



計算材料学センターだより

CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ 新スーパーコンピューティングシステムへの更新
- ・ 海外研修報告
- ・ 電話回線によるダイヤルアップ PPP サービス終了のお知らせ（予告）
- ・ センター訪問者見学風景

CCMS
NEWS
8

表紙の図

図のカラー表示は、2つの亜鉛原子がペンタメチルシクロペンタジエニル配位子でキャップされた構造体（車軸形状体と呼ばれる最近話題の分子）に対する基底状態の電荷分布密度による電子局在関数（ELF）のログプロット。灰色で重ねて描画してあるのは高ELFの等値面で、C-H bondは楕円体、C-C bondは円柱形状をしている。2つの亜鉛原子の中間面には、トーラス状の高ELFの等値面が存在し、この構造体の結合の複雑性が分かる。

Figure shows a long scale colour plot of the electron localization function (ELF) based on the ground electronic state charge density of the first molecule to be synthesized containing two zinc atoms end capped with pentamethylcyclopentadienyl ligands. Center picture shows the ELF density in color and a superimposed isometric surface for high ELF values displaying valence bond basins basins for C-H (ellipsoid) and C-C (cylinder) bonds.

Michael Philpott and Yoshiyuki Kawazoe

(designed by Kazuhiro Sato)

センター長あいさつ



計算材料学センター長 前川 禎通

本年 10 月 1 日より、計算材料学センター長を拝命しました。どうぞよろしくお願い致します。

本所の方針として、各センターはその運営を総括するセンター長と、センターの活動を推進する責任部門に分け、両者を両輪として運営する、ということにより、責任部門は川添研究室が担当し、私がセンター長として少し違った角度からセンターの活動をサポートさせていただきます。

私は物性理論屋として、とくに多体電子系の物性を中心に研究を行っています。多体電子系とは磁性体や超伝導体のように強く相互作用する電子集団のことで、このような電子集団が示す量子物性を理論的に明らかにするのが私の仕事です。言い換えれば、電子が集団として持つ興味ある性質を引き出し、それを解明し、新しいデバイス応用につなげようとするものです。このような研究は、量子多体問題であり、電子計算機がなければ一步も進めないものです。そのため、研究の進展は電子計算機の進歩に強く依存しています。

今さら言うまでもないことですが、あらゆる研究分野で電子計算機の重要度は増してきています。次世代スーパーコンピュータの国家プロジェクトが動き出し、計算機関係者にとって大きな変革期を向かえようとしています。これは、我々関係者が電子計算機による研究の意義を社会にアピールするチャンスでもあると思います。私も微力ながら、計算材料学センターの発展に少しでもお役に立てればと願っています。御支援をどうぞよろしくお願い致します。

新スーパーコンピューティングシステムへの更新

責任部門教授 川添良幸

計算材料学センターでは、スーパーコンピューティングシステムの更新を今年度末に行う予定です。「高度情報化社会基盤構築に寄与する超高速スーパーコンピューティングシステム」を目指す新スーパーコンピューティングシステムは、表1に示す機器群とソフトウェアより構成されます。今回の機種更新により、現行機種や国内外の同様なシステムと比較しても極めてコストパフォーマンスの良いシステムの導入に成功したと自負しております。本システムの特徴は、主スーパーコンピューターの演算処理能力の高さのみならず、特徴あるアプリケーションサーバー群や多くのアプリケーションプログラムの導入により、利用者が材料設計シミュレーションを迅速に効率良く実施できる環境を提供することにあります。もちろん、利用者プログラムのチューニングも行いますが、本所の材料設計専用スーパーコンピューティングシステムは、「特殊実験装置」として活用されて来ました。そのため、ファイル容量も巨大な1PBの安定なストレージシステムを導入します。高速数値計算実行と結果の大容量ファイルへの保存の組み合わせにより、材料設計シミュレーションが効率良く実行可能となります。従来より行って来た ITBL や NAREGI との対応も継続的に行う予定です。

現在、従来からの利用実績を踏まえ、今後のより良い材料設計シミュレーション研究環境を構築すべく、システムの詳細設定の検討作業に入ったところです。来年、2月14日より現システムの搬出を行い、その後、新システムの搬入、組み立て、移行のため、約1ヶ月間、システムを停止させていただき、3月中旬からサービス再開の予定です。新スーパーコンピューティングシステムについては、随時、ニュースを掲載していきますので、皆様のご理解とご協力を、何とぞよろしくお願い申し上げます。

表1-1. 新スーパーコンピューティングシステムの主な機器群

機器名	機種	ノード (CPU)数	性能	主記憶 容量	ディスク容量
スーパー コンピューター	HITACHI SR11000 モデル K2	51 ノード	7.5TFLOPS (現行の8倍 以上)	5TB	
アプリケーション サーバーA	NIWS Gene/S Turbo (IBM BlueGene)	計算ノード 256 ノード		256GB	
アプリケーション サーバーB	Hp Proliant BL 35p	48 ノード (192 コア)		4GB/ ノード	
アプリケーション サーバーC	SGI Altix450	32CPU (64 コア)		384GB	
ファイルサーバー	IBM System p5 モデル 520				
ネットワーク ディスパッチャー	IBM System x3850				
ストレージ システム	HITACHI SANRISE AMS1000				FC ディスク 344TB SATA ディスク 704TB

表1-2. 新スーパーコンピューティングシステムの主なソフトウェア

コンパイラー	Fortran77, Fortran90, Fortran95, C, C++, Java
数値計算ライブラリー	BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, FFTW, MPI, MPI2,IMSL Fortran, MATRIX/MPP
アプリケーションプログラム	VASP, Gaussian, TOMBO, CASTEP, DMol3, AVS/Express Developer, ADF, PHOENICS, Tecplot, EnSight, PowerFLOW, Mathematica, Maple, MATLAB, ANSYS Multiphysics, Materials Studio, WIEN2k, ABINIT, Virtual NanoLab
通信ミドルウェア	ITBL,NAREGI ミドルウェア

海外研修報告

技術職員 五十嵐伸昭

今回、研究支援職員海外研修ということで、平成18年10月1日から10月7日までの1週間の日程で大津直史氏とオランダのデルフト工科大学およびドイツのマックス・プランク研究所を訪問し、研究支援職員の現状を視察してきましたので報告いたします。

オランダのデルフト工科大学では技術職員の管理業務をされている方に話を伺いました。技術職員は機械と電子の分野に分かれており、58名の職員で構成されているそうです。研究者から作業の依頼があるとプロジェクトマネージャーが研究者と話をし仕様を決め、職員へ作業を割り当てるようになっているそうです。作業は有料になっており、その収入は装置の購入に充てているそうで、多数の装置が設置されていました。また、マネージャーは職員とミーティングを行い、その中で職員の評価を決めていくそうです。とても効率のよい組織になっていると感じました。

マックス・プランク固体物理研究所ではコンピュータシステムを拝見させていただきました。7名の職員でメール、Web、印刷、ソフトウェア、バックアップなどのサーバーを管理しているとのことでした。このシステムは数年前まではAIX, Tru64, HP-UX, Solarisなど商用UNIXを使用していたそうですが、場所や管理コストを考慮し、現在では主にLinuxとAIXをOSとしたマシンでサービスしているそうです。計算マシンとしてはPCクラスが多く使用されているようでした。マシンはすべて購入し、必要に応じて更新しており、障害の際はほとんど自分たちで修理するとのこと、技術力の高さを感じました。

ドイツではミュンヘンのドイツ博物館も見学してきました。ドイツ博物館は5万5千km²の広大な敷地面積に55の展示場があり、短時間ですべてを見て回ることはできませんでした。船、飛行機、自動車、金属、発電、宇宙、コンピュータなど多岐にわたる分野で多数の展示物があり、世界最初のスーパーコンピュータであるCRAY-1も展示してありました。多くの展示物にボタンやレバーが付いていて実際に体験できる(故障中のものも多くありましたが)ようになっており、館員によるデモンストレーションも行われているようでした。親子で実験している姿や、レポート用紙を持って回っている学生の姿を見ると、小さいころから科学に関心を持てるような環境がドイツの技術力を支えているのではないかと思います。

最後に、このような機会を与えていただいた井上所長をはじめ事務部、技術部の方々には大変お世

話になりました。また、受け入れ先をお世話いただいた川添先生、デルフト工科大学の Sluiter 先生、Springer 社の Ascheron 氏、お忙しいところ対応していただいたデルフト工科大学およびマックス・プランク研究所の方々に感謝申し上げます。



デルフト工科大学 機械系の技術職員と共に



マックス・プランク研究所 コンピュータサポートグループの職員と共に

電話回線によるダイヤルアップ PPP サービス終了のお知らせ(予告)

現在、計算材料学センターでは、所外(自宅、出張先等)からスーパーコンピューティングシステム等を利用していただくために電話回線を利用したダイヤルアップ PPP サービスを提供しておりますが、本年度末のスーパーコンピューティングシステムの更新に合わせて、本サービスを終了させていただくことになりました。

次期スーパーコンピューティングシステムでは SSL-VPN によるリモートアクセスサービスを標準とさせていただきますので、ご理解とご協力の程よろしくお願いいたします。

なお、電話回線を利用したダイヤルアップ PPP サービスの終了日は2月中旬を予定しておりますが、正式に決まり次第以下の WWW ページにてお知らせいたします。

<http://www-lab.imr.edu/~gcns/Jpn/info/network/index.html>

計算材料学センター(ネットワーク担当)

センター訪問者見学風景

■東北大学工学部マテリアル・開発系一行

(2006年5月26日(金)、学生100名、引率4名)



■台湾産学連携訪問団一行

(2006年5月31日(水)、Dr.H.H.Chang 他4名)



■福島県立郡山高校理系特進クラス一行

(2006年6月1日(木)、生徒38名、引率2名)



■中国西北工業大学訪問団一行

(2006年6月28日(水)、楊教授他4名)



計算材料学センターだより No.8

2006年11月1日(水)発行

1st November (Wed), 2006

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