

# 産業界からの期待 ( 4 )

## 高効率色素増感型太陽電池設計

クリーンエネルギー  
デバイス研究開発で  
の連携計算の例



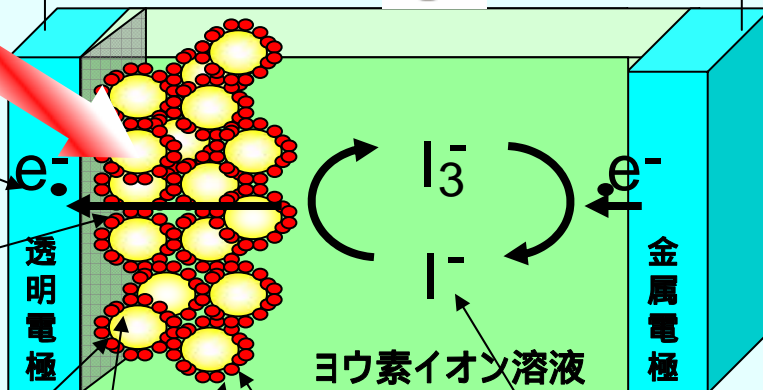
電子の流れ

デバイス開発におけるマルチ  
フィジクスシミュレーションを異  
機種最適計算機で実施

透明電極材料の電子構造計  
算 ... **大規模処理計算機**

動的量子力学による励起エネルギー・  
電子移動解析の動的量子力学シミュ  
レーション ... **逐次処理計算機 /  
大規模処理計算機**

酸化チタン微粒子表面構造特性解析  
の第一原理分子動力学シミュレーシ  
ョン ... **大規模処理計算機**



現状

連携計算による解析は不可能。

将来

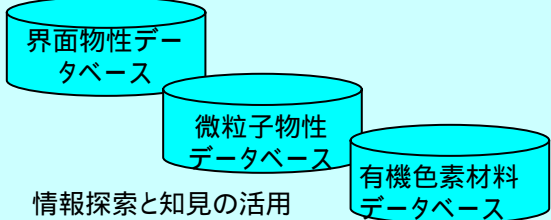
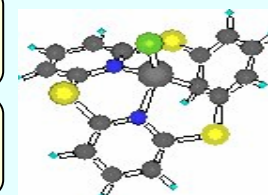
デバイス全体を**約1時間**で解  
析可能。

地球シミュレータでは不可能な  
異機種計算機間の連携計算で  
ブレークスルーを狙う。

酸化チタン微粒子  
有機色素分子  
電解質内のヨウ素イオンドリフトの古  
典分子動力学シミュレーション ...  
**特定処理計算加速機 ( 2 体力 )**

色素分子光励起解析のSCF - CI計算 ...  
**逐次処理計算機 + 特定処理計算加速機 ( 積分 )**

高効率色素分子設計の分子軌道計算 ...  
**逐次処理計算部 + 特定処理計算加速機 ( 積分 )**



### 期待される成果

- **太陽電池の発電コスト削減** 現状は原子力/火力/水力の数倍
- **太陽電池の発電効率改善** 現状は理論性能の 50% 程度

超高速計算機に  
よる最適設計シ  
ミュレーション

**1 / 10 以下  
80% 超**

燃料電池の設計開発に  
も転用可能な技術

従来型電力よりも経済性に優れたクリーンエネルギーの供給によって、国民が豊かで安心した生活を送れる  
ようにする。

提供: (株)東芝

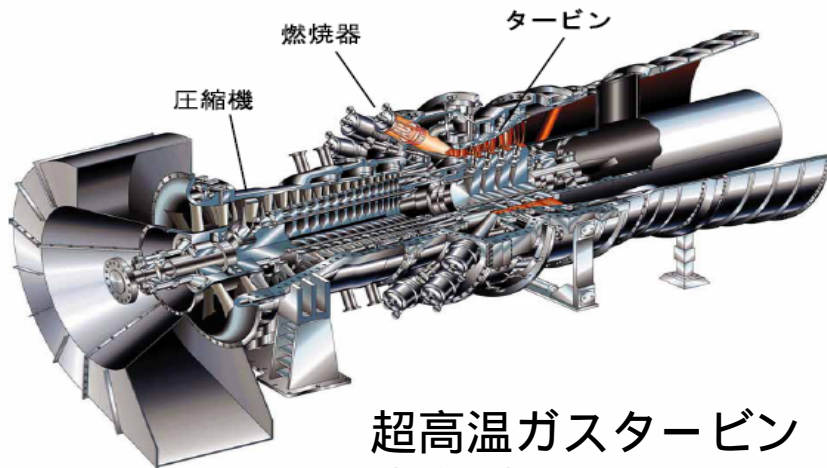
# 産業界からの期待（5）

## 最先端の超高温ガスタービンの開発

現在のガスタービンや航空機エンジンの開発では、流動解析(CFD)や構造解析(FEM)と3次元CADを組合わせたシステムを最大限活用し、殆ど全ての部品の温度、応力、振動等について検討をしないと先端的製品開発は不可能。

### (現状)約0.4テラFLOPS

膨大な要素個別のシミュレーション結果と各種の制約条件の組合せによる研究開発  
(タービン・圧縮機の多段非定常計算、燃焼器の定常計算など)



### (将来)10ペタFLOPS超級

- ・ 燃焼機内で生じる、燃焼、流動、音響、熱伝達などが関与した複雑連成現象の非定常解析が実時間で可能になる。
- ・ 個別解析や実験などをベースにした研究開発と比較し、巨額の開発費の削減(1/10)と開発期間の短縮(1/5)を実現

- ・ エネルギー変換の限界に向けた挑戦  
(現行1,500 1,700 )による化石エネルギー消費の低減
- ・ CO<sub>2</sub>排出量の削減等による低公害  
(循環型社会の実現)

# 産業界からの期待（6）

適用分野	重要課題	計算の特徴	要求計算規模	予測効果
<b>流体機械</b> (ポンプ、タービン等) 	<ul style="list-style-type: none"> <li>性能向上</li> <li>小型軽量化</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>大規模乱流複数現象の解析</li> <li>構造、音、材料系連成解析</li> </ul>	<b>現状</b> (流体解析の例) : ・ 数100万メッシュ(非定常) (0.1T以下) ↓ <b>要求</b> : 高精度大規模解析 ・ 数1000万 ~ 数億メッシュ(非定常) (10TF ~ 0.1PF)	<b>現状</b> : ・ 部分解析のみ ・ 現象解明不十分 <b>将来</b> : ・ 全体解析実現 ・ 現象解明による高速設計 ・ 解析1日以下
<b>車両</b> (自動車、新幹線) 	<ul style="list-style-type: none"> <li>低騒音化</li> <li>高信頼化(衝突、走行、安定性)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>大規模乱流複数現象の解析(圧縮性)</li> <li>構造、音、材料系連成解析</li> </ul>	<b>現状</b> (流体解析の例) : ・ 数100万メッシュ(非定常) (0.1TF以下) ↓ <b>要求</b> : 高精度大規模解析 ・ 数1000万 ~ 数億メッシュ(非定常) (10TF ~ 0.1PF)	<b>現状</b> : ・ 部分解析のみ ・ 現象解明不十分 <b>将来</b> : ・ 全体解析実現 ・ 現象解明による高速設計 ・ 解析数日
<b>情報機器</b> (HDD、DVD、家電等) 	<ul style="list-style-type: none"> <li>低騒音化</li> <li>高効率化</li> <li>高精度化</li> <li>試作レス</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>最適化手法による自動設計</li> <li>装置まるごと解析</li> <li>分子レベル材料</li> </ul>	<b>現状</b> (流体解析の例) : ・ 数1000万メッシュ(定常) (0.1TF以下) ↓ <b>要求</b> : 最適パラメータ解析 ・ 数1000万 ~ 数10億メッシュ 最適設計、非定常) (1TF ~ 1PF(分子))	<b>現状</b> : ・ 部分解析のみ ・ パラメータバイ不足 <b>将来</b> : ・ 全体解析実現 ・ 自動最適設計 ・ 解析1日以下