

計算材料学センターだより

CONTENTS

- ・本センター責任部門体制発足
- ・材料の知的生産と加工に関する国際会議（IPMM=Intelligent Processing and Manufacturing of Materials）後援
- ・センター長が日本金属学会学術功労賞受賞
- ・アプリケーションのバージョンアップについて
- ・金属材料研究所第105回講演会で本センター技官が3編ポスター発表
- ・空調機更新工事に伴うスーパーコンピューティングシステム停止のお知らせ

CCMS
NEWS
5

表紙の図は

Hydrogenated Silicon Fullerenes: Effects of H on the Stability of
Metal-encapsulated Silicon Clusters,
V. Kumar and Y. Kawazoe,
Phys. Rev. Lett., 90 (2003) 055502-1-1055502-4. に掲載されたものです。

本センター責任部門体制発足

計算材料学センター長

川添良幸

本所では、新素材設計開発施設において、平成11年9月より、井上所長の研究室が責任部門となっている。その趣旨は、「施設独自の研究を強力に推進するためには、今まで3研究部で行われていた施設の研究を統括して、それらの研究能力を結集する必要があります。そこで、新素材開発研究の分野で実績のある教授研究部門を責任部門（施設担当部門）として、その教授の指導のもとで施設独自の研究を行う体制をとることにしました。」とある。

今年度より、本センターにおいても、上記新素材設計開発施設の例に従い、センター運用体制の高度化と安定化を図るため、単に川添がセンター長をしているというレベルを超えて、川添研究室を責任部門とすることが、教授会で承認された。従来から、スーパーコンピューター導入時及び更新時の機種選定作業や、毎週の ICOM ミーティング（12年間継続的に行っている技官とセンター長の打ち合わせ会）、月に一度の納入メーカーとの定例会、等では川添研究室は本センターの運営に主体的に関わって来ていた。また、センター所属の技官の支援スキルの向上を目指し、川添研究室では、国内外学会・研修等への参加や、計算機関連の講習会への出席・論文発表を支援・指導していた。機材に関しても、常に新しい装置が入り、最新の技術を体得できるように、川添研究室が関与しているプロジェクト研究から供出するよう努めている。今年5月に仙台で開催した IPMM（Intelligent Processing and Manufacturing of Materials）「材料の知的製造と加工に関する国際会議」は、カナダ国バンクーバー市ブリティッシュコロンビア大学のミーチ教授と川添が共同主催し、それを本センターが後援して、金属ガラスに関する井上所長の基調講演や飯島教授のナノチューブ発見秘話等と熱心な討論で、17ヶ国から訪問された材料研究者に高い評価をいただくことができた。特に本センターのスーパーコンピューターを活用した分子エレクトロニクス用デバイスの電気伝導特性や水素をガスボンベ並みに吸収する水クラスレートに関する大規模シミュレーション計算結果は注目を集めた。

今後、新素材設計開発施設の例を見習い、川添研究室が関係している各種プロジェクト研究から、本センターに最適なものを選定し、本センターの業績となるように設定する予定である。特に、本センターのスーパーコンピューターの能力を最大限に發揮させることのできる全電子混合基底第一原理シミュレーション計算法（TOMBO=TOhoku university Mixed-Basis Orbitals method）は、カタログ性能の70%もの実行効率を達成し、全体の平均をも30%程度まで上げている（他センターでは装置の稼働率のみを発表しており、その実行効率が10–20%であることは一般に知られていない。初期のリンパックテストの結果と実際の実行効率は全く違っている）。既に、さらなる超大規模計算環境を構築するため、川添が部会長をしているスーパーSINET ナノテクノロジー研究部会及びスーパーコンピューター連携実験を目的とした第4班班長をしている学術創製プログラムの実行部隊として、一関技官を中心に、本所と東京大学物性研究所、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所、及び九州大学情報基盤センター間の分散処理用超高速光コンピューターネットワーク構築を行って来ている。地理的に離れたスーパーコンピューターの連携を行い、超大規模シミュレーション計算まで実行している例はなく、本所はその最初の重要な実験を

行っていることになる。

他にも、本学が医工学連携で振興調整費を認められたことに従い、川添が深く関わることになる。本センターは、このプロジェクトで、医療の高度化を実現するためにスーパーコンピューターを用いた第一原理シミュレーション計算による新材料設計でも積極的に関わって行く予定である。

本学も平成16年度からは独立行政法人になる。その時までに、本センターもより良い体制を実現すべく、既に種々の検討を始めている。特に、本学には、情報シナジーセンター、流体科学研究所、及び本所にスーパーコンピューターが導入されている。各々、最大限に設置目的を達成すべく継続的に活動している訳であるが、今後のあり方を模索するため、これら3組織間での検討会を密に行っており、これから最適解を見出す努力を本センターと責任部門、さらには本所として行わなければならない。

スーパーコンピューターは、今後とも重要な戦略物資である。それを活用した効率の良い新材料設計は、材料立国日本の存在基盤確立に欠かせないものである。今後とも、利用者の皆様には最高の環境を提供すべく努力してまいりますので、何とぞご理解、ご協力のほど、宜しくお願ひ申し上げます。



材料の知的生産と加工に関する国際会議(IPMM=Intelligent Processing and Manufacturing of Materials)後援

本センターが後援し、川添センター長がカナダ国ブリティッシュ・コロンビア大学のミーチ教授と共同主催する標記国際会議が、材料生産と加工に知的処理を適用しようとする研究者を世界中から集めて5月に仙台で開催されました。SARS の影響で、初期に予定した200名には達しませんでしたが、ナノテクノロジーをトピックとして開催したこともあり、140名以上の参加を得て、成功裡に終了いたしました。参加国は17で、外国人は60名ほどでした。井上所長の金属ガラス及び飯島教授のカーボンナノチューブに関する基調講演は、大盛況で、特に外国からの参加者の注目を集めました。

会議の名誉会長であるカリフォルニア大学のザデー教授は、ファジイ論理の開発で著名な研究者であり、仙台市の地下鉄は日立製作所が世界で始めてその理論を大規模システムに適用した例として知られています。第4回目に仙台が開催地として選ばれたのは、このような事情によります。会議に関して河北新報と東北放送が取り上げて報道されました。





上記写真はすべてIPMMでの様子

センター長が日本金属学会学術功労賞受賞

川添センター長が、2003年3月末に千葉大学西千葉キャンパスで開催された日本金属学会で、学術功労賞を受賞しました。この賞は、日本金属学会の学術事業の推進に多年にわたり貢献された方々に贈られるものであります。独自の全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO(TOhoku university Mixed-Basis Orbitals method)を開発し、本センターのスーパーコンピューターを駆使した超大規模シミュレーション計算によって、シリコンフラーんを発見して医療用などへの応用を可能としたこと、水素吸蔵水クラスレートの安定性を算定し水素燃料自動車開発に希望を持たせたこと、などは良く知られている業績ですが、さらに、これらに加え、昨年度までの東北支部長、現在の理事及び欧文誌 Materials Transaction 編集長としての活躍が評価されたものと思われます。

本センターとしては、これを励みとして、今後とも、より一層、利用者の皆様にご満足いただけるサービスに努めてまいります。



アプリケーションのバージョンアップについて

1. ANSYS

汎用有限要素法解析プログラム ANSYS のバージョンアップ(5.6 → 6.1)を行いました。

ANSYS は構造、振動、伝熱、電磁場、圧電、音響、熱流体、衝突落下までの幅広い解析機能がプリ／ポスト＆ソルバー一体型として提供されているほか、磁場－構造、電場－構造、磁場－熱、磁場－流体、電流－磁場、電気回路－磁場など、一般的には複数の CAE の併用を要求される連成解析も統一環境下で実行できます。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- 構造解析に関する機能強化
- 熱解析に関する機能強化
- CFD (Computational Fluid Dynamics) 機能
- 電磁場解析機能

ANSYS はアプリケーションサーバーA でご利用になれます。

ANSYS Web site:

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

2. Mathematica

数学統合ソフトウェア Mathematica のバージョンアップ(4.1 → 4.2)を行いました。

Mathematica は簡単な電卓計算から大規模なプログラミングやインタラクティブなドキュメントの作成まで行うことができ、日常の研究・学習のなかの数学的処理を必要とするあらゆる場面において有効なツールです。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- 線形計画法と最適化の改良
- 簡約化の向上
- 新パッケージ ANOVA を含む、統計機能の改善
- 技術出版のための新パッケージの追加
- XML の拡張
- Combinatorica の拡張
- 新規データ形式のサポート

また、Mathematica4.2 から IBM RS/6000 では OS が 5.1 以降のみサポートになり、現スーパーコンピュ

一ティングシステムに導入されている RS/6000 は OS が 4.3 のためサポート外になります。そこで、導入マシンをアプリケーションサーバーA およびアプリケーションサーバーB のみにいたしますので、ご了承ください。ただし、ご自分の Windows, Macintosh, Linux マシンにインストールすることができます。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(5ライセンス)をしていますので、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。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、ccms-adm@imr.edu までお申し出下さい。

Mathematica Web site:

<http://www.wolfram.com/products/mathematica/index.html>

3. Maple

数式処理ソフト Maple のバージョンアップ (7 → 8) を行いました。

Maple では数式処理をはじめ、数値計算、グラフィックとアニメーション、プログラミング等の機能を使いややすいインターフェース上で利用することができます。

今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- 線形代数や微分方程式の機能追加および強化
- 代数曲線や数値近似の機能追加および強化
- プログラミング機能の機能追加および強化
- ユーザーインターフェースの機能追加および強化
- XML に関する機能追加および強化

Maple はアプリケーションサーバーA および IBM WS, XP1000 WS でご利用になれます。また、ご自分の Windows, Linux マシンにインストールすることも可能です。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(1ライセンス)をしていますので、他の方が使用されていなければ、どこからでもお使いいただけます。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、ccms-adm@imr.edu までお申し出下さい。

Maple Web site:

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

4. Materials Studio

分子設計ソフトウェア Materials Studio (MS)のバージョンアップ (2.1 → 2.2) を行いました。

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 Windows 版です。

今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- Reflex 機能の拡張
- Visualization 機能への機能追加および拡張

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(8ライセンス)をしていますので、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。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、ccms-adm@imr.edu までお申し出ください。

Materials Studio Web site:

<http://www.accelrys.com/jp/mstudio/index.html>

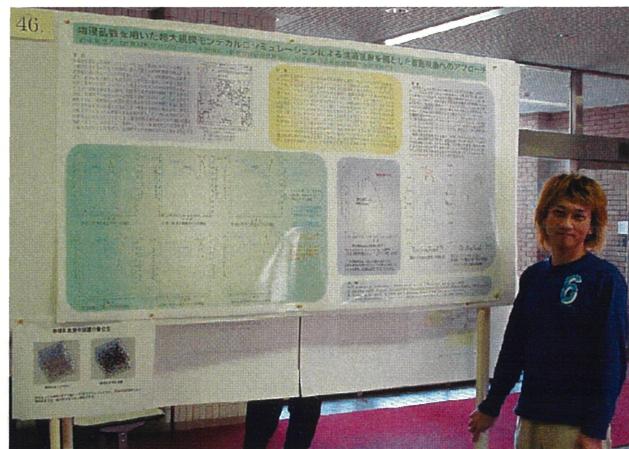
金属材料研究所第105回講演会で本センター技官が3編ポスター発表

平成15年5月29日(木)、30日(金)に行われました標記講演会に、本センターより3編、ポスター発表として参加しました。

1. 「物理乱数を用いた超大規模モンテカルロシミュレーションによる濾過現象を例とした表面現象へのアプローチ」

野手 竜之介

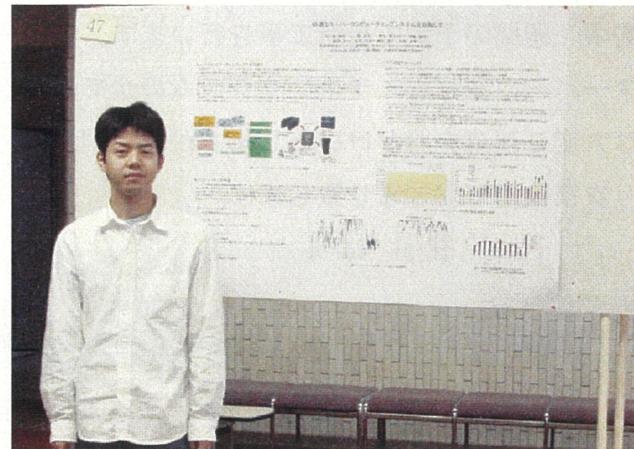
概要: 金研では、機能材料としての薄膜結晶や単層、多層膜の開発が盛んに行われています。また表面解析、表面分析の研究開発も多く行われています。これらの基本は表面現象で、それを詳細に調べることから研究は始まります。表面現象解析にシミュレーションを用いることは行われていますが、数としては少なく、各々の分野でシミュレーション解析を導入することにより、研究開発をさらに効率よく行えると期待できます。標記講演会では濾過現象をモンテカルロ法により解析する例をご紹介しました。このシミュレーションでは、センター設置のスーパーコンピューターに付いている専用物理乱数発生装置を用いて、計算機資源に乏しかった過去の研究と比べ非常に精密で詳細な数値解析を行うことに成功しました。



2. 「快適なスーパーコンピューティングシステムを目指して」

五十嵐 伸昭

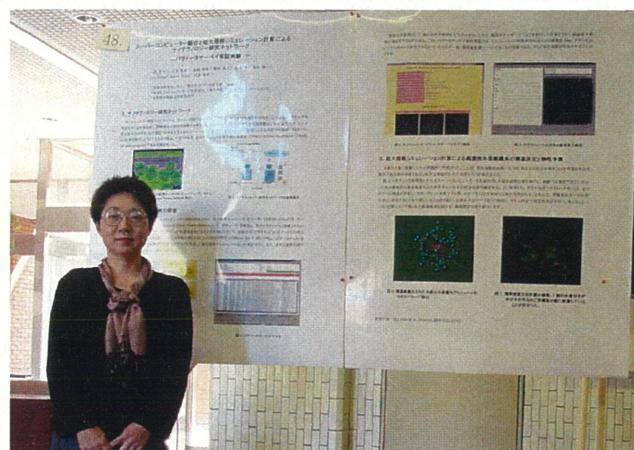
概要: 平成13年2月に稼動を開始した本所のスーパーコンピューティングシステムは異なるメーカー一製の複数のコンピューターから構成されており、それぞれのコンピューターの特徴を生かしながら、利用者が違和感を感じないようにシステムを構築しています。それぞれのコンピューターの役割を明確にし、システムをチューニングすることにより、システム全体が効率よく利用されるようになってきたので、これまで実施して来たチューニングの内容およびその効果について報告しました。



3. 「スーパーコンピューター結合と超大規模シミュレーション計算によるナノテクノロジー研究ネットワーク – パラメータサーベイ実証実験 –」

一関 京子

概要: スーパーSINET を活用する目的で、平成14年10月に東北大学金属材料研究所(金研)、東京大学物性研究所(物性研)、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所(分子研)、九州大学情報基盤センター間に VPN (Virtual Private Network)を構築しました。平成15年1月から3月にかけて分子研のスーパーコンピューターSR8000(6ノード)と金研のスーパーコンピューターSR8000(8ノード)を接続し、金研で独自に開発した全電子混合基底法TOMBO(TOhoku Mixed-basis Orbitals *ab initio* program)を用いて実証実験を行ったので、その実行環境および成果について報告しました。



(予 告)

空調機更新工事に伴うスーパーコンピューティングシステム停止のお知らせ

計算材料学センター1階スーパーコンピュータ室に設置している空調機2台に対し、8月中旬頃1週間の予定で更新工事を行います。この間、メールやインターネットサーバーを除くスーパーコンピューティングシステムの全てのマシンが利用ができなくなりますので、皆様には大変ご迷惑をおかけいたしますが、ご理解をお願いします。なお、工事計画の日程が決まり次第改めてお知らせ致します。

記

工事予定： 2003年8月下旬頃1週間

計算材料学センターだより No.5

2003年6月30日(月)発行

30th Jun(Mon), 2003

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 Katahirra, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, JAPAN

TEL +81-22-215-2411(DIAL-IN), FAX +81-22-215-2166