

計算材料学センターだより

## CCMS NEWS 1

2001年10月5日(金)発行

5<sup>th</sup> Oct (FRI), 2001

東北大学金属材料研究所

計算材料学センターだより

TEL : 022-215-2411 FAX : 022-215-2166

E-mail Address : [kumi@imr.edu](mailto:kumi@imr.edu)

WWW : <http://www-lab.imr.edu/~ccms/>

## CONTENTS

計算材料学センター長あいさつ

「シリコンフラーレン」の予言

新人紹介～五十嵐伸昭さん～

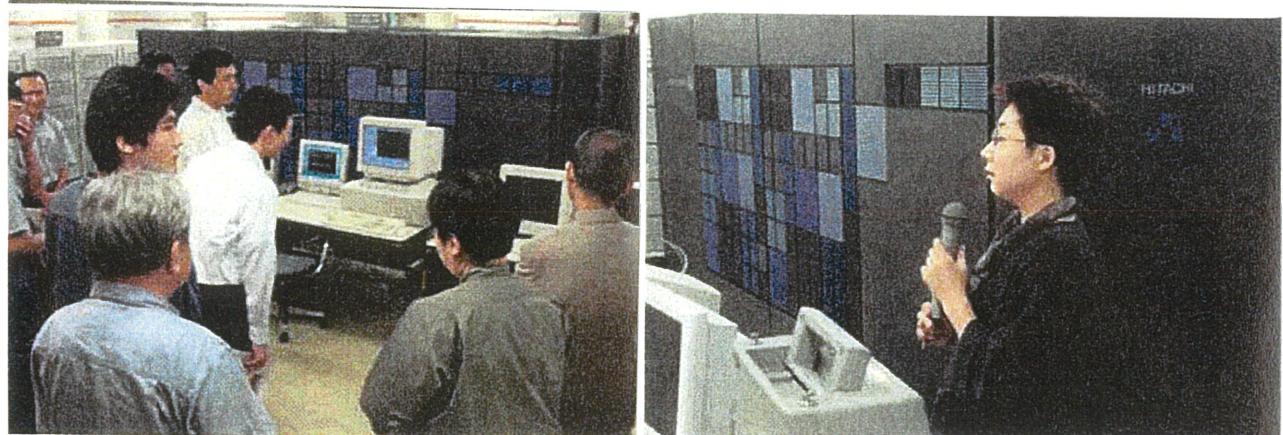
## 計算材料学センター長あいさつ

川添良幸([kawazoe@imr.edu](mailto:kawazoe@imr.edu))



本所に待望の新スーパーコンピューティングシステムが導入されてから、早いものでもう半年が過ぎてしまいました。この間に、システムも安定化し、所内外への御披露目も無事にすみました。さて、7年前に導入された初号機 HITACHI S-3800 システムは、ベクトル型計算機の最高レベルを達成した名機でした。3CPU 並列で 24Gflops のカタログ性能の半分程度の実行性能を発揮したおかげで、Nature 誌に掲載された水のアモルファス相に関する研究を含め多数の高度な論文を発表することができました。しかし、5 年で 10 倍という計算機の急速な進歩のため、ドンガラレポートの 500 番外になり、最後の数年、本所のシミュレーション計算の大半は他所の装置によってなされていました。（川添研は大計と原研、前川研は物性研）また、導入手続きに関わったための仕事量は膨大で、私の研究室の論文は、平成 12 年度には前年の半分程度に止まりました。

こうした苦労の末である新スーパーコンピューター HITACHI SR8000 は最大限に活用し、有意義なシミュレーション研究を行わなければなりません。64 ノード全てを並列に使った超大規模計算も計画していますが、多くのジョブを効率良く処理するためのパーティション設定を試み、通常は、最大 16 ノードまでのシングル及び並列ジョブを実行しています。このようにして、最大稼働率を上げることが出来るようにチューニングしながら、既に、24 時間、常に満杯の稼動状況を達成することが出来ました。



この半年で既に多数の有意義な研究成果が出ています。例えば、COE客員教授のKumar博士は、金属を内包した最小サイズのシリコンクラスターを発見しました。これは、フラーレンの発見に匹敵するかも知れません。少なくとも、工業的には、クラスター基有用物質の構成要素として、今後の実験が期待されます。また、新素材設計開発施設の水関博志助手を筆頭とする研究グループは、分子エレクトロニクス用ナノスケール素子の設計を精力的に進め、原子細線中の電気伝導特性算定に成功しています。

このように、本所の研究者及び共同利用研究者による処理プログラムの質及び量は共に増大する一方であり、本所のシミュレーション研究内容は、世界最高レベルを達成しております。こうして、計算量も膨大になり、今後益々スーパーコンピューターの進展を待たなければならない面も多く、メーカーには一層高速な装置の開発を期待しています。(写真は全てスーパーコンピューティングシステム導入披露の時のものです)



## 「シリコンフラーレン」の予言

本センターの川添センター長とクマール客員教授は、第一原理シミュレーション計算により、金属原子1個を内包する最小の籠型安定シリコンクラスターの構造決定に成功した。最も小さい分子は14原子からなり、立方晶の一部の様な形態をしている特徴を持つ。また、驚くべき事に、16原子のシリコン原子は最小のフラーレン型の分子を構成している。これらの新物質の構造は極めて安定で、ワイドバンドギャップ光学素子等、クラスター基新物質開発の基礎となると期待されるので、この新しい「フラーレン型シリコン」が実在することを確認する探索実験が待たれる。この結果は、7月23日付けの Physical Review Letter 誌に掲載された。

(その他掲載紙、日本経済新聞 2001年7月23日、日刊工業新聞 2001年7月24日、河北新報 2001年8月22日、The Nikkei Weekly 2000年8月23日)

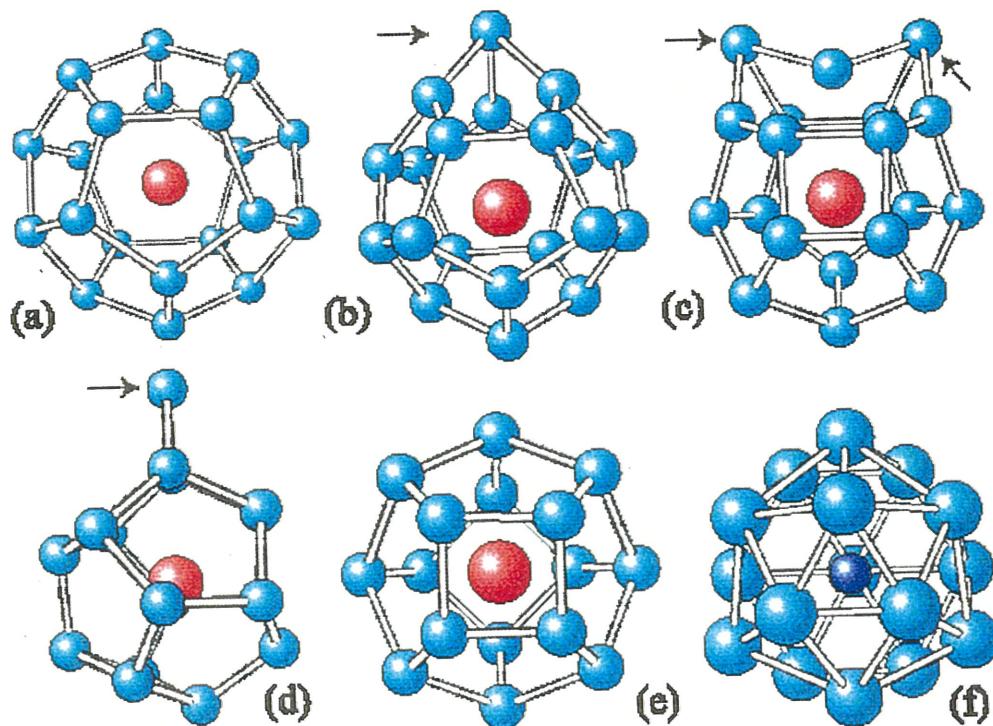
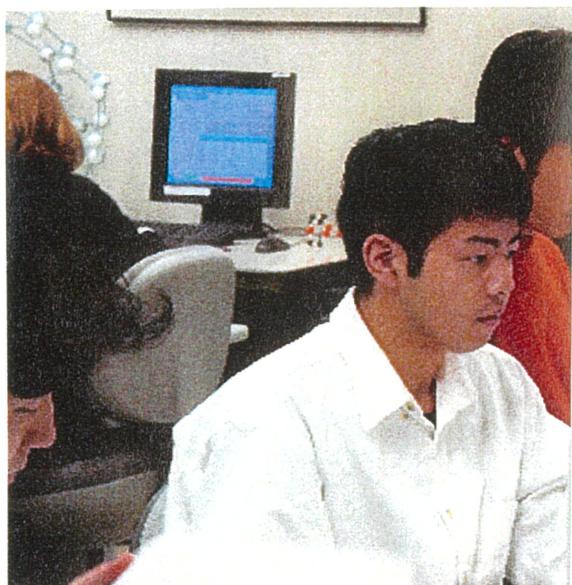


図1. かご型 Si<sub>20</sub> を初期クラスターとし、それを縮小して最小安定クラスターを探索する方法。(a) Zr 原子内包十二面体 Zr@Si<sub>20</sub> クラスター。(b)–(e) Zr@Si<sub>20</sub>, Zr@Si<sub>19</sub>, Zr@Si<sub>17</sub>, Zr@Si<sub>16</sub> の最適化構造、矢印は、縮小する時に外した原子。Hf@Si<sub>16</sub> に対しても同様の構造が得られている。(f) M@Si<sub>16</sub> (M=Ti,Hf) のフランク・カスパー多面体構造。中心にあるのが金属原子で、見易さのため結合の手は省略している。

## ～計算材料学センターの新人紹介・五十嵐伸昭さん～



### 五十嵐伸昭(技官)

4月にこちらに配属になって、現在ではだいぶ仕事の内容についても理解できるようになりました。また、講習会等に参加し、いろいろな経験をさせていただいています。

大阪での並列プログラミング講習会ではチューニングの重要さを感じました。講師の方の経験では2行ほど修正することによってパフォーマンスが約80倍になったプログラムもあったそうで、チューニングすることで2、3割はパフォーマンスが向上するということでした。また、パフォーマンスに関するオプションをつけるのとつけないとでは通常4～5倍もパフォーマンスが変わるというのには驚きました。チューニングによって時間を短縮できることも重要ですが、私たちの使うスーパーコンピュータのように複数の人が使用する場合は資源の有効利用ということを考えてもチューニングはとても重要なことだと思いました。

今後は、計算量が膨大なプログラムが増え、並列プログラミングの習得は必須になってくるものと思われます。その中で、いかに効率よくプログラムをチューニングし、パフォーマンスを向上させるかということも重要なことになってくると思いました。

また、秋田での電気関係学会東北支部連合大会では金研が導入したファイアウォールについて発表させていただきました。セキュリティについて学んで、システムとしてのセキュリティ対策は非常に重要な問題ですが、現在のような危険なウィルスが次々と発見されている状況では一人一人が認識を改め、常に注意しなければいけないと感じました。

これからは徐々に研究のほうもやっていきたいと思っています。