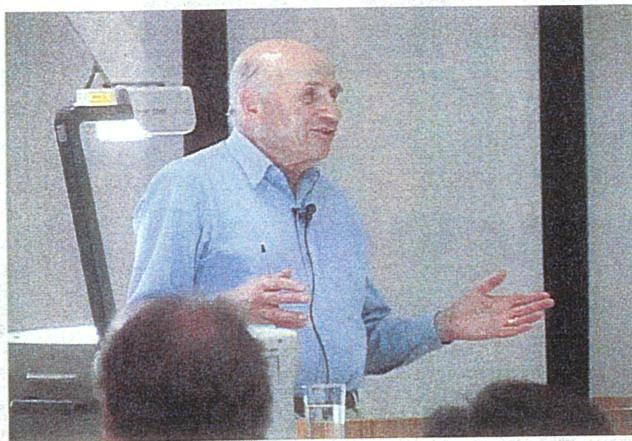


計算材料学センターだより

CONTENTS

- ・ノーベル化学賞受賞者カリフォルニア大学コーン教授の本所訪問
- ・スーパーSINET 推進協議会ナノテクノロジー部会用システム運用開始
- ・片平まつりでの金研一般公開
- ・学術創成研究記者発表 金研からのネットワーク経由での参加を支援
- ・AVS6.1へのバージョンアップについて
- ・Materials Studio2.1へのバージョンアップについて
- ・スーパーコンピューティングシステムからのプリント方法について
- ・スーパーコンピューターSR8000 停止のお知らせ

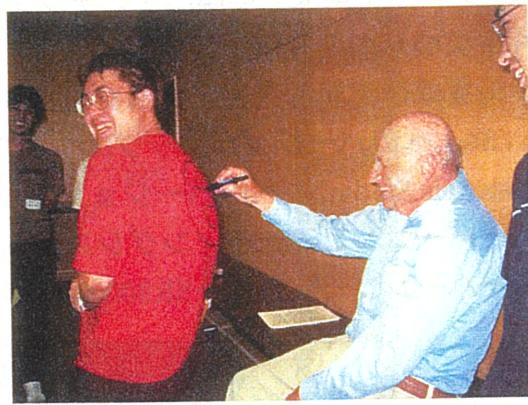
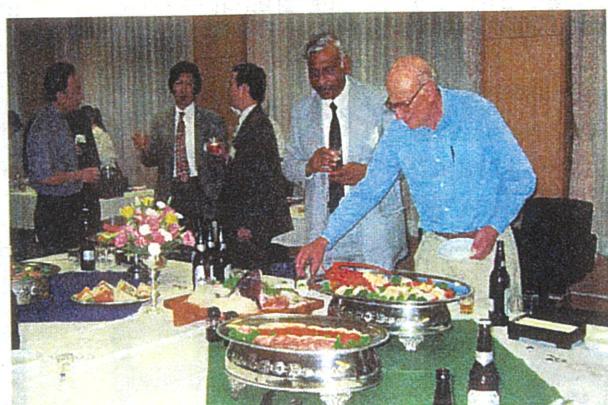
ノーベル化学賞受賞者 カリifornia大学コーン教授の本所訪問



コーン教授による1964年の密度汎関数理論とそれに基づく第一原理計算法の開発は、物性理論に止まらず、電子系の関係する化学、薬学、生物学、等の広範な学問に本質的な進展を与えた。すなわち、従来は複雑すぎて単純なモデル計算以外は不可能であると考えられていた電子多体系の問題を、具体的な数値計算によって解決可能としたのである。その後、スーパーコンピューターの進展により、

実際的な問題が次々と解明されるようになり、その有用性が証明された。こうして、1999年のノーベル化学賞に輝くこととなった。

コーン博士から、直接ノーベル賞講演の内容をお聞きできる又とないチャンスを得ることができたことは、本学の研究者にとって誠に幸いであった。もちろん、ノーベル賞受賞後の初来日であり、日本中の関係者に連絡をとった。講演会の当日は、金属材料研究所講堂に超満員の200名以上が集まり、別室にテレビで同時放映して凌いだ程である。また、この講演会の様子は、本所ネットワーク運用室が担当してインターネットで国内外に同時放映した。79歳とは思えないかくしゃくとした姿勢で、ノーベル賞受賞講演会の再現をしていただいた。数万原子系までを第一原理で計算できるようになれば、興味のある対象は全て網羅されるという、我々にとって元気の出る話題から始められ、最新の理論の進展までを分かり易く説いていただいた。極めて友好的な紳士であられ、質問にも懇切丁寧に答えていただいた。図に講演会後の懇親会のスナップショットを載せたので、当日の打ち解けた雰囲気を味わっていただきたい。



約一週間の滞在中、担当研究室である合金設計制御研究部門の研究者との討議に多くの時間を費やしていただいた。特に、本所のスーパーコンピューターを活用した第一原理計算実績には強い

関心を示され、コーン教授の提案で、一般化密度勾配近似のパラメーターを量子モンテカルロ法によって決定するための国際共同研究を開始した。

この機会に、全国共同研究者を中心として、若手を含む多くの研究者が集まり、講演会に出席するとともに、コーン先生からいただいた直接の助言は、第一原理計算を研究課題とする我が国の研究者にとって極めて重要なものであり、本招聘によって研究上大きな成果が得られた。コーン教授は、約一週間という短い滞在期間ではあったが、本所内外の研究者や学生と極めて真摯に対応していただけた。朝早くから夜まで、時間も気にせず、若手研究者の声に耳をすまして聞き入り、適切な助言をなされる姿は感動的ですらあった。高齢を全く感じさせず、約2時間の講演会も立ったままで行われ、その後の懇親会でも、椅子を用意したにも関わらず、立たれたままで次々と訪れる研究者と最先端の議論を戦わせておられた。これらは、我々全てが見本とすべきことであり、大変な刺激となった。

コーン教授は、第一原理計算法の開発に止まらず、コーン異常、KKR 法、等の名前の入った多くの業績を持つ。これは、普通のレベルの研究者ではとても無理なことである。また、生涯の論文数は 60 編足らずであるが、全て重要な学問上の寄与を行ったものばかりであり、一つ一つ慈しまれた成果であることが、直接お会いしてしみじみ感じられた。最近の論文量産主義への重要な警鐘であるとも考えられ、今後、心して内容の充実した研究成果の発表を目指すべきであると大いに反省した次第である。

スーパーSINET推進協議会
ナノテクノロジー部会用システム運用開始
—スーパーコンピューター結合によるナノテクノロジー研究体制の確立—

The image consists of two parts. On the left, there is a block of Japanese text describing the development of nanotechnology. On the right, there is a photograph of a man in a suit and tie speaking on a television screen. The screen has a digital clock at the top left showing "6:13". Below the clock, there is a small inset image of a laboratory or workshop. At the bottom of the screen, there is a blue banner with white text that reads "ナノテクノロジー 発展の歴史" (History of Nanotechnology Development) and "NEWS ニュース" (News). The background of the entire image is a blurred photograph of a man in a suit.





一方、昨年度から、国内の高度研究機関を10Gbpsという超高速光通信で結合し、研究機関間の情報共有と連携強化を図るためのスーパーSINET設置が開始されています。このネットワークの活用を図るため、宇宙物理学、高エネルギー物理学、ライフサイエンス、ナノテクノロジー、及びGRIDの5部会構成による推進協議会が設けられ、本センター長の川添がナノテ

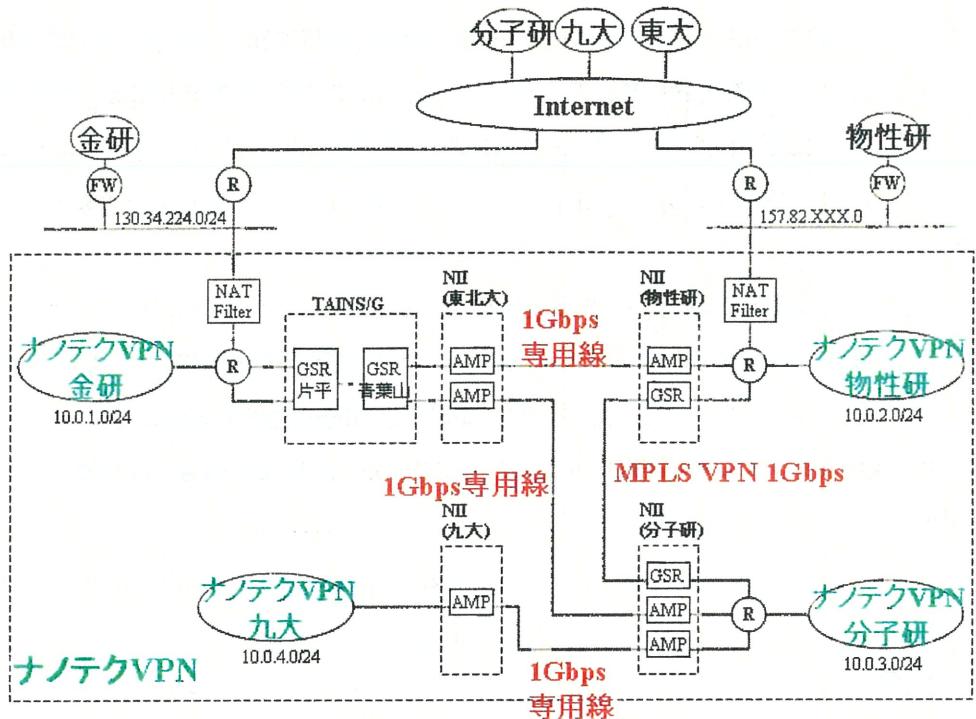
クノロジーディレクターを仰せつかっております。また、他に、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所（分子研）の茅幸二所長を代表として、学術創成研究費による「新しい研究ネットワークによる電子相関系の研究—物理学と化学の真の融合を目指して—」という研究プロジェクトが活動を開始しており、その一部にもスーパーコンピューター結合による超大規模シミュレーション計算が企画され、川添が計算機ネットワーク構築班長になっております。さらに、ナノテクノロジー研究専用の超大型スーパーコンピューターの概算要求が分子研を中心として進められています。

10月1日(火)に、ナノテクノロジーディレクターを構成する、本所、分子研、東京大学物性研究所、及び九州大学間のスーパーSINET結合が完成しました。図に示すように、従来のスーパーコンピューター間をVPN(Virtual Private Network)によって結合し、より大規模な材料設計シミュレーション計算実行を可能とする試みが開始されたと言えます。現在、本所独自開発の全電子第一原理計算プログラムであるTOMBO(Tohoku Mixed-Basis Orbital)コードを最初の例題として採用し、その分散処理化と、ネットワーク上での効率的処理方策の検討を行っています。

尚、本記事に関しては、10月1日(火)のNHKニュースで詳細に報道されました。



—ナノテクノロジーVPN構成図—



2002年10月12日(土)、13日(日)の両日、片平まつりが開催されて、東北大学片平キャンパスは2年振りに一般に公開されました。これに金研も参加し、所内各部門では各々の公開テーマにより展示や公開実験などが披露され、今までの一般公開の中で最高の1500人以上の人出を記録しました。



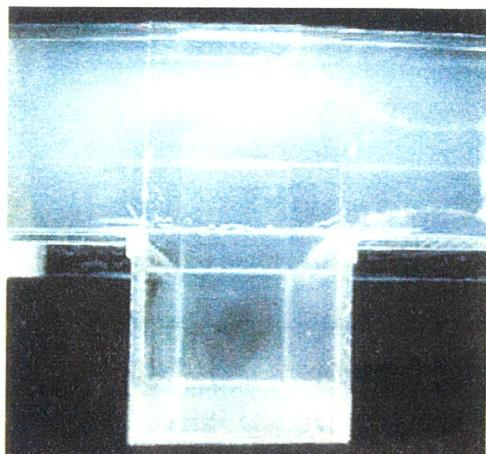
当センターの公開テーマは「スーパーコンピューターと高速ネットワークによる材料設計支援」ということで、スーパーコンピューターの持つ高速演算性能とそれを生かすための高速ネットワークに関してアピールし、それらがどのように役立っているかを一般の方々にご理解頂けるよう計画しました。ブースでは一般の方にわかりやすいように、スーパーコンピューターと高速ネットワークの存在意義、またそれらと一般に普及してい

るパソコンや電話回線を使ってのネットワークとの違いのパネル説明に始まり、さらに一般ネットワークと高速ネットワークの体感コーナー、実験とシミュレーションの比較コーナーを設置しました。

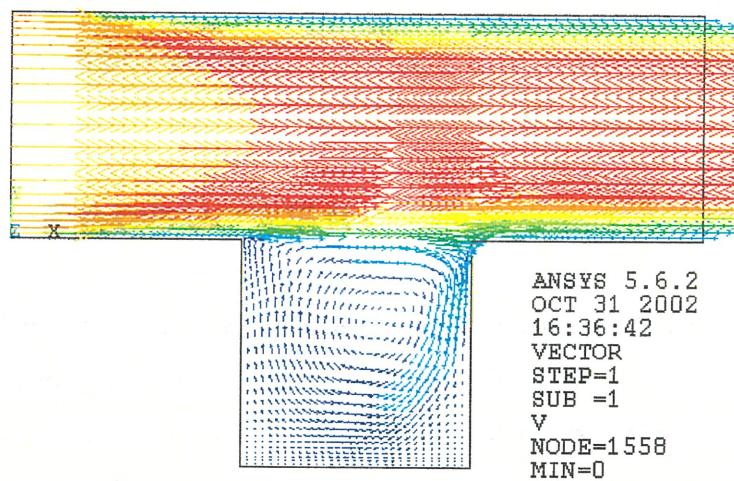
一般ネットワークと高速ネットワークの体感コーナーでは、テレビ会議システムを用い、別の部屋に設置したカメラからの中継映像を56kbps の遅い回線と100Mbps の高速回線とで比較しました。電話回線経由でのほとんど使い物にならないとぎれとぎれの映像と割れた音声に比べ、高速ネットワーク経由での鮮明な映像とリアルな音声は来場者に未来のコミュニケーションの形を実感させました。また子供たちはテレビ電話のような離れた場所とのコミュニケーションをとても喜び楽しんでいました。このシステムは、国内材料研究所間で使われ始めているものと同様の性能で、我々が日常、研究者の支援を行っているものを公開しました。

また実験とシミュレーションの比較コーナーでは一般の方に馴染み深い簡単な例として、材料の変形、煙の流れ、電磁石の作る磁力線のそれぞれのシミュレーションと実験を並べて示して、結果が同じになる点を来場者に認識して頂きました。子供たちは実験で起こる現象そのものに興味を示し、中高生以上では実験結果と計算結果の一一致に多くの方が驚嘆されていました。シミュレーションの必要性、有用性、発展性についてよいアピールとなつたことでしょう。

実験



シミュレーション



ブースで実演した煙の流れ方を調べる実験とそのシミュレーションの対比

学術創成研究（新プロ）記者発表（10月23日・於 KEK）について 金研からのネットワーク経由での参加を支援

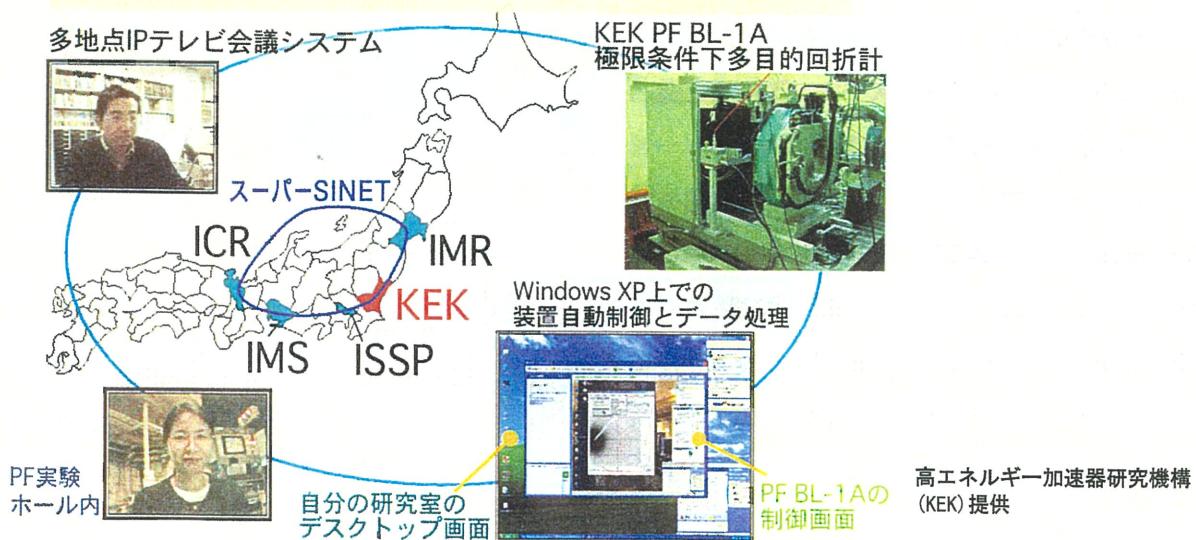
現在、岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所の茅幸二所長を総括代表として、学術創成研究費による「新しい研究ネットワークによる電子相関系の研究－物理学と化学の真の融合を目指して－」という研究プロジェクトが進行中です。このプロジェクトは平成13年度から5年間をかけて、わが国の物性研究を代表する5つの研究所を軸として行われる学術創成研究であり、コラボラトリ－という従来とは異なる研究システムを介して、物性物理学と物性化学が境界領域としても多様な電子相関系の物質科学研究を行い、物質科学の基礎研究の新しいパラダイムを構築することを目的としたものです。本研究所からも多数の方々がこのプロジェクトに参加されています。

この度、このコラボラトリ－システム(Colaboratory System)を使って、高エネルギー加速器研究機構(KEK)物質構造科学研究所の放射光実験施設にある実験装置を分子研からネットワーク経由で遠隔操作することに成功し、去る10月23日(水)にKEKにおいて記者発表が行われました。その際、同プロジェクトの一環として導入されたH.323-TV会議システムにより金研、分子研、東大物性研がKEKの記者発表会場と接続され、このシステムを通して金研から前川禎通教授がご挨拶と今後の抱負について述べられました。

今回、計算材料学センター及び総合ネットワーク運用室ではこのための事前テスト、記者発表当日の装置運用等のサポートをいたしました。

このコラボラトリ－システムは、21世紀の新しい科学技術創成に不可欠な学際的共同研究や大型施設を持つ研究所を核にした、多くの研究所からの科学者が参加する大型プロジェクトを効率よく進める研究体制として、大きな期待が集まっています。

5つの研究所を結ぶコラボラトリ－



このプロジェクトの情報及び関連情報等については、以下のサイトをご覧ください。

<http://newpro.ims.ac.jp/>

<http://www.kek.jp/newskek/2002/sepoct/collabo.html>

<http://flash24.kyodo.co.jp/?MID=IBR&PG=STORY&NGID=soci&NWID=2002102301000302>

AVS6.1へのバージョンアップについて

計算材料学センターでは可視化支援ソフトウェア AVS/Developer を使用していただいているが、9
月にバージョンアップ(5.1 → 6.1)を行いましたのでお知らせいたします。

AVS/Developer は実験・解析結果などの数値データを可視化して、 絵にして表示するソフトウェアです。データ読み込みや各種の画像処理、表示設定等が個別にモジュール化されているので、このモジュール・アイコンを自由に配置し組み合わせるだけで、データを可視化することができます。

通常、何かデータを可視化するためには、

1. データファイルを読み込む
 2. データの中でどこの部分に対してコンターを書くか指定する
 3. そのデータのコンター図を書く
 4. コンターを表示する

といったようないくつかの処理手続きの流れがあります。

その処理の手続きのひとつひとつが、AVS/Developer ではモジュールとして供給されています。必要なモジュールを選び、それらの組み合わせ(ネットワーク)で、データの可視化が行えます。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がされました。

- MPEG 出力の改良
 - 半透明表示の改良
 - デフォルトのライトの位置とスペキュラーの変更
 - Read-image3DVol モジュールの追加
 - CGNS ファイルの読み込みモジュールの追加
 - illuminated lines の追加
 - Read/Write netCDF, Read Plot3D の改良
 - HDF5 ファイルの読み込み, 書き出しモジュールの追加
 - Image Capture の AVI 圧縮機能の追加
 - VRML 法線抑制機能の追加

AVS Web site:

http://www.avs.com/software/soft_t/avsxps.html

<http://www.kgt.co.jp/product/avs/express/dev/index.html>

Materials Studio2.1へのバージョンアップについて

計算材料学センターでは、平成14年1月より、材料設計支援ソフトウェア Materials Studio を使用していただいているが、10月にバーションアップ(2.0 → 2.1)を行いましたのでお知らせいたします。

Materials Studio はスーパーコンピューティングシステムでサービスしています分子設計ソフトウェア Cerius2 の後継システム(Windows 版)です。計算材料学センターでは、フローティングライセンス契約をしていますので、そのライセンス数に達するまでは、どこからでもお使いいただけます。特に、グラフィカルインターフェース(Materials Visualizer)は、アプリケーションサーバ B(cmsappb)をお使いになるより、ご自分の PC の方がレスポンスが速い場合があるかもしれません。なお、ライセンス数の範囲内で、cmsappb でも従来どおり Cerius2 を使用することは可能です。

ご自分の PC にインストールしたい方は、CD をお貸ししますので、ccts-adm@imr.edu までお申し出ください。

今回のバージョンアップで、次のような機能拡張が行われました。

- #### ● Reflex Plus: 自動空間群検索

ピークサーチの改良

Materials Studio Web site:

<http://www.accelrys.com/mstudio/>

スーパーコンピューティングシステムからのプリント方法について

1. アスキー形式のファイルをプリントする

テキストファイルをプリンタに出力する際は、a2ps.pl (Perl 版 a2ps) コマンドを使用し、アスキiform のテキストをポストスクリプト形式に変換してから、lpr コマンド (OS の種類によっては lp コマンド) で行うのが一般的です。スーパーコンピューティングシステムには、日立、IBM など 4 種類のオペレーティングシステムの WS がありますので、コマンドが微妙に異なるものがあ

ります。そこで、どのマシンからでも同じコマンドでプリントできるように、a2ps.pl と lpr（またはlp）コマンドを組み合わせたセンター独自のコマンド textpr*を9月より提供していますので、お知らせいたします。

形式 : `textpr -Pprinter_name [a2ps options] file_name`

`printer_name` : プリンターネームを指定する

`a2ps options` : Perl 版 a2ps.pl コマンドのオプションを指定する

`file_name` : アスキー形式のファイルを指定する

2. ポストスクリプト形式のファイルをプリントする

スーパーコンピューティングシステムのどのマシンからもつぎのコマンドで、TeX などで作成したポストスクリプト形式のファイルをプリントすることができます。

形式 : `lpr -Pprinter_name file_name.ps`

`printer_name` : プリンターネームを指定する

`file_name.ps` : ポストスクリプト形式のファイルを指定する

注意 :

cmsjp1、cmshpx0、cmshpx1 では、プリントするためのコマンドは lp コマンドで、lpr コマンドはありません。そのため、「lpr -Pprinter_name」と指定された場合のみ lp コマンドに変換するように、センターで lpr コマンドを作成しています。-P 以外のオプションを指定する場合は、本来の lp コマンドをお使いください。

*textpr コマンドは西松 育さん作成のコマンドです。

詳しくは、以下を参照ください。

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/service/announce/textpr.html>

スーパーコンピューターSR8000 停止のお知らせ

本センターだよりの「スーパーSINET推進協議会ナノテクノロジー部会用システム運用開始」でご紹介していますように、スーパーSINETの活用を図るためスーパーコンピューター結合による超大規模シミュレーション計算が企画されています。実験的に、センターのスーパーコンピューターのいくつかのノードをナノテクノロジー用のVPN（Virtual Private Network）に接続する予定ですが、その作業のために下記の期間、運用を停止せざるを得ません。計算機を利用する時期に大変申し訳ありませんが、ご理解とご協力をよろしくお願い申しげます。

停止期間（予定）：平成14年12月23日（月）9時から12月30日（月）13時まで

停止計算機：スーパーコンピューターSR8000

計算材料学センターだより No.4

2002年10月31日(木)発行

31th Oct(Thu), 2002

東北大学金属材料研究所 計算材料学センター

〒980-8577 宮城県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.edu/~ccms/>

E-mail ccms-adm@imr.edu

Center for Computational Materials Science of IMR,
Tohoku University

2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, JAPAN
TEL +81-22-215-2411(DIAL-IN), FAX +81-22-215-2166