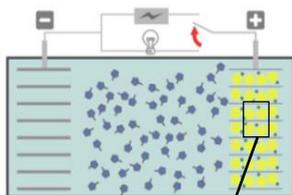


想定されるポスト京の成果（重点課題⑤エネルギー）

京以前（過去）

リチウムイオン電池について、従来のスパコンでの典型的な電子状態計算サイズは、電池の中の正極や負極の固体電極材料で100原子程度。電解液は勿論、電極電解液界面における化学反応を予測することはできず、高性能と高安全を両立する材料設計はほぼ不可能。

リチウムイオン電池



電子状態
計算領域

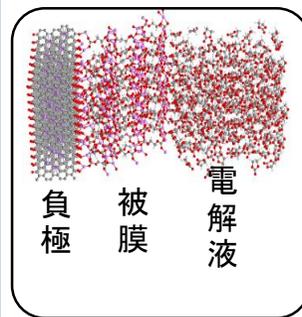


熱暴走

©NTSB

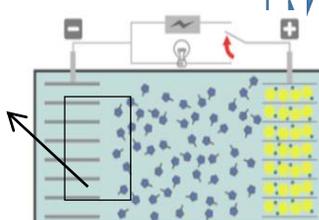
京時代（現在）

「京」では負極と電解液等の材料界面を含む1000原子レベルの電子状態計算が可能。界面に電位を加えた計算手法も開発。結果、化学反応を予測する高精度計算が可能となり、安全や性能にかかわる電極上被膜の添加剤効果など長年の謎を解明。材料探索も実施中。

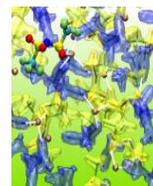


負極
被膜
電解液

電子状態
計算領域

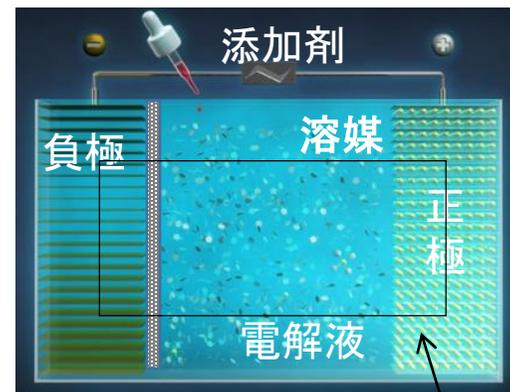


高性能電解液開発



ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では正極・電解液から負極まで複数界面を取り込んだ領域の数十万原子レベルの計算にトライ。実験と連携してインフォーマティクス手法を取り込み、新型電池材料の開発期間を短縮。高性能と高安全を両立する電池材料特許の先行取得をもくろむ。



添加剤

負極

溶媒

正極

電解液

電子状態
計算領域

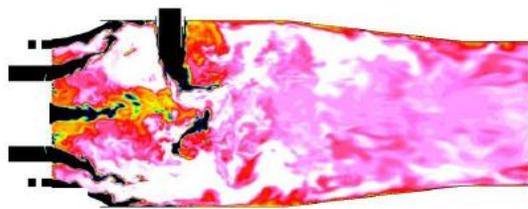


新しい高性能・高安全性電池材料設計
→電気自動車、スマートグリッドなどの革新

想定されるポスト京の成果（重点課題⑥クリーンエネルギー）

京以前（過去）

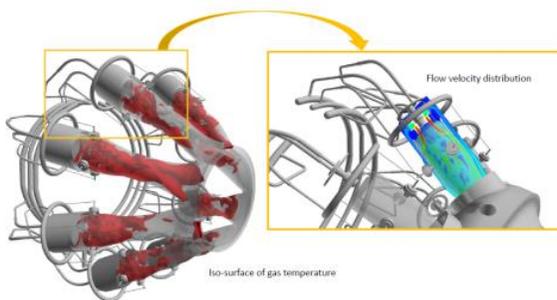
実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析は行われていたが、対象は大気圧(0.1MPa)条件下の単缶もしくは燃焼器の一部に限られていた。



単缶型ガスタービン燃焼器のLES
(提供 京大)

京時代（現在）

3.0MPa程度までの亜臨界状態における実圧の実機燃焼器内のガス、噴霧、微粉炭燃焼のLES解析が可能となった。

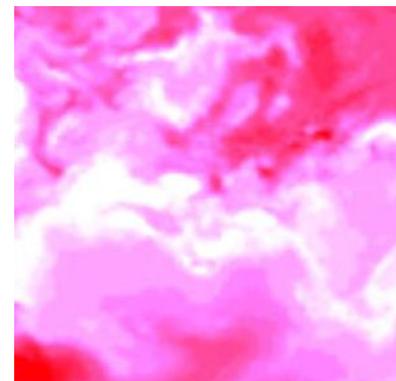


8缶型ガスタービン燃焼器のLES
(提供 京大、川崎重工)

ポスト京時代（将来）

30MPa程度までの超臨界状態における実圧の実機燃焼器内の燃焼LES解析が可能となる。これにより、あらゆる条件下における燃焼挙動の把握、燃焼器の設計、および最適操作条件の選定を支援し、クリーンエネルギーシステムの実用化に貢献する。

←→ 数十 μm



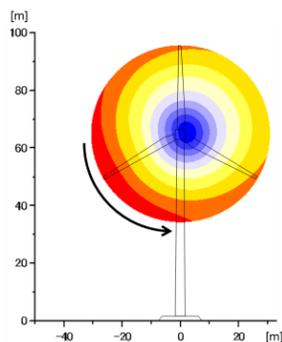
乱流燃焼のイメージ(ガス温度)：圧力の上昇に伴い乱流の最小スケールが小さくなる
(提供 京大)

想定されるポスト京の成果（重点課題⑥クリーンエネルギー）

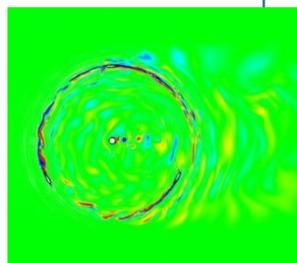
「高効率風力発電システム構築のための大規模数値解析」が拓く次世代風力発電システム

京以前（過去）

風車の設計には実験・観測データに基づく経験則が利用されており、数値解析は補助的な役割として利用されていた。風車単体の定常解析が中心であり、風況や地形の影響を考慮した数値解析は限られた条件のみで実施されており、実験の代替には至らなかった。



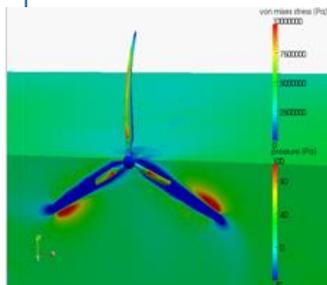
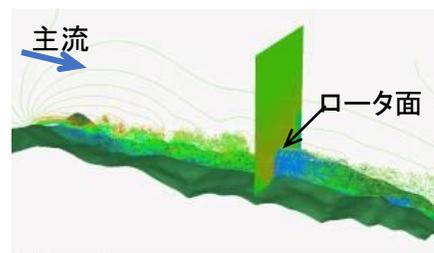
FAST
(実験データベース)に
基づく風車騒音予測



風車単体解析

京時代（現在）

風車単体の大規模な非定常解析が可能となり、さらに空力・構造連成解析による風車の構造解析も可能となった。風車の後流の影響や地形の影響を考慮した非定常解析が可能となった。しかし、ウインドファームのような風車群の流れ解析最適設計のための解析は実現できていない。



複雑地形上に
設置された
風車後流の可視化

流体・構造連成解析
(風車単体)

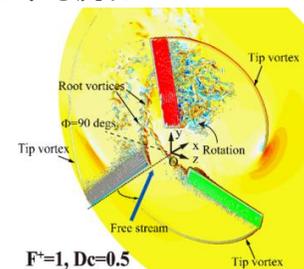
ポスト京時代（将来）

大気境界層、地形を考慮した大規模ウインドファームにおける風車間の流れの相互干渉を解析することにより、発電量の向上、ブレードの寿命改善、低コスト化が可能となる。これらの技術によって環境に優しい安定した電力供給を実現すると共に我が国の風力発電産業の競争力向上に貢献する。



洋上WFにおける風車後流(DK)

ポスト京で対象とする流れ

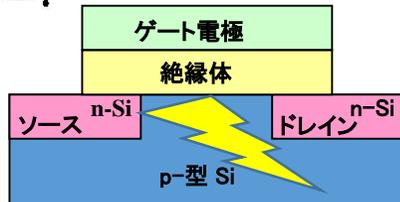
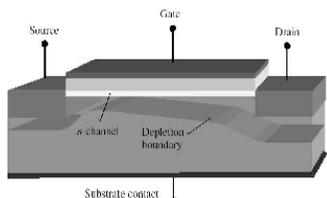


風車性能改善のため
の制御技術の開発

想定されるポスト京の成果（重点課題⑦デバイス）

京以前（過去）

従来の汎用コンピュータでは、数十ナノメートル程度のサイズで生じる電子の量子化の問題を計算することが困難であった。そのため、この量子効果を考慮した次世代のナノデバイスのシミュレーションを行うことはできなかった。



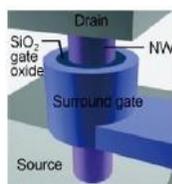
回路幅が数10ナノになるとリーク電流が急増



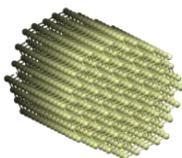
平面トランジスタ

京時代（現在）

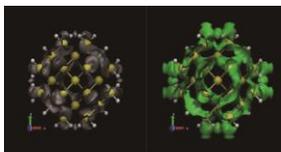
「京」により、数万原子レベルのナノデバイスが実物大で計算可能に。シリコンナノワイヤをはじめとする次世代ナノデバイスの有力ターゲットに対して、その安定性と電子状態を量子論で解明することに成功。形状に依存する電子構造や伝導特性等を明らかにした。



電極を周囲に設けリーク電流抑制



ワイヤ構造



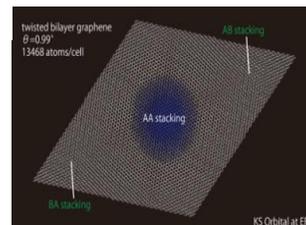
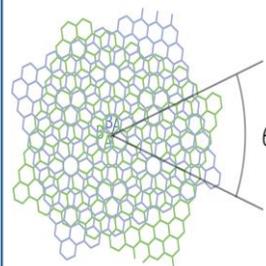
$V_G=0.3V$ $V_G=0.8V$

断面での電流分布

3Dトランジスタ Siナノワイヤ

ポスト京時代（将来）

ポスト「京」では、数十万原子レベルの計算が可能となり、様々なナノ構造体の電子機能や安定性の量子論に基づく予測、さらにはダイナミクスまでもが扱える。これにより量子シミュレータの構築と、新機能を創出するナノ界面科学の深化を目指す。また、インフォマティクス技術を活用した大規模高精度計算を実行し、用途指向の新材料・新ナノ構造を探索する。



多彩なナノ構造と新機能の創出