

研 究 報 告 書

「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」

研究期間：平成 29 年 10 月～平成 31 年 3 月

研究者番号：50160

研究者：劉麗君

1. 研究のねらい

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、数値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を連成させ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。高速計算を行うにあたり、従来通りのモデルの空間分割による並列計算だけでなく、時間領域の分割も併せて実行し、時間と空間の両側面で分割した時空間ハイブリッド高速計算の概念を新たに導入することが新規点である。これにより大幅な計算時間の短縮だけでなく、マルチスケール計算の難点である時間スケールの違いも克服することができる。今回提案した計算手法は水素脆化のみならず、任意の材料物性解析、またその材料を巨視的に用いた場合の解析を一貫して行うことが可能となる。そのため材料開発から企業の製品開発まで、計算力学的手法による材料の評価やスクリーニングが可能となり、科学技術の進展に大きく寄与する計算プラットフォームを提供すると考えられる。よって、水素脆化などの様々な材料力学的諸問題を解決できるツールを提供しう点で産業応用上も非常に価値の高い研究であると位置づけられる。さらに本計算スキームを未だ解明されていない水素脆化メカニズム調査に応用することで、真の水素脆化メカニズムが明らかになるインパクトは将来の低炭素化社会実現に向けて大きなマイルストーンとなるものであろう。またこれまで研究開発分野で用いられてきた空間分割のみの解析手法から脱却した、空間だけでなく時空間分割の概念を導入したマルチスケール連成解析手法は、従来の空間分割のみの高速計算手法に比べて、大幅な計算時間の短縮を可能とする点で学術的に意義深いと考えられる。

2. 研究成果

(1) 概要

連続体力学と分子動力学計算を組み合わせた低計算コストかつ高精度を同時に実現させるマルチスケール計算ツールを創出するために、線形方程式を解く高速数値計算手法を提案した。収束しにくい線形問題に対して提案した COMINRES-QLP は優位性を示した。既存の手法で解けない問題も解けるようになった。多倍長精度を利用した提案手法は既存手法より反復回数 77%、計算時間 62%の削減を達成した。

また、水素脆化メカニズム解明意外にも水素脆化を防止するためのグラフェン水素不透

過構造を提案し、分子動力学シミュレーションによる検討をおこなった。欠陥無しグラフェンの場合、水素バリア効果を確認した。点欠陥を導入した場合、水素は欠陥部分にトラップされた現象も観察でき、新たな応用可能性もあることを示した。

さらに時間並列計算に関しても、新規計算手法のアイデアを見いだした。軌跡をセグメントに分解することにより時間方向の並列化を実現し状態(States)のラベリングにより終了と開始状態がマッチングするセグメントの連結を実現する。開始状態を予測することにより並列性能を向上することが予想されており、本アイデアは引き続き ACT-I 加速フェーズにおいて継続検証をすすめていく。

(2) 詳細

高速線形方程式ソルバーの開発

複素対称線形システムをいかに効率良く解くかは、材料力学だけでなく電磁気学、音響学、量子力学などの幅広い用途において非常に重要な問題である。例えば、電子デバイスの設計や品質管理の過程において、電磁場解析を行う際、有限要素法を使用した数値モデルの離散化は複素対称線形システムをもたらす。そのため、複素対称線形システムを解くための効率的な数値解法が求められている。今回マルチスケールシミュレーションを行うに辺り、分子動力学計算と有限要素解析の融合により、大規模な系での計算時間の大幅な増加が問題点であったため、新規高速線形ソルバー開発を行った。

本研究の計算方法の詳細と他手法との比較検討結果は投稿論文[電気学会論文誌(2019/2 投稿済)]にまとめられ、発表予定である。概略だけ説明すると、共役直交基底を構築するための Lanczos 法を採用し QLP 分解を適用する COMINRES-QLP 法を新たに提案した。本手法ではこれまでの経験により相対許容残差を設定する収束判定則ではなく、行列の条件数を推定し、その影響を考慮した収束判定則も新たに提案している。条件数が大きい(解にくい)複素対称線形問題に対して、同程度の相対誤差が得られた時に、COMINRES-QLP 法の反復回数は COCG 法の約 70%であることがわかった。計算時間についても COCG 法と比べ計算時間も約 70%まで削減することに成功した。(表 1)これより、悪条件問題において高い精度の近似解を得る場合は特に提案手法の優位性が高いことが分かった。

COMINRES-QLP 法は複素対称線形システムだけでなく、微小非線形システムにたいしても優位性を示した。図 1(a)に示したように、既存手法 COCG 法が解けない問題に対して収束するようになった。

さらに、多倍長精度の QMR-SYM 法も開発した。図 1(b)は倍精度、混合精度、倍々精度、可変精度の倍々精度から倍精度の変換、可変精度の混合精度から倍精度の変換を用いた結果を示した。悪条件問題に対して、同レベルの精度の解を得るために、高精度計算手法の有効性を示した。

表 1 線形方程式における提案手法と既存手法の計算性能の比較

Method	# of iter.	Time(sec.)	Relative error
COCG	10172	1442.06	0.0047
COMINRES-QLP	6966	1056.49	0.0047

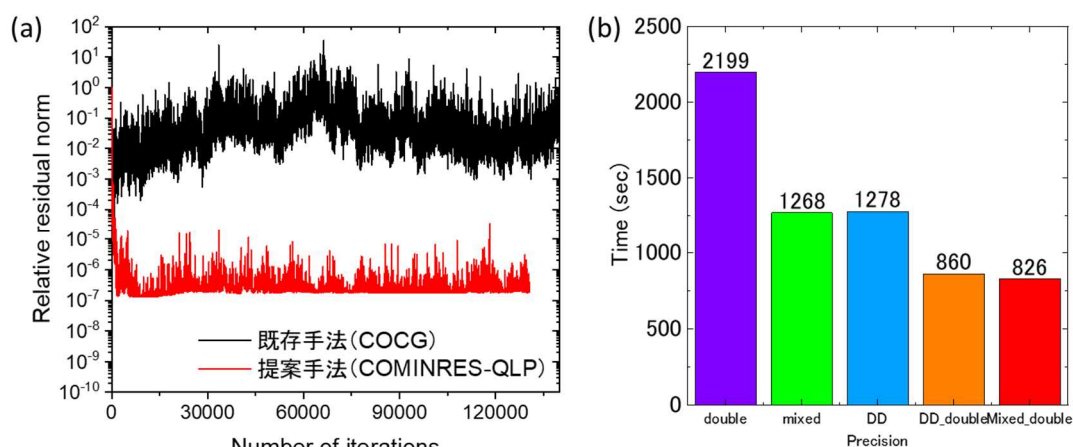


図 1(a) 既存手法と提案手法の収束性検証結果 (b) 各精度における計算時間比較結果
グラフェンによる水素不透過構造の検討

グラフェンは機械強度、電気伝導度に優れる材料だが、近年酸素の侵入を防いで金属の酸化を防止したり[S. Chen et al., *ACS Nano*, **5** 1321 (2011)], He 以上のすべての原子の透過を防ぐことが報告[J. S. Bunch et al., *Nano Lett.*, **8** 2458 (2008)] されている。そこで本研究では、水素ぜい化の未然防止の目的でグラフェンの水素不透過性について反応性分子動力学による解析を行った。具体的には分子動力学シミュレーター(LAMMPS)の使用環境構築を行った上で、まずは鉄中に欠陥を模擬した系を水素雰囲気配置して、鉄中の水素拡散解析を行い、水素による鉄のぜい化の検証を行った。その結果、鉄中の欠陥周辺に水素が集まり、強度が約 20%程度低下することを確認した。

さらにグラフェンを鉄の表面に配置したものと同様の系で、水素の侵入の有無を調査するシミュレーションを行った。グラフェンの欠陥密度は実験で作製される欠陥密度(10^{10} - 10^{13} 個/cm²)を模擬するため、以下 3 条件で計算を実施した。 欠陥無し 10^{12} 個/cm² (欠陥 0.1%) 10^{13} 個/cm² (欠陥 1%) 計算結果の一部を図 2 に示す。欠陥の無いグラフェンでは、圧力 60MPa 計算時間 1ns の範囲において、水素バリア効果があることがわかった。(図 2(a))

グラフェンの欠陥密度依存性の計算結果から、欠陥がある場合は、水素は欠陥部分にトラップされる減少を確認した。(図 2(b))

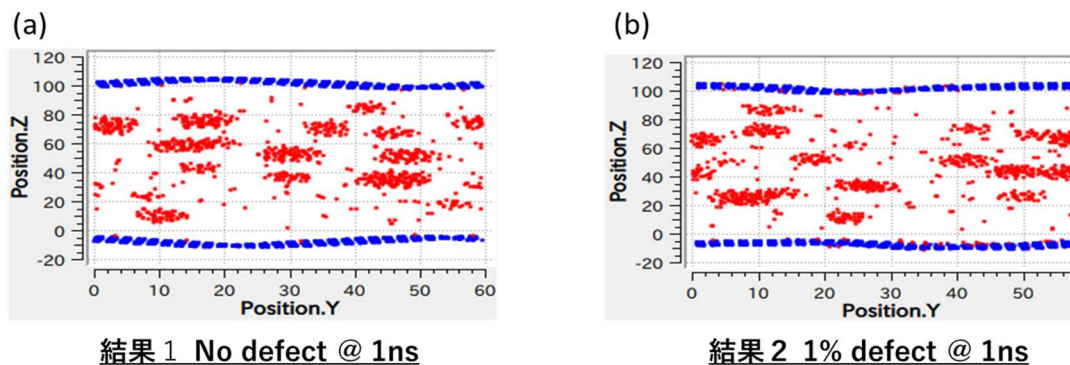


図 2 反応性分子動力学法によるグラフェンの水素透過シミュレーション(1ns 計算時間経過)

後)

(a) 欠陥無しの場合 (b) 欠陥 1%導入の場合

3. 今後の展開

本研究テーマである高性能マルチスケールシミュレーションに関する研究は、計算主体の超高速研究開発を行うことができるため、社会的波及効果が大きい。さらに空間並列計算、時間並列計算については情報学の分野における基礎研究の側面も強く、高精度かつ高速な計算手法の学理を探究できる点でも意義深い。今後は、今回対象とした水素ぜい化だけでなく、電子デバイスや結晶成長、鉄鋼材料分野など幅広い分野で使用される汎用性の高いシミュレーターへの応用展開も視野に入れた研究に取り組んでいく。情報学の知識をフル活用して工学の知識と融合させることで幅広い分野で使われるシミュレーターを創出することで世の中に研究成果の形で社会還元して貢献していきたい。

4. 自己評価

研究目的の達成状況

マルチスケール計算を行うための有限要素解析と分子動力学解析のカップリングコード開発において Prof. G. Queisser (Temple Univ., USA) との国際共同研究を開始できている。現在大まかな連成コード開発が終わり、詳細のすりあわせを行っている段階である。隔週での打ち合わせにより強固な連携関係を築けており、ACT-I 加速フェーズにおいて本カップリングコードのプロトタイプ版開発を完了させる予定である。

空間並列計算に関しては、新規線形ソルバー (COMINRES-QLP) 法を開発し、既存のどの手法よりも計算精度・計算時間削減の点で優位性を示すことができた。成果は国内の学術雑誌に投稿済み、国際論文誌に関してはデータを追加している関係で投稿が遅れているが、2019 年前半での投稿予定である。

時間並列計算に関しても新規計算手法をアイデアとして提案し、現在コーディングを進めているところである。機械学習を採用した手法でまずは機械学習向け PC 環境構築を ACT-I 加速フェーズにおいて進める計画である。

上記以外にも空間並列計算手法の成果を応用して Prof. J.-L. Bredas (Georgia Tech., USA) との有機半導体デバイス向けの高速電磁場解析シミュレーター開発や、研究代表者 chair となった国際ワークショップ開催など、研究代表者の今後の国際飛躍につながる成果を創出することができている。

研究の進め方(実施体制、研究費執行状況)

2018 年 7 月に名古屋大学(研究員)から大阪大学(特任助教、2019/4 より助教)に異動した関係で、予想以上に新研究環境構築と教育業務の負荷が大きく、論文執筆などの点で遅れが見られた。しかしながら新しい研究環境に移ったことで、固体力学の専門家などが身近にいる研究環境に身を置くことができ、新規研究テーマにも着手できている、多くのメリットも享受できている。

今後は助教の身分のため、引き続き学生の補助はなく代表者 1 名での研究となるが、今後は 1 年半の ACT-I の成果を国際学術雑誌にまとめていき、成果報告を迅速に実施する予定である。

研究費執行に関しては通常の予算配分による研究環境構築・成果だしを行った。2018 年度後

半の追加予算配分によって、Prof. G. Queisser (Temple Univ., USA)との国際共同研究を迅速に進めることができています。さらに国際学会発表も行うことができ、効果的に研究費を執行することができ、追加予算による研究への効果は非常に実りの多いものとなった。

研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

本研究テーマである高性能マルチスケールシミュレーターの創出により、計算主体の超高速研究開発を行うことができるため、社会的波及効果が大きい。さらに空間並列計算、時間並列計算については情報学の分野における基礎研究の側面も強く、高精度かつ高速な計算手法の学理を探究できる点でも意義深い。

今回対象とした水素ぜい化だけでなく、電子デバイスや結晶成長、鉄鋼材料分野など幅広い分野で使用される汎用性の高いシミュレーターを開発することで世の中に研究成果で貢献していきたい。

研究課題の独創性・挑戦性

従来の空間並列計算に加えて、時間並列計算手法を導入した点に独創性があり、新規点である。さらに空間並列計算自体も従来よりも大幅に高精度で高速な計算を可能にする線形ソルバー開発に成功している。情報学の知識だけでなく、固体力学やなどの工学分野の知識融合した分野を横断型の学際的な本研究は、産業応用上価値が高いことに加え、高い挑戦性がある。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Koki Masui, Masao Ogino, and **Lijun Liu**. Multiple-precision Iterative Methods for Solving Complex Symmetric Electromagnetic Systems. Accepted by Lecture Notes in Computational Science and Engineering. (Accepted)

(2) 特許出願

特になし。

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

[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.

[3] **Lijun Liu**, Masao Ogino, Iterative Substructuring Methods for Solving Large-scale Complex Symmetric Linear Systems in Electromagnetic Field Analysis, *Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems*, Chengdu, China, 15-18 October, 2017.

[4] 劉麗君, 萩野正雄, 榎井晃基, 複素数対称システム向けの多倍長反復法の開発, 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