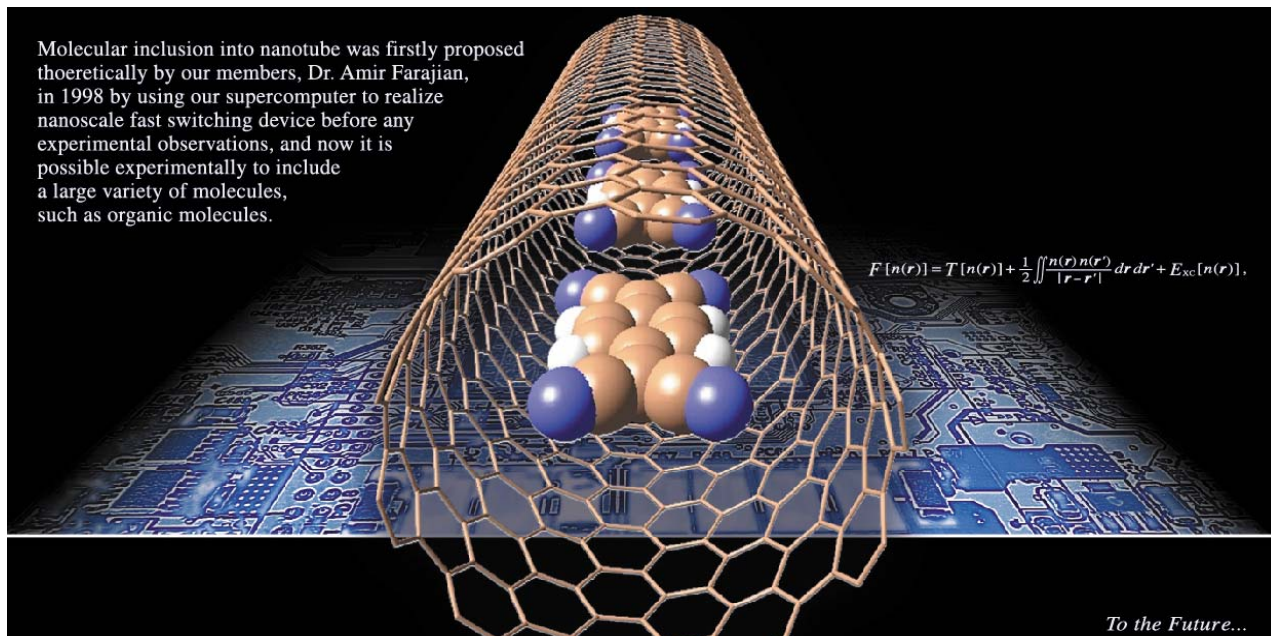


Molecular inclusion into nanotube was firstly proposed theoretically by our members, Dr. Amir Farajian, in 1998 by using our supercomputer to realize nanoscale fast switching device before any experimental observations, and now it is possible experimentally to include a large variety of molecules, such as organic molecules.



$$F[n(\mathbf{r})] = T[n(\mathbf{r})] + \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + E_{xc}[n(\mathbf{r})],$$

計算材料学センターだより

CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ アプリケーションの紹介
- ・ 2005年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム
で本センター職員がポスター発表
- ・ 第3回ナノ学会で本センター職員がポスター発表
- ・ 立体視プレゼンテーションとAVS講習会について
- ・ 平成16年度計算材料学センター見学者

表紙の図は

カーボンナノチューブに内包されたTCNQ有機分子の最安定状態を第一原理シミュレーション計算によって決定。内包有機分子によって電気伝導特性を制御できる。岩佐研究室との共同研究の成果。

Determined most stable structure of organic molecule TCNQ included in carbon nanotube by ab initio computer simulation. Conduction property changes depending on the organic molecule included. Results are collaboratively obtained with Iwasa laboratory.

Rodion Belosuludov and Yoshiyuki Kawazoe

(designed by Kazuhiro Sato)

センター長あいさつ

計算材料学センター長 川添良幸

現スーパーコンピューターが導入されてから4年がたち、導入時にはドンガラレポートで世界21位だった1Tflops 近い処理速度もトップ500番にさえ入らなくなりました。この驚くべき進展速度の理由は、1995年に米国でASCIプロジェクトが始まり、パソコンと共通のCPUを使うという従来とは全く異なる方法でスーパーコンピューターの格安化が達成されたからです。一方、旧来のスーパーコンピューターの処理能力評価用に開発された Linpack benchmark と呼ばれるテストプログラムでは、小さいCPU単位を沢山並列結合した現在の計算機の本当の実行性能は計れないことも明らかになりつつあります。現在の本当に実行効率の高いスーパーコンピューターの最も高価な部分はCPUではなく、それらを接続しているネットワーク部分なのです。つい最近まで世界一だった地球シミュレーターをご覧になった方は、その重要部分がネットワーク接続機器であることがお分かりになると思います。CPU性能ばかりではなく、ネットワーク性能などを含む総合評価を行えるHPCC(High Performance Computing Challenge) benchmark と呼ばれる新評価システムでは、FFTなど実際のシミュレーション計算で必要となる項目も追加され、より実行性能に近い評価が得られます。新しいスパコンの形態には、それにふさわしいベンチマークが必要なのです。今後、新システム導入時には、より新しい評価方法を採用することが必須になります。

本所では、約2年後を目指し、新スーパーコンピューティングシステム導入のプロセスが始まります。計算機進展のトレンドを見れば明らかなように、現状の数十倍の処理能力の計算機が導入可能となります。本所の計算機利用環境は、材料設計シミュレーションに特化し、必要とされる多くのソフトウェアを準備しており、アクティブな利用者も200名を数えます。特に、計算材料学研究部門では、クーロン多体系に対する量子力学方程式の直接解法を目標に、他所では見られない超大規模数値計算を行っています。その成果の一例としては、スレーターの電子相関のみによるフント則の解釈は間違いで、原子核の影響を取り入れたボイドによる解釈が正しいことを電子相関まで数値的に取り込んで証明したことが挙げられます。本所のスーパーコンピューターは、このような教科書を書き換えるレベルの基礎理論への貢献から、現実的な実用材料の設計まで、幅広く活用され、CPU利用率が常時90%という高効率利用を達成しています。新システム導入に向け、さらなる高度な研究を達成するための超高速性能と膨大なメモリー容量への要求は止まるところを知らない勢いです。

スーパーSINET推進協議会におけるナノテクノロジー研究部会は、本所を中心に東京大学物性研究所や自然科学研究機構分子科学研究所などを1Gbpsの専用回線でVPN接続し、複数台のスーパーコンピューターの常時遠隔結合という世界にも例をみないGRID環境を実現しています。1センター内でのMPI並列化レベルをはるかに超え、我が国で開発されたITBLを基盤に、本所開発の第一原理シミュレーションプログラムTOMBOの遠隔分散処理などを本格的に実行しており、この活動も今後とも発展的に継続していく予定です。

私は、4月から本学情報シナジーセンター長を仰せつかりました。本学の情報基盤を支える組織でありその重要度は増大する一方です。特に、法人化に対応して重要で膨大な業務の中心となることを期待されており、毎日、目まぐるしく働いています。この経験を本センターの運用に生かし、継続的に利用者の皆様に満足いただけるサービスに努めますので、今後ともご支援のほど、宜しく願い申し上げます。

アプリケーションのバージョンアップについて

1. Cerius2

分子設計ソフトウェア Cerius2 のバージョンアップ(4.2 → 4.9)を2004年6月4日に行いました。

Cerius2 では分子モデルの可視化や分子の構築, シミュレーションを行うことができます。なお, バージョン4.9では Gaussian I/F (Gaussian で作成されたデータの読み込みや Gaussian の入力ファイルの作成) が使用できないため, バージョン4.2も実行できるようにしています。Gaussian I/F を使用される方はバージョン4.2をご利用ください。

Cerius2 はアプリケーションサーバーB でご利用になれます。

実行方法は以下をご覧ください。

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~ccms/Jpn/service/software/cerius2/cerius2.html>

Cerius2 Web site:

<http://www.accelrys.com/jp/cerius2/index.html>

<http://www.accelrys.com/cerius2/index.html>

2. MS Modeling (Materials Studio)

分子設計ソフトウェア Materials Studio (MS) のバージョンアップ (MS 2.2 → MS Modeling 3.1) を2004年12月22日に行いました。

MS Modeling 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。MS Modeling 3.1 では Windows98 および Windows ME をサポートしておりませんので, ご注意ください。

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。

- Material Visualizer の機能追加および性能向上
- DMol の性能向上

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。

MS Modeling Web site:

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

http://www.accelrys.com/mstudio/ms_modeling/index.html

アプリケーションの紹介

計算材料学センターではさまざまなアプリケーションを提供しています。詳しくは以下の URL をご覧ください。

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/service/software/>

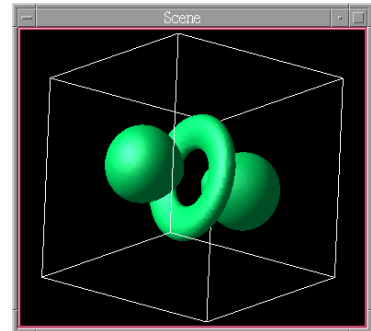
その中の一部を紹介します。

1. AVS/Express Developer Ver.6.3

AVS/Express Developer は実験・解析結果などの数値データを可視化するソフトウェアです。データ読み込みや各種の画像処理、表示設定等が個別にモジュール化されており、このモジュール・アイコンを自由に配置し組み合わせるだけで、データを可視化することができます。

AVS/Express Web site:

<http://www.kgt.co.jp/product/avs/express/viz/index.html>

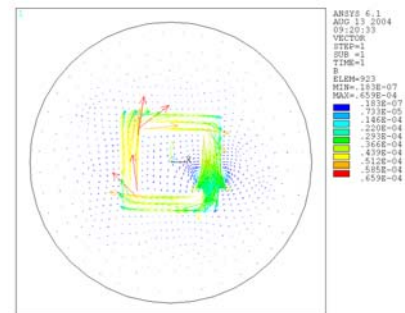


2. ANSYS Ver.6.1

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。

ANSYS Web site:

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

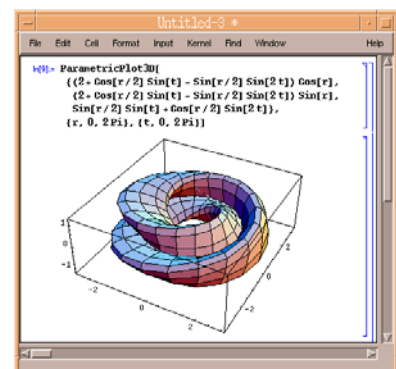


3. Mathematica Ver.4.2

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利用できます。

Mathematica Web site:

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

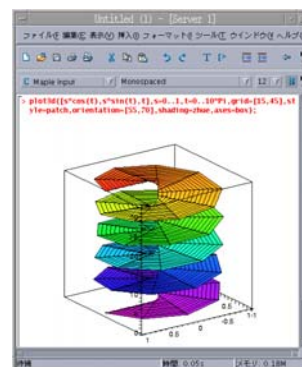


4. Maple Ver.9

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すいインターフェース上で利用することができます。

Maple Web site:

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

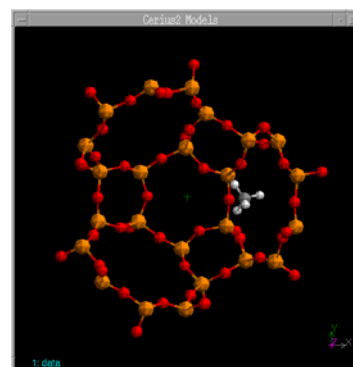


5. Cerius2 Ver.4.9

Cerius2 は原子、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。機能別にモジュール化されたモジュールソフトウェア群により構成されており、分子モデルの構築、各種シミュレーション、解析を行うことができます。

Cerius2 Web site:

<http://www.accelrys.com/jp/cerius2/index.html>

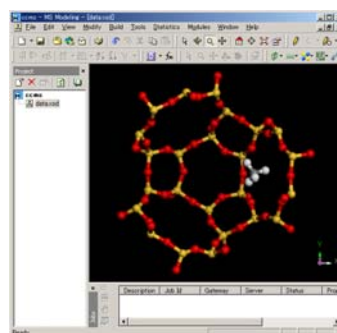


6. Materials Studio (MS Modeling) Ver.3.1

Materials Studio は分子設計ソフトウェア Cerius2 の Windows 版です。

Materials Studio Web site:

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

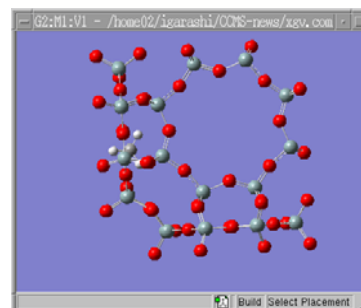


7. Gaussian 03 Rev.B.04, GaussView 3.09

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 3 では分子モデルの作成や Gaussian によるシミュレーション結果の解析などを行うことができます。

Gaussian Web site:

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



2005年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウムで 本センター職員がポスター発表

2005年1月18日(火), 19日(水)に東京大学山上会館で行われました標記シンポジウムに, 本センターより2編, ポスター発表として参加しました。

・「シミュレーション分野」での発表

○五十嵐 伸昭, 水関 博志, Belosludov Rodion, Farajian Amir, 川添 良幸(東北大)

「第一原理計算および遺伝的アルゴリズムによるナノデバイスの探索」

概要: ナノテクノロジーの急速な進歩により, 有機分子を使った分子デバイスの実現の可能性が示唆されています。現在, 分子デバイスの実現に向け, 実験・理論両面から精力的な研究が行われていますが, 膨大な数の有機分子から最適な分子を見いだすことは困難な状況にあります。そこで, 第一原理計算により有機分子の安定構造と電子状態を求め, その結果を用いた遺伝的アルゴリズム(自然界において環境に適応した個体がより高い確率で生き残っていくという生物の進化の過程を模倣したアルゴリズム)による分子デバイス構築用分子の探索方法について報告しました。

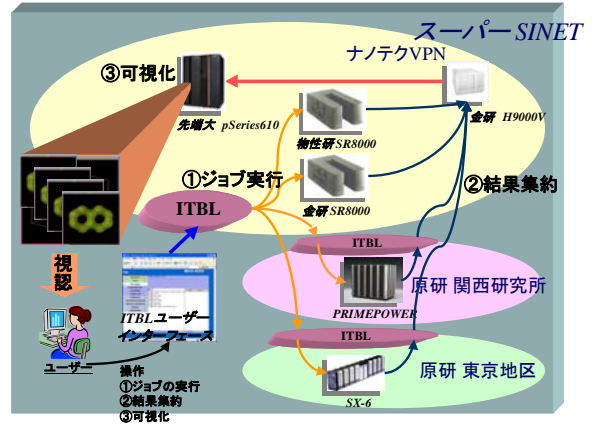
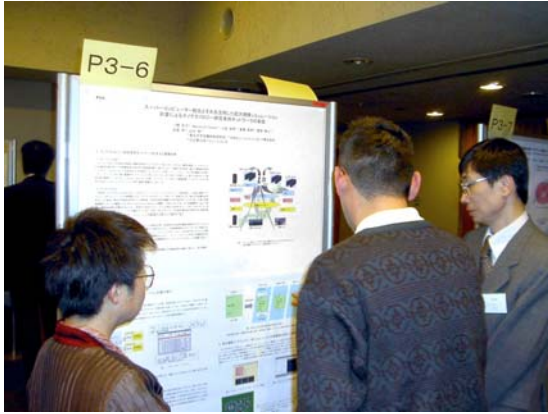


・「ネットワーキングと GRID 分野」での発表

○一関京子, Sluiter Marcel, 川添 良幸(東北大), 高橋 英明(日本ヒューレットパッカード株式会社), 安達 斉, 山口裕(日立東日本ソリューションズ)

「スーパーコンピューター結合とそれを活用した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者用ネットワークの実現」

概要: ナノテクノロジー研究者用ネットワークは, スーパーSINET および日本原子力研究所が開発するITBL(IT Based Laboratory)を最大限に活用して, 東北大学金属材料研究所, 東京大学物性研究所, 自然科学研究機構分子科学研究所, 九州大学情報基盤センター, および原研の所有する5台の遠隔スーパーコンピューターを結合し, 分散処理による超大型材料設計シミュレーション計算を実行しようとするものです。そのためのナノテクシミュレーション環境を, 川添研究室が独自開発している第一原理シミュレーション計算プログラム TOMBO (TOhoku Mixed-basis Orbitals ab initio program)や GW(グリーン関数-バーテックス)近似の分散処理化を基礎に, 原子力研究所で開発しているITBLシステム上に構築してきました。平成16年度には計算結果の数値データを北陸先端科学技術大学院大学に転送し, AVSを基礎として開発した3次元可視化システムで表示し, 遠隔地に分散した研究者間で迅速なシミュレーション結果の議論を可能としました。



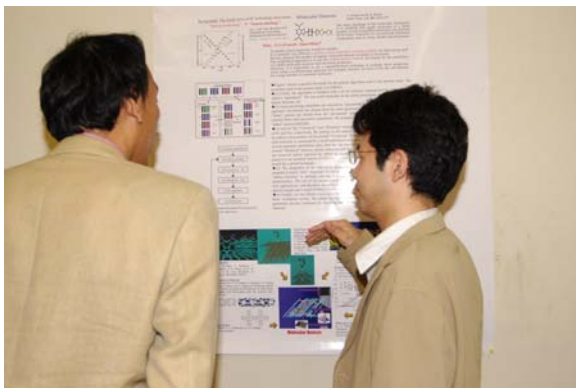
ナノテクノロジー研究者用ネットワーク

第 3 回ナノ学会で本センター職員がポスター発表

2005 年 5 月 8 日(日)～10 日(火)に仙台市民会館で行われた標記学会に本センターより 2 編、ポスター発表として参加しました。

○五十嵐伸昭, 水関博志, Rodion V. Belosludov, Amir A. Farajian, 川添良幸 東北大金研
「第一原理計算と遺伝的アルゴリズムによる分子デバイス用材料の探索」

○一関京子¹⁾, Marcel H.F.Sluiser¹⁾, 川添良幸¹⁾, 高橋英明²⁾, 安達斉³⁾, 山口裕³⁾
¹⁾東北大金研, ²⁾日本ヒューレットパッカー, ³⁾日立東日本ソリューションズ
「スーパーコンピューター結合とそれを活用した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者用ネットワークの実現」



質問者に説明する五十嵐技術職員と一関技術職員

立体視プレゼンテーションと AVS 講習会について

日 時 : 2005年5月31日(火)

13:30~ 立体視プレゼンテーション

14:30~ AVS講習会

場 所 : 2号館1階会議室

内 容 : 1. 立体視プレゼンテーション(3D可視化デモ)

(1)実際に目で見るような実物に近い形の立体視のデモを行います。

・AVS データを3次元可視化し、実物を見るのに近い形での立体視を体験してください。

2. AVS(入門編)

(1)AVS でできること

(2)分子を表示するための方法

平成16年度計算材料学センター見学者

期間:2004年4月~2005年3月

2004.5.28	Rainer Poerschke	Springer-Verlag
2004.6.22	George Fitzgerald	Accelrys
2004.8.27	齋藤 幸一	開成学園 他 60 名
2004.9.30	丘 亮台	IBM GEORGE CHIU
2004.10.18	遠藤 光広	宮城学院高等学校 他 7 名
2004.10.25	小田島 一晃	岩手県立釜石南高等学校 他 30 名
2004.11.9	Jaroslav Sestak	Institute of Physics, Academy of Science, Czech
2004.11.9	彭 旭明	台湾大学化学系 他 11 名
2004.12.3	Herbert Carlson	AFOSR
2005.1.25	羅 建紅	浙江大学医学院
2005.1.25	姚 玉峰	浙江大学医学院附属邵逸夫医院
2005.1.25	嚴 蜜	浙江大学材料系
2005.1.25	柳 徳仁	浙江大学材料系
2005.1.25	陳 紀忠	浙江大学化学工程系
2005.1.25	任 其龍	浙江大学化学工程系

他42名

計算材料学センターだより No.6

2005年5月26日(木)発行

26th May (Thu), 2005

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 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577, Japan

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