

リチウムイオン電池起電力  
シミュレータ

emfsim

操作マニュアル

## はじめに

この文書は、リチウム電池起電力シミュレータ **emfsim** のインストールと操作のためのマニュアルです。インストール→計算の準備→計算という一連の作業の方法を記述しています。

## 内容

1. インストール作業、プログラムの起動と終了.....	2
1.1. 動作の前提.....	2
1.2. インストール作業.....	2
1.2.1. インストールフォルダの作成.....	2
1.2.2. プログラム、コンフィグファイルの配置.....	2
1.3. プログラムの起動と終了.....	2
2. 計算の準備.....	3
2.1. 作業用フォルダの準備.....	3
2.1.1. 作業用フォルダの作成.....	3
2.3.2. 初期ファイルの配置.....	4
2.2. 実行用の各種パラメタの設定.....	4
2.3. 主画面での設定.....	6
2.3.1. 作業用フォルダの設定.....	6
2.3.2. 実行モードの選択.....	6
3. 計算の開始と中断.....	7
3.1. 計算の開始.....	7
3.2. 計算の中断.....	7
4. 各種ファイルの内容.....	7

改定履歴

平成 24 年 11 月 30 日 第一版

# 1. インストール作業、プログラムの起動と終了

## 1.1. 動作の前提

本シミュレータをインストールする同じマシンに "mopac2012" がインストールされていることを確認し、そのパスを記録しておいてください。

## 1.2. インストール作業

### 1.2.1. インストールフォルダの作成

まず本シミュレータをインストールするフォルダを新規作成します。インストールフォルダの名前は自由に決められますが、以下のような条件を満たすフォルダにしてください。

- a. "C:\Program Files" や "C:\Windows" 等、OS が特殊な保護対象としているフォルダ以外の場所にあること。このようなフォルダの下にインストールすると、そのフォルダに書き込んだファイルが実際には別の場所に書き込まれるなどの現象が起き、混乱を招きやすくなります。
- b. インストールフォルダの絶対パスに、空白や日本語を含まないこと。このようなフォルダを使用すると、内部で使用する "mopac" が認識できない場合があります。
- c. インストールフォルダの絶対パスが短いこと。同じく、内部で使用する "mopac" が長すぎるファイル名を認識できない場合があります。本シミュレータでは、作業用に比較的長いファイル名を使用する場合があります。インストールフォルダの絶対パスが 50 文字程度になるようにして下さい。

一番良いのは、"C:\emfsim" のように、ルートフォルダ直下に適当なフォルダを作成して、そこにインストールすることです。

### 1.2.2. プログラム、コンフィグファイルの配置

作成したインストールフォルダ直下に、次のようにファイルを配置します。

- ・インストールフォルダ\emfsim.exe
- ・インストールフォルダ\emfsim.exe.config
- ・インストールフォルダ\mkatmstruct.exe
- ・インストールフォルダ\regresopt.exe

必要があれば、"emfsim.exe" のショートカットを作成して下さい。右クリック→送る→デスクトップ(ショートカットを作成) で作成します。

以上でインストール作業は終わりです。

## 1.3. プログラムの起動と終了

インストールした "emfsim.exe" またはそのショートカットをダブルクリックするとシミュレータが起動します。この画面を「主画面」と呼びます。(図 1.) 終了は標準の「閉じる」ボタン、またはツールバー→「ファイル」→「終了」で終了します。(図 2.) 「ファイル」

から終了した時には「終了します。よろしいですか?」という確認画面が出ますので、「はい」を選択すると終了します。

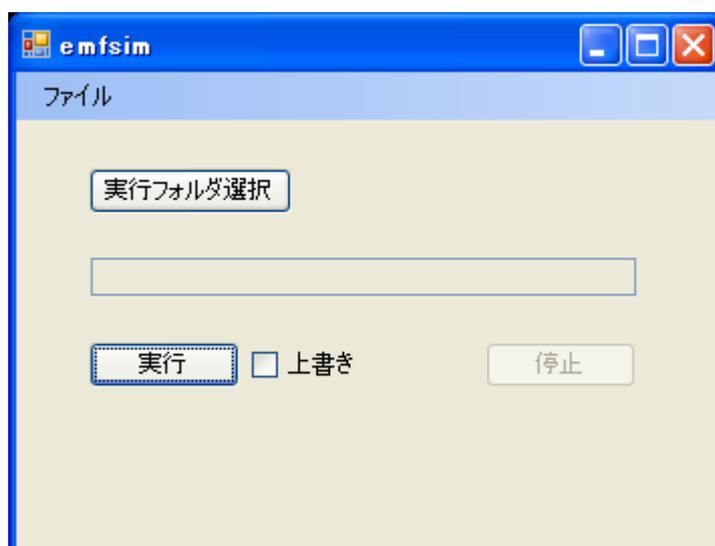


図1 主画面

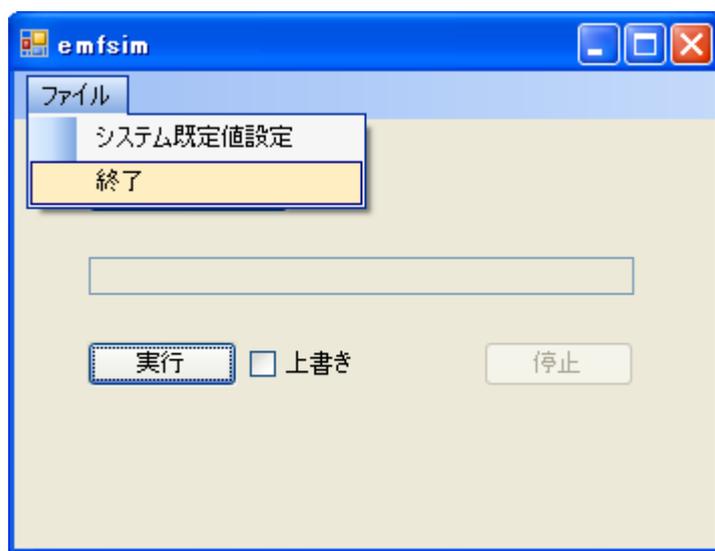


図2 終了の選択

## 2. 計算の準備

### 2.1. 作業用フォルダの準備

#### 2.1.1 作業用フォルダの作成

実験を行うための作業用フォルダを新規作成します。このフォルダも名前は自由に決められますが、インストールフォルダと同じく a. b. c. の条件を満たすフォルダとして下さい。インストールフォルダ直下に作業用フォルダを作っても結構です。

### 2.3.2. 初期ファイルの配置

作成した作業用フォルダ直下に "Source" というフォルダを作成し、さらにその直下に、以下のように初期データを配置します。

- 作業用フォルダ¥Source¥Li1V2(PO4)3.cif
- 作業用フォルダ¥Source¥Li2V2(PO4)3.cif
- 作業用フォルダ¥Source¥Li3V2(PO4)3.cif
- 作業用フォルダ¥Source¥LiAlone.dat

作業用フォルダ作成作業は以上で終わりです。

### 2.2. 実行用の各種パラメタの設定

次に、シミュレータ実行時に用いるパラメタの値を設定します。起動したシミュレータのツールバー→「システム規定値設定」を選択して下さい。(図 3.)「システム規定値設定画面」が起動します。(図 4.)

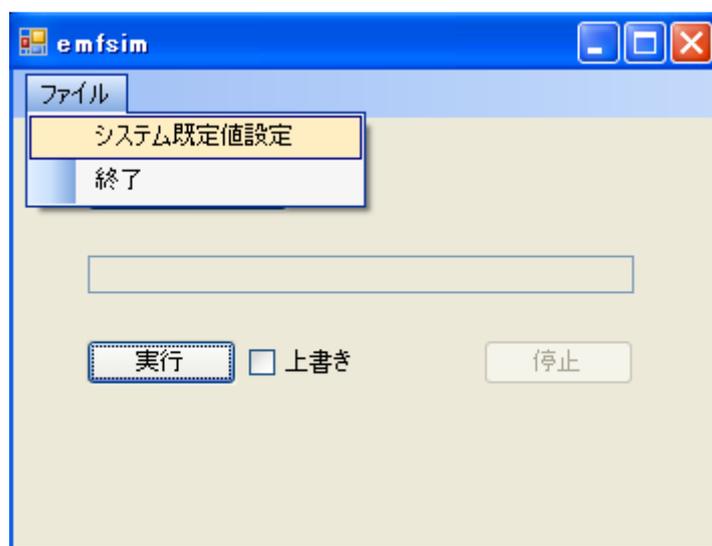


図 3 システム規定値設定画面の起動

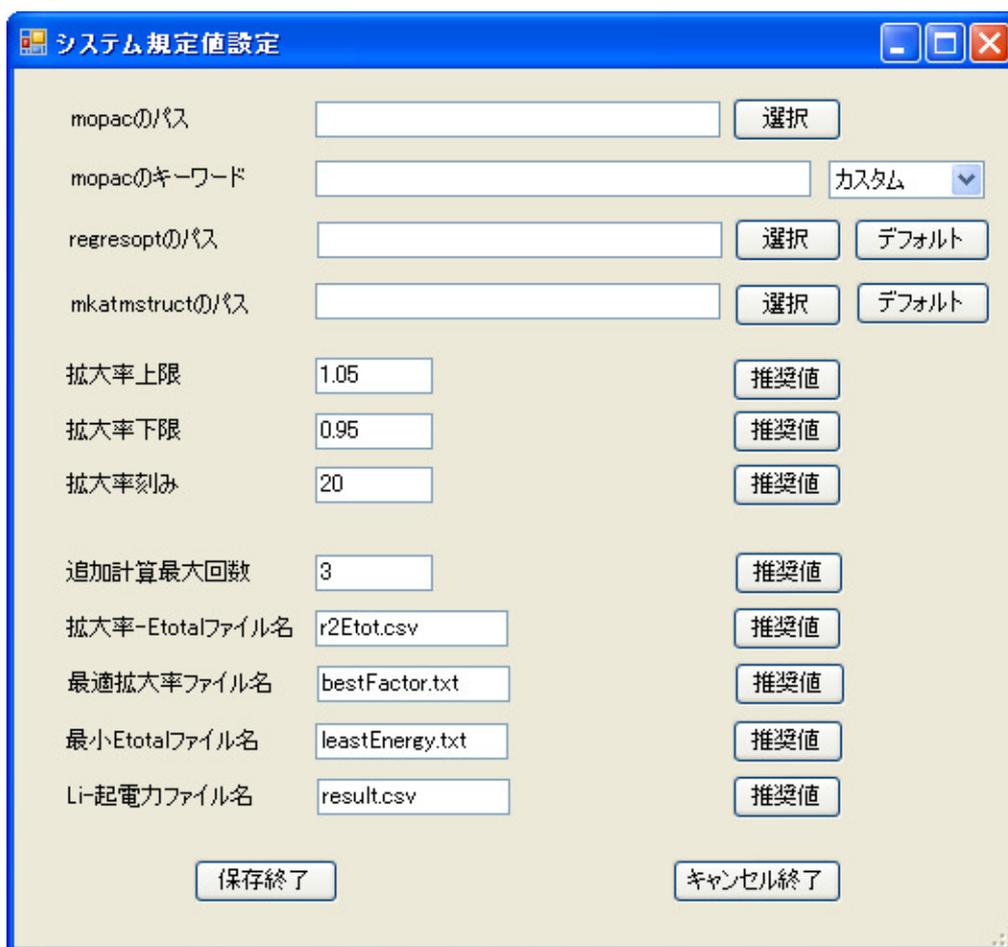


図 4 システム規定値設定画面

以下、この画面で設定する項目、およびその設定方法について説明します。選択が必須なのは、「mopac のパス」「mopac のキーワード」「regresopt のパス」「mkatmstruct のパス」の 4 項目で、それ以外は特に変更したいときに変更します。

#### mopac のパス

計算エンジン本体です。「選択」ボタンを押すとファイル選択画面が立ち上がりますので、インストールされている "mopac2012.exe" を選択します。

#### mopac のキーワード

計算エンジンに与える動作条件を選択します。選択した文字列が、"mopac" 入力用の "dat" ファイルの冒頭に挿入されます。通常は右側のプルダウンメニューで、「mopac2012」を選択すると、適切な文字列が挿入されます。選択された文字列を編集すること、または最初から新規に与えることも可能です。この場合、誤った記述を行うと、「mopac」による計算がすべて失敗することになります。十分に注意を払って下さい。ここに選択/記述する動作条件の詳細は "mopac2012" のマニュアルを参照してください。

#### regresopt のパス、mkatmstruct のパス

いずれも計算時に補助的に用いるツール "regresopt.exe"、"mkatmstruct.exe" のパスを設定します。基本的に "emfsim.exe" と同じフォルダに置きます。この場合、右側の

「デフォルト」ボタンを押すと、その情報が自動的に設定されます。これ以外の場所にこれらのツールを置いた場合には、右側の「選択」ボタンより、手動でそのパスを設定して下さい。

以下の設定は、必要に応じて変更します。変更後推奨値に戻したい場合は、右側の「推奨値」ボタンを押します。通常変更する必要はありません。

#### 拡大率上限、拡大率下限、拡大率刻み

格子定数を最適化する際に、格子定数を拡大縮小するときの拡大率の範囲と、その間のいくつかの計算点で計算するかを設定します。推奨値は、それぞれ「1.05」「0.95」「20」です。この場合、基本となる格子定数の 0.95、0.955、0.96、0.965、…、1.045、1.05 倍の格子定数を持った 20 のデータを生成し、それぞれについて全エネルギーを計算します。

#### 追加計算最大回数

"mopac" による全エネルギー計算はしばしば失敗します。すべての計算点で全エネルギーを計算しても、失敗により十分な数（最低 10 点）の情報が得られなかった場合、更に自動的に「拡大率刻み」を 1 増やして新たな計算点を作成し、これらの点について計算します。この追加計算を何回まで行うかの上限を定めます。推奨値は「3」回になっています。実際には「拡大率刻み」を 20 程度にしておけば、追加計算は多くて 1 回で済むことが多いようです。

拡大率-Etotal ファイル名、最適拡大率ファイル名、最小 Etotal ファイル名、Li-起電力ファイル名

最初の 3 つは計算用の一時ファイル名、最後は結果のファイル名です。

以上のすべての条件を設定したら、「保存終了」ボタンを押します。エラーがある場合は警告がなされます。確認を聞かれるので、はいいいえを答えます。保存せずに終了したいときは「キャンセル終了」ボタンを押します。確認を聞かれるので、はいいいえを答えます。システム規定値設定画面が閉じたら設定は終了です。設定条件は記録され、次回起動時には前回設定時の条件を自動的に設定します。従って条件を変えて実験するのでなければ、上記条件の設定は最初の一回のみ行えばよいということになります。

## 2.3. 主画面での設定

### 2.3.1. 作業用フォルダの設定

主画面の「実行フォルダ設定」ボタンを押すとフォルダ選択画面が立ち上がりますので、2.1.1 で作成したフォルダを選択します。選択されたフォルダは主画面に表示されます。

### 2.3.2. 実行モードの選択

"mopac" の計算は長時間を要します。そのため、実行時の動作に「スキップ」と「上書き」の 2 つのモードを設けています。「スキップモード」は、一連の計算の際に、"mopac" による計算結果が残っている場合はその計算をスキップします。「上書きモード」は、過去の計算結果に関わらず常に最初から計算します。スキップモードの場合、一度計算を中断して、同じ実行フォルダで、実験条件を変えずに計算を再開すると、前回の計算の続きを行うこととなります。上書きモードを選択したいときに「上書きモード」チェックボタンにチェックを入れます。チェックを入れないときは「スキップモード」で動作します。

## 3. 計算の開始と中断

### 3.1. 計算の開始

計算開始の前に、以下の点を再確認して下さい。

- ・実行フォルダが作成され、主画面に設定されたフォルダが表示されている。
- ・実行フォルダの"%Source"以下に初期ファイルが正しく配置されている。
- ・実行モードが希望通りに設定されている。
- ・システム規定値がすべて希望通りに設定されている。

計算は主画面の「実行」ボタンを押すと始まります。経過、エラー情報などは主画面下に表示されます。計算は9ステップからなります。ステップ2には12の、ステップ5には3の、ステップ7には10のサブステップがあります。「すべての処理が完了しました」と表示されれば、計算は終了です。

### 3.2. 計算の中断

計算を中断したいときは主画面の「キャンセル」ボタンを押します。ただし、そのタイミングで "mopac" による計算が進行中の場合は、その計算が終了してから中断します。これは、"mopac" による中途半端な計算結果が残らないようにするためです。

## 4. 各種ファイルの内容

以下は各種のファイルの内容です。計算上、各種フォルダ、ファイルの「名前」を参照して計算するので、これらの名前を手動で変更すると、正しく処理が行われません。

#### ・一時ファイル

次の3つのファイルは計算用一時ファイルで、  
"実行フォルダ%計算用に自動生成されるフォルダ"  
の下に生成されます。以下はその内容です。

- ・ leastEnergy.txt           最適化によって計算された最小の全エネルギーの値
- ・ bestFactor.txt           最適とされた格子定数の拡大率
- ・ r2Etot.csv               最適化に用いる、拡大率と全エネルギーの値

#### ・ログファイル

実験条件や経過、エラー等はログファイルに出力されます。ファイルは

- ・ インストールフォルダ%emfsim.log

です。

#### ・結果ファイル

次のファイルは最終結果で、"実行フォルダ%Result%" の下に生成されます。以下はその内容です。

- ・ result.csv               リチウム抜け数と起電力の値

最終結果ファイルは CSV なので、同じマシンにエクセルがインストールされている場合、そのままクリックするとエクセルが立ち上がります。適宜グラフとして表示して下さい。第一カラムがリチウム保有数、第二カラムが起電力 (V) です。