



計算材料学センターだより

CONTENTS



新年の挨拶

スーパーコンピューティングシステムの  
ユーザー更新について

Materials Studio&Cerius2 導入説明会報告

2002年1月31日(木)発行

31<sup>th</sup> Jan (THU), 2002

東北大学金属材料研究所

計算材料学センターだより

TEL : 022-215-2411 FAX : 022-215-2166

E-mail Address : [ccms-adm@imr.edu](mailto:ccms-adm@imr.edu)

WWW : <http://www-lab.imr.edu/~ccms/>



## 新年の挨拶

計算材料学センター長  
川添良幸

米国では同時多発テロ、国内では失業率増加や狂牛病と、暗い話題が多くなっています。しかし、新年を迎え、我々は、材料こそ将来を豊かにする基盤であるとの認識を新たにし、一層教育研究に努力して行く心がまえを持ちたいものです。



平成5年度に買取として導入された初号機が7年間の稼働を終え、昨年1月に本所の新スーパーコンピューターが念願のレンタル経費で導入されてから、早いもので既に1年が経とうとしています。この間、超大規模で複雑な構成の新システムの設定から調整まで、センターの職員は、納入各社の技術者と共に本当に寝る間も惜しんで誠心誠意働いて来ました。ここに記して感謝したいと思います。

システムは、ベクトル並列演算用のSR8000と、Gaussian、PHOENICS、VASP等の市販のプログラム実行用のアプリケーションサーバー、利用者の貴重な入力データ、プログラム、計算結果などを保存するファイルサーバから構成され、それぞれの目的に沿って活用されています。

また、スーパーSINETが1月4日から稼働を開始し、本学も世界最高速の10Gbpsでインターネットに接続されました。本所のスーパーコンピューターは、来年度、直接この回線に接続予定です。物性研と分子研の間で、この環境を活用したスーパーコンピューター結合で、本所独自開発の第一原理プログラムTOMBO(TOhoku Mixed-Basis Orbitals method)の分散処理による超大規模シミュレーション計算実行を計画しています。

このように、既に、スーパーコンピューターからアプリケーションサーバーまで、初期の目的に沿って、フル稼働状態になっていますが、各種チューニングを継続し、より良い利用環境を達成して行く所存でありますので、今後ともシステムの有効活用とセンターの継続的な御支援をお願いいたします。

## スーパーコンピューティングシステムのユーザー更新について

スーパーコンピューティングシステムのユーザー更新が2月半ばより開始されます。例年は3月から4月にかけて更新を行なっていましたが、年度末の移動が早い方もおられますので、今年度からは一月早い更新となります。詳しいご案内は後日致しますのでスーパーコンピューティングシステム利用者は更新・廃止手続きを宜しく御願い致します。

## Materials Studio&Cerius2 導入説明会報告

下記の要領で、計算材料学センター主催の説明会を開催いたしましたので、報告いたします。

**日時** : 2002年1月29日(火) 13:30~16:30

**場所** : 2号館7階セミナー室

**内容** : MaterilasStudio-Visualizer 及び Cerius2-DMOL3の導入説明

材料設計支援ソフトウェア Materials Studio (以下 MS) は Cerius2 の後継システム (Windows 版) で、平成 14 年 1 月より使用していただくことができるようになっています。Cerius2 はスーパーコンピューティングシステム導入時よりサービスしているもので、原子、分子レベルの計算モデルを利用して、ポリマー、結晶、表面、界面にかかわる物性予測や構造解析を支援するソフトウェアです。MS は、グラフィカルインターフェース (MS Visualizer) を中心に、オプションモジュールを組み合わせることによって、低分子、高分子、結晶など多彩な物質のモデリングに最適な環境を提供するソフトウェアですので、MS Visualizer を使用すれば、PC 上で分子・結晶・合成高分子のモデルを簡単に座標に作成することができます。

今回の説明会では、今まで Cerius2 のインターフェースを使っていた方が、スムーズに MS に移行できるように操作の説明を、また新たに使用する方へは MS の紹介を行いました。また、Cerius2-DMOL3 についての説明も予定していましたが、時間の関係とライセンス数が少ないことから、興味のある方へ資料を配布することにしました。出席者は 23 名で、今まで使用したことのある人は約 7 名で、他はこれから使いたいという方でした。また、受講者は半分弱が日本語圏外の方でしたので、講師の方とも相談し、同時に 2 か国の説明を聞くことができるように、テキストは英文・和文の 2 種類を用意し、スライドを日本語で映して説明は英語で行いました。

MS の説明を 1 時間 15 分程度行い、その後、場所を変え操作の実習を行ないました。



センターで用意できるPCは4台でしたが、ライセンスは8個ありますので、受講者にあらかじめMSをインストールしたPCを持ち込んでもらい、テキストに沿って各自のペースで操作をマスターしてもらいました。説明の時も実習の時も、積極的な質問が出され、また、受講者同士でのディスカッションも有意義なものでした。

今回は、実習を行う時間もPCも少なかったのですが、MS Visualizerのある程度の操作や概要は会得してもらえたものと思います。次回、またこのような実習を行う機会がある場合は、受講者全員が実習できるよう、マシンの台数や実習方法を考えたいと思います。



写真は説明会の様子