

平成29年度 名古屋大学 HPC 計算科学連携研
究プロジェクト

研究課題「水素脆化解明に向けたマルチスケール
高速計算手法の開発」

研究成果報告書

研究期間 平成29年4月～平成30年3月

研究代表者: 劉麗君
(名古屋大学情報基盤センター)

§ 1 研究実施内容

水素脆化は燃料電池車などのクリーンなエネルギー使用の観点から解決すべき重要課題と考えられている。しかしながら実験的研究では実験上の制約から困難が多く、シミュレーションによる解析に期待が集まっている。そこで本研究では、水素脆化のメカニズム解明に向けて、反応分子動力学計算とマクロスケールの有限要素解析の連成計算を可能にする高速なマルチスケール連成計算手法を新たに開発することを目的とする。この目的の達成に向けて、本研究を4つの大きなテーマに分けて実施している。具体的には、①線形ソルバーの開発、②新規材料設計（グラフェンによる水素不透過構造の検討）、③マルチスケール計算ツールの開発及び④時間並列計算である。平成29年度の研究重心は①及び②を重点的に実施した。

§ 2 研究成果の概要

実施内容①線形ソルバー開発について、新たな複素対称行列にも使用可能なソルバーを考案し、さらに多倍長精度の適用により計算コストの低減を確認した（図1、図2）。この成果は国際学会(WCCM)及び投稿論文としてまとめている最中である。実施内容②のグラフェンによる水素不透過構造について、**ReaxFF** 分子動力学計算を用いて、水素原子が欠陥の周囲に集まる様子（図3）及び水素により鉄の強度の低下を確認した（図4）。さらに本研究で新規提案したグラフェンと鉄の複合材料のモデルを作成し、反応性分子動力学法(**ReaxFF**)を用いたシミュレーションを行った結果、欠陥の無いグラフェンでは水素を透過しないことがわかった（図5）。（この成果も国際学会発表(ICCM)に投稿し採択済みである。

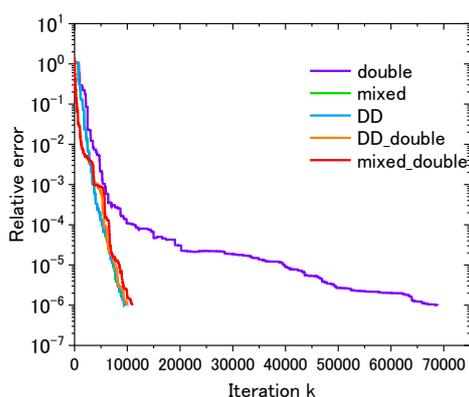


図1 反復回数の削減結果

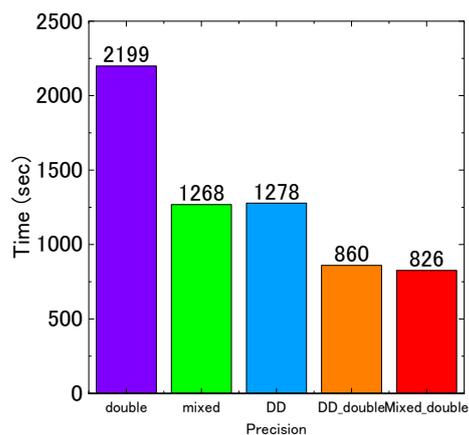


図2 計算時間の削減結果

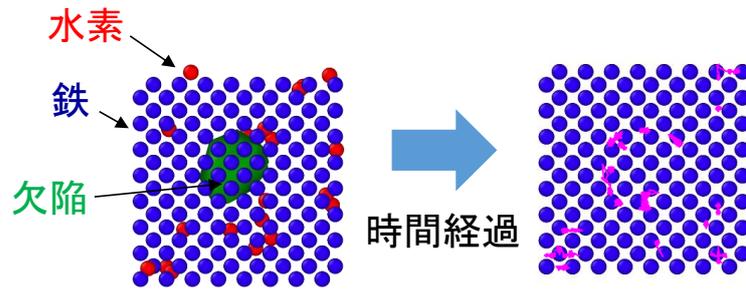


図3 欠陥周囲に水素が漂っている様子

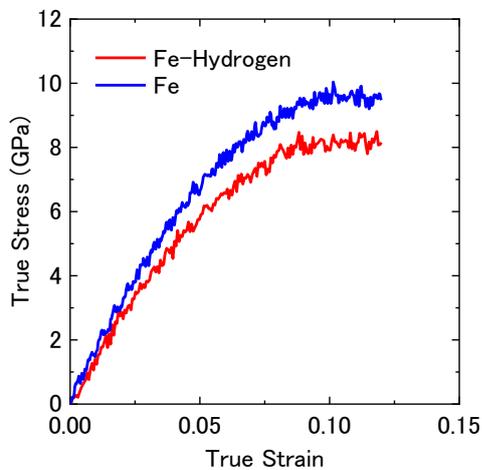


図4 水素による材料強度の低下

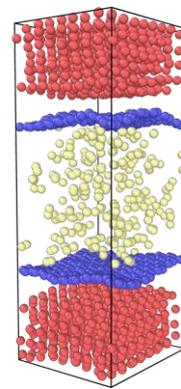


図5 グラフェンの水素透過防止効果の確認

§3 成果発表等

【国際会議】

- [1] **Lijun Liu**, Katsumi Hagita, Jun Hirotsu, A reactive molecular dynamics study of graphene as a protective barrier against hydrogen embrittlement, to appear in *Proceedings of the 9th International Conference on Computational Methods*, Rome, 6-10 August 2018.
- [2] **Lijun Liu**, Masao Ogino, Kazuaki Sekiya, Mixed Precision Iterative Methods for Complex Symmetric Systems, to appear in *Proceedings of the 13th World Congress on Computational Mechanics/2nd Pan American Congress on Computational Mechanics*, New York City, 22-27 July, 2018.

【国内会議】

- [3] 劉麗君, 荻野正雄, 榎井晃基, 複素数対称システム向けの多倍長反復法開発, 第23回計算工学講演会, ウィンクあいち, 2018年6月6日-6月8日.