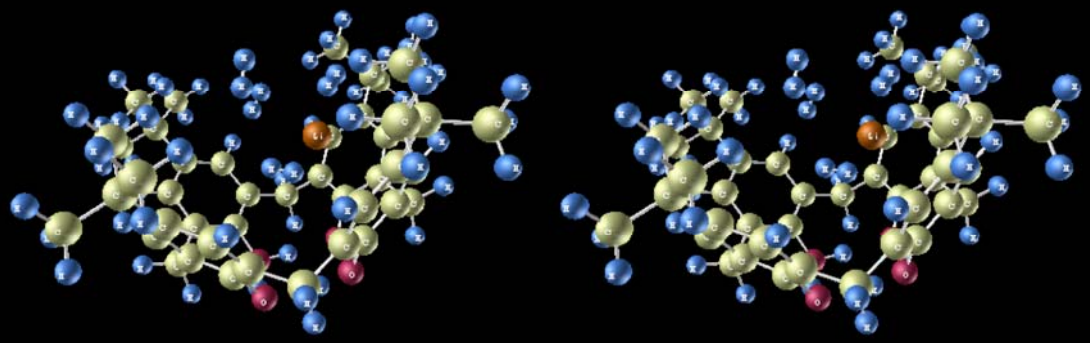
計算材料学センターだより

Center for Computational Materials Science News



CONTENTS

- 責任部門教授あいさつ
- ジョブ再現実行機能の提供について
- 携帯電話からのジョブ状況確認について
- ジョブ一元管理システムのジョブ履歴参照機能追加について
- AVS/Expressのモジュール開発について
- アプリケーション ADF-BAND および BAND-GUI のサービス開始について
- アプリケーションのバージョンアップについて
- 主なアプリケーションについて
- リアルタイムストリーミング中継について
- スーパーコンピューティングシステム利用申請に係る変更について
- 平成 20 年度日本計算工学会で本センター職員が発表
- SC08 に本センター職員が参加
- 金属材料研究所第 116 回講演会で本センター職員が発表
- 平成 20 年度京都大学総合技術研究会で本センター職員が発表
- 平成 20 年度東北地区国立大学法人等技術職員研修に本センター職員が参加
- 日立 IT ユーザ会で本センター職員の論文が受賞
- 日本金属学会で本センター職員が日本金属学会研究技術功労賞を受賞
- 平成 21 年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日について
- スーパーコンピューティングシステムユーザー専用サービスについて
- 平成 20 年度計算材料学センター見学者

CCMS NEWS 11

表紙の図は4個の水素分子を Li を付加した n 量体カリックスアレーン分子に吸着させた様子を示す。

純粋な有機複合体である 4 量体 p-t-ブチルカリックスアレーン分子（TBC）は、その籠状の分子構造内に水素を 0.6wt%まで取り込む能力がある。我々は水素分子をより効率良く取り込むようにLiを付加した系を提案し、第一原理分子動力学計算により 1000℃までこの系が安定であることを明らかにした。

Figure in the cover shows the appearance in which the calixarene-n molecule that adds Li is made for them to adsorb four hydrogen molecules.
The pure organic compound, p-tert-butylcalix[4]arene (TBC), has the capability to store hydrogen up to 0.6 wt%. We dope it with Li atom to increase its storage capacity. Ab inito molecular dynamic studies show that Li -functionalized TBC with four hydrogen molecules was stable up to 1000℃.

裸眼立体視画像（平行法）

1. 右目で右の★、左目で左の★をぼんやり見るような感じで焦点を画像に合わせないようにする。
2. 画像が段々ぼやけてくるのでさらにそのままぼんやり見る。
3. ぼやけた像が中央へと近づいて、中央へ来た像が融合して立体的に見える。

Stereogram (Parallel Viewing)
* Relax. Then try to look at the left star with your left eye and the right star with your right eye. Try not to focus on the image.
* Don't force your eyes to focus on it.
* After that, the two blurred images will get close to each other, and you'll see the 3D image at the center!!

計算材料学センターは本格的に全国共同利用体制へ

責任部門教授　川添良幸

平成 16 年度からの国立大学法人化で、法人として半端な状態となっていた「全国共同利用」が、やっと第二期中期目標・計画で再定義されることとなりました。本所も全国の多くの研究者の期待に沿えるように、新全国共同利用体制樹立に向けた取り組みを開始しました。本センターは、これまで所内措置の名ばかりの組織でしたが、今回、きちんとした組織化を目指し、全国共同利用に対応することとなりました。課題の受付が従来の本所全体の共同利用枠内ではなくセンター独自のものとなり、課題審査も学外委員が入った体制で行われます。もちろん、このためには人手も必要で、現在のようなセンターの状態では本格的な対応は困難ですが、将来計画として徐々に整備して行ければ全国規模でのより良い利用者サービスが可能となると思われますので、ご期待下さい。

私は旧教養部で学生教育を専門としていたので、「世界の金研」に雇っていただけた時は本当に嬉しく、頑張って imr.edu というドメイン名を取得しました。今では、edu ドメインは米国の大学以外では入手不可能ですので、大変貴重な「世界の金研」の印となっています。是非ご利用下さい。（stanford.edu などと米国だけが国名のないドメイン名を使うという不公平を解消し、同等のレベルを確保しました。）

センターの一関技術専門職員をはじめとする多くの方々のおかげで、本責任部門独自開発の混合基底第一原理計算プログラムTOMBOのSINET3 上での分散処理を可能としました。定式化からオリジナルな第一原理計算プログラムの実質を伴う超大型数値計算を実行できる貴重な実例として高い評価をいただいています。私が主催し、本センターが支援し続けているアジア計算材料学コンソーシアムACCMSも設立から 10 年が経過し、計算材料学分野で世界的に一定の認知度をいただけるまでに成長しました。自分たちが立ち上げたアジアの会議に欧米からも多くの参加者が得られるのは嬉しいことです。そこでもTOMBOを東洋発の標準プログラムとする話がなされています。計算材料学分野で「世界の金研」の地位を維持するのも全世界共同利用として大変重要な貢献であると思います。この点では米国はさすがに進んでいて、もし米国で「全国共同利用」と言う言葉があればほとんど自動的に全世界共同利用となります。我々も志を高く持ち、米国と対等であった初期の金研（米国物理学会誌と本所の出版物RITU*を対等交換していた頃）を忘れずに頑張りたいものです。

*RITUは形を変えましたが、今でもAdvances in Materials Researchシリーズとして本所の業績を中心に、ドイツSpringer社から出版され続けています。

ジョブ再現実行機能の提供について

昨今、各分野で論文や実験データの捏造が騒がれています。計算材料学分野においても他人事ではありません。事と次第によっては、過去の計算の証拠を要求されることも考えられます。しかし研究者の皆様には古い計算データの抽出が困難な場合もあるでしょう。そこで当センターでは、過去に実行されたジョブを再現させる機能の可能性を探り、ここに当システムで最も使用されている第一原理計算プログラム VASP の再現実行機能を実現しました。2009 年 6 月以降に実行された VASP ジョブであれば、入力ファイルと投入コマンド情報を得ることができます。

ジョブ再現実行機能の提供については以下をご覧ください。
http://www-lab.imr.edu/~hitachi/MAN/reenact/AZ030002.HTM

携帯電話からのジョブ状況確認について

以前までは携帯電話からジョブの状況を確認する際には必ずユーザーID とパスワードを入力する必要がありました。しかし、携帯電話での文字入力はキーボードでの入力とは異なり、操作しにくいという欠点がありました。そこで、個々の携帯端末を識別できる情報を使用して携帯端末とユーザーID を対応付けた情報（マッピング情報）を利用して認証できる機能を開発しました。図に開発後のユーザー認証画面を示します。ユーザーは一度"Set auto-login"にチェックしてユーザーID とパスワードでの認証に成功すれば、次回からは"auto-login"ボタンを押すだけで認証可能となります。また、マッピング情報はユーザーあたり複数作成することができるので、携帯電話を複数持っている場合や、機種を変更した場合でも対応可能です。

ユーザー認証画面

携帯電話によるジョブの状況確認については以下をご覧ください。
http://www-lab.imr.edu/~hitachi/MAN/OneCommand/AZ020220.HTM#ID2.2.4

ジョブ一元管理システムのジョブ履歴参照機能追加について

ジョブ一元管理システムでは、ジョブ投入、ジョブ確認、ジョブ削除に加え、ジョブ実行履歴が参照できるようになりました。コマンドは histj です。デフォルトでは、最近投入した 50 件のジョブ一覧が表示されます。実行中のジョブは表示されません。-l（小文字のエル）オプションをつけるとジョブの詳細情報（ジョブ ID、ジョブ名、使用キュー、投入時刻、開始時刻、終了時刻、実行時間、使用 CPU 時間、使用メモリー、浮動小数点演算量、ノード/スロット数、投入コマンド、実行ディレクトリ）が表示されます。

ジョブ一元管理システムのジョブ履歴参照機能については以下をご覧ください。

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/MAN/OneCommand/AZ020220.HTM#ID2.2.5

```
userA@super1> histj
JOB ID                QUEUE    ENDED TIME    ETIME(H) JOB NAME
super24-cx.57506.0       EA 2008/12/10 17:30     0.00 super24-cx.57506
super24-cx.57851.0       EB 2008/12/14 18:24     0.74 super24-cx.57851
super24-cx.58176.0       EB 2008/12/18 17:10     0.31 super24-cx.58176
super24-cx.58177.0       EB 2008/12/18 17:10     0.04 super24-cx.58177
super25-cx.58181.0       EA 2008/12/19 11:32     0.00 super25-cx.58181
73486                 avasp 2008/12/21 14:19     0.01
73487                 avasp 2008/12/21 14:21     0.00
73550                    bl 2008/12/23 14:11     0.00
                                  :
                          (途中省略)
                                  :
super24-cx.58791.0       EB 2008/12/30 18:12     0.01 super24-cx.58791
super25-cx.59076.0       EB 2009/01/06 14:16     0.00 super25-cx.59076
74272                    bl 2009/01/06 14:21     0.08
super24-cx.59115.0       SC 2009/01/06 14:20     0.00 super24-cx.59115

The specified number of jobs                    : recently submitted 50 jobs
The number of actually listed jobs (submit order) : 50

executed command: histj [-n 50]
```

実際に表示した件数

実行した histj コマンド
(仮定したデフォルト値も表示)

histj コマンドの簡易形式の表示例

```
userA@super1> histj -l
|       JOB ID          |       JOB NAME                                          |
| QUEUE                 | ETIME(H)|    CPU(H)|   MEM(GB)| FLOPS(%)|  NODES/SLOTS|
| SUBMITTED TIME        |    STARTED TIME    |    ENDED TIME      |             |
|                         submit COMMAND                                          |
|                         WORK DIR                                                |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|
| super24-cx.57506.0   | super24-cx.57506                                        |
| EA                   |    0.00 |    0.00 |    N/A  |    N/A  |           1 |
| 2008/12/10 17:28:58  |2008/12/10 17:30:03 |2008/12/10 17:30:04 |             |
| submit EA general -exec test1.sh                                                |
| /home/userA/xxxxxx/testY1                                                       |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|
| super25-cx.57468.0   | super25-cx.57468                                        |
| EB                   |    0.00 |    0.00 |    N/A  |    N/A  |           1 |
| 2008/12/10 17:29:56  |2008/12/10 17:32:03 |2008/12/10 17:32:04 |             |
| submit EB general -exec test2sh                                                 |
| /home/userA/xxxxxx/testY1                                                       |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|
                                  :
                          (途中省略)
                                  :
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|
| 74272                |                                                         |
| bl                   |    0.08 |    0.06 |    N/A  |    N/A  |           1 |
| 2009/01/06 14:17:10  |2009/01/06 14:17:12 |2009/01/06 14:21:56 |             |
|                         (later)                                                 |
| /home/userA/xxxxxx/1202                                                         |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|
| super24-cx.59115.0   | super24-cx.59115                                        |
| SC                   |    0.00 |    0.04 |    N/A  | (later) |           1 |
| 2009/01/06 14:18:44  |2009/01/06 14:20:03 |2009/01/06 14:20:19 |             |
|                         (later)                                                 |
| /home/userA/SR11000                                                             |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|-------------|

The specified number of jobs                    : recently submitted 50 jobs
The number of actually listed jobs (submit order) : 50

executed command: histj [-n 50] -l
```

実際に表示した件数

実行した histj コマンド
(仮定したデフォルト値も表示)

histj コマンドの詳細形式の表示

AVS/Express のモジュール開発について

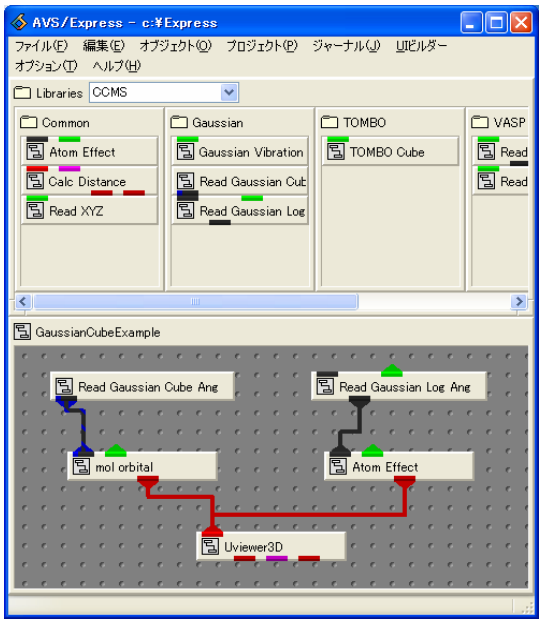
AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって可視化を行うことができる汎用の可視化ソフトウェアです。計算材料学センターでは、利用率の高い計算アプリケーションである VASP、Gaussian、TOMBO 用のモジュールとして以下を作成しましたのでご利用ください。

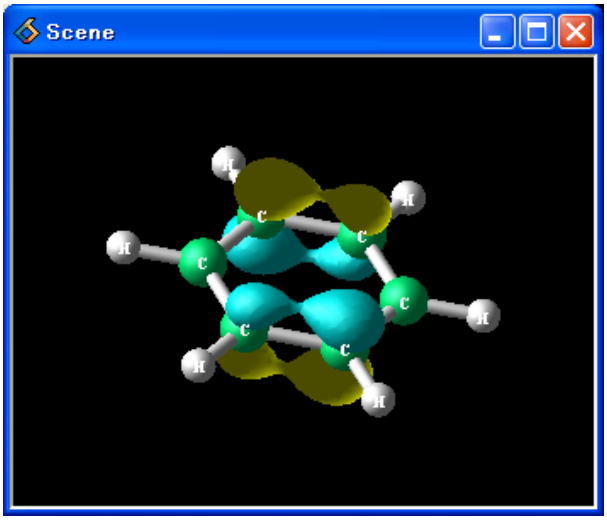
1. Gaussian 用モジュール

Gaussian Vibration：Gaussian の振動計算の log ファイルからスペクトル、振動アニメーションを表示する。

Read Gaussian Log Ang：Gaussian の log ファイルから分子情報のパラメータを出力する。

Read Gaussian Cube Ang：Gaussian の cube ファイルから分子軌道のフィールド・データを出力する。



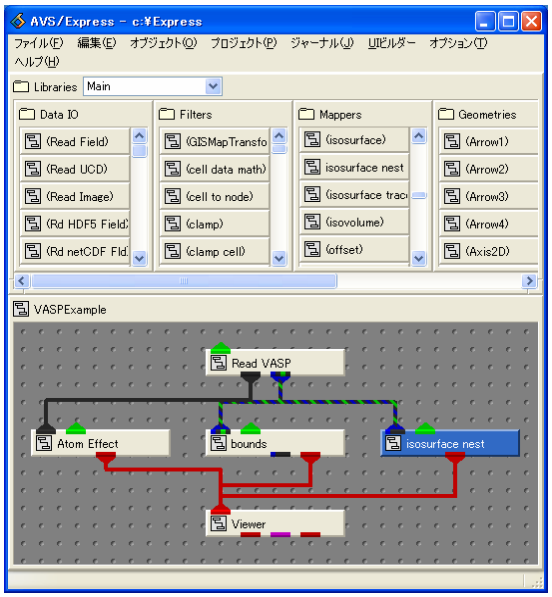


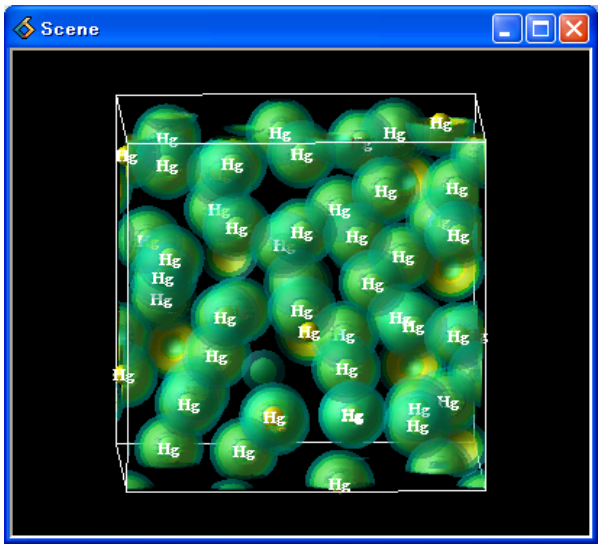
Gaussian による構造と分子軌道の表示例

2. VASP 用モジュール

Read VASP：VASP の CHGCAR および POTCAR ファイルから分子情報のパラメータおよび電荷密度のフィールド・データを出力する。

Read VASP MD：VASP の XDATCAR、POSCAR、POTCAR ファイルから分子情報のパラメータを出力し、MD のアニメーションを表示する。



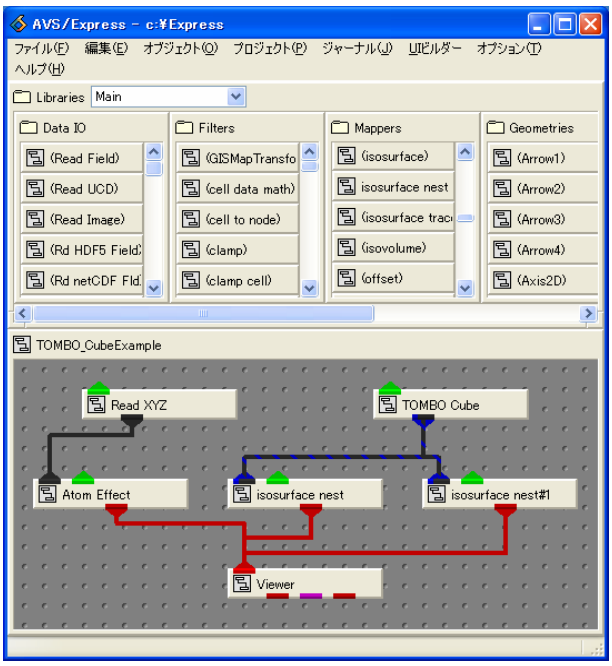


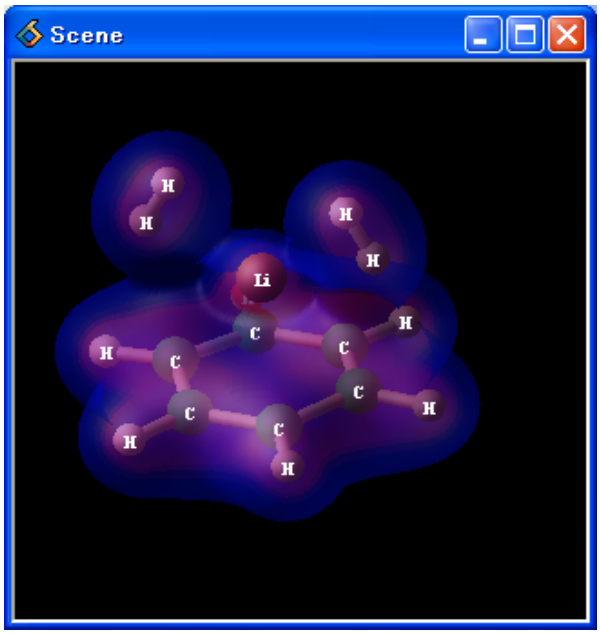
VASP による構造と電荷密度の表示例

3. TOMBO 用モジュール

Read XYZ：TOMBO の結果ファイルや XYZ 形式のファイルから分子情報のパラメータを出力する。

TOMBO Cube：TOMBO の結果ファイルから電荷密度のフィールド・データを出力する。



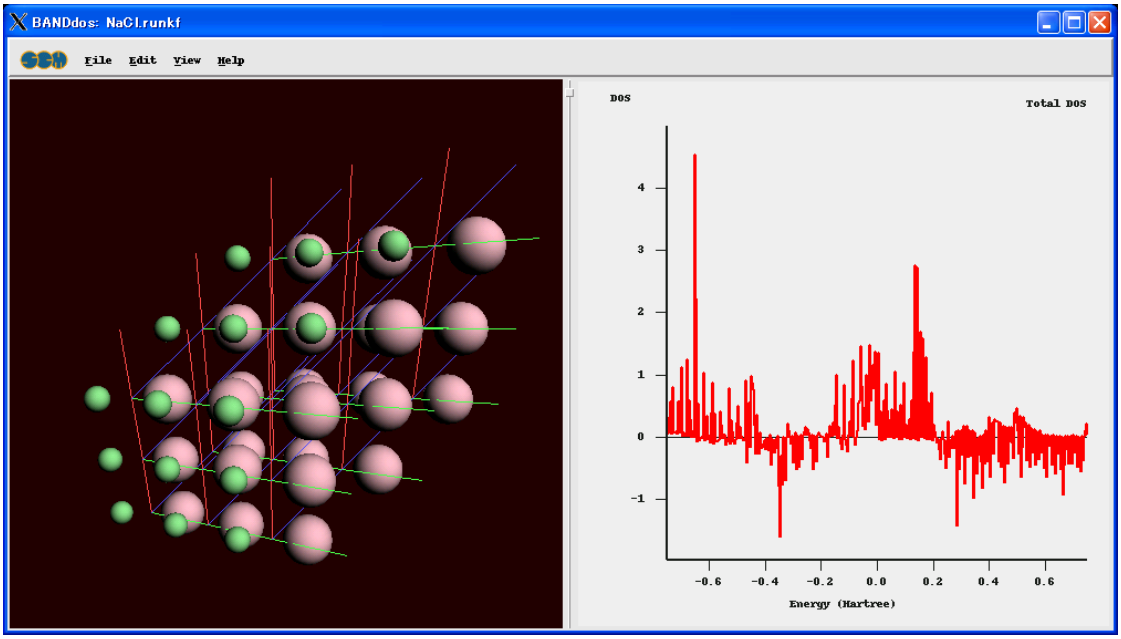


TOMBO による構造と電荷密度の表示例

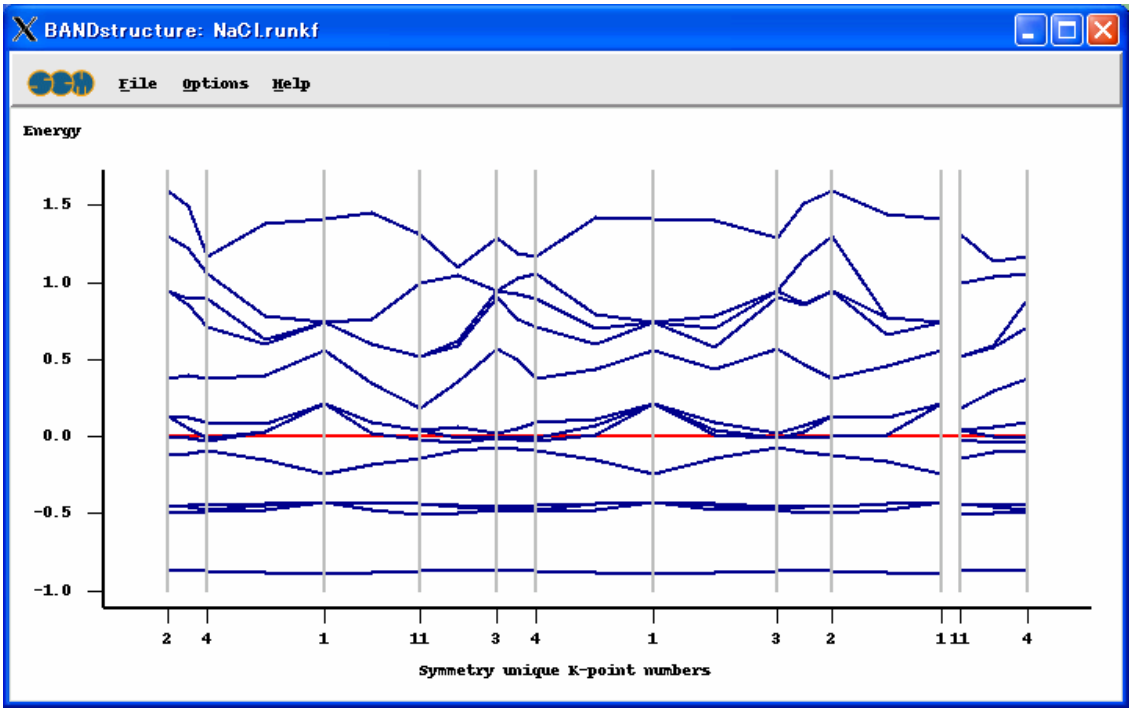
アプリケーション ADF-BAND および BAND-GUI のサービス開始について

表面、バルク結晶、ポリマーなどの研究を目的とした周期境界構造計算プログラム ADF-BAND および ADF-BAND 用のグラフィカルユーザインターフェース BAND-GUI がアプリケーションサーバーB で使用できるようになりました。

使用例



NaCl の電荷密度



NaCl のバンド構造

使い方

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/adfband/band.html

ADF-BAND web site:

http://www.scm.com/

アプリケーションのバージョンアップについて

1. Materials Studio

分子設計ソフトウェア Materials Studio を 4.3 へバージョンアップしました。

Materials Studio は低分子化合物、有機・無機材料、結晶、ポリマー、金属、半導体、触媒など様々な分野でモデルの構築から各種シミュレーションの実行、シミュレーションデータの解析まで行うことができるソフトウェアです。

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。

- CASTEP：バンドギャップと有効電子質量の大幅な改善および標準的 Hubbard U あるいはユーザー独自パラメータの使用が選択可能
- Visualizer：場の 3D 分布情報の定量化およびメモリ使用量の低減と速度の改善による大きなドキュメントの効率的処理

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、ライセンス数に達するまでは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、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

Materials Studio web site:

http://accelrys.co.jp/products/accelrys/ms/ms.html

2. Mathematica

数値計算および数式処理ソフトウェア Mathematica を 6.0 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。

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。

- 即時インターフェースの導入
- 高性能関数とデータグラフィックスの自動生成
- 何百もの標準データ形式の自動統合
- 革新的アルゴリズムによる視覚的表現の最適化

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、ライセンス数に達するまでは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、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

Mathematica web site:

http://www.wolfram.co.jp/

3. Maple

数式処理・数式モデル設計パッケージ Maple を 12 へバージョンアップしました。

Maple は電卓代わりの計算から連立方程式や微分方程式の求解、微積分計算、フーリエ変換・ラプラス変換などの基本的な数式計算・数値計算を直感的で手軽なユーザインターフェースで可能となります。

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。

- 2 軸プロットや極座標プロットなどの追加
- 常微分方程式ソルバー、偏微分方程式ソルバーおよび微分代数方程式ソルバーへの改良
- CAD 接続やデータベース接続などの追加

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、ライセンス数に達するまでは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、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

Maple web site:

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

4. ADF

密度汎関数法ソフトウェア ADF を 2008.01 へバージョンアップしました。

ADF は密度汎関数法に基づく量子化学計算ソフトウェアで、均一系、不均一系触媒から無機化学、重元素化学、生化学、各種分光学まで幅広い分野での研究に利用可能です。

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。

- QM/MM 法の追加
- 構造最適化機能の強化
- 磁化率における存続効果の追加

ADF web site:

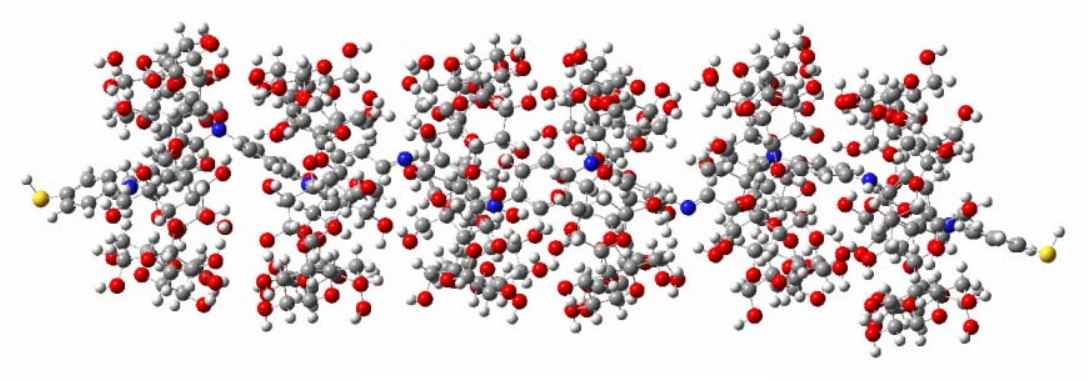
http://www.scm.com/

主なアプリケーションについて

1. Gaussian 03 および GaussView

Gaussian 03 は非経験的および半経験的分子軌道計算を行うソフトウェアです。量子力学の基礎方程式に基づく計算により、気相や溶液中、基底状態や励起状態など、さまざまな条件のもとでの広範囲な分子システムをモデリングできます。GaussView は Gaussian の入力ファイルの作成や計算結果を可視化するためのソフトウェアです。

使用例



シクロデキストリンの最適構造

使い方

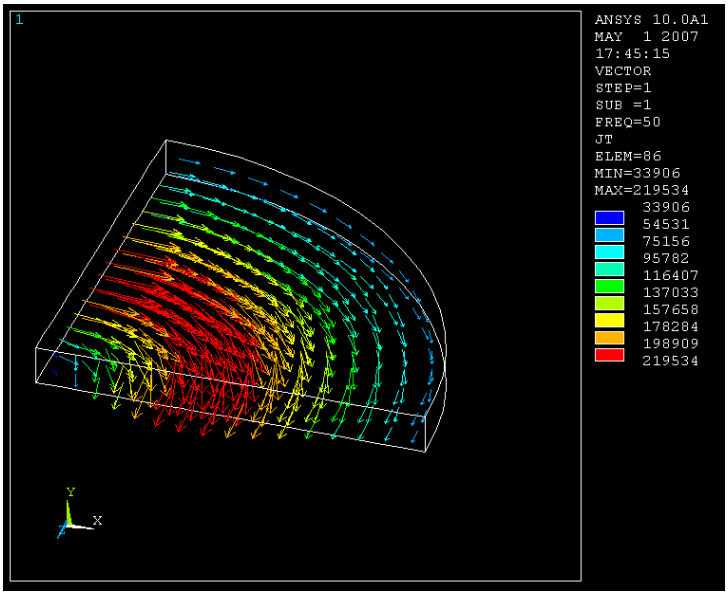
http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/gaussian/gaussian.html

Gaussian 03 およびGaussViewはWindowsでも利用できます。ご自分のPCにインストールしたい方は、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

2. ANSYS Multiphysics

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 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。

使用例



磁場解析例

使い方

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/ansys/ansys.html

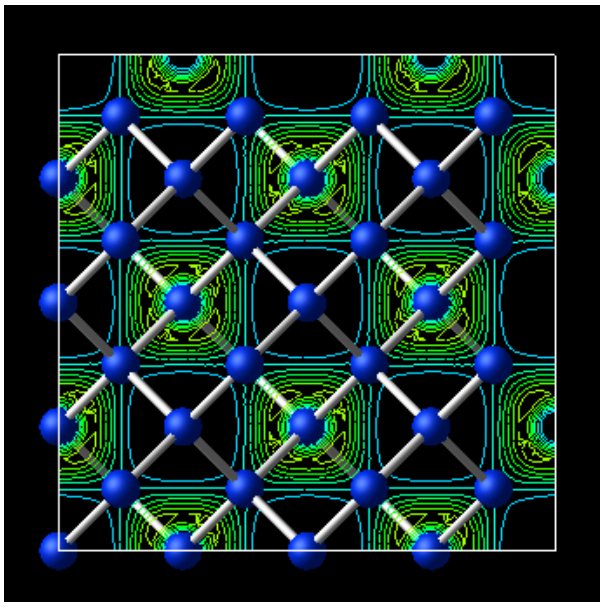
計算材料学センターではフローティングライセンス契約をしていますので、ライセンス数に達するまではお使いいただけます。ご自分のPCにインストールしたい方は、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

3. AVS/Express Developer

AVS/Express では、さまざまな機能がモジュールと呼ばれる部品として提供されており、モジュール同士をマウス操作で組み合わせるだけで、意のままの可視化を簡単に実現します。また、ユーザーが独自にモジュールを作成することによって機能を追加することも可能です。

計算材料学センターでは計算アプリケーション Gaussian、VASP、TOMBO 用のモジュールを提供しています。

使用例



VASP での計算結果の可視化例

使い方

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/avs/avs.html

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、ライセンス数に達するまでは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、インストールメディアをお貸しいたしますので、ccms-adm@imr.eduまでご連絡ください。

リアルタイムストリーミング中継について

撮影、配信の様子

グローバルネットワークに繋がれた環境から、スーパーコンピューティングシステム上でサービスしているストリーミングサーバーを使って、ビデオカメラとクライアント PC で撮影した講演会や国際会議などをリアルタイムストリーミング配信中継することができます（視聴には Windows Media Player が必要です）。また、撮影された映像は、DVD、CD などに変換し会議記録として依頼者へ提出を行うこともできます。是非、ご利用下さい。これまで、以下の中継を行ないました。

2008 年 12 月 2 日	日仏ジョイントラボラトリ調印式の撮影と中継
2009 年 2 月 27 日	マテリアル系講堂で行われたノーベル賞受賞者グリュンベルグ博士による遠隔授業の中継

スーパーコンピューティングシステム利用申請に係る変更について

本所スーパーコンピューティングシステムの利用に関して、昨年度までは「スーパーコンピューティングシステム利用内規」第2条に規定された利用資格者が各自で「スーパーコンピューティングシステム利用申請書」を計算材料学センター長に提出し、同センター長の承認を得て利用することとしていました。今年度（2009 年度）より本所の各種共同研究・共同利用研究全体に関して、新たにWebシステムを利用した電子申請が導入され、これを機にスーパーコンピューティングシステムの利用に関しても、「計算材料学センター共同研究」として研究部共同研究等と同様に定められた受付期間内に研究課題申請を行い、その後、同センターの採択専門委員会及び共同利用委員会の議を経てセンター長が課題採択の可否を決定することとなりました。なお、研究課題申請の資格者は「国立大学法人・公・私立大学及び高等専門学校並びに独立行政法人及び特殊法人の研究者」となっており、それ以外の方（教務職員、技術一般職員及び大学院生）については、研究課題の分担者とすることにより、スーパーコンピューティングシステムの利用が可能となります。なお、実際にスーパーコンピューティングシステムを利用するためには、課題申請者及び分担者が各々、簡略化した新しい「スーパーコンピューティングシステム利用申請書」を計算材料学センター長に提出し、利用アカウントを取得（更新）していただくことになります。また、年度途中に新たにスーパーコンピューティングシステムを利用することになった方については、すでに採択された研究課題の申請者がその方を分担者として追加登録することによりスーパーコンピューティングシステムを利用できるようになります。

以上のように、スーパーコンピューティングシステム利用申請に係る変更がありましたのでご注意ください。

平成 20 年度日本計算工学会で本センター職員が発表

2008 年 5 月 19 日（月）～5 月 21 日（水）に仙台市民会館で行われました第 13 回計算工学講演会に本センター職員が参加し、口頭発表を行いました。

「大規模シミュレーション計算結果の 3 次元可視化ソフトウェアの統一とプレゼンテーションシステムの構築」
○ 佐藤 和弘、一関 京子、三浦 重幸、野手 竜之介、五十嵐 伸昭、川添 良幸、古田 正俊、桐山 智文、北川 千夏、衛藤 奈緒美

概要：本所スーパーコンピューティングシステム上でサービスしている代表的な材料設計開発のソフトウェア Gaussian、VASP などの計算結果の 3 次元可視化を、共通のソフトウェアで実現できるよう AVS/Express のインターフェースを開発したので紹介しました。

SC08 に本センター職員が参加

2008 年 11 月 15 日（土）～21 日（金）に、AUSTIN-Austin Convention Center（米国 テキサス州）で行われました標記 Conference に、本センターの佐藤和弘技術専門職員と責任部門の西松毅助教が参加しました。

概要：SC は毎年行われてい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 Conference 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。東北大学ではスーパーコンピューターを所有する部局であるサイバーサイエンスセンター、本所、流体科学研究所が合同で 1 ブースの展示を毎年行っています。今回の本所の展示はスーパーコンピューターの紹介、実績報告に関するパネル展示とともに、スーパーコンピューターの携帯電話からのジョブ確認のデモや、本所計算材料学研究部門にてオリジナル開発された不揮発性強誘電体メモリー（FeRAM）の超高速分子動力学シミュレーションの説明等を行いました。

会場の各ブース展示見学では、3D 投影のデモの他、3D 映像を擬似的にさわれる装置などもあり、技術の進歩が伺われます。有名メーカーが数多く展示しており、スーパーコンピューターが高速になった分、ストレージとのネットワークをロス無く繋ぐ技術や日本では見られない最新のコンピューター機器技術に触れることのできるよい機会でした。 また、各国の大学が独自発想で構築したクラスターコンピューターの計算スピードを競う催しなどもありました。

会議での展示の様子

金属材料研究所第 116 回講演会で本センター職員が発表

2008 年 11 月 27 日（木）、28 日（金）に行われました標記講演会で、本センター職員がポスター発表を行ないました。

「ACCMS-VO ホスティングパッケージの開発」
○一関 京子、五十嵐 伸昭、橋 祐一、川添 良幸

概要：本センターは、アジア計算材料学コンソーシアムACCMSを支援し、本所のスーパーコンピューターSR11000を中心とした仮想超大規模シミュレーション計算環境を共有するグリッド環境の構築を行っています。各サイトのACCMSのメンバーが、そこに自由に参画できるよう、必要なインストールすべきモジュールをDVDにパッケージングし、そのDVDで起動すると、1つの計算ノードの環境が自動的に構築されるシステムを開発したので報告しました。

一関京子技術専門職員のポスター発表

平成 20 年度京都大学総合技術研究会で本センター職員が発表

2009 年 3 月 9 日（月）、3 月 10 日（火）に京都大学で行われた京都大学総合情報技術研究会に、本センター職員が参加し、3 名がポスター発表を行ないました。

「ACCMS-VO ホスティングパッケージの開発」
○一関 京子、五十嵐 伸昭、橋 祐一、川添 良幸

概要：本センターは、アジア計算材料学コンソーシアム ACCMS を支援し、本所のスーパーコンピューターSR11000を中心とした仮想超大規模シミュレーション計算環境を共有するグリッド環境の構築を行っています。各サイトの ACCMS のメンバーが、そこに自由に参画できるよう、必要なインストールすべきモジュールを DVD にパッケージングし、その DVD で起動すると、1つの計算ノードの環境が自動的に構築されるシステムを開発したので報告しました。

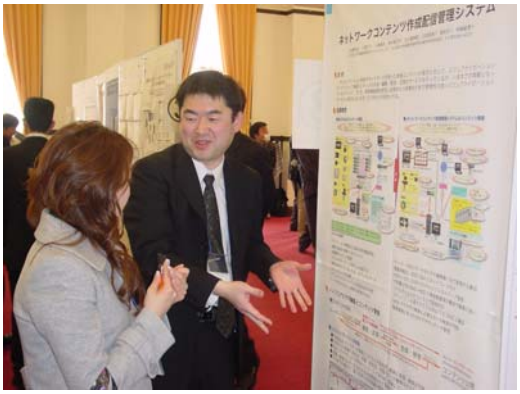
「ネットワークコンテンツ作成配信管理システム」
〇佐藤 和弘、一関 京子、三浦 重幸、野手 竜之介、五十嵐 伸昭、川添 良幸、根来 武、寺崎 敏男

概要：本所スーパーコンピューティングシステム上でサービスしている映像に関する編集、作成、変換、配信、記録、検索等を一元管理する総合的なネットワークコンテンツ作成配信管理システムを構築導入したので紹介しました。

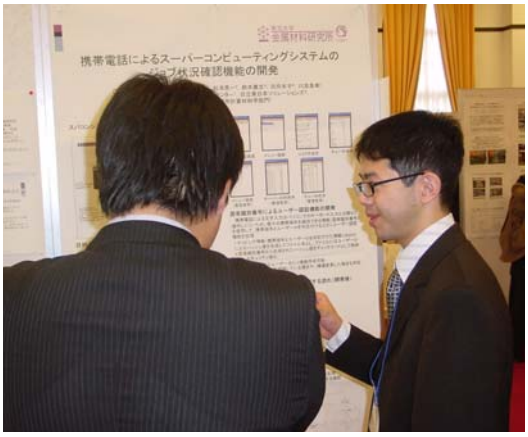
「携帯電話によるスーパーコンピューティングシステムのジョブ状況確認システムの開発」
〇五十嵐 伸昭、一関 京子、佐藤 和弘、松本 秀一、鈴木 嘉文、日向 本子、川添 良幸

概要：スーパーコンピューティングシステムのジョブの状況やキューの混み具合を携帯電話から確認できるシステムを開発しました。また、携帯電話の個体情報を利用して簡単にログインできる機能を開発し、ユーザーの利便性を向上させたので紹介しました。

一関京子技術専門職員のポスター発表



佐藤和弘技術専門職員のポスター発表



五十嵐伸昭技術一般職員のポスター発表

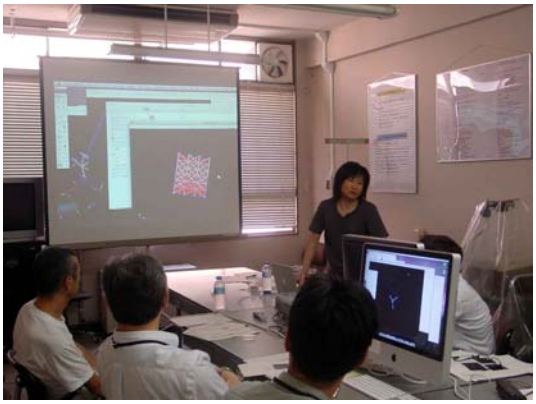
参加したセンター職員（左から 3 番目より、一関、五十嵐、佐藤、三浦）

平成 20 年度東北地区国立大学法人等技術職員研修に本センター職員が参加

2008 年 9 月 9 日～9 月 12 日に東北大学で行われました平成20年度東北地区国立大学法人等技術職員研修技術発表会に本センター職員の野手竜之介技術専門職員が実技講師として参加し、三浦重幸技術専門職員がポスター発表を行いました。

「バルク金属の結晶構造探索」
〇野手　竜之介、村上　義弘

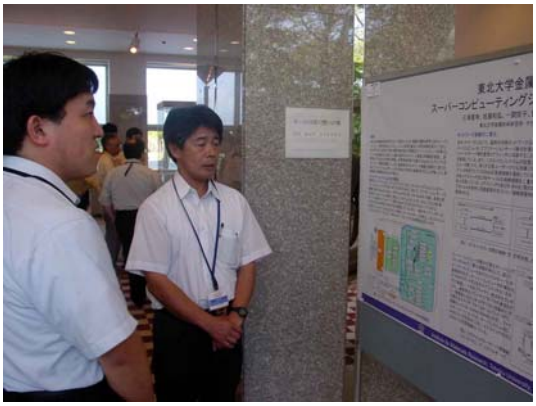
概要：東北大学が当番校となり平成 20 年度東北地区国立大学法人等技術職員研修が行われたが、その中で実技は 5 テーマがそれぞれ別部局において実施され、その 1 テーマを金属材料研究所のテクニカルセンターで受け持ちました。実技講師には本センターの野手竜之介技術専門職員と金属ガラスセンターの村上義弘技術職員が選ばれました。通常 1 つのテーマは同カテゴリーの技術を用いての実施となりますが、新たな試みとして異種の技術を持つ 2 名のコラボレートによる実施となりました。さらにテーマを「バルク金属の結晶構造探索」とすることで同対象を異種技術で扱う実習が可能となりました。同じ「バルク金属結晶」を、野手技術専門職員による第一原理計算でのシミュレーションと、村上技術職員によるX線解析のデータ分析により、多面的に考察しました。計算と実験という全く異なる手法により得られた最終結果が見事一致することに参加者は驚嘆しました。金研らしさをより前面に押し出した実習とすることができました。



野手竜之介技術専門職員の実技指導

「東北大学金属材料研究所スーパーコンピューティングシステムネットワークの紹介」
〇三浦　重幸、佐藤　和弘、一関　京子、野手　竜之介、五十嵐　伸昭

概要：東北大学金属材料研究所では、2007 年 3 月に従来の 10 倍の演算性能を誇る大規模なスーパーコンピューターを中心として材料設計開発に特化した複数のコンピュータから構成されるスーパーコンピューティングシステムを更新導入しました。これに併せて、その処理能力に見合った高速で堅牢なネットワーク環境の再構築を行い、基幹部分で 10Gbps の帯域確保とネットワーク機器・経路の二重化を図り、対障害性や信頼性の向上を目指しました。本報告では、以上のような設計思想に基づいて構築した高速ネットワークシステムについて紹介しました。



三浦重幸技術専門職員のポスター発表

日立 IT ユーザ会で本センター職員の論文が受賞

2008 年 6 月 3 日に開催されました日立 IT ユーザ会 第 45 回大会において、以下の論文が「一般論文優良賞」を受賞しました。

「異機種計算機統合による材料設計専用スーパーコンピューティングシステム」
〇一関 京子、野手 竜之介、五十嵐 伸昭、三浦 重幸、佐藤 和弘

概要：現在のスーパーコンピューティングシステムは平成 18 年度に、材料設計専用のスーパーコンピューティングシステムとして導入されました。全体システムとしての処理効率向上のために、大規模ジョブ用のスーパーコンピューター本体に加え、高速なスカラープロセッサを多数連結したアプリケーションサーバー群を導入し、ストレージを中心に異機種計算機を結合したシステムを構築してあります。スーパーコンピューティングシステムの概要、導入にあたって検討したユーザーインターフェース、導入後のシステムチューニングなどを中心に報告しました。

日本金属学会で本センター職員が日本金属学会研究技術功労賞を受賞

2009 年 3 月 28 日に開催されました（社）日本金属学会 2009 年春期（第 144 回）大会において、一関京子さんが「日本金属学会研究技術功労賞」を受賞しました。受賞は以下の功績によるものです。

受賞者は 1996 年 4 月に大型計算機センター（現サイバーサイエンスセンター）より金属材料研究所に異動してから一貫して、所内の情報基盤の整備、技術職員の情報技術の向上、スーパーコンピューターの利用促進、利用環境の整備に努めてきました。特にスーパーコンピューターを連携して行う超大規模シミュレーション計算の実現を積極的に推し進め、2003 年には、本所が独自に開発した全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO のスーパーSINET 上での分散処理化を行うなど、金属材料の研究発展に大きく貢献しています。

平成 21 年度スーパーコンピューティングシステム定期保守予定日について

スーパーコンピューティングシステムは、基本的に奇数月の最終週の月曜日に定期保守を行っています。

今年度、スーパーコンピューティングシステムは以下の日程で定期保守を行う予定です。また、片平地区の計画停電により停止することもあります。保守時間はその時の保守内容によって異なりますので、詳細についてはそのつど、メールでお知らせいたします。皆様のご協力をどうぞよろしくお願いします。

定期保守日

2009 年　奇数月の最終週月曜日

　　7 月 27 日、9 月 28 日、11 月 30 日

2010 年　奇数月の最終週月曜日

　　1 月 25 日、3 月 29 日

片平地区停電のためのシステム停止

2009 年 8 月 7 日（金）18 時～8 月 10 日（月）10 時（予定）

定期保守日については、センターのホームページでも案内しています。

http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/index.html

スーパーコンピューティングシステムユーザー専用サービスについて

以下は、スーパーコンピューティングシステムユーザー専用のサービスです。

1. PDF ファイルへ変換サービス（PDFstaff Web）

計算材料学センターでは Web ブラウザを利用したネットワーク上での PDF 変換サービスを行っています。下記 URL より変換可能ですのでご利用ください。Windows XP の Internet Exploler からのみ利用可能です。

PDF 変換サービス web site:

http://pdf-serv.imr.edu/PDFstaff/

2. 大判プリンタ出力サービス

計算材料学センターでは2階ユーザーコーナーで B0 サイズまでの大判プリントのサービスを行っています。Windows XP と Machintosh OSX の専用 PC を用意していますので、USB メモリ等で PowerPoint、Illustrator、PDF のデータをお持ち下さい。

平成 20 年度計算材料学センター見学者

期間:2008 年 4 月～2009 年 3 月

2008 年 4 月 16 日	佐藤 年成氏	日本 SGI(株)
2008 年 4 月 16 日	渡辺 健人氏	Force10 Networks
2008 年 4 月 25 日	新宅 一憲氏	NTT コムウエア(株) 他 1 名
2008 年 4 月 25 日	坂本 寛之氏	ネットワークダイナミックス
2008 年 5 月 14 日	谷田部 順氏	Clear Speed 他 2 名
2008 年 5 月 16 日	松谷 光男氏	NTT コムウエア(株) 他 2 名
2008 年 5 月 19 日	邵 学民氏	中国地質大学 他 4 名
2008 年 7 月 14 日	宮島 雅史氏	Bosch Corporation(Japan) 他 1 名
2008 年 7 月 18 日	成 会明氏	中国科学院金属材料研究所
2008 年 9 月 10 日	宮崎 隆雄	AOARD 他 2 名
2008 年 9 月 16 日	小松 誠幸	NIMS 他 1 名
2008 年 10 月 16 日	ニジェゴロド大学	ロシアニジェゴロド国立総合大学 3 名
2008 年 10 月 31 日	吉田 典之氏	読売新聞
2009 年 1 月 31 日	梅澤 健輔氏	上智大学
2009 年 2 月 6 日	嶋 政勝氏	エヌビーアイ 他 1 名
2009 年 2 月 13 日	原田 隆氏	筑波大学 他 1 名
2009 年 2 月 16 日	手塚 明則氏	産業技術総合研究所 他 20 名
2009 年 3 月 19 日	菱田 元樹氏	(株)本田技術研究所

他 見学者総数 60 名

■中国科学院金属材料研究所見学
（2008 年 7 月 18 日　5 名）

■ニジェゴロド大学見学
（2008 年 10 月 16 日　3 名）

■ニジェゴロド大学見学
（2008 年 10 月 16 日　3 名）

■産業技術総合研究所見学
（2009 年 2 月 16 日　21 名）

計算材料学センターだより No.11

2009 年 6 月 18 日（木）発行

18th June(Thu),2009

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）215-24.1 FAX（022）215-2166

URL http://www.ccms.imr.edu/
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

CCMS
Supercomputing system