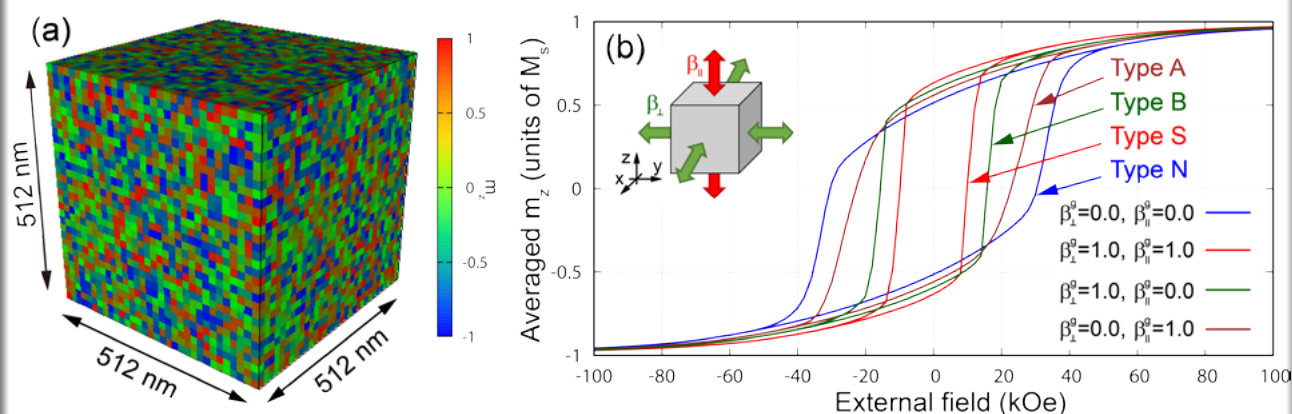


計算材料学センターだより



■ Magnetization reversal processes of isotropic permanent magnets with inter-grain exchange interactions

CONTENTS

- ・スーパーコンピューティングシステムの更新について
- ・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 モジュール開発について
- ・機械学習・データサイエンス勉強会の開催
- ・セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催
- ・SC17 に本センター技術職員が参加
- ・きんけん一般公開 2017 に本センターが参加

表紙の図について

■ Magnetization reversal processes of isotropic permanent magnets with inter-grain exchange interactions

To investigate the coercivity mechanism in the nanocrystalline permanent magnets, the interplay between inter-grain exchange interactions and dipolar interactions is important. In this study, we performed large-scale micromagnetic simulation based on Landau–Lifshitz–Gilbert equation using simple isotropic nanocrystalline $\text{Nd}_2\text{Fe}_{12}\text{B}$ permanent magnet model as shown in Fig. (a). Fig. (b) shows the hysteresis curves with four types of anisotropic inter-grain exchange interactions. The inter-grain exchange interactions work only to the xy-plane in type A, only to the z-direction in type B, to all directions in type S, and no interactions in type N. An external field is applied to the z-direction. The hysteresis curve for type N seems like that of the Stoner-Wohlfarth model, and dipolar interactions play an important role in the magnetization reversal. On the other hand, in type S, the magnetization rapidly decreases near the coercivity, because the inter-grain exchange interactions are essential. The hysteresis curve for type A seems like that for type N, and in type A, the magnetization reduces gradually, and the coercivity becomes larger than that of type S. In contrast, the hysteresis curve form type B seems like that for type S due to the dipolar interactions, since there is no exchange interaction along the z-direction. The magnetization reversal behaviors indicate that the reduction of inter-grain exchange interactions work along the perpendicular to the external field direction effectively increases the coercivity of the isotropic permanent magnet.

スーパーコンピューティングシステムの更新について

現在のシステムは平成 30 年 3 月 31 日まででジョブの実行を停止させていただき、平成 30 年 8 月 1 日より新スーパーコンピューティングシステムの運用を開始する予定です。現システムのホーム領域にあるデータは新システムへ移行いたしますが、SAS 領域（/home/UID/sassuper および /home/UID/sasapp）にあるデータは移行いたしませんので、各自で事前にダウンロードしていただくようお願い申し上げます。なお、新システムの構成及び移行スケジュールの詳細につきましては、決まり次第お知らせいたします。

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. 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 11Aug17 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/>

アプリケーションサーバー

1. 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 11Aug17 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/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/>

2. CRYSTAL17

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 CRYSTAL17 をインストールしました。

CRYSTAL17 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/>

3. Quantum Espresso

擬ポテンシャルファイルと平面波基底を用いた密度汎関数法シミュレーションプログラムである Quantum Espresso のバージョン 6.1.0 をインストールしました。

Quantum Espresso 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探索計算
- ・ 第一原理分子動力学計算

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

Quantum Espresso の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.quantum-espresso.org/>

4. AVS/Express

モジュールを組み合わせることによって可視化を行うことのできる、汎用の 3 次元可視化ソフトウェア AVS/Express を 8.4 にバージョンアップしました。

AVS/Express では主に次のようなことを行うことができます。

- ・さまざまなデータフォーマットをマウスによる簡単な操作で可視化

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

AVS/Express の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cybernet.co.jp/avs/>

5. ADF

密度汎関数法に基づく量子化学計算ソフトウェア ADF および ADF の GUI である ADF-GUI を 2017.103 へバージョンアップしました。

ADF 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探索計算
- ・紫外・可視呼吸スペクトルやラマン強度、ファン・デル・ワールス分散係数などの計算

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

ADF の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.scm.com/>

6. Mathematica

数値計算および数式処理ソフトウェア Mathematica を 11.1.1 へバージョンアップしました。Mathematica は計算のみならず、モデリング、シミュレーション、可視化、開発、文書化、配備にも利用可能です。

Mathematica では主に次のようなことを行うことができます。

- ・数値計算や統計的データ解析
- ・データの可視化やアニメーションの作成

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

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

<http://www.wolfram.com/>

7. ANSYS Mechanical

構造、伝熱などの幅広い解析機能とそれらの連成解析、さらに各種最適化設計機能を搭載した汎用有限要素法プログラムである ANSYS Mechanical 18.0 および電磁界解析の機能をもつ ANSYS Electromagnetics 18.0 をインストールしました。

ANSYS Mechanical では主に次のようなことを行うことができます。

- ・構造力学、熱伝導など、幅広い物理現象の解析
- ・複数の要素を組み合わせた連成解析

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

ANSYS Mechanical の詳細については以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.cybernet.co.jp/ansys/>

AVS/Express モジュール開発について

AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって可視化を行うことができる汎用の 3 次元可視化ソフトウェアです。本年度、本所のスーパーコンピューティングシステムで得られた LASKYO のシミュレーション計算結果を AVS/Express で可視化する際に、LASKYO データ変換プログラムで変換されたフィールドデータを読み込み、粒子の空孔部分にあたる境界面を生成する CavitySurface モジュールを開発しましたのでご利用ください。AVS/Express はアプリケーションサーバーで利用できます。また、ご自分の PC で利用希望の方はインストールメディアが計算材料学センターにありますので、ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp までご連絡ください。サポート OS は Windows 7 以上、Mac OS 10.9-12、RedHat Enterprise Linux 6.x です。

CavitySurface モジュールについて

CavitySurface モジュールは境界面の生成には、昨年度開発した BoundarySurface モジュールで使われているアルゴリズムと同じものを用いています。CavitySurface モジュールでは (粒子数だけでなく) 粒子に定義されている物理量の平均値も合わせて計算され、生成した 3 次元ボリューム格子上に定義されます。図 1 の例では、点 A は粒子数 4、点 B は 7、点 C は 1 になりますが、各粒子に物理量 F_x が定義されている場合、点 A の $F_x = (4 \text{ 点分の } F_x \text{ 総和}) / 4$ 、点 B の $F_x = (7 \text{ 点分の } F_x \text{ 総和}) / 7$ 、点 C の $F_x = (1 \text{ 点分の } F_x)$ の様に計算されます。また、データによっては生成される境界面に凹凸がつき、滑らかに表示されない場合に、図 2 のように境界面を作成した後の三角形の各頂点に対し、その頂点を構成 (共有) する三角形の座標値を平均化する処理を行うことで、凹凸を削減する平滑化処理の機能も実装しました。CavitySurface モジュールは AVS/Express の CCMS の Library にあります。図 3 は CavitySurface モジュールの接続例です。図 4 は粒子の空孔部分にあたる境界面生成の表示例です。

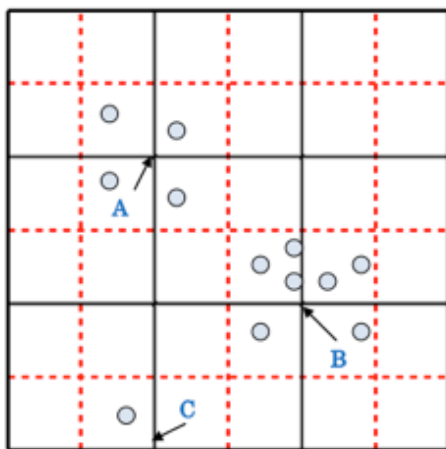


図 1. ボリューム格子の生成例

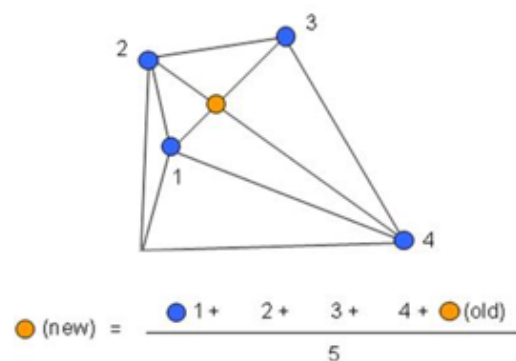


図 2. 面の平滑化処理

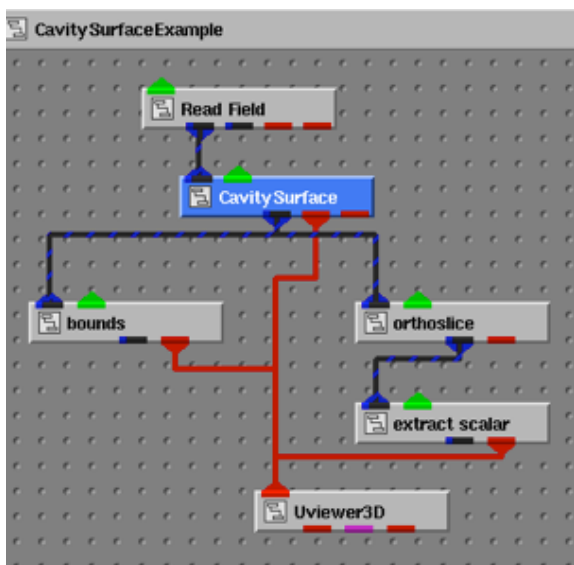


図 3. CavitySurface モジュールの接続例

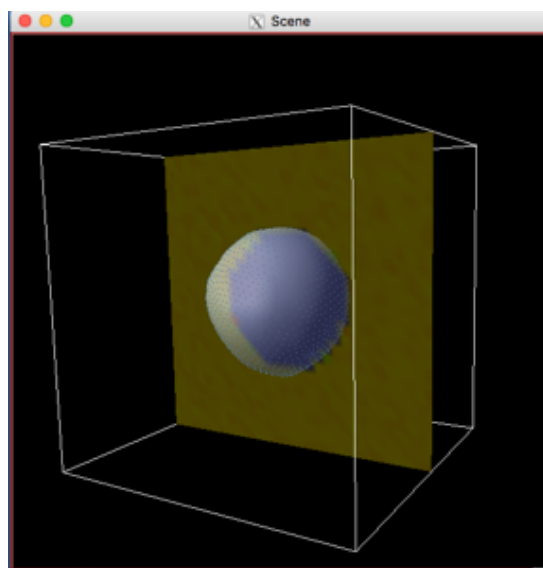


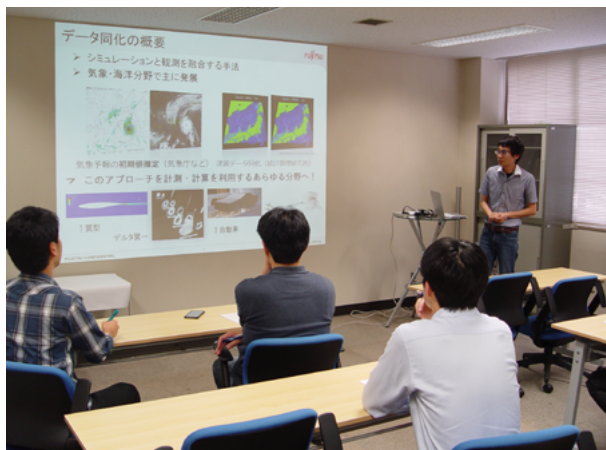
図 4. 粒子の空孔部分にあたる境界面生成の表示例

計算材料学センターで導入しているアプリケーションが自分の研究に利用できるかを試してみたいといった要望が寄せられ、試用制度を設置いたしました。現在、計算材料学センターのユーザーで無い場合でも、金研所内の方であれば、AVS/Express を 2 週間試用して頂くことができますので、当センターホームページ (<http://www.ccms.imr.tohoku.ac.jp/>) の「試用制度 (所内限定)」をご参照のうえ申請してご利用下さい。また、計算材料学センターで導入している、これ以外のアプリケーションについても同様に当センターの試用制度をご利用いただくことができます。

機械学習・データサイエンス勉強会の開催

計算材料学センターでは、スーパーコンピュータの周知、利用用途拡大を図るため、下記の通り機械学習・データサイエンスに関する勉強会を開催しました。講師、聴講者を含め、所内外から様々な方にご参加いただきました。

- 5月17日（水）15:00～16:00 講師：千葉研究室 青柳 健大 助教
「機械学習を用いた高効率高精度な金属積層造形プロセス設計手法の構築」
参加者：7名
- 6月30日（金）15:00～16:30 講師：富士通研究所 菊地 亮太 博士
「データサイエンスの材料研究への応用に向けた事例紹介」
参加者：8名
- 7月28日（金）13:30～15:00 講師：計算材料学センター 丹野 航太 技術職員
「ニューラルネットワークを用いたマインスイーパの解法」
参加者：8名
- 10月3日（火）15:00～16:00
発表者：村松 哲郎さん（名古屋大学大学院工学研究科 M2）
「多結晶 Si インゴットの核形成サイト解析への重み付きボロノイ図の応用」
発表者：羽山 優介さん（名古屋大学大学院工学研究科 M2）
「データ科学的手法を用いた多結晶 Si 中の転位発生・伝搬の可視化」
参加者：6名



6月30日 菊地博士の講演の様子



10月3日 村松さんの発表の様子

セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催

セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」は、スパコンの応用事例を紹介するべく、金研で行われている研究テーマに近い話題を選び、シリーズで開催しているセミナーです。今年度は、計算物質科学人材育成コンソーシアムとポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」との協賛で、下記の3回のセミナーを開催し、いずれの回も多くの方にご参加いただきました。

- ・ No.7 2017 年 10 月 10 日 (火) 東京大学大学院工学系研究科 澁田 靖准教授
「金属材料の凝固・組織形成に係る分子動力学」
- ・ No.8 2017 年 11 月 8 日 (水) 東京大学大学院工学系研究科 今田 正俊教授
「電子相関の強い物質の第一原理計算科学と計算アルゴリズム」
- ・ No.9 2017 年 12 月 14 日 (木) 東京大学大学院工学系研究科 押山 淳教授
「密度汎関数理論に基づく大規模かつ長時間シミュレーションの現状と物質科学」

これまでのセミナーの概要と今後の開催予定は下記の Web サイトからご確認いただけます。

計算材料学センター セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」アーカイブス

<http://www.ccms.imr.tohoku.ac.jp/Jpn/seminar/index.html>

○今後のセミナーの予定

- ・ No.10 2018 年 1 月 19 日 (金) 13:30 ~ 15:00 分子科学研究所 信定 克幸准教授
「光励起電子ダイナミクスの第一原理計算と光・電子融合デバイス設計への展開」
※詳細は計算材料学センターまでお問合せ下さい。



澁田 靖准教授 の講演の様子 (2017 年 10 月 10 日)



今田 正俊教授 講演の様子 (2017 年 11 月 8 日)



押山 淳教授 講演の様子 (2017 年 12 月 14 日)

SC17 に本センター技術職員が参加

2017年11月12日（日）から17日（金）に、米国コロラド州デンバーの Colorado Convention Center で行われた、SC17（Supercomputing Conference 2017）に、五十嵐伸昭技術職員が参加しました。SC は毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワーキング・ストレージ分野における世界最大のイベントです。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今回は 334 のブース出展と約 12,000 名の参加者がありました。東北大学からは、今年もサイバーサイエンスセンター、流体科学研究所、東北メディカル・メガバンク機構、本所が合同で展示を行いました。

本センターの展示内容は、スーパーコンピューティングシステム、および、本センターの共同利用施設としての役割の紹介、そして、スーパーコンピューティングシステムを利用して得られた研究成果のポスター展示を行い、来場者への説明とパンフレットの提供などを行いました。また、企業や他大学の展示ブースへ来訪して最新システムの情報収集などを行って来ました。



SC17 での展示と五十嵐伸昭技術職員

きんけん一般公開 2017 に本センターが参加

2017年10月7日（土）、8日（日）に開催された標記一般公開に、本センターは計算物質科学人材育成コンソーシアムと合同で参加いたしました。初日が雨天だったこともあり客足は鈍かったものの、東北大学金属材料研究所全体では両日合わせて約 3,000 名もの方々に、本センターへは、小学生だけでも約 650 名もの方々に来場いただきました。

本センターではスーパーコンピューターを見学していただきました。また、小学生を対象としてシャープペンシルの芯の強度や変形についてコンピューターによるシミュレーションと実験との比較を行ってもらい、来場者の方に興味を持って参加していただけたと思います。



シャープペンシルの芯のシミュレーションと実験の様子

計算材料学センターだより No.28

2017 年 12 月 20 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.ccms.imr.tohoku.ac.jp/>

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