

# ⑤ エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術

## 概要・意義・必要性

(1) **必要性の観点** 新規エネルギー源の確保、効率的な変換、貯蔵、利用技術の開発は我が国喫緊の重要課題であり、既存の多数の国家プロジェクトとの連携や発展途上国でのエネルギー施策などへの国際貢献が強く期待されている。

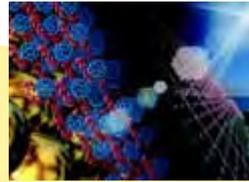
(2) **有効性の観点** エネルギーの創出、変換・貯蔵、利用に関する複雑な現実系の全系シミュレーション技術の開発は、我が国のエネルギー基盤技術のブレークスルーに繋がる。大規模プロジェクト、実験・企業研究者や計算機科学者との強力な研究体制が育ちつつある。

(3) **戦略的活用の観点** 複雑な要素が相互に相関する複合系の微視的挙動を対象とした大規模、長時間シミュレーションは、ポスト「京」を駆使して初めて可能である。小規模系などへの適用で産業への展開が可能、大きな波及効果となる。

## 内容の詳細

### サブ課題A 新エネルギー源の創出・確保

光をエネルギーに変換する過程の電子論を解明し、新しい有機系太陽電池や高性能人工光合成系を設計・開発する。



フラレン太陽電池  
ACSから許可: H. Imahori and T. Umeyama  
J. Phys. Chem. C, 113, 9029-9039(2009)

### サブ課題B エネルギーの変換・貯蔵

電池内で起こる全過程を物質構造と直接関連させるシミュレータを開発し、低コストの汎用元素を用いた二次電池や燃料電池開発の基盤技術を確立する。



メタンハイドレートの分解

### サブ課題C エネルギー・資源の有効利用

高効率触媒の理論設計・開発や効率的な物質の分離技術により、エネルギー多消費型工業プロセスを革新する。特にメタンハイドレートの分離・精製、二酸化炭素の効率的な捕集・変換系を設計・開発する。

## ポスト「京」利用の必要性

経験に頼ったエネルギー関連複合材料の開発では革新的新材料は生み出せない。物理と化学の基礎方程式から出発した大規模計算に基づく計算科学的な設計・制御が必要。

「京」では、部分系、モデル系に対する計算に止まる。エネルギー問題の解決には複合物質の全系シミュレーションが必須。また、工業的に使用される条件や実験条件下での多数の統計量に基づいた解析も重要。

これらの計算を実施するには、「京」で10~50年ほどかかると考えられ、ポスト「京」の使用が不可欠。

## 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

ポスト「京」で占有日数は、最低でも80日程度必要。

## 期待される成果・波及効果

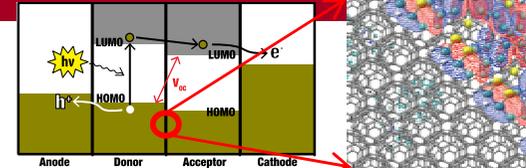
- ・ 変換効率の高い太陽電池を安価な元素や有機系で実現し、実用化を促進、また人工光合成系の確立により新規エネルギー源を確保する。
- ・ 安価で高速充電、大容量の二次電池や高効率の燃料電池の開発を可能とする。
- ・ 白金などの貴金属を使用しない高機能触媒の開発により、エネルギー多消費型物質生産の革新を達成する。
- ・ ハイドレートの生成・分解過程の解明により、メタンの効率的な分離、精製方法、安全な貯蔵技術を確立する。
- ・ 二酸化炭素を低コストで捕集・変換する技術を開発し、地球規模での二酸化炭素抑制、化石燃料の有効利用に貢献する。

# 重点課題 エネルギーの高效率な創出，変換・貯蔵，利用の新規基盤技術の開発

平成28年1月「スーパーコンピュータの今とこれから」シンポジウム公表資料より

● **重点課題** 概要：ポスト「京」を駆使することにより、太陽光、電気や化学エネルギーにおける複雑かつ複合的な分子・物質過程に対する全系シミュレーションを行い、実験研究者・産業界と連携して、エネルギー新規基盤技術を確立する。

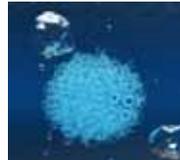
- サブ課題A：新エネルギー源の創出・確保－太陽光エネルギー：光触媒による水分解反応の解明や高效率太陽電池の実現に向けたシミュレータにより新エネルギー源の創出を目指す。
- サブ課題B：エネルギーの変換・貯蔵－電気エネルギー：二次電池の充放電曲線や燃料電池の電圧曲線を予測できる手法を確立し、信頼性の向上に貢献する。
- サブ課題C：エネルギー・資源の有効利用－化学エネルギー：メタンやCO<sub>2</sub>の分離・回収、貯蔵、触媒反応によるエネルギー・資源の有効利用に関わる基盤技術を開発する。



高效率な太陽電池設計 (エネルギー変換効率要因の特定)



電極被膜・電解液界面



メタンハイドレートの分解



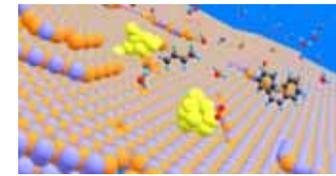
人工光合成の候補触媒の構造  
大阪市大・神谷信夫教授, CALTEC・Agapie教授



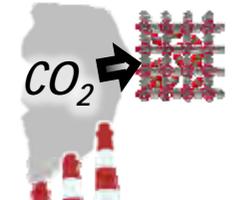
IMPACT  
「しなやかなタフポリマー」との連携。コンセプトカー

## ● ポスト「京」で出来るようになる事

- a)天然と人工光合成のリアルなスピン状態計算や反応機構解析
- b)有機系太陽電池における現実系界面シミュレーション
- c)1-10億原子系のMD計算による高分子電解質膜設計
- d)電極、電解質をカバーした蓄電池反応統合シミュレーション
- e)ハイドレートの生成過程とセミクラスレートの平衡過程研究
- f)千原子の不均一触媒表面反応経路の探索
- g)CO<sub>2</sub>の化学反応吸着法最適化と固体吸着材の設計



高性能触媒



MOFへのCO<sub>2</sub>の吸収

## ⑥ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

### 概要・意義・必要性

- (1) 必要性の観点: ポスト「京」を用いた第一原理解析により、超高効率・低環境負荷な**革新的クリーンエネルギーシステムの実用化**を大幅に加速する。
- (2) 有効性の観点: 産業界の大型プロジェクト(SIP等)と連携し、ポスト「京」の超高精度解析を駆使することで、鍵となる物理現象を解明し、**世界最先端のエネルギーシステムを実現する**。
- (3) 戦略的活用の観点: エネルギー変換の中核をなす、燃焼等の複雑な物理現象を高精度に予測するためには、**第一原理解析**が必須となる。実問題に対する第一原理解析にはポスト「京」の能力が必要となる。

### 内容の詳細

具体的なサブ課題として以下のようなものが想定されるが、**波及効果の大きなもの**、解析基盤技術が共有できるものを**優先して実施**。

- **サブ課題A: 超臨界タービン燃焼器:**  
超臨界燃焼挙動を詳細に解明し、高熱効率・低環境負荷(CCS, ゼロNOx)に寄与する超臨界タービン燃焼器の実用化を加速。
- **サブ課題B: ICエンジン:** エンジン内の乱流噴霧燃焼挙動を解明し、熱効率の飛躍的向上(40%→50%以上)に貢献。
- **サブ課題C: 超大型風車:** 最重要課題である立地アセスメントで必要な100ケース/アセスメントの高精度風況予測を実現し、実用化を加速。
- **サブ課題D: 核融合炉:** 核融合炉の実用化に必須となる核燃焼プラズマ挙動の解析技術を確立し、国際熱核融合実験炉ITERの炉心設計に貢献。



### ポスト「京」利用の必要性

- 超臨界タービン燃焼器では亜臨界状態に比べて雰囲気圧が10倍(300気圧)になり**解析規模が約100倍**になるため。
- ICエンジンでは予測精度を飛躍的に向上させることが可能な気筒内噴霧燃焼の第一原理解析(**DNS解析**)が必要なため。
- 超大型風車の立地アセスメントでは、**100ケース以上**の詳細な風況予測シミュレーションを実施することが必要なため。
- 核融合炉心の核燃焼プラズマ挙動の解析では、「京」の成果を重水素など多種イオン系、かつ、**長時間スケール**(10ms→1s)に拡張することが必要となるため。

必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

占有日数は7日～53日程度と見積もられるが、詳細は具体的な研究課題に依存する。

### 期待される成果・波及効果

- 超高効率・低環境負荷な産業機器・コンシューマ製品の実現による我が国の**産業競争力の強化**、低炭素社会・省エネルギー社会の実現に向けた**世界的リーダーシップの発揮**。
- 「**エネルギー基本計画**」で重要性が指摘される省エネルギー・低環境負荷技術、中長期クリーンエネルギー源等の技術開発に貢献。
- 具体的な成果としては、高熱効率・低環境負荷の超臨界タービン燃焼器の実用化、ICエンジンの熱効率の飛躍的向上(10%以上向上)、超大型風車の実用化、核融合炉の炉心設計への貢献などが期待される。

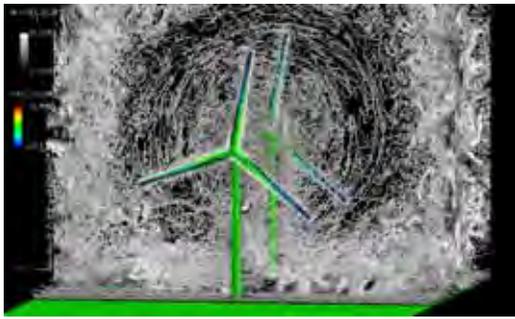
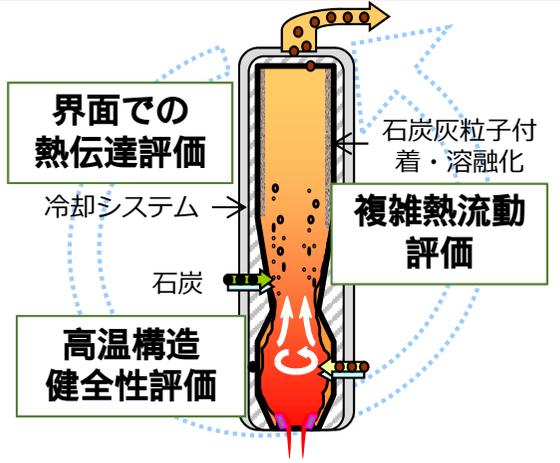
# 重点課題 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

## ● 重点課題 概要

- 超高効率・低環境負荷の革新的クリーンエネルギーシステムとして、**CO<sub>2</sub>分離・回収・貯留を導入する石炭ガス化炉、洋上ウインドファーム、核融合炉、燃料電池**を取り上げる。それらの実用化の鍵を握る複雑非線形物理現象の第一原理的大規模超精密解析を、ポスト「京」の計算性能を駆使し、短時間で繰り返し行うことを実現し、実機環境(50~100万kWの石炭ガス化炉、数10基の洋上ウインドファーム、ITER等)での最適な設計条件や稼働条件を効率的に探索し、実用化のスピードアップに貢献する。

## ● ポスト「京」で出来るようになる事

- **石炭ガス化炉** ①科学的な観点：世界初のガス化・粒子分散・燃焼・灰溶融・壁面付着の乱流燃焼解析と炉構造・冷却の連成解析 ➔ 出口温度予測誤差10%未満、灰分量予測誤差20% ②社会的な観点：豊富な化石燃料を活用しつつCO<sub>2</sub>及び環境汚染物質のゼロエミッションの実現 ③経済的な観点：5年で400万kW級(1400億円)のプラント売り上げ5基上積。5年で2850万トンのCO<sub>2</sub>削減効果、81億円の燃料費削減効果
- **洋上ウインドファーム** ①科学的な観点：風車後流・大気境界層の変動風が発電性能や翼荷重に及ぼす影響を考慮した世界初の設計・疲労寿命解析システム ➔ ウインドファーム性能予測誤差10%未満 ②社会的・経済的な観点：ウインドファームの開発・設計を支援し、日本の風力発電産業の国際競争力強化に貢献

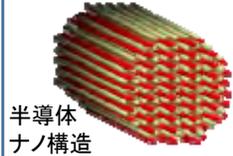


# ⑦ 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

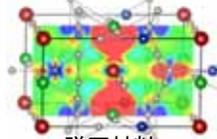
## 概要・意義・必要性

- (1) 必要性 次世代の産業を支える先端電子デバイスや高機能物質・材料の開発と機能創出を図る。新機能を持つ電子デバイス、高性能な永久磁石、信頼性の高い構造材料、次世代の機能性化学品等が主な研究対象。
- (2) 有効性 元素戦略プロジェクト、最先端大型実験施設と連携して基礎研究のブレークスルーを図り、産業界と共に国際競争の激しい新デバイス・新材料の研究開発を加速。
- (3) 戦略的活用 ポスト「京」で初めて実現される精密、大規模、長時間のシミュレーションと系統的探索により、新デバイス・新材料開発を革新。

## 内容の詳細



半導体  
ナノ構造



磁石材料



鉄鋼材料組織

### サブ課題A 新機能電子デバイス

微細加工限界のナノ構造半導体デバイスや新奇超伝導材料、光エレクトロニクスデバイスなど、新原理により新機能を提供する電子デバイスと電子デバイス材料の開発

### サブ課題B 高性能永久磁石・磁性材料

電子論に基づく磁石機能の解明と希少金属を代替する高性能永久磁石、軟磁性材料の開発

### サブ課題C 高信頼性構造材料

材料特性と製造プロセスの関係に着目した構造材料の強靱化の設計・制御と新材料開発

### サブ課題D 次世代機能性化学品

凝集系の構造や電子状態の解明に基づく次世代機能性化学品の分子設計

## ポスト「京」利用の必要性

「京」では理想的なナノ構造や高温超伝導体の大規模計算が行われ、電子状態や物理現象の解明・理解が進展。ポスト「京」では、これまで不可能だった複雑界面や不均一系の精密、大規模、長時間のシミュレーション、多数の化学組成、多様な条件下でのシミュレーションなどにより、実験だけでは困難な物性解明や系統的な材料探索、デバイスデザインを実現。

### 必要な計算資源 (実行効率を1EFLOPSの15%程度と仮定)

計画されている全ての計算を実行すると、ポスト「京」での占有日数は、最低でも80日程度は必要。量子ダイナミカル計算、複雑な強相関物質の設計などさらに高度な計算を行うと最大400日程度必要。(京では、10~50年分に相当)

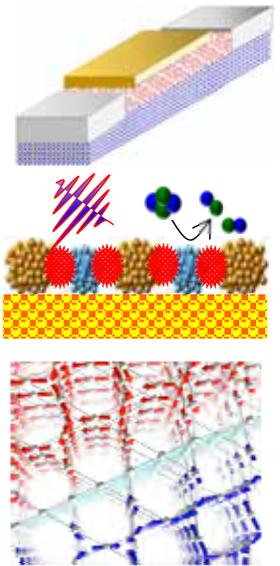
## 期待される成果・波及効果

- 多様なナノ構造デバイスのデザイン、強相関系新奇物質の高精度物性予測と物質探索、複雑な界面や凝集構造、不均一性を考慮した材料特性の予測と製造プロセスの提案が可能に。
- 物質・材料の性質の予測だけでなく、ほしい物性を実現するための物質設計も加速。
- 最先端大型実験施設で得られる膨大な実験データの解析と有効利用。
- 新しい半導体材料、超伝導材料、磁性材料、構造材料、機能性化学品、ナノ構造デバイス等において、日本の産業競争力を一層強化し、社会基盤を形成するための、高機能物質・材料創成技術が確立。
- 物質科学の深化と自然観の革新を通して基礎科学に貢献。

# 重点課題 次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成

## ● 概要

マイクロな基礎方程式にもとづくデバイスと材料の大規模シミュレーション

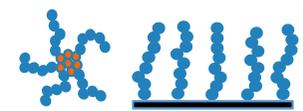


大規模系電子状態計算を基幹技術とした 界面・薄膜のサイエンスと新デバイス開発

マルチスケール手法・インフォマティクスを用いた材料開発

- (a) 高性能半導体デバイス
- (b) 光・電子融合デバイス
- (c) 超伝導・新機能デバイス材料
- (d) 高性能永久磁石・磁性材料
- (e) 高信頼性構造材料
- (f) 次世代機能性化学品
- (g) 共通基盤シミュレーション手法

構造シミュレーション手法や数理科学的手法の開発

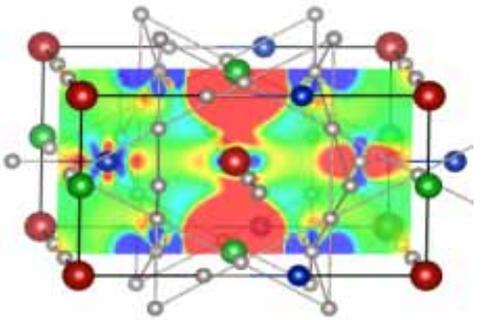


## ● ポスト「京」で出来るようになる事

### 磁石材料

◆ 電子論とデータ科学手法を利用した磁石材料探索

◆ 磁石の主相・粒界相界面の電子状態・構造計算



### 構造材料

◆ 高温高圧下を含めた構造材料微細組織の安定構造や挙動のマルチスケール計算

