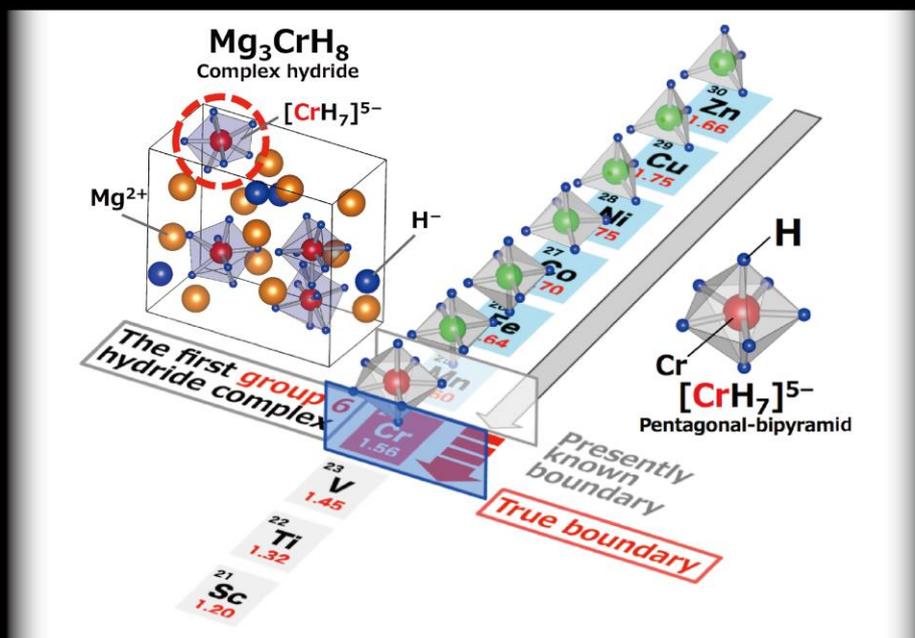


計算材料学センターだより



■ True Boundary for the Formation of Homoleptic Transition-Metal Hydride Complexes

CONTENTS

- ・ スーパーコンピューターの時間ノード管理
- ・ コンパイラ・ライブラリのバージョンアップ
- ・ アプリケーションのバージョンアップ
- ・ SC15 に本センター技術職員が参加
- ・ AVS/Express 講習会の開催
- ・ Materials Studio 講習会の開催
- ・ きんけん一般公開 2015 に本センターが参加

CCMS
NEWS
24

表紙の図について

■ 6 族元素クロムに 7 つの水素を結合させることに成功

水素は高い結合自由度を有し、ほとんどの元素と結合して多彩な水素化物を形成します。特に遷移金属元素の一部には多数の水素が結合して錯イオンを形成し、これらが陽イオンからの電子供与を受けて安定化した錯体水素化物を形成します。錯体水素化物は古くから水素貯蔵材料として注目され、活発な探索研究が進められてきたものの、錯イオンを形成し得る遷移金属はこれまで 7 族から 12 族元素に限定されていました。本研究では、水素が特定の対称性をもって 6 族元素クロムに配位するとき、従来よりも高水素配位の錯イオンを形成することを理論的に予測しました。また実際に水素 7 配位の錯イオン $[\text{CrH}_7]^{5-}$ を含む錯体水素化物 Mg_3CrH_8 の合成に成功し、中性子回折と赤外分光によりクロムと 7 つの水素が結合していることを確認しました。

今回の研究成果により、6 族元素においてさらなる高水素密度の材料が得られるとの指針が得られました。水素を高密度に含む水素化物は、水素貯蔵材料に加えて超伝導材料としての応用が期待されるなど、近年多くの注目を集めており、今後はこうした物性・機能性の開発研究が活発化するものと期待されます。

■ True Boundary for the Formation of Homoleptic Transition–Metal Hydride Complexes

Despite many exploratory studies over the past several decades, the presently known transition metals that form homoleptic transition–metal hydride complexes are limited to groups 7–12. Here we present evidence for the formation of Mg_3CrH_8 , containing the first group 6 hydride complex $[\text{CrH}_7]^{5-}$. Our theoretical calculations reveal that pentagonal–bipyramidal H coordination allows the formation of σ –bonds between H and Cr. The results are strongly supported by neutron diffraction and IR spectroscopic measurements. Given that the group 3–5 elements favor ionic/metallic bonding with H, along with the current results, the true boundary for the formation of homoleptic transition–metal hydride complexes should be between group 5 and 6. As the H coordination number generally tends to increase with decreasing atomic number of transition metals, the revised boundary suggests high potential for further discovery of hydrogen–rich materials that are of both technological and fundamental interest.

- S.Takagi, Y.Iijima, T.Sato, H.Saitoh, K.Ikeda, T.Otomo, K.Miwa, T.Ikeshoji, K.Aoki, S.Orimo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** (2015), pp. 5650–5653.

スーパーコンピューターの時間ノード管理

今年 10 月から各課題に時間・ノード積(以下、時間ノード と略す)の割り当てを行うことになりました。各課題の代表者は割り当てられた時間ノードを課題の分担者に配分し、これをセンターに連絡してもらって、センターでは新しく導入した機能により各ユーザーの時間ノードの管理をしています。今回導入した新機能では、登録された時間ノードの値に達するとユーザーはそれ以上、ジョブをサブミットすることができなくなります。この新しい機能に関する詳細はセンターホームページの FAQ に掲載されていますのでそちらをご一読下さい。本稿ではこのような管理機能の導入の背景について記したいと思います。

今年度は電気代の高騰に対処する為に 4 月より 60%の部分稼働を続けてきました。これは累積赤字の増加を抑えるべく、単年度赤字を出さない為に昨年度末に推定したギリギリの稼働率です。ユーザーの皆様の御協力を得て、これまで何とかスーパーコンピューターの運用を行ってききましたが、待ち時間の増大などいろいろなところに影響が表れています。このような状況下では、計算資源量が有限であることをよく認識し、計画的にジョブを流すことが望まれます。本センターのユーザーは、かつては時間ノードなどに制限されることなく、“無尽蔵”とも思われる計算資源を自由に使っていました。このような使い方ができたのは非常に恵まれていたことだと思います。しかし、150 名近いユーザーが有限の計算機資源を分かち合っているということを考えると、有効な利用の為に何らかの約束事が必要だったはずで、この必要性が 60%という部分稼働を余儀なくされる事態によって、顕在化したということだと思います。これが今回の管理機能の導入の最初の理由です。

又、本センターの課題採択は採択委員会をもってなされますが、採択委員の先生方には申請書を熟読して採択審査にあたっていただき、正確な評価を心得ていただいています。そして、いくつかの申請課題には構成メンバーの数や課題との整合性において十分な検討がなされていないと思われるものや、継続課題において十分な成果報告がなされていないものがあり、これらに対して採択委員からは厳しい意見が出ていました。又、これまでの課題審査は“資格審査”の側面が強調されすぎているきらいがあり、競争的な要素が抜けていたように思います。これは他機関のスーパーコンピューターセンターが厳密に評点に基づいて計算機資源を割り当てているのと比べると雲泥の差があります。これも上述の“無尽蔵”な資源を仮定すれば問題にはならないことのように思えるのですが、実は、このような考え方は、計算材料科学のコミュニティに弛緩を生じさせるのではないかと危惧しています。有限の資源を有効に利用すべく切磋琢磨して成果を挙げ、これを適切に評価して次の割当量に結び付けるというのがコミュニティに強靱性を醸成するものだと思います。

多くの成功を見てきたこれまでのセンターの運営方針を極度に変更し、単純な競争原理を持ち込んで、長年のユーザーに混乱を生じさせることは私達の本意ではありません。しかし、本センターが本邦の HPCI のリンクの中で、他のセンターと協調・整合しながら運営していかねばならないこと、計算材料科学のコミュニティも周辺の関連コミュニティと連携し、又、競争しながらアクティビティを高めていかなければならないこと、このような文脈の中で今回の時間ノードの割り当ての制度の導入を捉えていただければと思います。

電気代の高騰は私達に多くの問題を突きつけています。このような逆風をセンターのあり方を考える好個の機会にしたいと思います。未だ、時間ノードの導入に対して多くの御不便をかけており、スムーズにこの制度が定着しているわけではありません。不自由をおかけしますが、本センターの意向をご理解の上、御協力いただければ幸いです。なお、今年度は採択時の評点に基づいた時間ノードの配分を行いましたが、他の視点も来年度には考慮したいと思います。ユーザー各位の忌憚のない御意見をお待ちしています。

コンパイラ・ライブラリのバージョンアップ

スーパーコンピューター

1. クラスタソフトウェア

スーパーコンピューターのクラスタソフトウェアを 01-03 へバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のようなパッケージが使用可能になりました。

- ・ ESSL 5.2
- ・ PESSL 4.2

アプリケーションサーバー

1. Intel コンパイラおよびライブラリ

Intel コンパイラ、およびライブラリをバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のようなパッケージが使用可能になりました。

- ・ Intel Fortran コンパイラ 15.0.3
- ・ Intel C/C++コンパイラ 15.0.3
- ・ Intel MKL 11.2.3
- ・ Intel MPI 5.0.3

アプリケーションのバージョンアップ

スーパーコンピューター

1. WIEN2k

全電子計算法を用いた第一原理シミュレーションプログラムである WIEN2k を 14.2 へバージョンアップしました。

WIEN2k 14.2 では主に次のような修正が行われました。

- ・ 2つの原子が同じ位置にある場合、エラーで終了するよう修正
- ・ いくつかの wien2wannier ファイルの更新と修正

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_wien2k.html

Official web site:

<http://www.wien2k.at/index.html>

2. SIESTA

擬ポテンシャル法と原子局在基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである SIESTA を 3.2 patch level 5 へバージョンアップしました。

SIESTA 3.2 patch level 5 では主に次のような改良が行われました。

- ・ スピン偏極の変形電荷を読み出す際の不具合を修正
- ・ gnubands プログラムのアップデート
- ・ ゴースト合成原子の取り扱いが可能

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_siesta.html

Official web site:

<http://departments.icmab.es/leem/siesta/>

3. ABINIT

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである ABINIT を 7.10.4 へバージョンアップしました。

ABINIT 7.10.4 では主に次のような機能の追加、改良が行われました。

- ・ GW 計算の高スループット化
- ・ プラズマライブラリーを使用可能
- ・ 超並列計算用に Chebyshev filtering を基にした新しいアルゴリズムの実装
- ・ k 点並列で陽電子ドップラー拡がり計算が可能

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_abinit.html

Official web site:

<http://www.abinit.org/>

4. CPMD

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理分子動力学シミュレーションプログラム CPMD を 3.17.1 にバージョンアップしました。

CPMD 3.17.1 では主に次のような改良が行われました。

- ・ OpenMP 3.0 のサポートによるハイブリッド実行の大幅な高速化
- ・ RESTART ファイルの入出力における並列 I/O のサポート

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_cpmd.html

Official web site:

<http://www.cpmd.org/>

5. Quantum Espresso

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである Quantum Espresso を 5.1.2 にバージョンアップしました。

Quantum Espresso 5.1.2 では主に次のような機能の追加、改良が行われました。

- ・ 別々に計算した分子軌道を選択し PDOS を計算可能
- ・ GIPAW の再構成データと非 PAW の擬ポテンシャルの小さなバグの発生を防止
- ・ スピン偏極 b86r 交換項の追加

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_quantumespresso.html

Official web site:

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

6. CP2K

原子論的シミュレーションを行うことができる量子力学、固体物理学のソフトウェア CP2K を 2.6.0 にバージョンアップしました。

CP2K 2.6.0 では主に次のような改良が行われました。

- ・ リニアスケールリングルーチンの改良
- ・ LRI 基底の最適化

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_cp2k.html

Official web site:

<http://www.cp2k.org/>

7. VASP

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである VASP のバージョン 5.4.1 をインストールしました。バージョン 4.6.38、5.2.12、5.3.3、5.3.5 も使用可能です。

VASP 5.4.1 では主に次のような改良が行われました。

- ・ 新しいビルドシステムを導入
- ・ FOCK_ACC におけるメモリのボトルネックを解消

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/application/usage_vasp5.2.html

Official web site:

<http://www.vasp.at/>

アプリケーションサーバー

1. ANSYS Multiphysics

構造、電熱、電磁場、電圧、熱流体、音響、落下／衝突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 Multiphysics 16.0 をインストールしました。バージョン 14.5 も使用可能です。

ANSYS Multiphysics 16.0 では主に次のような改良が行われました。

- ・ 複合材料の解析機能強化
- ・ 接触解析機能の大幅改良
- ・ 流体解析と電磁界解析の連携がさらに強化

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_ansys.html

Official web site:

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

2. Mathematica

数値計算、および数式処理ソフトウェア Mathematica を 10.1 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 10.1 では主に次のような機能の追加、改良が行われました。

- ・ ユニバーサルデータアキュムレータ Wolfram Data Drop のサポート
- ・ ユーザー定義の文法規則、およびアクションに対するプログラム可能な言語学的インターフェースの追加
- ・ 不規則な間隔の時系列に対する多様な操作のサポート

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_mathematica.html

Official web site:

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

3. MATLAB

数値解析プログラム MATLAB を R2015a へバージョンアップしました。

MATLAB R2015a では主に次のような改良が行われました。

- ・ 行列が意図しない大きにならないように最大サイズを制限
- ・ マルチスレッド計算を使用して内挿関数を高速化

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_matlab.html

Official web site:

<http://www.mathworks.co.jp/>

4. WIEN2k

全電子計算法を用いた第一原理シミュレーションプログラムである WIEN2k を 14.2 へバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_wien2k.html

Official web site:

<http://www.wien2k.at/index.html>

5. SIESTA

擬ポテンシャル法と原子局在基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである SIESTA を 3.2 patch level 5 へバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_siesta.html

Official web site:

<http://departments.icmab.es/leem/siesta/>

6. ABINIT

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである ABINIT を 7.10.4 へバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_abinit.html

Official web site:

<http://www.abinit.org/>

7. CPMD

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理分子動力学シミュレーションプログラム CPMD を 3.17.1 にバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_cpmd.html

Official web site:

<http://www.cpmd.org/>

8. Quantum Espresso

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである Quantum Espresso を 5.1.2 にバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_quantum_espresso.html

Official web site:

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

9. CP2K

原子論的シミュレーションを行うことができる量子力学、固体物理学のソフトウェア CP2K を 2.6.0 にバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_cp2k.html

Official web site:

<http://www.cp2k.org/>

10.Q-CHEM

非経験的量子化学計算の統合パッケージ Q-CHEM を 4.3 にバージョンアップしました。

Q-CHEM 4.3 では主に次のような機能の追加、改良が行われました。

- ・ XSAPT において第三世代の+D3 分散ポテンシャルの利用が可能
- ・ TDDFT のエネルギーとその勾配計算について共有メモリ並列計算を実装
- ・ 厳密な交換項を評価する PARI-K 法は TZ あるいはそれ以上の大きな基底系を用いたハイブリッド DFT 計算について飛躍的に高速化

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_q_chem.html

※スーパーコンピュータではバージョンアップはされていません。

Official web site:

<http://www.hulinks.co.jp/software/qchem/>

11.VASP

擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理シミュレーションプログラムである VASP のバージョン 5.4.1 をインストールしました。バージョン 4.6.38、5.2.12、5.3.3、5.3.5 も使用可能です。バージョンアップの内容については、スーパーコンピュータの項目をご覧ください。

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/application/app_vasp52.html

Official web site:

<http://www.vasp.at/>

SC15 に本センター技術職員が参加

2015年11月15日(日)~20日(金)に Austin Convention Center (米国テキサス州)で行われた SC15(Supercomputing Conference 2015)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352のブース出展、12,000名を越える参加者がありました。東北大学では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1ブースの展示を行いました。今回は本センターの紹介、スーパーコンピューターを使った研究成果、および本所スーパーコンピューティングシステムのモニタリングツールであるリアルタイムグラフに関するパネル展示を行いました。



SC15 での展示と五十嵐伸昭技術職員

AVS/Express 講習会の開催

AVS/Express はモジュールを組み合わせることで簡単に計算結果の可視化ができる、汎用の3次元可視化ソフトウェアです。本センターではスーパーコンピューターで得られた計算結果の可視化のためにAVS/Expressをアプリケーションサーバーにインストールしユーザーにサービスしています。このAVS/Expressを活用していただくため、AVS/Expressの概要、基本的なモジュール結線、本センターで開発したVASPやTOMBO用のモジュールやその他便利なモジュールの紹介と操作、そして、応用と実習という内容で、2015年11月12日(木)にスーパーコンピュータ棟を会場として講習会を開催しました。所内外より外国人を含む6名が受講しました。



AVS/Express 講習会の様子

Materials Studio 講習会の開催

Materials Studio は総合的なモデリング/シミュレーション環境であり、金属や合金、電池や燃料電池など材料科学や化学分野の研究者が材料の物性や挙動についての構造を簡単にモデル化、研究することができ、優れたグラフィック機能を利用して、結果を表示します。また、計算プログラムとして、DMol³ や CASTEP が利用可能です。

本センターでは Materials Studio をアプリケーションサーバーにインストールしユーザーにサービスしています。この Materials Studio を活用していただくため、最新バージョン 9.0 の紹介、そして、MS Visualizer、MS CASTEP、MS NMR-CASTEP、MS DMol³、MS ForcitePlus、MS Reflex、MS QSAR の各ツールの説明という内容で、2015 年 11 月 13 日(金)にスーパーコンピュータ棟を会場として講習会を開催しました。所内外より外国人を含む 6 名が受講しました。



Materials Studio 講習会の様子

きんけん一般公開 2015 に本センターが参加

2015 年 10 月 10 日(土)、11 日(日)に行われました標記一般公開に、本センターは計算材料科学研究拠点と合同で参加しました。前回よりも全体での来場者数は増加し約 5,000 名の方に来場いただきました。本センターへの来場者数も前回より増加し、両日合わせて小学生だけで約 1,000 名の方に来場がありました。

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、電気が流れる仕組み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い、来場者の方にも興味を持っていただけたと思います。



きんけん一般公開の様子

計算材料学センターだより No.24

2015年12月17日(木)発行

17th Dec (Thu), 2015

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.tohoku.ac.jp



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