

## 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

研究課題代表者：大阪大学 工学研究科 劉 麗君

水素は天候や環境に影響されず安定的に用いることができるクリーンなエネルギー源であり、太陽光や風力などの再生可能エネルギーとともに次世代エネルギーの中心的役割を果たすと考えられている。しかしながら、水素は燃料電池自動車や家庭用コージェネレーションなどでの幅広い利活用が期待されているものの、材料内部における高い拡散係数や、他物質との反応性の高さがネックとなり、普及に向けて解決すべき課題が多く残されている。特に安全利用に向けた喫緊の課題として水素脆化があり、水素環境下にある材料内部への水素侵入・拡散が原因となり材料強度が低下する現象が知られている。最小原子半径を有する水素原子の厳密な挙動を解析するためには、有限要素法などの連続体力学向け計算スキームだけでは十分とは言えない。しかし、原子レベルの計算手法、例えば第一原理計算や分子動力学計算などは計算コストが高いため、現在世界中最速なペタスケールのスーパーコンピュータを利用しても最長マイクロ秒までしか計算できない。本研究では時空間並列手法を導入することで、長時間 MD 計算の実現を目指した。

本計算手法の性能を検証するために、まず簡単な Ag<sub>3</sub> 量体モデルを用いて計算速度解析を行った。その結果、Fig.1 に示したように、64 並列の場合、約 48 倍の速度向上を実現することができた。 $\alpha$  鉄中の水素拡散の場合、水素の拡散速度が速いため、状態探索に時間がかかってしまい、十分な計算速度の向上を得られなかった。今後の展望としては、提案手法を炭素鋼組成に関する内部構造の発展などの長時間反応解析問題への適用が考えられる。

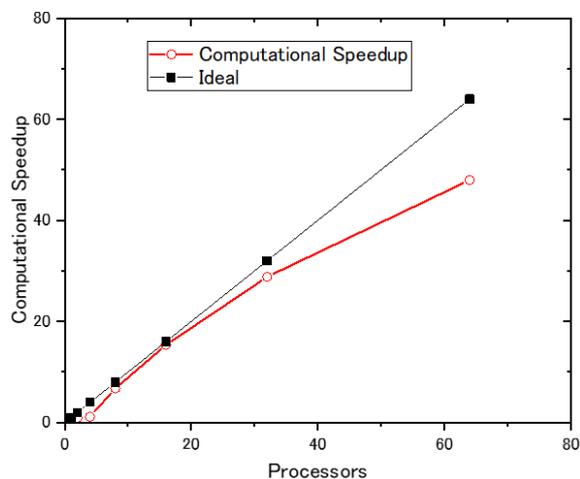


Fig.1. Computational speedup

## 成果発表

- [1] **Lijun Liu**, Katsumi Hagita, Jun Hirotsu, A reactive molecular dynamics study of graphene as a protective barrier against hydrogen embrittlement, *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, *Proceedings of the 13th World Congress on Computational Mechanics/2nd Pan American Congress on Computational Mechanics*, New York City, 22-27 July, 2018.