

計算材料学センターだより

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・SC105に本センター職員が参加
- ・第17回分子科学研究所技術研究会で本センター職員が発表
- ・AVS / Express 講習会と立体視プレゼンテーションについて
- ・平成18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
- ・平成17年度計算材料学センター見学者

CCMS
NEWS
7

表紙の図

気体の純化と貯蔵に関する効果的な技術は、工業界における基本的な重要事項である。今回、世界で初めて高度に制御された多孔質ナノ金属錯体中のアセチレン分子の超高密度吸蔵が京大北川研の実験と本所川添研の理論の共同研究によって実現された。本研究成果は、今後、水素吸蔵材料等への広範な応用が可能な技術であると考えられている。

Efficient technologies for the gas separation and storage are essential for many industrial applications. Full characterization of highly controlled acetylene accommodation in a metal-organic microporous material has been performed for the first time by both experimental measurements and first-principles calculations. The proposed new guideline for specific adsorption systems on microporous materials will be applicable to a wide range of target molecules .

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

国立大学が法人格を持って早いもので2年が過ぎました。未だに多くの混乱がありますが、積極的に良い方向に持って行くように構成員全員が一丸となって取り組むべき課題が山積していると認識しています。昨年度から本学情報シナジーセンター長を拝命し、全国共同利用施設の重要性や問題点をより一層肌身にしみて認識することが出来ました。また、本部事務機構情報部長として、全国で唯一人の教員からの事務員も勤めさせていただいています。会議などにおいて、事務部の皆さんの苦勞はいくらか知っているつもりでしたが、実際に自分でなってみて、如何に大変な仕事であるかが実感できました。本年度からは、情報シナジー機構が組織化され、その副機構長と情報化統括責任者補佐官も勤めることになりました。本学の情報統一化による諸手続きの高度化・迅速化・合理化、さらに、全学電子認証システムを基盤としたセキュリティと利便性の同時向上に向けた仕事を開始しております。

本センターのスーパーコンピューターも導入後5年が経過し、世界のトップ 500 番のドンガラレポートからも消えるどころか、経済産業省のスーパーコンピューターの定義が 1.5TFLOPS 以上になり、それにも入らなくなってしまっています。本当に、計算機技術の進展は急速であり、このようなセンターは常に自転車操業状態にならざるを得ないのです。昨年度から、今年度中の機種更新を目指して、国際競争入札の過程に入っています。本研究所事務部のみならず、本部財務部契約課の並々ならないご支援をいただきながら、これまでに、資料招請と仕様書原案説明会までに至っております。現在利用中のスーパーコンピューターに比べて8倍以上の処理能力を予定しており、現在処理能力不足で他センター利用に頼ったりもしている本センター利用者の要求に対応したいと考えています。

本年度からは、技術職員が一名減った状況での運営を余儀なくされています。多岐にわたるサービス業務に加え、新システム導入の仕事はそれだけでも激務です。このような状況にはありますが、職員一同、今後とも、利用者の皆様へのサービス向上に最大限の努力を払って行く所存でございますので、ご支援、ご鞭撻の程、何卒よろしくお願い申し上げます。

SC|05 に本センター職員が参加

2005年11月12日(土)～18日(金)に The Washington State Convention and Trade Center で行われた標記会議に、五十嵐技術職員が参加しました。

概要:SC はスーパーコンピューティング関係では世界最大の国際会議であり、発表のほかに企業や大学、研究所による展示がありました。また、この会議はスーパーコンピューターのTop500を発表することでも有名です。今回トップだったのは前回(2005年6月)と変わらず、LLNLのBlueGene/Lでした。東北大学として流体研究所、情報シナジーセンター、金属材料研究所の3機関で出展し、金属材料研究所としてはスーパーコンピューターを使用した成果などを展示しました。2005年の会議はシアトルで行われ、Microsoft 会長であり Chief Software Architect でもある Bill Gates 氏による基調講演などもありました。企業展示では日立や NEC、富士通、IBM、Cray などスーパーコンピューターメーカーだけでなくソフトウェアやネットワークなどさまざまな企業がデモンストレーションを交えながら説明を行っていました。



会議での展示の様子

第 17 回分子科学研究所技術研究会で本センター職員が発表

2006年3月2日(木)～3日(金)に自然科学研究機構岡崎コンファレンスセンターで行われた標記研究会に、参加しました。

「CXFS による SAN 環境の構築」

五十嵐伸昭¹⁾、古田正俊²⁾、川添良幸¹⁾

¹⁾東北大学金属材料研究所、²⁾日本SGI株式会社

概要: 科学技術計算の分野においては、計算機の性能向上および研究の高度化に伴い扱うデータ量が急激に増大し、計算性能に見合った高速で大容量のストレージが要求されてきています。このような中、SAN (Storage Area Network) や NAS (Network Attached Storage) といったネットワーク・ストレージ分野が急激に成長しています。東北大学金属材料



発表する五十嵐技術職員

研究所のスーパーコンピューティングシステムのストレージ形態は DAS (Direct Attached Storage) であり、ユーザーのファイルは NFS で共有しています。SAN は DAS の問題点であるディスクの有効利用などを可能にしますが、異機種間でのファイル共有ができないなどの問題点もあります。そこで、2 台のコンピューターを CXFS (Cluster eXtended File System) を用いて異機種間でもファイル共有が可能な小規模な SAN 環境を構築し、性能測定を行いました。

AVS/Express 講習会と立体視プレゼンテーションについて

AVS/Express(以下 AVS) は計算結果を可視化するソフトウェアです。VASP(第一原理計算ソフトウェア)や Gaussian(量子力学計算ソフトウェア) の計算結果を可視化するためには各々専用の Viewer を使用するが、計算結果を AVS で読み込めるように編集し、モジュールをつなぎ合わせてネットワークを作成するといった複雑な作業が必要でしたが、どちらも本センターと KGT の協同の成果として AVS で簡単に可視化できるようになりました。さらに 3 次元立体視も可能なので実物を見るように表示できますので、是非、多数のご参加をお待ちしております。

日 時 : 2006 年 6 月 23 日(金) 13:00 - 15:30

場 所 : 2 号館 1 階 会議室

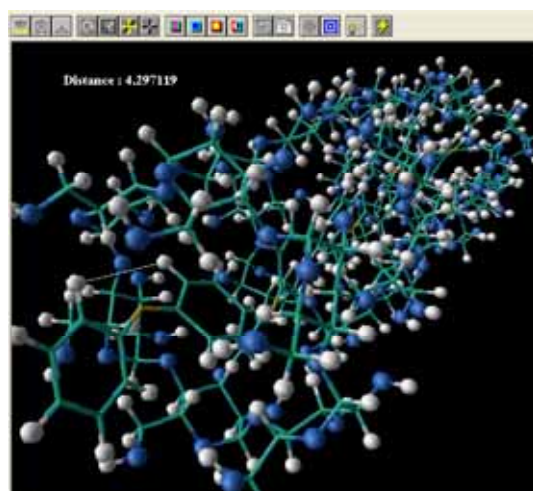
内 容 : 1. 立体視プレゼンテーション(3D 可視化デモ)

(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。

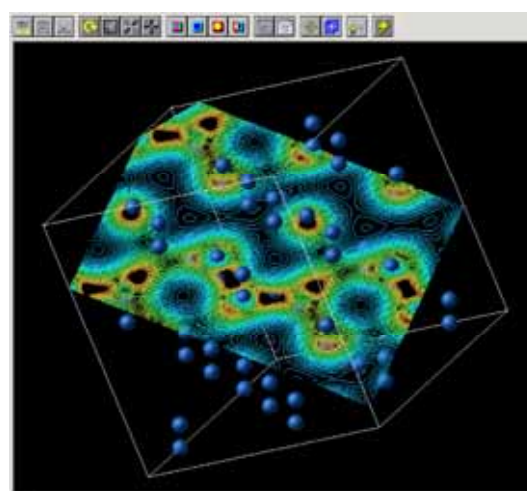
2. AVS(入門編)

(1) AVS でできること (2) 分子を表示するための方法 (3) VASP、Gaussian の計算結果の表示



Gaussian 可視化例

ポリオフェンを -シクロデキストリンで被覆した分子ワイヤーの構造



VASP 可視化例

4x4x4 シリコン結晶電荷密度

平成18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

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。定期保守の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。

また、今年度は機種更新を予定しています。2月中旬に現在のシステムを撤去し、新システムは3月中旬に稼働を開始する予定です。1ヶ月ほどの停止になりご迷惑をおかけしますが、ご協力とご理解をどうぞよろしくお願いいたします。

定期保守日

平成18年 奇数月の最終週月曜日

5月29日、7月31日、9月25日、11月27日

平成19年 奇数月の最終週月曜日

1月29日

システム更新による停止

平成19年2月中旬～3月中旬

平成17年度計算材料学センター見学者

期間:2005年4月～2006年3月

2005年4月15日	高 家誠 氏	重慶大学 工程学院院長 他8名
2005年4月27日	工学部プレゼミ学生	東北大学工学部マテリアル・開発系 1年生 30名
2005年5月11日	李 熙哲 氏	韓国ナノ総合 Fab センター長 (National Nano Fab Center)
2005年6月1日	Richard Funk 氏	DRESDEN Univ., Prof.
2005年6月2日	郡山高校	教諭2名、生徒41名
2005年7月3日	日本物理教育学会東北支部	20名
2005年7月7日	Keivan Esfarjani 氏	Sharif University, Assoc. Prof.
2005年7月7日	Ali Shakouri 氏	University of California, Santa Cruz
2005年7月27日	兪 育徳 氏	中国科学院半導体研究所 副所長 他11名
2005年11月12日	E. Ma 氏	Johns Hopkins University

2005年12月2日	Jose-Lorenzo Valles 氏	European Commission
2006年2月14日	李 敬鋒 氏	清華大学材料系 教授 他2名
2006年3月9日	星野 利彦 氏	文部科学省情報技術推進室長

見学者総数 162名

中国重慶大学一行見学風景

(2005年4月15日、張副学長 他10名、
引率3名)



郡山高校一行見学風景

(2005年6月2日、生徒41名、引率2名)



中国清華大学一行見学風景

(2006年2月14日、教授3名、引率1名)



計算材料学センターだより No.7

2006年5月31日(水)発行

31st May (Wed), 2006

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