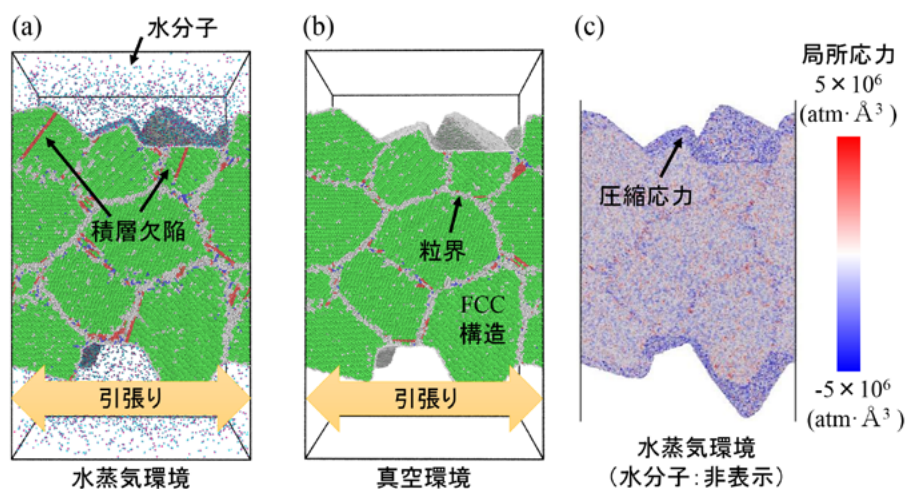


計算材料学センターだより



大規模分子動力学法を用いた固体酸化物形燃料電池用Ni電極の破壊特性シミュレーション：水蒸気の化学反応が与える影響
Large-Scale Molecular Dynamics Simulation on Fracture Properties of Ni Electrode for Solid Oxide Fuel Cell: Effect of
Chemical Reactions by Water Vapor

CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・ AVS/Express 講習会を開催
- ・ DIGITS を用いたディープラーニング講習会を開催
- ・ 平成 28 年度の計算材料学センター見学者
- ・ 平成 28 年度の計算材料学センターの技術支援実績
- ・ 平成 29 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日
- ・ 新人職員あいさつ

CCMS
NEWS
27

表紙の図について

■大規模分子動力学法を用いた固体酸化物形燃料電池用 Ni 電極の破壊特性シミュレーション：水蒸気の化学反応が与える影響

固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の燃料極材料である Ni/YSZ には、高温作動中に亀裂が発生する問題がある。また作動中において、燃料中の水蒸気量によりその亀裂の発生のしやすさが異なることが実験的に示されている。SOFC の高寿命化を実現するためには、水蒸気が破壊特性に与える影響を原子・分子レベルで明らかにすることが重要であるが、未解明である。そこで本研究では、著者らが開発した大規模分子動力学シミュレータを用いて、水蒸気環境における多結晶 Ni の引張り計算を行い、水蒸気の化学反応が破壊特性に与える影響を検討した。約 200 万原子の大規模 Ni 多結晶モデルに対して引張り計算を行った結果、真空環境に比べて水蒸気環境の方が、多結晶 Ni において積層欠陥の生成が促進されることを明らかにした (図 (a)、(b))。その原因を明らかにするために、圧縮応力の解析を行ったところ、水蒸気環境では Ni 表面に強い圧縮応力が発生する (図 (c)) のに対し、真空環境では Ni 表面に強い圧縮応力は観察されなかった。水蒸気環境では、水蒸気との化学反応によって電荷移動が起こりクーロン力が強まることから、圧縮応力の発生原因であることも明らかにした。以上の結果より、水蒸気と多結晶 Ni 表面との化学反応に伴う電荷移動によって表面に圧縮応力が発生し、積層欠陥が生成しやすくなることを明らかにした。

■ Large-Scale Molecular Dynamics Simulation on Fracture Properties of Ni Electrode for Solid Oxide Fuel Cell: Effect of Chemical Reactions by Water Vapor

Ni/YSZ anode of a solid oxide fuel cell (SOFC) has a problem of crack generation during high operation temperature. Moreover, experiments showed that the possibility of crack generation depends on the amount of water vapor in fuel during the operation. For prolonging the SOFC life, it is important to clarify the effect of water vapor on fracture properties at atomic- and molecular-scale, however it remains unclear. In this study, the tension simulations of polycrystalline Ni in water vapor are performed by our developed large-scale molecular dynamics simulator and the effect of chemical reactions between the water vapor and polycrystalline Ni surface on the fracture properties is discussed. Our large-scale polycrystalline Ni model consisting of around 2 million atoms revealed that the generation of stacking fault in the polycrystalline Ni is accelerated in water vapor compared to that in vacuum (Figure (a) and (b)). To clarify the reason of this effect, the compressive stress distribution is analyzed. A large compressive stress is generated at the surface of the polycrystalline Ni in water vapor (Figure (c)), whereas it is not observed in vacuum. In water vapor, charge transfer occurs due to the chemical reactions, leading to an increase in Coulomb force. This is the reason why the compressive stress is generated. Thus, it is concluded that the compressive stress, which is generated by the charge transfer due to the chemical reactions between the water vapor and Ni polycrystalline surface, accelerates the generation of stacking fault.

センター長あいさつ



計算材料学センター長
久保 百司

この度、2017年4月1日より計算材料学センターのセンター長を仰せつかりました久保百司と申します。2年前に、東北大学工学研究科機械系のマルチフィジックス計算科学研究分野の担当から、金属材料研究所に異動し計算材料学研究部門を担当させて頂くことになり、さらに本年度から計算材料学センターのセンター長を拝任させて頂くことになりました。京都大学工学部石油化学科を卒業し、助手と助教授の時は東北大学工学研究科の化学・バイオ系に所属しておりましたので、これまで「化学」から「機械」、そして「材料」へと所属を変えることによって、それにあわせて自分自身の研究分野を変遷させ、その度に、新しい研究分野に踏み込む楽しさと苦労を経験し、自分なりの異分野融合研究とは何かについてチャレンジをしてみたいました。そして本年度からは、スーパーコンピュータという「巨大科学」分野の発展を支援させて頂くという自分自身にとって、また新たなチャレンジを経験させて頂くことになりました。スーパーコンピュータの全国共同利用施設としての利用支援、スーパーコンピュータの管理・運営、シミュレータの並列化支援、計算材料科学コミュニティへの貢献など、今までとは全く異なる仕事に新たな楽しさとやりがいを感じる一方で、スーパーコンピュータを問題なく運用することに対しての責任を強く感じしております。至らぬことも多いと思いますが、精一杯努力していく所存ですので、今後ともご支援・ご指導を頂けますよう宜しくお願い申し上げます。

昨年度から文部科学省のポスト「京」プロジェクトにおいて、萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」の課題責任者も担当させて頂いております。「京」またはポスト「京」を第1階層とする日本のスーパーコンピュータの階層構造の中で、第2階層にあたる金属材料研究所のスーパーコンピュータを多くの研究者の方々に活用して頂くとともに、金属材料研究所のスーパーコンピュータ上で開発されたアプリケーションソフトウェアが、日本のフラッグシップである「京」またはポスト「京」上での活用に繋がっていくことを期待しております。このような国家プロジェクトの実施を通して、日本の計算材料科学コミュニティの発展に貢献できればと思っております。

私自身としては、スーパーコンピュータの活用によって、単に大規模計算が可能になる、単に高速

な計算が可能になるという単純な「量の変革」ではなく、1) 今まで計算できなかったものが計算可能になる、2) 今まで解明できなかった現象が解明可能になるというように、大きな「質の変革」に結びつけることで、スーパーコンピュータを活用した「巨大科学」の重要性・有効性をアピールできればと考えております。いかに金属材料研究所のスーパーコンピュータの存在意義を世界に対して示すことができるかという課題に対して、センター職員と一緒に頑張っていきたいと考えております。

来年の7月には本計算材料学センターに、3ペタ FLOPS 以上の新しいスーパーコンピューティングシステムの導入が予定されており、現在のスーパーコンピュータ「京」の計算速度が10ペタ FLOPSであることを考えると、センター職員一同、新しいスーパーコンピューティングシステムへの期待が膨らんでいるところであります。センター職員が一丸となって、金属材料研究所のスーパーコンピュータの運用を通して、日本の計算材料科学コミュニティの発展、さらには材料科学全体の発展に貢献していきたいと考えております。今後とも、計算材料学センターへの皆様のご協力・ご支援をよろしくお願い申し上げます。

アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ

スーパーコンピューター

1. Gaussian 16

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 16 Rev A.03 をインストールしました。

Gaussian 16 では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 構造最適化計算や遷移状態計算
- ・ 自由エネルギー、IR スペクトルなどの物性値の算出

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_gaussian16.html

Gaussian の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://gaussian.com/>

2. WIEN2k

全電子計算法を用いた第一原理シミュレーションプログラムである WIEN2k を 16.1 へバージョンアップしました。

WIEN2k では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ エネルギーバンドおよび状態密度の計算

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_wien2k.html

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.wien2k.at/index.html>

3. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 5Nov16 をインストールしました。

LAMMPS では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ ソフトマター、固体など多くの系での分子動力学計算

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_lammps.html

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://lammps.sandia.gov/>

4. OpenMX

原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラムである OpenMX のバージョン 3.8.1 をインストールしました。

OpenMX では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 密度汎関数理論に基づく、高速かつ高精度な電子状態計算
- ・ 大規模系に対しての分子動力学計算や構造最適化計算

使用方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_openmx.html

OpenMX の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.openmx-square.org/>

5. feram

強誘電体を対象とした高速分子動力学シミュレーターである feram のバージョン 0.26.03 をインストールしました。

feram では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 双極子相互作用を効率よく取り扱うことで、原子変位に関する高速な分子動力学計算
- ・ 数十 nm の微細な強誘電性薄膜の物性を、形状や不活性層の効果などを制御しながらのシミュレーション

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/super/application/usage_feram.html

feram の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://loto.sourceforge.net/feram/>

アプリケーションサーバー

1. Gaussian 16

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 16 Rev A.03 をインストールしました。

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_g16.html

Gaussian の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://gaussian.com/>

2. GaussView 6

Gaussian の入力ファイルの作成や計算結果を可視化するためのソフトウェアである GaussView 6 をインストールしました。

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_gview6.html

GaussView 6 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://gaussian.com/gv6new/>

3. WIEN2k

全電子計算法を用いた第一原理シミュレーションプログラムである WIEN2k を 16.1 へバージョンアップしました。

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_wien2k.html

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.wien2k.at/index.html>

4. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 5Nov16 をインストールしました。

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_lammps.html

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://lammps.sandia.gov/>

5. CRYSTAL14

原子局在ガウス基底と擬ポテンシャル法に基づく第一原理計算プログラム CRYSTAL14 をインストールしました。

CRYSTAL14 では主に次のような計算を行うことができます。

- ・ 構造最適化計算
- ・ 調和振動周波数計算

実行方法：http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~hitachi/app/application/app_crystal.html

CRYSTAL の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.crystal.unito.it/>

AVS/Express 講習会を開催

AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって簡単に計算結果の可視化が出来る、汎用 3 次元可視化ソフトウェアです。当センターではスーパーコンピュータで得られた計算結果の可視化のためにアプリケーションサーバーに AVS/Express をインストールし、ユーザーにサービスしています。そして AVS/Express を活用していただくために、AVS/Express の概要、基本的なモジュール結線、計算材料学センターで開発した VASP 用のモジュール、新開発した粒子が存在する位置の境界面を生成する Boundary Surface モジュール、その他の便利なモジュールの紹介と操作、そして、応用と実習という内容で、2016 年 12 月 14 日（水）にスーパーコンピュータ棟を会場として講習会を開催いたしました。金研の所内より、外国人を含む 4 名に参加して頂きました。



AVS/Express 講習会の様子

DIGITS を用いたディープラーニング講習会を開催

DIGITS はディープラーニングフレームワーク Caffe, torch をブラウザベースで操作するためのツールです。2017 年 4 月 12 日（水）スーパーコンピュータ棟を会場とし、本センターの丹野技術職員が講師として Caffe と DIGITS を用いて手書き数字データセット (MNIST) を識別するハンズオン講習会を行いました。講習会では、ニューラルネットワークの作成、学習、未知データを用いた推論、性能向上の方法など画像に関するディープラーニングのワークフローを一通り行い、実際に DIGITS を操作して手書き数字を識別しました。金研の所内から 9 名の方が受講しました。



ディープラーニング講習会の様子

平成 28 年度の計算材料学センター見学者

期間 :2016 年 4 月～ 2017 年 3 月

見学日	見学者	所属 / 会議など
2016 年 6 月 6 日	Jean-Claude Crivello 氏 他 2 名	東北大学金属材料研究所
2016 年 6 月 14 日	八鍬 友一氏 他 40 名	(株) 日立ソリューションズ東日本
2016 年 8 月 4 日	八戸北高校 36 名	青森県立八戸北高等学校
2016 年 9 月 28 日	日亜科学工業 3 名	日亜科学工業 (株)
2016 年 9 月 28 日	松岡 隆志氏	東北大学金属材料研究所
2016 年 10 月 3 日	久保 百司氏 他 3 名	東北大学金属材料研究所
2016 年 10 月 25 日	KIST 研究員 6 名	Korea Institute of Science and Technology
2016 年 11 月 1 日	新庄中学校 22 名	山形県新庄市新庄中学校
2017 年 2 月 6 日	柿本 浩一氏	九州大学応用力学研究所
2017 年 2 月 6 日	何 崗氏 他 6 名	中国地質大学
2017 年 2 月 17 日	八鍬 友一氏 他 6 名	(株) 日立ソリューションズ東日本
2017 年 3 月 29 日	久保 百司氏 他 10 名	東北大学金属材料研究所

見学者総数 137 名



■ 青森県立八戸北高校 36 名
2016 年 8 月 4 日



■ KIST 6 名
2016 年 10 月 25 日



■ 新庄市新庄中学校 22 名
2016 年 11 月 1 日

平成 28 年度の計算材料学センターの技術支援の実績

本センターは、所内のみならず、国内外の研究機関に計算機資源の提供をしており、ユーザーに対しての技術支援を行っています。

平成 28 年度の技術支援内容と件数について、所内 10 研究室および、所外 49 研究機関へ合計 247 件の支援を行いました（表 1）。

技術支援の内容

計算機資源の提供、スーパーコンピューティングシステム関連の利用支援、アプリケーション関連の利用支援、ネットワークの設定、リモートアクセス等の接続支援、および大判プリンタの利用支援。

表 1. 技術支援先の内訳と件数

技術支援先	支援先研究機関の数	件数
所内	10 研究室	51
学内	5 研究機関	42
国内の研究機関	17 研究機関	79
国外の研究機関	27 研究機関 (13 ヶ国)	75
合 計	59	247

平成 29 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日

スーパーコンピューティングシステムは、基本的に 2 か月に 1 度、定期保守を行っています。また、片平キャンパスの計画停電の際にも停止する予定です。保守時間はその時の保守内容によって異なりますので、詳細についてはそのつど、メールでお知らせいたします。皆様のご協力をどうぞよろしくお願い申し上げます。

片平キャンパスの計画停電の予定

2017 年 8 月 5 日 (土) 7:30 から 8 月 6 日 (日) 18:00 まで

定期保守日については、センターのホームページでも案内しています。

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/Jpn/news/maintenanceyear.php>

新人職員あいさつ

この春より計算材料学センターに勤務しております小林友紀と申します。勤務場所はスーパーコンピューター棟の2階で、その階下にはエメラルドグリーンのスパコン10筐体が鎮座しています。センターでは主に事務手続きなどを担当していますが、併せてスパコンの初歩的な知識も少しずつですが深めていけたらと思っております。

先日は初めて共融会のお花見に参加しました。400名以上の参加者にバス6台が用意されて、食べきれないほど豪華なお弁当は食欲旺盛な私にはとても嬉しく心強いかぎりでした。また、満開の桜のもと、広報や毛利研究室、久保研究室の方々からお話を聞くことができ、とても充実した時間を過ごせました。共融会では、他にもイベントがあるそうなので、今から楽しみです。

慣れないうちは皆さまにご迷惑をおかけすることもあるかもしれませんが、日々努力してまいりますので、よろしくお願い致します。



事務補佐員 小林 友紀



計算材料学センター職員

計算材料学センターだより No.27

2017年5月31日 発行

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター
〒980-8577 仙台市青葉区片平二丁目1番1号
電話 (022) 215-2411 FAX (022) 215-2166

URL <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/>

E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp

