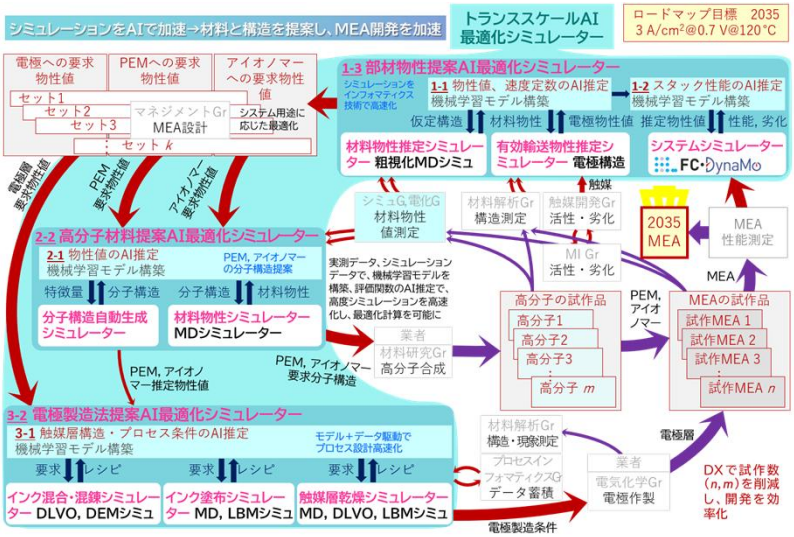
- 部材の各種輸送物性の測定。新規部材の作製。
- システムシミュレーションの高速化。
- 高分子構造から輸送特性等を評価できるシミュレーター構築
- インク調製条件から凝集サイズ分布を予測するサロゲートモデルの構築。非ニュートン流体のCFDモデル構築、塗布工程の数値シミュレーション。Pt/C凝集体の堆積と塗膜収縮の計算。

■課題と今後の取組

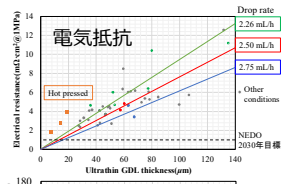
提案する高分子構造、電極の評価。

■実用化・事業化の見通し

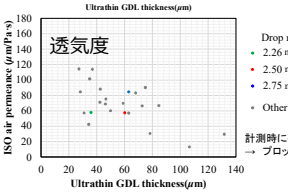
FCシステムシミュレーターFC-DynaMoは、無償配布する。
その他のシミュレーターについては依頼解析を受託する。



1-1(1) ナノファイバー極薄GDL創出と主要物性の評価解析



分散液滴下速度の上昇で、極薄GDLの面積抵抗が5 mΩ cm²から3 mΩ cm² @50 μmに低減した。繊維径の変化が寄与したと想定。

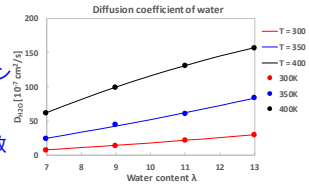


電気抵抗低減、透気度向上と共に強度改善が課題。

1-1(3)材料物性の分子動力学シミュレーションによる推定

材料物性の温度依存性・含水率依存性を推算し、4項目について定式化(青字)した。

【 PEMの物性】
- Ceイオン拡散係数
- Ceイオン対流イオン輸送係数
- 酸素パーミアンス
- 収着水有効拡散係数



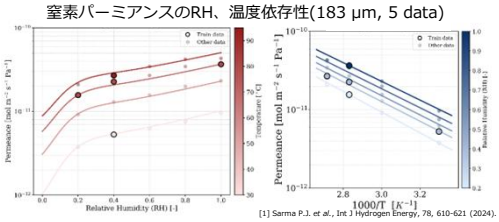
収着水の拡散係数の含水率依存性

【触媒層の物性】
- アイオノマー被覆での酸素パーミアンス
- 収着水有効拡散係数

1-1(5)材料物性値、速度定数を推定する機械学習モデル構築

既知の水素パーミアンスを対象に機械学習モデルを構築し、水素以外のガスパーミアンス、劣化膜や他の高分子膜でのパーミアンスを予測する。
転移学習で窒素と酸素のパーミアンスを導いた。
5点の文献データ[1]で精度高く予測できた。

窒素パーミアンスのRH、温度依存性(183 μm, 5 data)



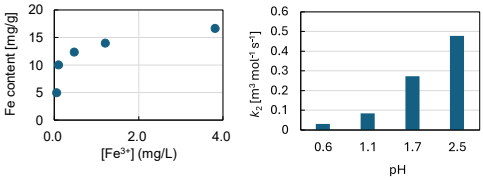
[1] Sarma P.J. et al., Int J Hydrogen Energy, 78, 610-621 (2024).

1-2(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

平衡状態で、膜内の鉄イオンは溶液中の3倍以上の濃度に濃縮されていることがわかった。

$Fe^{3+} + H_2O_2 \rightarrow Fe^{2+} + H^+ + HO_2^{\bullet}$

過酸化水素による鉄イオン（Fe^{3+}）の還元速度定数とpHの関係がわかった。

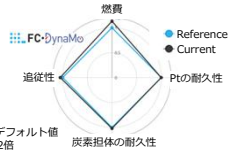


1-2(4)数値シミュレーションによるスタック性能を推定する機械学習モデル構築

1) 異なる物性と速度定数で多量の短時間シミュレーションデータと少量の長時間時間シミュレーションデータを生成した。（効率的な学習データの生成）
2) 1) のデータを線形補完し、機械学習モデルを構築した。

将来的には、未知の物性と速度定数の短時間シミュレーションデータから長時間経過後のMEAとシステム性能を推定する。

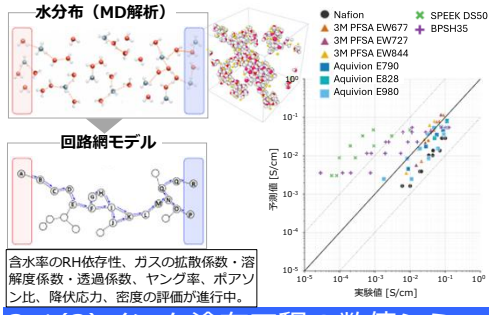
Ptおよび炭素担体の劣化モデルを搭載したGUI版FC-DynaMoを開発した。



Reference: FC-DynaMoデフォルト値
Current: プロトン伝導度2倍

2-1(2)高分子材料物性を推定する機械学習モデル構築

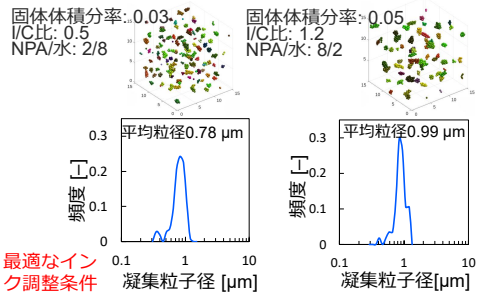
高スループットMD解析（化学反応を取り扱わない古典力場を使用）により求めた高分子膜内の水分布からプロトン伝導度を予測する手法を開発した。



含水率のRH依存性、ガスの拡散係数・溶解度係数・透過係数、ヤング率、ポアソン比、降伏応力、密度の評価が進行中。

3-1(1)触媒インクのモデリング

電気二重層斥力、vdW力、アイオノマー効果をモデル化し、凝集粒径分布、吸着・浮遊アイオノマー量を計算した。

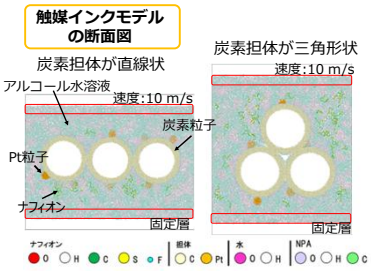


最適なインク調整条件が計算可能

各溶媒条件における凝集粒子径分布

3-1(2)プロセス内界面特性予測シミュレーション

高活性な触媒層の製造に適した触媒インク組成を設計し、炭素担体構造が粘性に与える影響をMDで計算した。

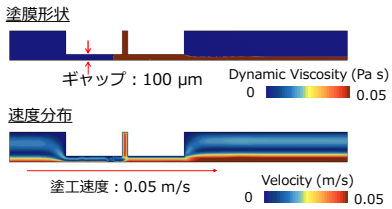


粘性係数
直線状：0.43 Pa・s
三角形状：7.92 Pa・s

担体形状で粘性が変化することを示唆

3-1(3)インク塗布工程の数値シミュレーション

非ニュートン性を考慮した触媒インク塗工過程のシミュレーションを実施し、生産速度3 m/minにおける速度分布や塗膜安定性を計算した。
NEDOロードマップ目標である25 m/minの条件では、固気液界面の安定的な計算が課題。



京都大学　河瀬　元明
連絡先：kawase@cheme.kyoto-u.ac.jp