平成 29 年度

九州大学情報基盤研究開発センター

民間利用成果報告書

提出日：平成 30 年 1 月 29 日

利用課題名		燃料電池開発のための、高精度な物質輸送解析シミュレータの開発、及び物質輸送シミュレーション				
課題責任者	企業名	パナソニック株式会社				
	フリガナ 氏名	フジタ ユウスケ 藤田 悠介	部署名	テクノロジーイノベーション本部 資源・エネルギー研究所 クリーンエネルギー研究部 水素燃料電池研究課	職位	社員
	連絡先	住 所：〒570-8501 大阪府守口市八雲中町3丁目1番1号 E-mail：fujita.yusuke003@jp.panasonic.com		TEL 050-3587-1662 FAX 06-6906-4595		
利用期間		平成 29 年 5 月 9 日 ～ 平成 29 年 9 月 30 日				
利用成果公開延期希望の有無		■ 即時公開 ・ □ 公開延期（成果公開予定： 平成 年 月）				

※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大2年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受付番号	10	受付日 平成30年 6月 19日	受付印	

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1） 利用目的

パナソニックでは、家庭用燃料電池コージェネレーションシステム（商品名：エネファーム）の開発を行っている。エネファームは、都市ガスから取り出した水素と空気中の酸素を電気化学的に反応させ、電気と熱を作る新しいエネルギーシステムであり、低出力でも発電効率が高いという優れた特徴があり、家庭における省エネ・CO2 削減の切り札として期待されている。しかしながらエネファームの本格普及には、高効率化と低コスト化が大きな課題となっており、さらなる技術革新が必要とされている。これらの課題をシミュレーションで効率的に解決することで、定置用燃料電池の活用を大きく広げ、わが国が世界に先行する水素・燃料電池分野の世界市場を獲得し、日本の優位性を確立する。

2） 利用意義

我々は、家庭用燃料電池コージェネレーションシステムの中でも直材費の大部分を占めるスタック・MEA (Membrane Electrode Assembly) のコストの低減と商品性の向上を目指し、電気化学反応シミュレーションや構造解析などのシミュレーション技術の開発を行っている。例えば、電気化学反応シミュレーションにおいては、燃料電池の各部材のミクロンスケールの微細構造に基づく固有の構成則をメソスケールのシミュレーションにより決定することにより、電池特性の予測精度を大幅に向上させてきた。しかしその反面、計算時間が非常に長くなってきており、実際の設計に適用するという点において、課題となっている。

3） 必要性

上記のように計算時間という課題に対し、我々のプロジェクト室では大規模な計算を実行するマシン環境を所有しておらず、そのため、大きな演算能力を有する貴学の計算機システムの使用を希望する次第である。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

触媒層中の物質輸送メカニズム解明のため、分子動力学法を用いて、燃料電池触媒層の構成要素である高分子電解質（アイオノマー）内、及びアイオノマー付近の領域における物質輸送性を解析した。具体的には、水分子・ヒドロニウムイオン・アイオノマー分子で構成されるアイオノマー領域と水分子で構成される水領域を接触させ、アイオノマー領域に存在するヒドロニウムイオンが水領域へ輸送される時系列変化を確認した。

また、ヒドロニウムイオンに対し外力を印加しその物質輸送性に関する検討を実施。ヒドロニウムイオンのその挙動から、液水だけの領域においてもプロトン伝導性の発現を確認し、燃料電池の発電性能予測に必要な各種の過電圧特性を計算し、実験との整合を確認するに至った。

このうち、水の構造パラメータが異なる系の発電性能予測において、FX10 を利用することで当社の従来サーバーを使用した場合と比較して工期を約 1/3 に短縮することができた。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

触媒層中の物質輸送メカニズムを解明することができれば、メカニズムを解明することができれば、物質輸送性の高い理想的な触媒層構造を提案することができ、燃料電池の発電性能向上およびコスト低減への貢献が可能である。

3） その他

特に無し

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

・高性能なスーパーコンピューターを非常に安価に使用させていただけた点

2) 利用に関して生じた問題点など

特に無し

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

特に無し

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

特に無し

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします

特に無し