

NEDOエネルギー・地球環境分野成果報告会2026

プログラムNo. 603-2-05

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

発表：2026年7月22日

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

発表者名 河瀬 元明

(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

問い合わせ先 (国)京都大学 E-mail:kawase@cheme.kyoto-u.ac.jp

事業概要

1. 期間

開始 : 2025年5月
終了（予定） : 2030年3月

2. 最終目標

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。

3. 成果・進捗概要

実施項目1群 部材物性提案AI最適化シミュレーター
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。

実施項目2群 高分子材料提案AI最適化シミュレーター
構造から物質輸送特性や力学特性を半自動で評価できるシミュレーターの構築。

実施項目3群 電極製造法提案AI最適化シミュレーター
（調製）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。
（塗布）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。
（乾燥）Pt/C凝集体の堆積と塗膜収縮の計算。

1. 事業の位置付け・必要性

本事業を実施する背景や目的

2035年HDV向けFCに求められるBOL、EOLでの高いI-V特性を達成するための材料物性を満たしつつ、セル、スタック、システムでも性能目標を達成する必要がある。

これまでに我々は、発電性能を予測するマルチスケールシミュレーターなど4つのシミュレーターを開発した。しかし計算負荷が高く、多くの条件での性能予測や5万時間運転後のEOL評価には課題がある。AIによってシミュレーターの高速化を図り、各スケールのシミュレーターを統一的に実行するトランススケールシミュレーターの開発を目的とする。

本事業の位置づけや意義、必要性

材料や電極への要求値を提案するために、材料の物性値、高分子構造、電極構造、システム性能を推定する機械学習モデルを構築し、シミュレーターの高速化を図ることが必要である。本事業では、開発された材料や試作MEAに対してシステム性能の評価を行い、MEA機能設計への提案につなげる。

2. 研究開発マネジメントについて

研究開発の目標と目標設定の考え方

部材特性や材料物性を予測し、2035年NEDOロードマップ目標を達成するMEAへの要求物性値、高分子構造、MEA製造プロセスの指針を提案する。また、計算速度を10倍化し、現実的な時間でMEA性能およびシステム性能の劣化予測を可能とする。

研究開発のスケジュール

2027年9月：一般的に使用されている材料（PFSAのPEM・アイオノマー、カーボンペーパーGDL等）の延長線上での探索、最適化を行い、2035年目標の8割のI-V特性が期待できるMEAの設計諸元を提案する。

2030年3月：NEDO目標を満たすMEAで採用が予想される材料（炭化水素のPEM・アイオノマー、ナノファイバー極薄GDL等を想定、新規材料に対応）で最適化を行い、2035年目標のI-V特性が期待できるMEAの設計諸元を提案する。

研究開発の実施体制

京都大学、九州大学、東京大学、東京農工大学、東北大学、北海道大学

進捗管理

1～2ヶ月に1回技術検討会を開催する。外部有識者の助言を得る。

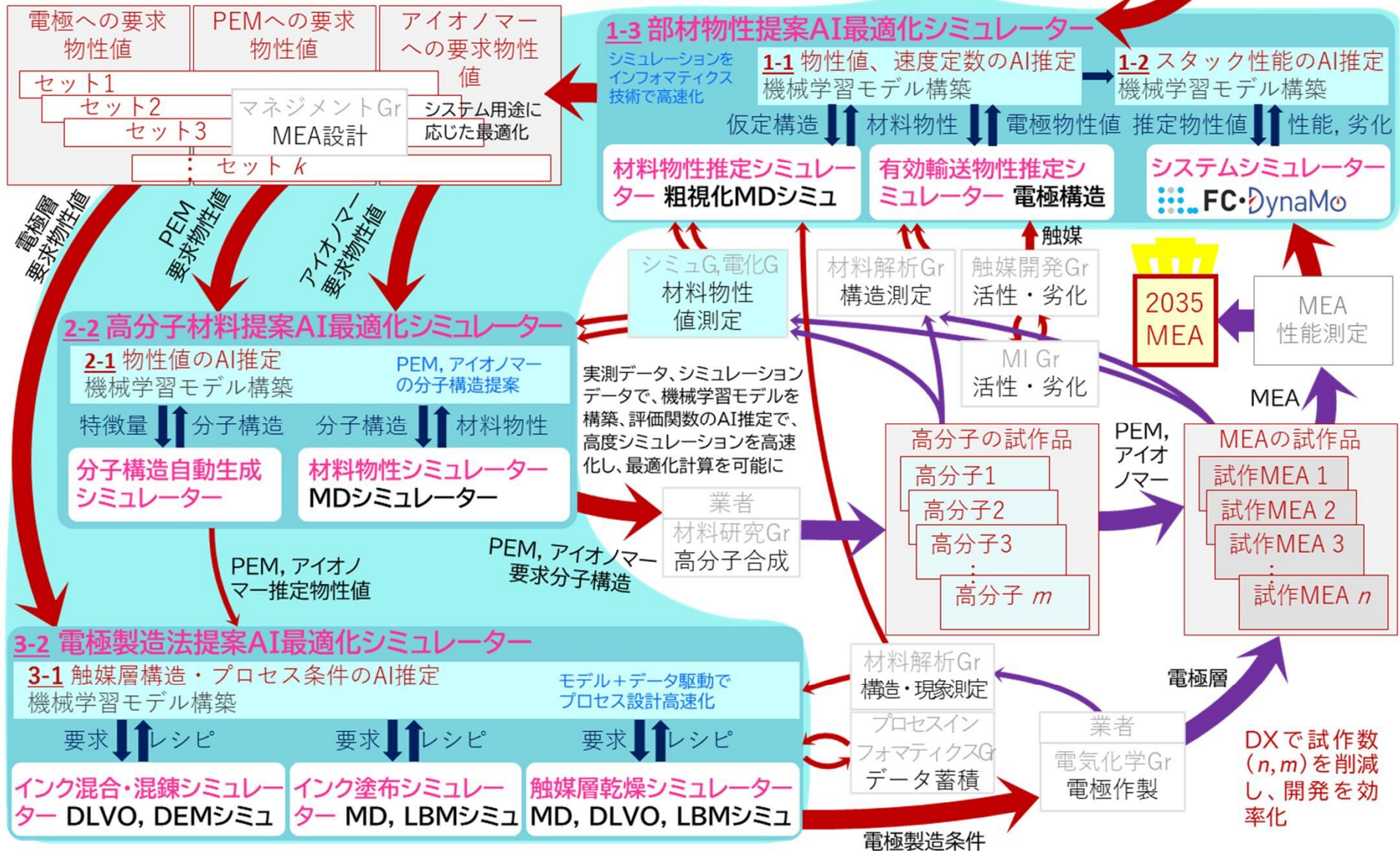
2. 研究開発マネジメントについて

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

トランススケールAI
最適化シミュレーター

ロードマップ目標 2035
3 A/cm²@0.7 V@120°C



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。

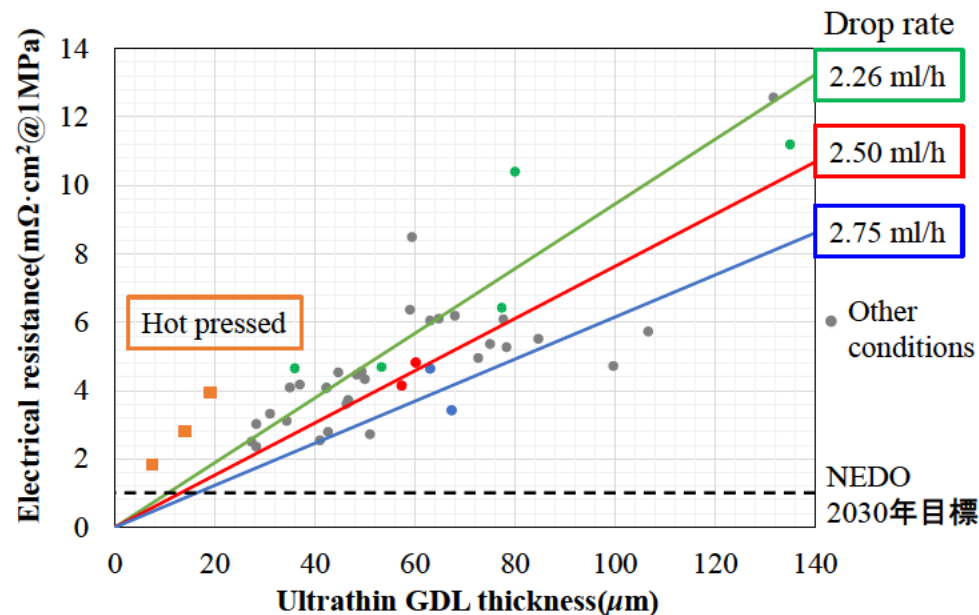
3. 研究開発成果について

実施項目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) ナノファイバー極薄GDL創出と主要物性の評価解析

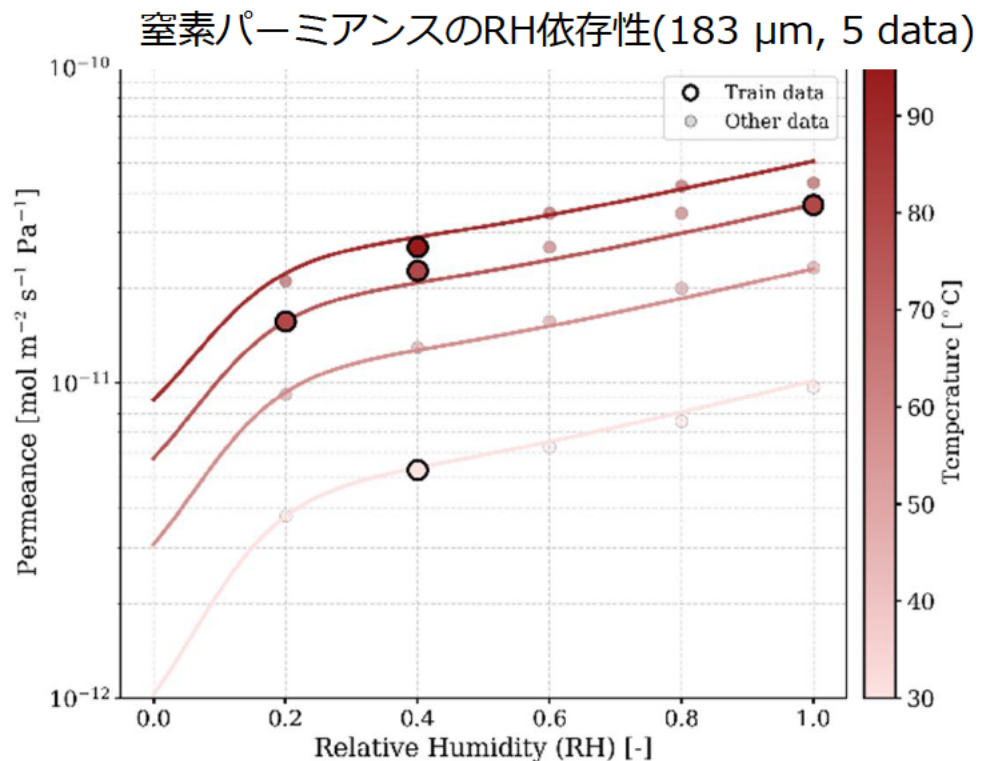
ナノファイバーシート紡糸工程におけるパラメータの影響を計算した。

- 分散液滴下速度を上昇することで、面積抵抗を5 mΩ cm²から3 mΩ cm²@50μmに低減できた。
- 繊維径の変化が面積抵抗低減に寄与すると想定される。メカニズムの解明を進める。



(2) 新規材料と劣化材料の有効輸送物性のモデリング, (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、水素以外のガスや劣化膜・他の高分子膜でのパーミアンスを予測する。窒素の文献データ^[1]5点で予測できた。



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

3. 研究開発成果について

実施項目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

(3)材料物性の分子動力学シミュレーションによる推定

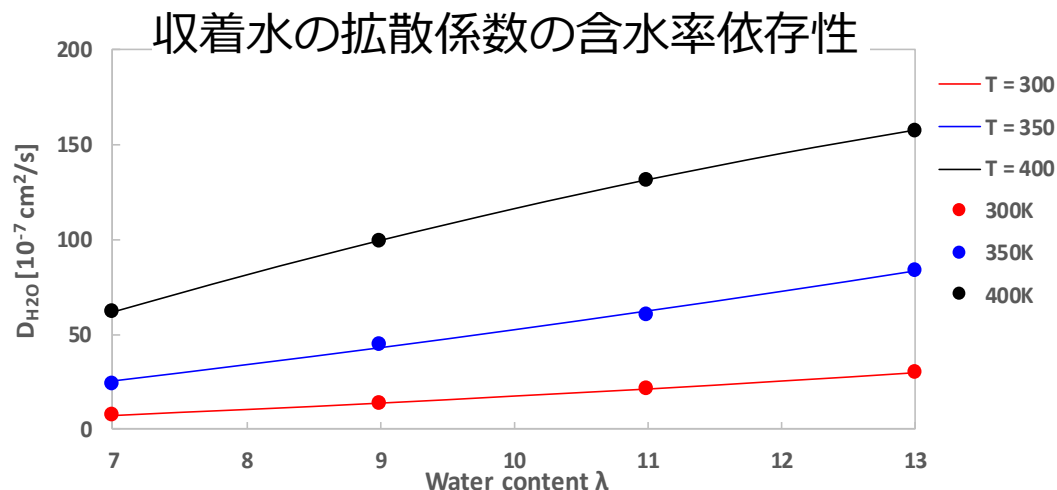
以下の物性をMDにより推定し、4項目について定式化(青字)した。

▶PEMの物性

- ・セリウムイオン拡散係数
- ・セリウム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

▶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

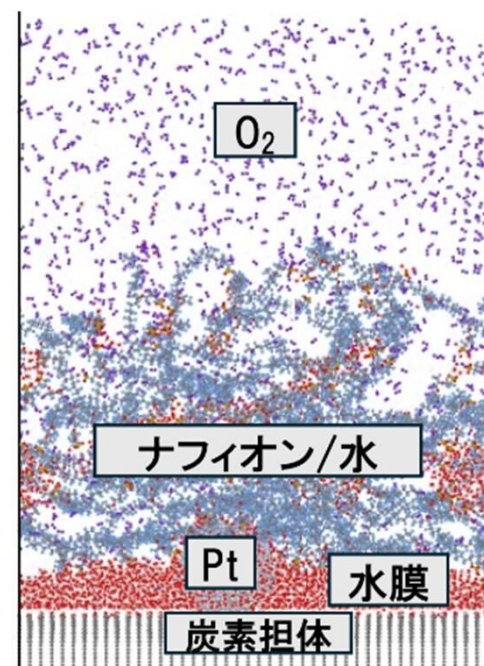


(4)全原子分子動力学法に基づく触媒反応の数値シミュレーション

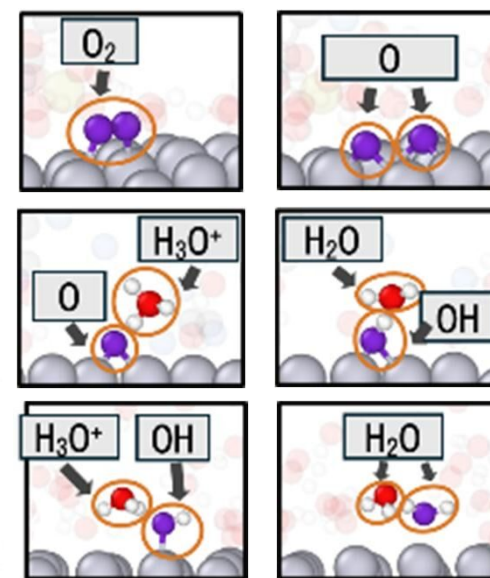
機械学習ポテンシャルを用いたAI駆動型分子動力学シミュレータを開発した。

200原子モデルでのORRの第一原理MD計算結果を学習し、同精度で**3万原子の触媒層モデル**を用いたORRシミュレーションを実現。

3万原子の触媒層モデル



ナフィオン層を通ったO₂のPt上のORR素過程



○ H ● C ● F ● S ● Pt ● O ● O (O₂分子)

3. 研究開発成果について

実施項目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

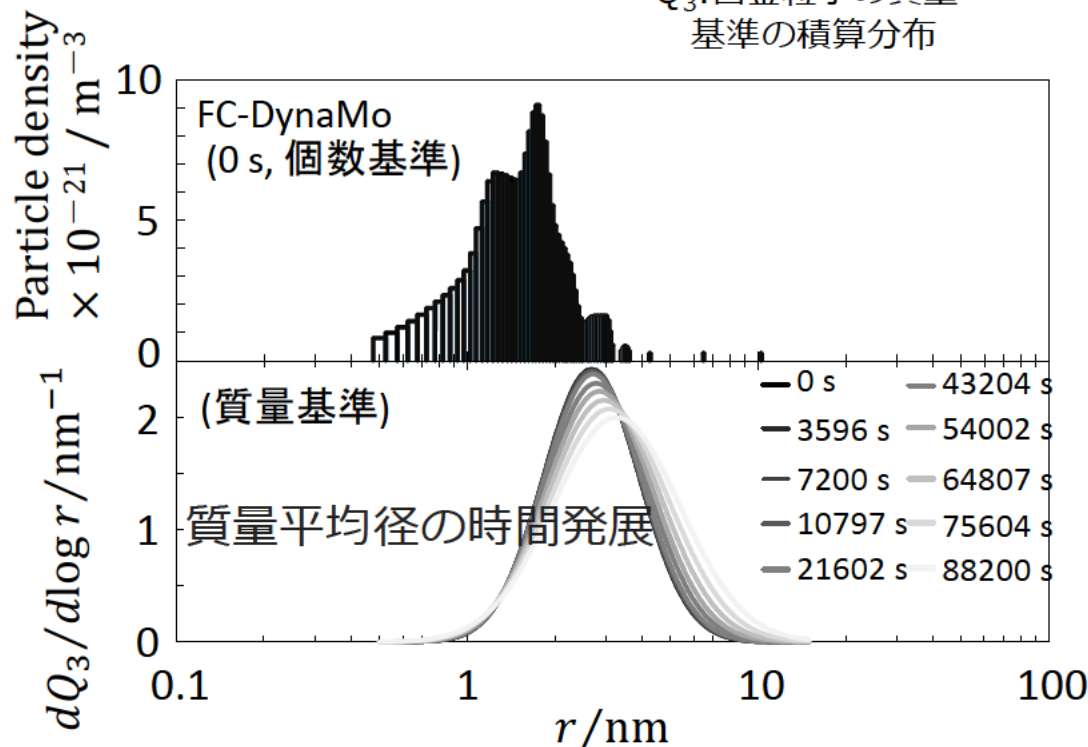
(2) 触媒白金粒子粗粒化のモデリング

白金粒子の粒径分布を分布関数で表し、関数の変化で白金の粒径変化を表した。

Population balance equation (粒子個数の保存)

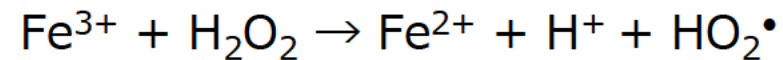
$$\frac{\partial f_0(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{dr}{dt} f_0(r, t) \right] = 0$$

f_0 : 白金粒子半径 r の
個数基準の分布関数
 Q_3 : 白金粒子の質量
基準の積算分布

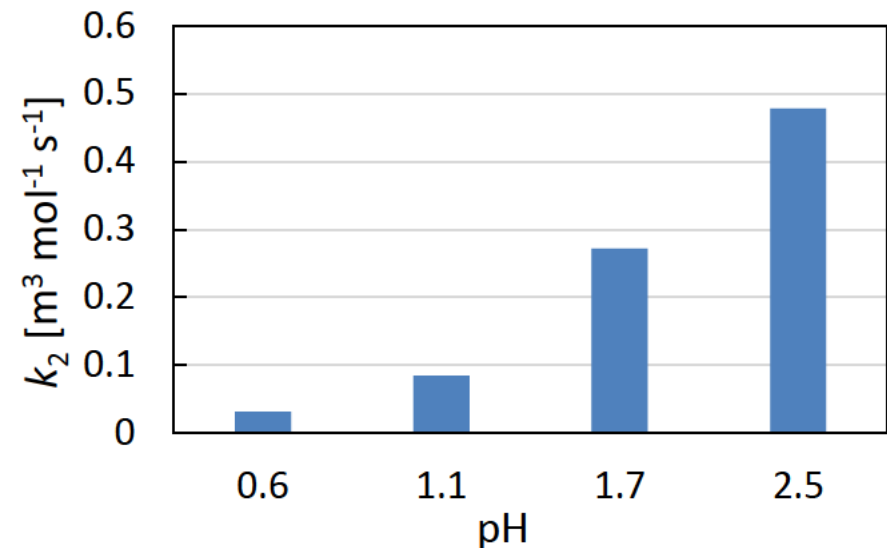


(3) PEM内OHラジカル濃度の高精度推定とPEMの化学劣化シミュレーション

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。



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。



3. 研究開発成果について

実施項目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

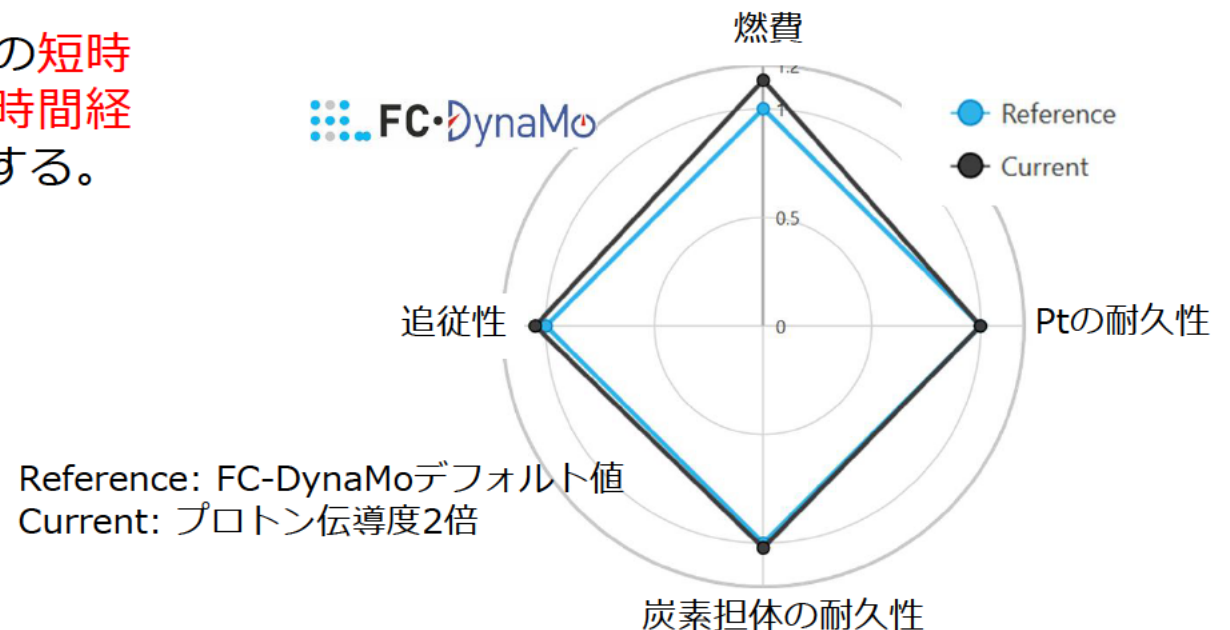
(4) 数値シミュレーションによるスタック性能を推定する機械学習モデル構築

- 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**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)のデータを線形補間し、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。

新たに負荷パターンを選択可能とし、劣化計算後の**ECSA維持率**、**カーボン維持率**を出力可能とした。また、レーダーチャートを導入し、視覚的に燃費や追従性等の**性能比較**ができるようにした。



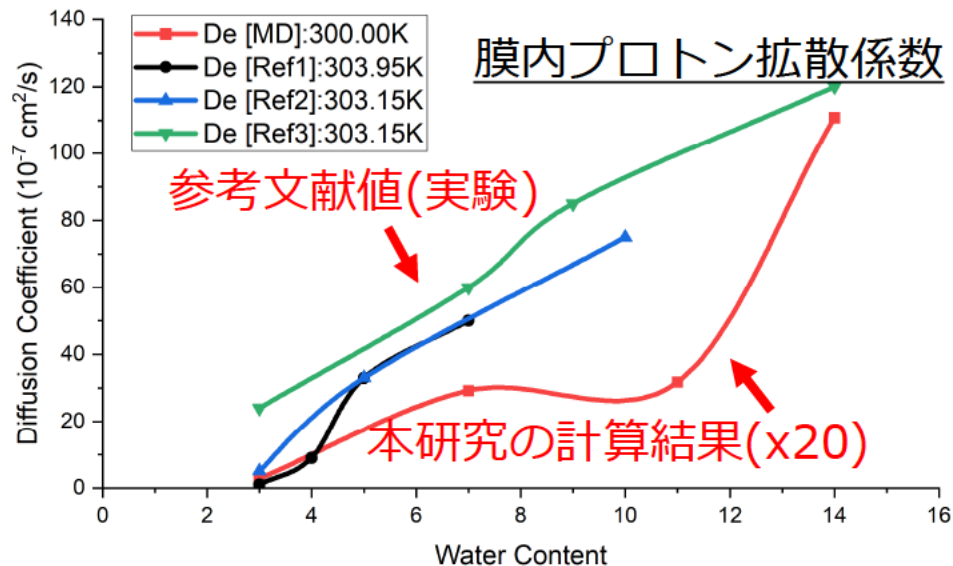
3. 研究開発成果について

実施項目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

(1) 高分子電解質膜内部の物質輸送特性の推定

DREIDING力場で高分子膜内の水と酸素の分子拡散係数を、ReaxFF反応力場で高分子膜内のプロトン拡散係数をMD計算で求めた。

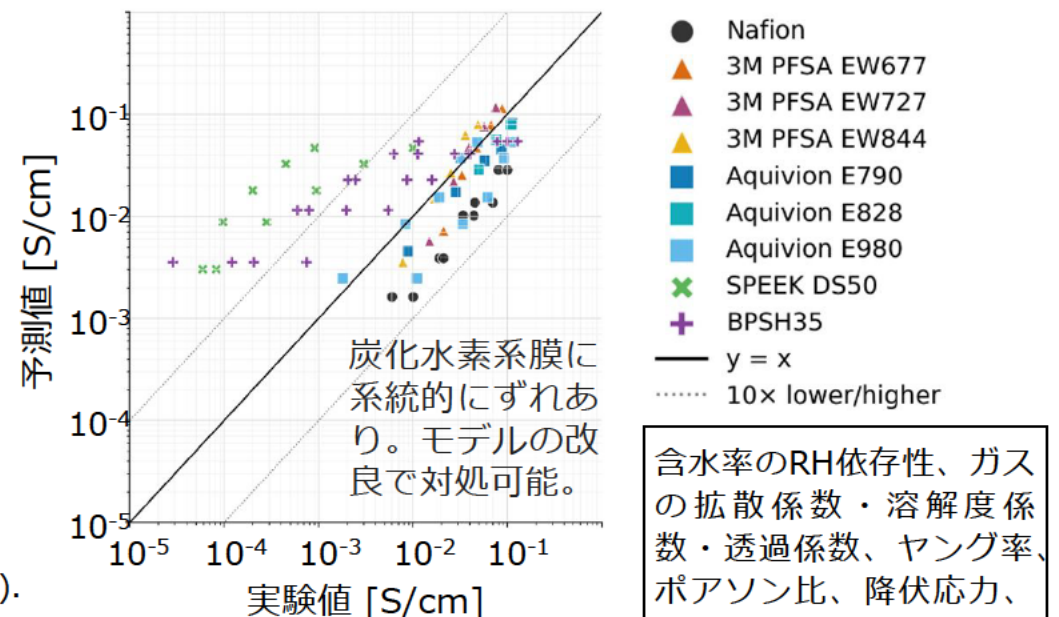
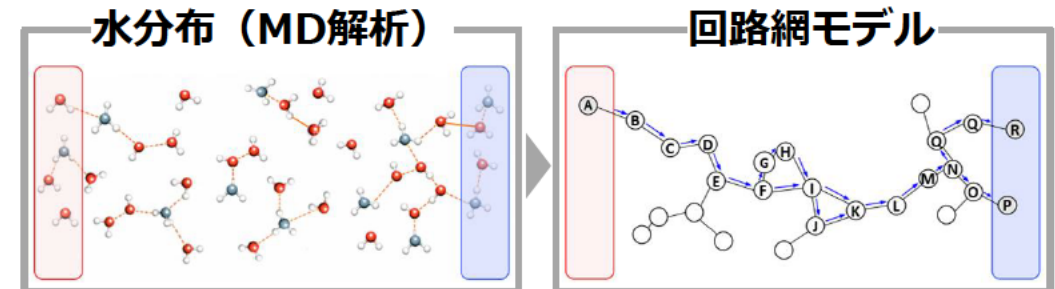
プロトン拡散係数の計算値は実験値を約1/20程度過小評価しており、今後ポテンシャルパラメーターを修正する。



- [1] S. Ochi et.al., *Solid State Ion.*, 180, 580-584 (2009).
[2] K.D Kreuer et.al., *Solid State Ion.*, 97, 1-15 (1997).
[3] T. A. Zawodzinski et.al., *Electrochim. Acta*, 40, 297-302 (1995).

(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）で求めた高分子膜内の水分分布からプロトン伝導度を予測する手法を開発。

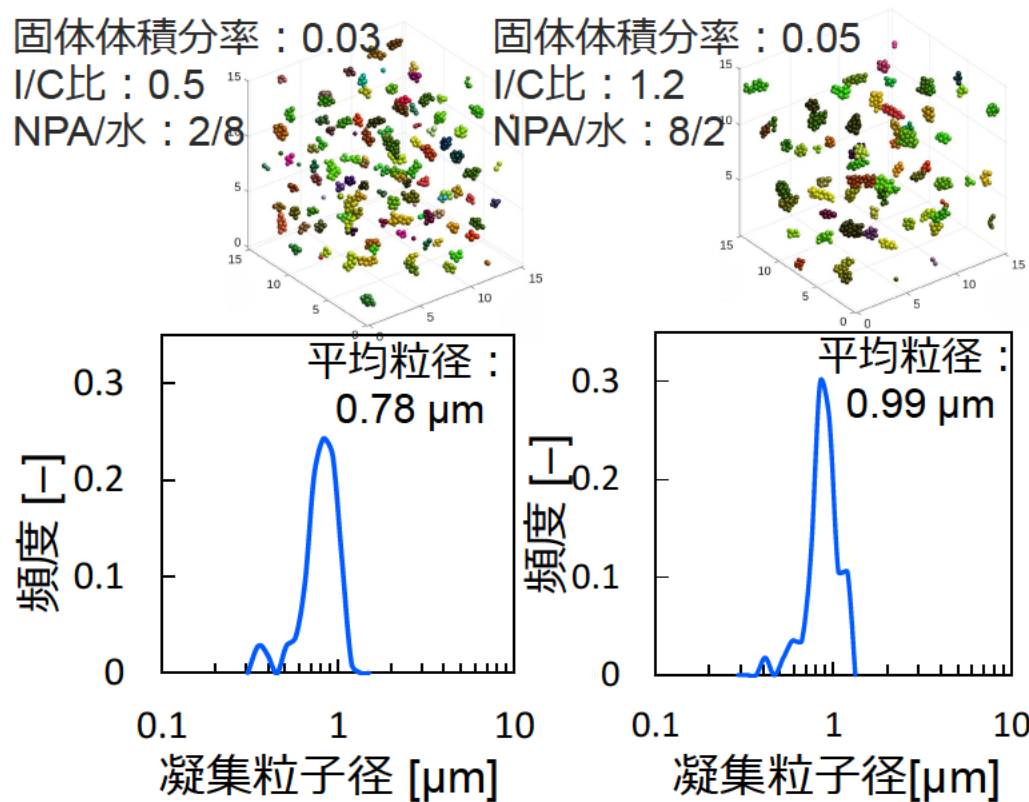


3. 研究開発成果について

実施項目3-1 製造法から電極構造、性能を推定する機械学習モデル構築

(1) 触媒インクのマデリング

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、アイオノマー吸着状態を計算して最適なインク調製条件を取得した。



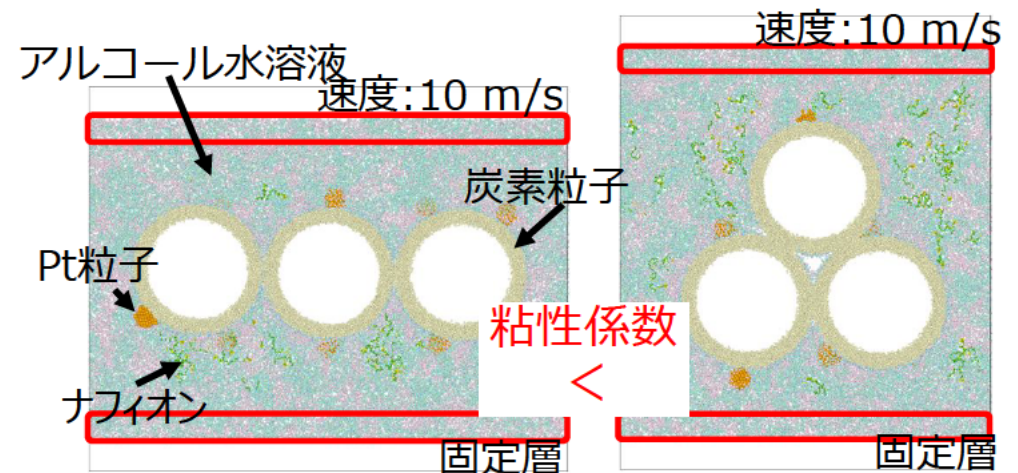
各溶媒条件における凝集粒子径分布

(2) プロセス内界面特性予測シミュレーション

【MD解析】

担持炭素の隙間にアイオノマーが侵入できなくなる限界値があり、同じ隙間でもアイオノマー濃度で侵入する量が変わることが示唆された。

炭素担体構造が異なる、三角形状と直線状の炭素担体を有する触媒インクのずりシミュレーションを実施。粘性係数はそれぞれ7.92 Pa s、0.43 Pa sと得られた。



3. 研究開発成果について

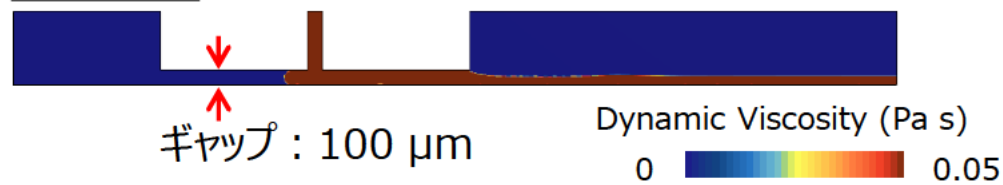
実施項目3-1 製造法から電極構造、性能を推定する機械学習モデル構築

(3) インク塗布工程の数値シミュレーション

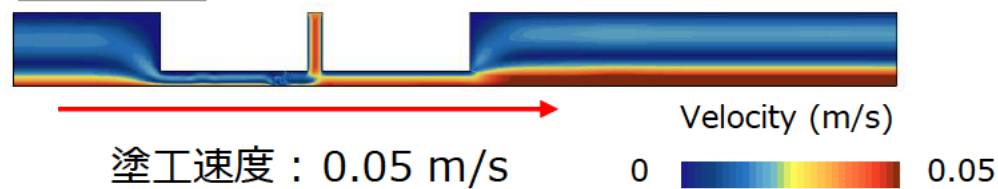
非ニュートン性を考慮した触媒インク塗工過程のシミュレーションを実施し、生産速度3 m/minでの速度分布と塗膜安定性を調査した。

NEDOロードマップ目標の25 m/minの条件については、固気液界面を安定的に計算する必要があり、モデルのさらなる調整を進める。

塗膜形状



速度分布



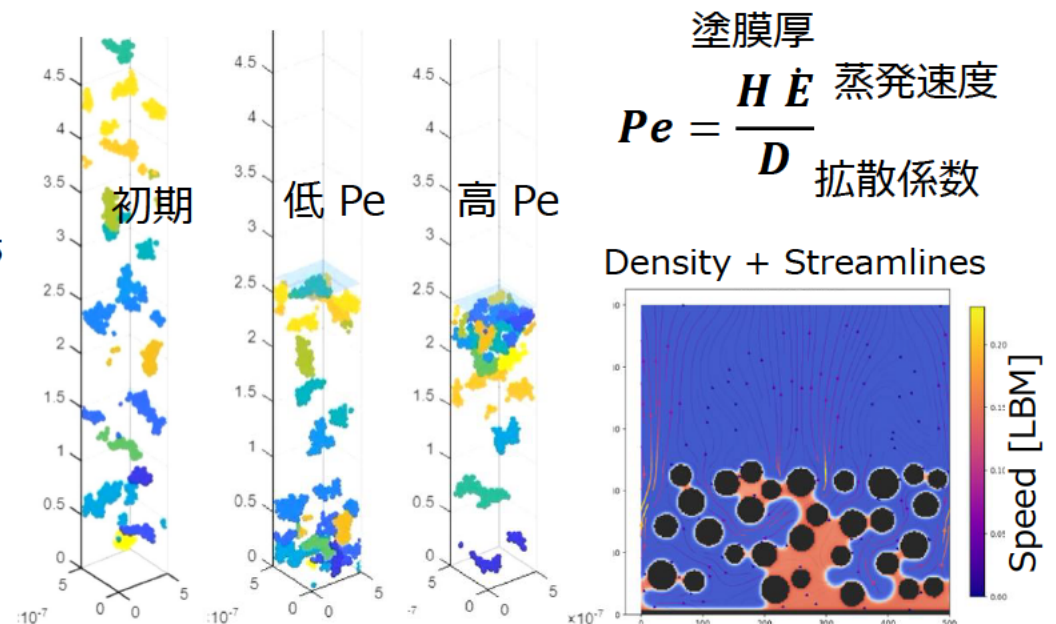
表面張力 : 10 mN/m
接触角 : 90°

降伏応力 : 2.0 Pa
降伏時の粘度 : 10.0 Pa s
べき指数 : 0.45
粘性の上限 : 10.0 Pa s
粘性の下限 : 0.01 Pa s

(4) 塗膜乾燥工程の数値シミュレーション

塗膜厚さが減少し、Pt/C粒子の骨格形成が進行する過程(Stage 1) と、微細部の溶媒が蒸発しアイオノマー分布が形成される過程(Stage 2)に分けてモデル化した。

DEM法、LBM法、ネットワークモデルを連成させたモデルを開発した。



(左)Stage 1, 触媒層構造への蒸発Pe数の影響

(右)Stage 2, 毛管力を含む二相流計算

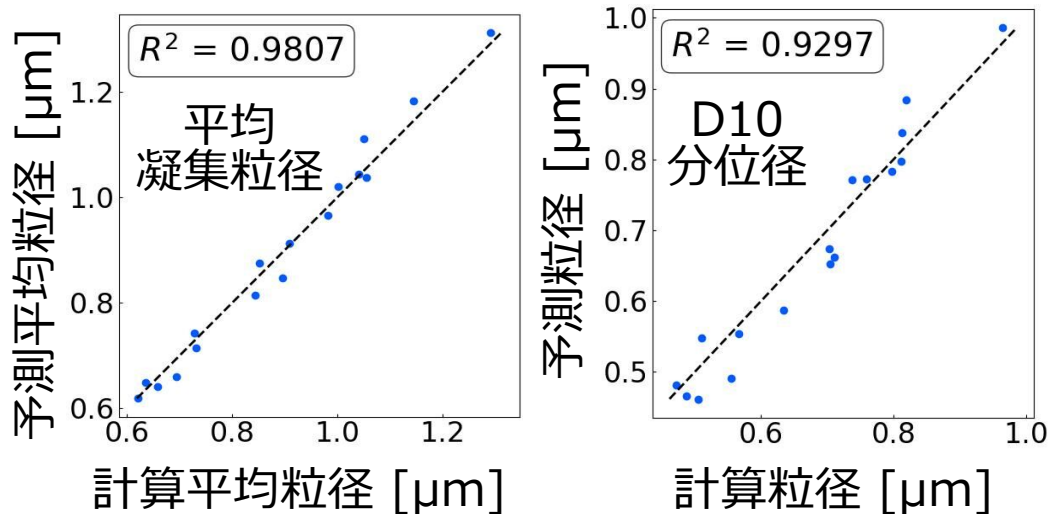
3. 研究開発成果について

実施項目3-1 製造法から電極構造、性能を推定する機械学習モデル構築

(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, (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

凝集計算を用いた機械学習モデルを開発した。

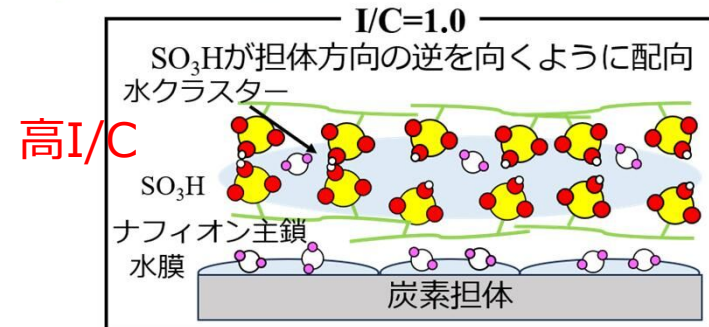
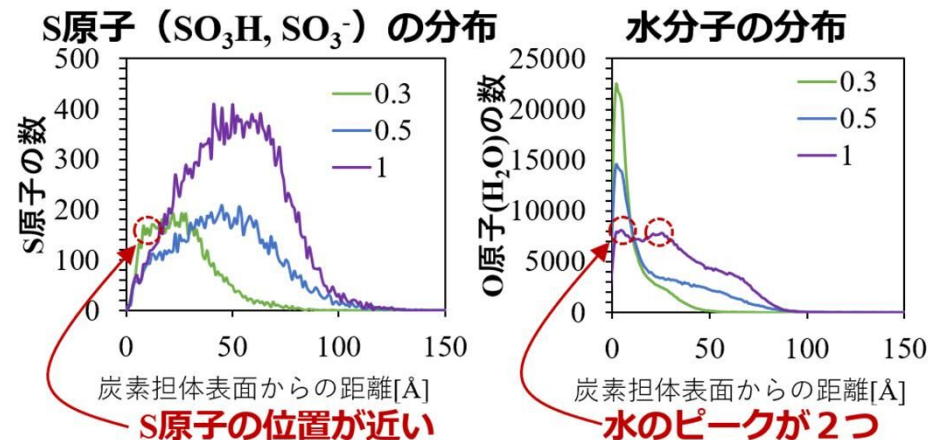
- 溶媒条件、材料比率、固形分濃度を入力し、凝集粒径、吸着アイオノマー量を推定。
- 平均粒径と分位径で R^2 値0.9以上を達成。
- 塗工はせん断場を考慮し、モデル化。



凝集粒子径分布の高速予測
SVR法を用いたサロゲートモデル

(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ターの開発

大規模触媒層モデルの反応MDで、**低I/C**では多くの**スルホ基が炭素表面側**に配向し、**高I/C**では多くのスルホ基がNafion層内で**水クラスターを挟む**形で配向することが明らかになった。



4. 今後の見通しについて

実用化・事業化のイメージ

FCシステムシミュレーターFC-DynaMoを改良してより**高速計算可能**とし、目標性能の実現を期待できる**要求物性値を提案**するAIシミュレーターに組み込む。また、製品**ライフサイクルシミュレーション**(含.劣化)を可能とする。

材料の要求物性を満たす**電極製造法や高分子化学構造を提案**する。

実用化・事業化に対する今後の課題と対応方針

提案する高分子構造、電極の評価。

実用化・事業化に向けた具体的な取り組み

FC-DynaMoは、前事業と同様に国内の事業者および研究者に無償で配布する。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。

顕著な経済・技術・社会的な効果

FC-DynaMoの利用希望は増加している。現在、GUI版のユーザー数は187、ソースコード版のユーザー数は30である。