

時間と空間の並列計算でものづくり革新!

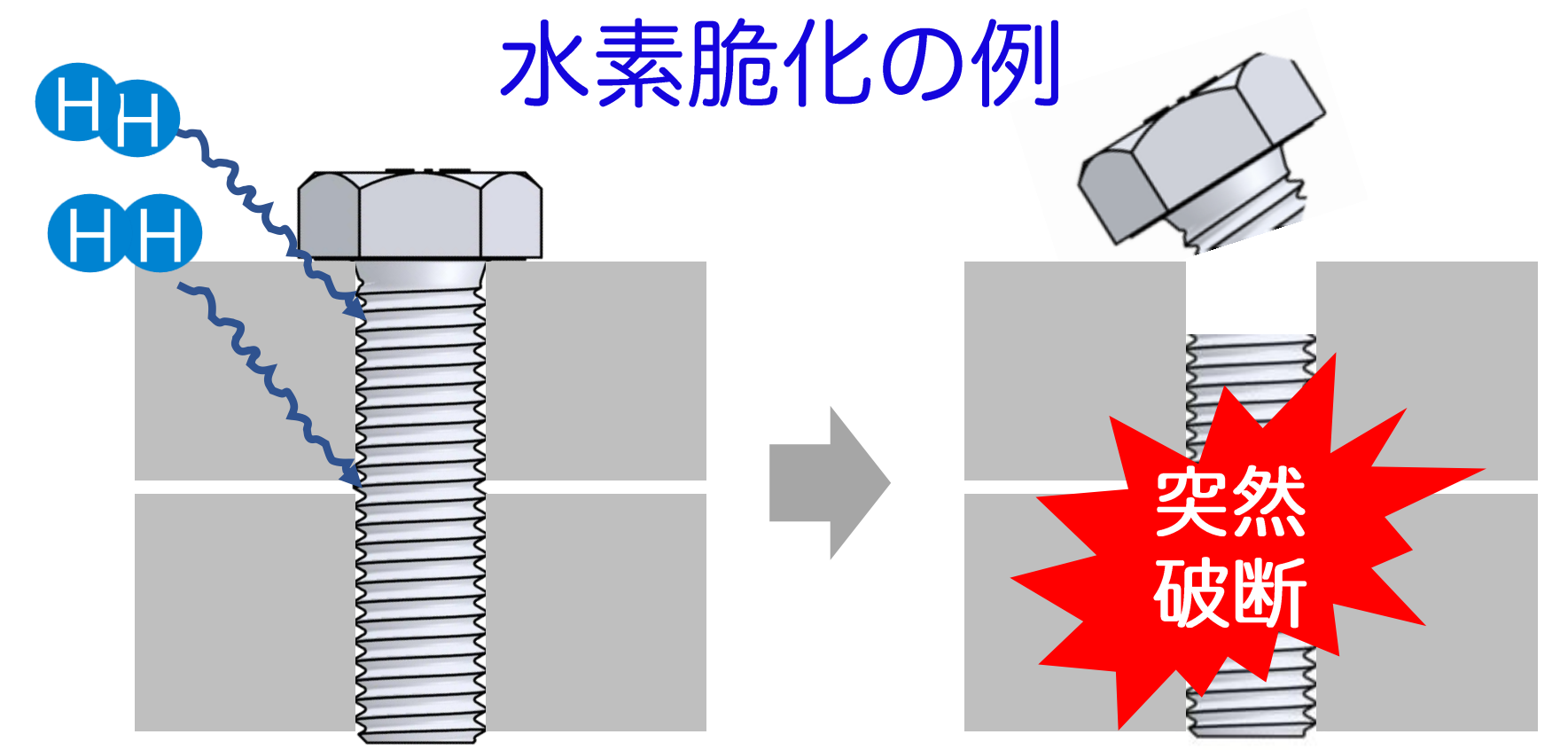
時空間並列計算による高性能マルチスケール解析手法の確立

劉麗君 (大阪大学/工学研究科 助教)

研究背景・解決すべき問題・提案手法・研究成果

<水素エネルギーの利用と水素脆化問題>

- 水素をエネルギー源として利用するシステムで、水素環境における材料の安全性に関連して重要性が高まっている
- 水素脆化とは水素によって材料の強度や破壊特性が劣化し、割れ発生や早期の破断をもたらす現象である



水素脆化のメカニズムは未だ未解明

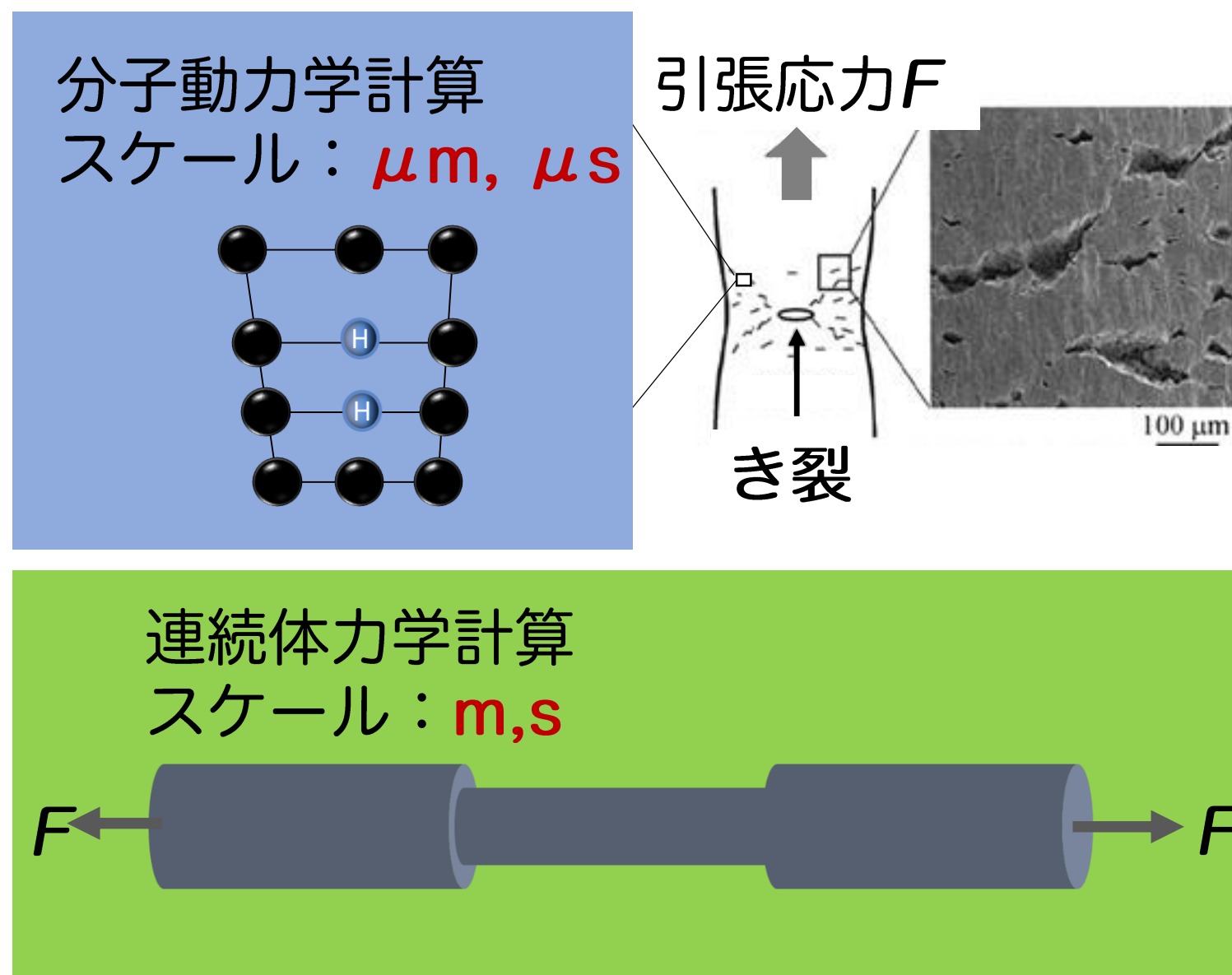
<実験的研究の抱える課題>

- 水素は最も軽い元素である上に含有量も多くの場合には微量であるため、リアルタイム観察、ナノ・マイクロ観察が困難
- 従来のトライ&エラーを主体とした実験で困難な課題を克服しつつ、研究開発の大幅加速が可能な**計算手法が必要**

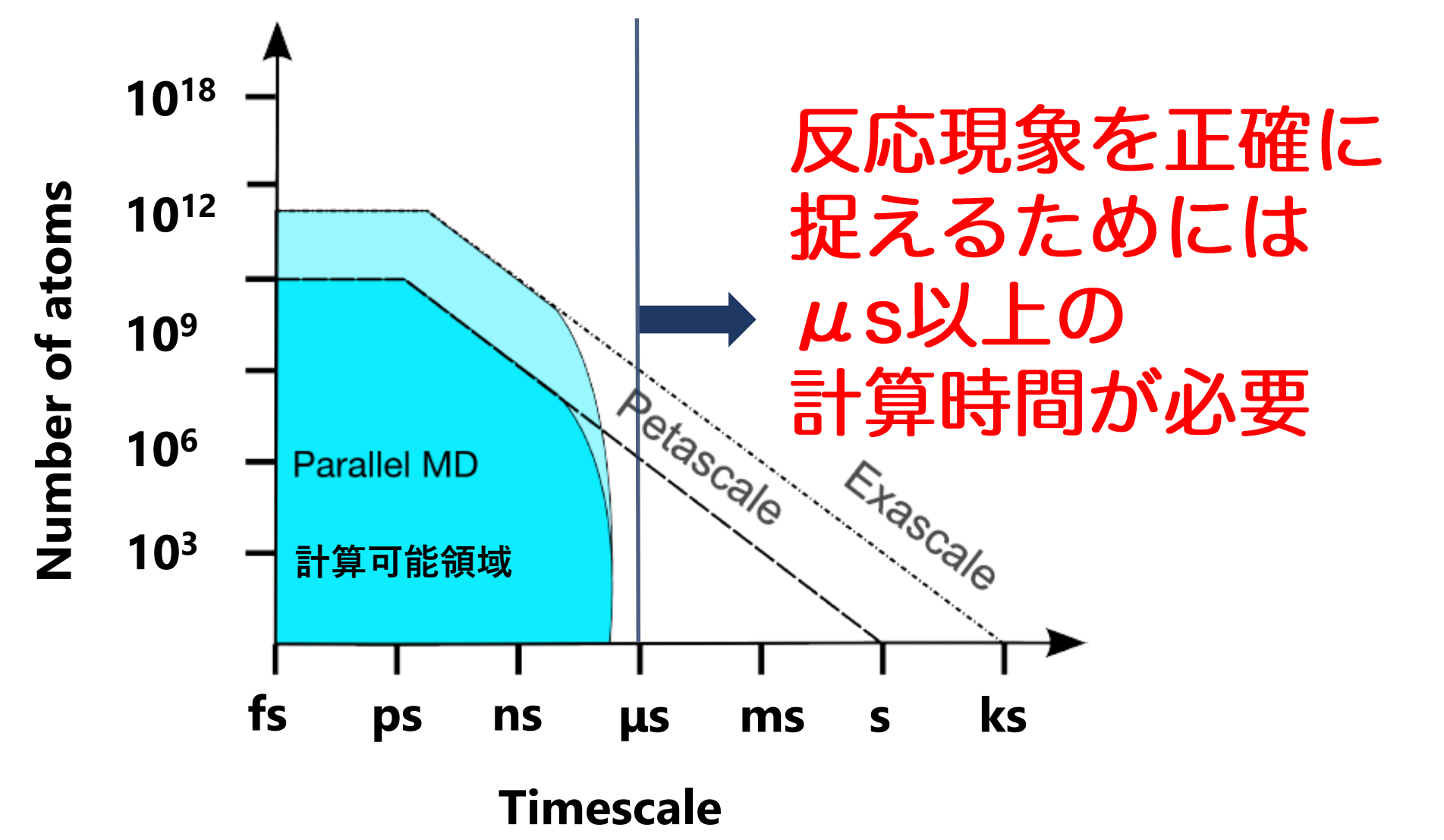
<計算的研究の抱える課題>

- 連続体力学の計算手法(有限要素解析等)は水素の存在状態や材料の構造・組織などを十分に調べることができない
- 分子動力学計算は高コストのため、実問題に近い系を模擬できない
- 連続体力学計算と分子動力学を組み合わせた**マルチスケール計算が必要**
- 最先端のスパコンを利用しても分子動力学計算は**μsまでしか計算できない**

マルチスケール計算手法の必要性



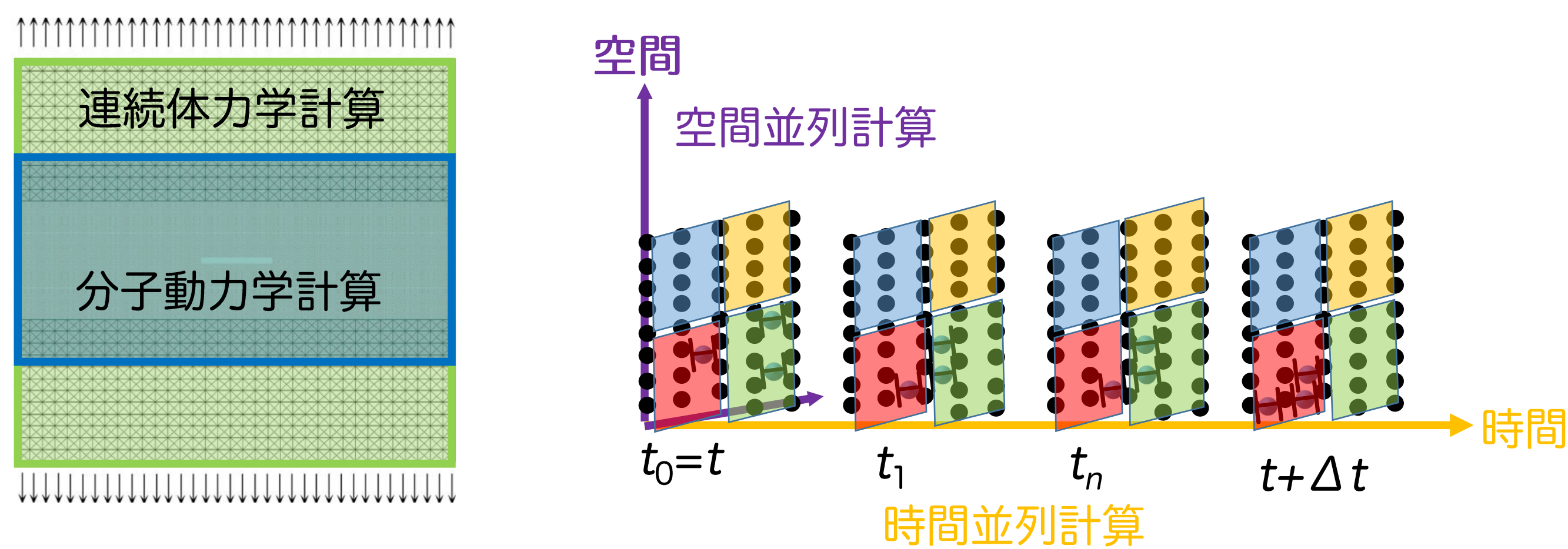
分子動力学計算の時間スケールの限界



<提案手法>

時空間並列計算によるマルチスケール解析手法

空間マルチスケール計算 分子動力学の時空間並列計算



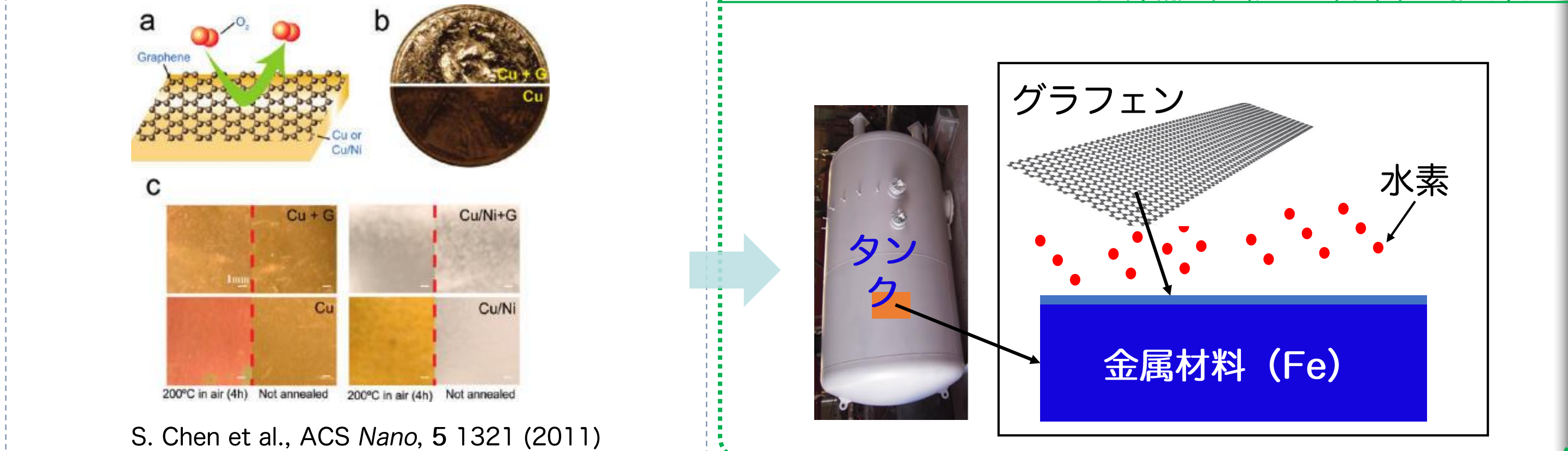
<研究成果>

- グラフェンによる水素不透過構造の提案及び分子動力学計算による検証
 - グラフェンの水素バリア効果を確認
- 計算の高速化のための数値計算手法を開発
- 古典的なCOCG法と比較して
 - 反復回数はCOCG法の約70%
 - 計算時間はCOCG法と比べ約70%まで削減
 - 微小非線形問題対しても収束性を示した
- 多倍長計算精度を適用した手法を開発

研究成果の詳細

酸素の侵入を防いで金属の酸化を防止

<グラフェンによる水素脆化防止材料の提案>



分子動力学 (MD) | LAMMPS

- 古典MDコード
 - オープンソース
 - 優秀な並列性能
 - Highly portable C++
- <http://lammps.sandia.gov/>

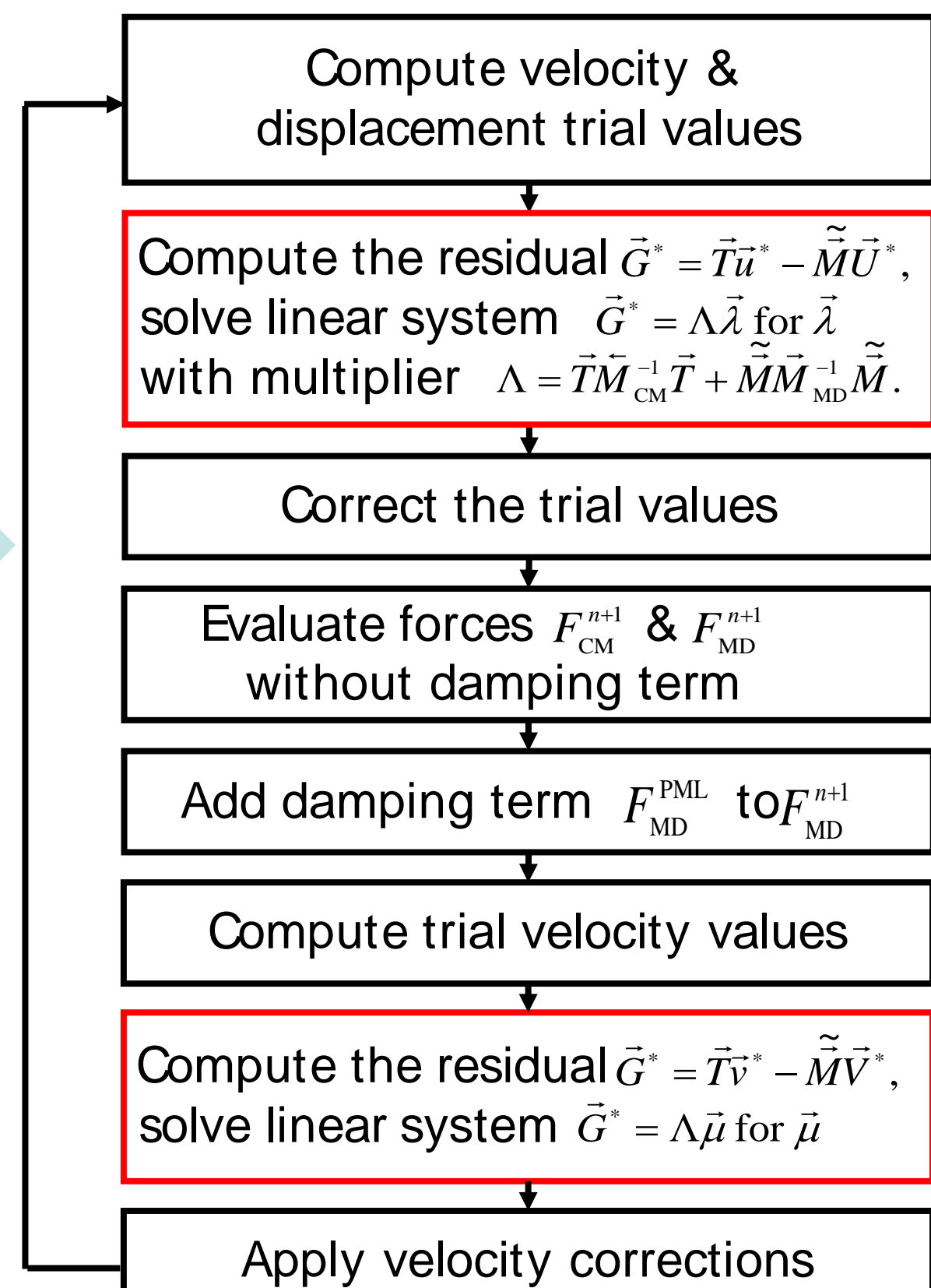
連成ツール

- Molecular dynamics-Continuum mechanics Coupling Tool (MCCT)

連続体力学(CM) | UG4

- 偏微分方程式問題のための解析コード
 - オープンソース
 - 優秀な並列性能
 - Highly portable C++
- <http://gcsc.uni-frankfurt.de/simulation-and-modelling/ug4>

連成計算のアルゴリズム

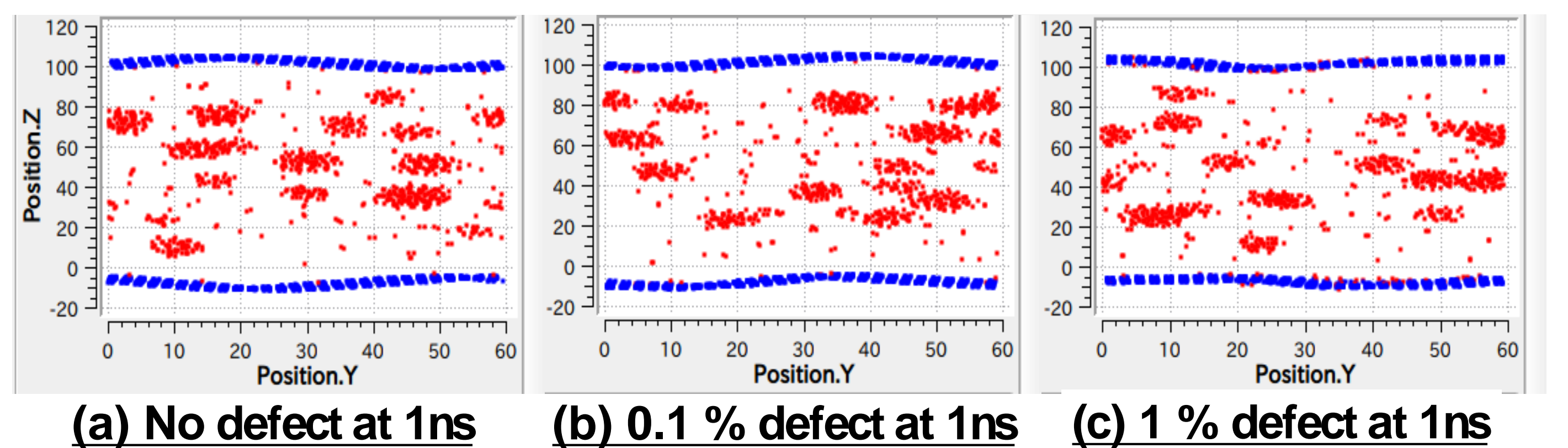


数値実験・結果

<グラフェンの水素バリア効果の検証>

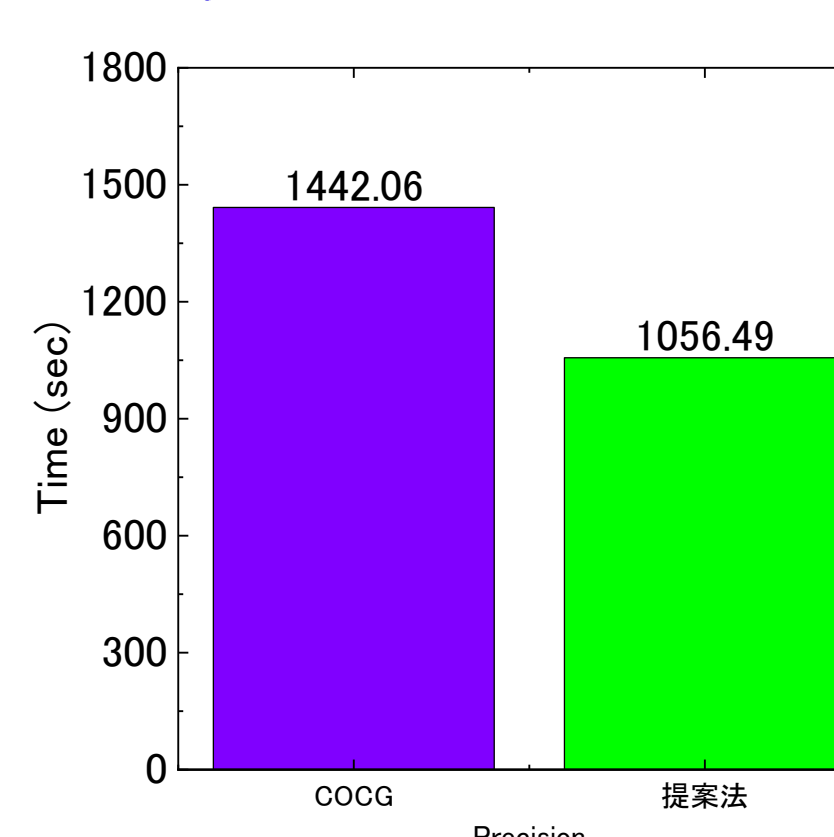
- 欠陥無しグラフェンの場合、水素の侵入を防ぐ
- 点欠陥を導入することで、水素は欠陥部分にトラップされ、その後の現象はさらに解析の余地がある

グラフェンの欠陥密度依存性

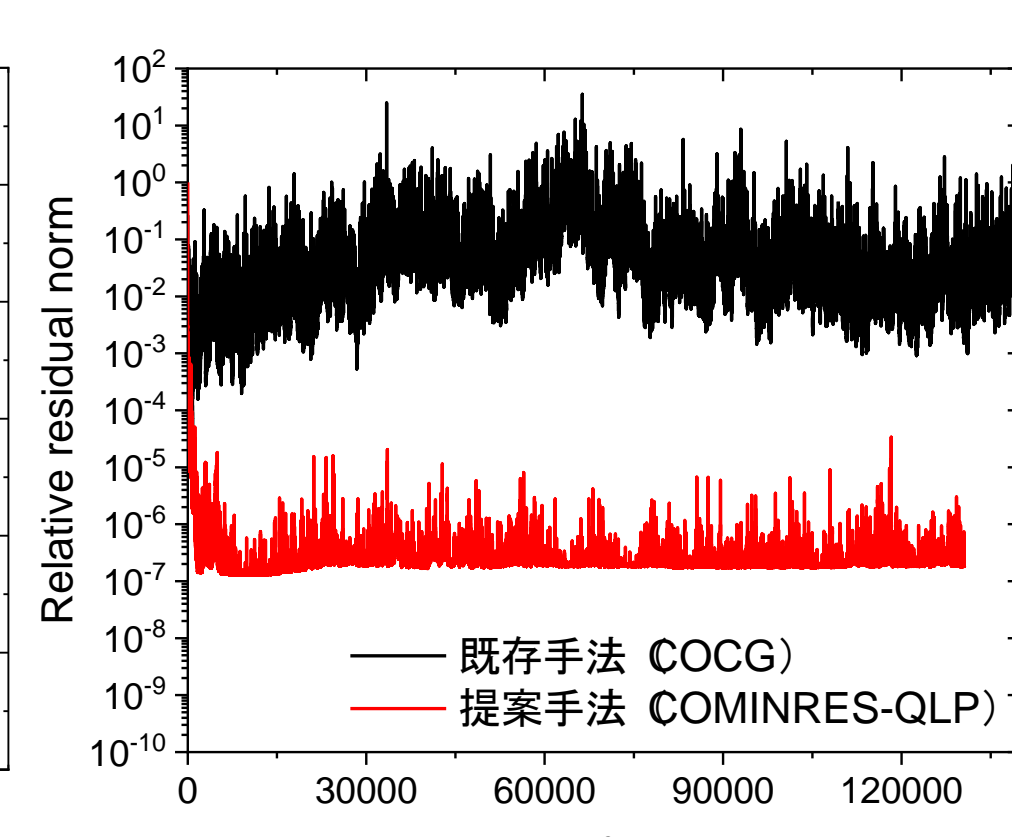


<数値計算手法の性能検証>

計算時間の比較



$\vec{G} \approx \Lambda \vec{\lambda}$ for $\vec{\lambda}$



多倍長精度の適用

