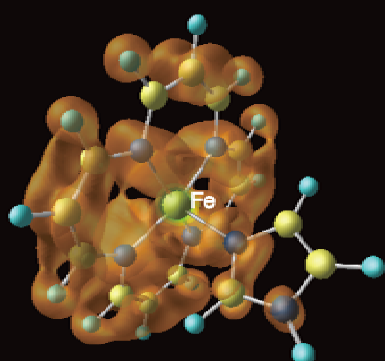
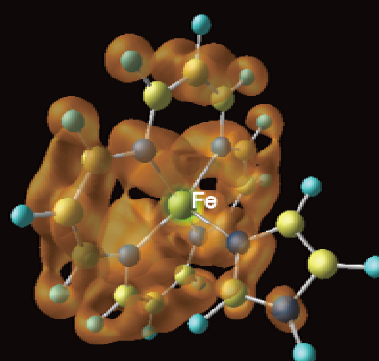


計算材料学センターだより

Stereogram for the electronic charge density distribution calculated by TOMBO.
Charge density isosurface of Deoxymyoglobin, the oxygen storage part of hemoglobin. The figure clearly shows the localization of charge on central Fe atom and its nearest neighbors.



Stereogram for the electronic charge density distribution calculated by TOMBO.
Charge density isosurface of Deoxymyoglobin, the oxygen storage part of hemoglobin. The figure clearly shows the localization of charge on central Fe atom and its nearest neighbors.



CONTENTS

- ・責任部門あいさつ
- ・新たなアプリケーション XCrySDen 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
- ・スーパーコンピュータジョブの実行順の話
- ・AVS/Express による計算結果の 3 次元可視化ソフトウェアの統一
- ・3 次元可視化プレゼンテーションシステム
- ・スパム対策システムの運用変更のお知らせ
- ・センターWeb ページの紹介
- ・SC07 に本センター職員が参加
- ・平成 19 年度 機器・分析研究会で本センター職員が発表
- ・平成 19 年度 核融合科学研究所技術研究会で本センター職員が発表
- ・センター職員の論文が日立 IT ユーザ会で受賞
- ・金属材料研究所 114 回講演会で本センター職員が発表
- ・平成 19 年度計算材料学センター見学者
- ・計算材料科学 WG ホームページ開設のお知らせ
- ・平成 20 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

表紙の図は

TOMBO により計算された電荷密度分布の立体写真。デオキシミオグロビン(ヘモグロビンの酸素貯蔵部分)の電荷密度等電荷面。この図から、電荷が中心部の鉄原子およびその最隣接原子に集中していることがはっきり分かる。

Stereogram for the electronic charge density distribution calculated by TOMBO. Charge density isosurface of Deoxymyoglobin, the oxygen storage part of hemoglobin. The figure clearly shows the localization of charge on central Fe atom and its nearest neighbors.

3 代目導入から一年が経過して



責任部門教授 川添良幸

平成 5 年度に導入された 1 号機は日立製作所製 S3800 でした。1CPU で 8GFLOPS という当時最高速のベクトル演算装置を有しており、3CPU 総計で 24GFLOPS はドンガラレポートによる世界のスーパーコンピューターランキング第 18 位に輝きました。それは買い取りの装置でしたので、7 年間使い続けましたが、この処理速度には最後まで素晴らしいものがありました。やっとレンタル経費が認められて導入された 2 号機は、日立製作所製 SR8000 でした。CMOS 製で沢山の CPU を接続し、総計 921GFLOPS の処理速度を誇りました。1 ノードで 8GFLOPS を達成し、それまでの蓄積をすぐに活用することが可能でした。順位も世界 21 位と初代とそう変わらない地位を維持できました。しかし、今回の 3 号機 SR11000 は、ドンガラレポートで 100 位以内にもランキングされていません。この間に何が起こったのかと言うと、米国のコモディティ CPU を沢山結合するという ASCII プロジェクトに始まる IBM 社の BlueGene や PC クラスターが米国を中心に大量に導入されたのです。そのため、1 単位(昔は CPU、今はノード)を大きくするという方策を採っている我が国の計算機メーカーは窮地に立っています。しかし、自分のオリジナルプログラムを使う利用者から見れば、自動コンパイルでノード内の処理の最適化をしてもらえる計算機の魅力は相変わらず大きいのです。地球シミュレーター後にもう一度ドンガラレポートで世界 1 位を奪回しようとする次世代スパコンプロジェクトが始まりました。2012 年に結果が出るはずです。

本センターに 3 号機が入って約 1 年が立ちました。導入後すぐに、常に沢山の待ちジョブがある状況になりました。初号機から、材料設計シミュレーション専用機として、他ではなかなか実行できない超大規模シミュレーション計算によって多大の成果を挙げ続けています。また、計算結果のグラフィックス表示の高度化でも本センターは優れた成果を挙げ、諸外国の科学雑誌を飾っています。8 年前に本センターを中心に開始したアジア計算材料学コンソーシアムが、その構成員に対する GRID 計算環境を実現するため、仮想組織(ACCMS-VO)を立ち上げ、その実現に向けて様々の試みがなされています。我が国が独自に開発した GRID 用ミドルウェア NAREGI を国際的に活用した研究環境整備という大きな目標に向けてセンター職員と責任部門が協力して作業に当たっています。

全国共同利用としての活動も責任を持ってやらせていただいています。ぜひ、本所の研究者と共同研究を実施する国内外の多くの研究者が本センターに集い、優れた研究成果を挙げられる環境を維持し、支援したいと考えていますので、皆様のご理解とご協力をお願いいたします。

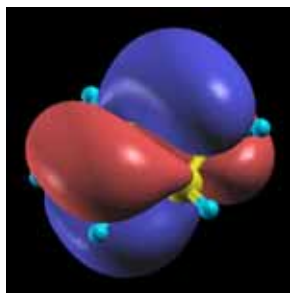
新たなアプリケーション XCrySDen のサービス開始について

結晶や分子構造の可視化を行うプログラム XCrySDen をインストールしました。
XCrySDen では WIEN2k や Gaussian などの計算結果を可視化できます。

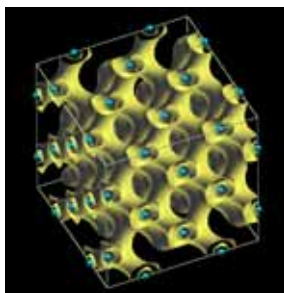
使い方

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/xcrysdn/xcrysdn.html>

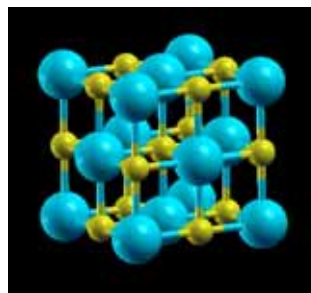
使用例



Gaussian の結果の可視化



VASP の結果の可視化



WIEN2k の入力ファイル
(初期構造)の可視化

XCrySDen web site:

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

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 4.2 へバージョンアップしました。

Materials Studio 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る Cerius2 の Windows 版です。

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: 金属やウルトラソフト擬ポテンシャルで計算した系のフォノン振動数が計算可能になるなどの機能追加および構造最適化機能の改良
- DMol3: COSMO 溶媒和法の周期系への拡張および性能改善やユニットセルの最適化および大きな基底系のサポート
- Reflex: 粉末 X 線データから結晶化度を計算可能
- Visualizer: Perl スクリプティングからアクセス可能

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. GaussView

Gaussian の GUI アプリケーション GaussView を 4.1.2 へバージョンアップしました。

GaussView は Gaussian の入力ファイルの作成や Gaussian で計算した結果を可視化することができます。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- 分子モデリングと解析機能の改良
- Gaussian 計算を素早くセットアップするための新機能の追加
- 等高線図による可視化機能や紫外-可視スペクトルの表示機能などの追加
- 動画への保存機能の追加

GaussView の Windows 版である GaussViewW 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。

GaussView web site:

http://www.gaussian.com/gv_plat.htm

3. ATK および VNL

電気伝導特性を計算可能なプログラム ATK (Atomistix ToolKit) を 2.3.2 へ、ATK の GUI プログラム VNL (Virtual NanoLab) を 2.0 へバージョンアップしました。

VNL ではモデルの作成、NanoLanguage スクリプトの作成、計算の実行、結果の可視化を同一の画面上から行うことができます。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

ATK

- 透過係数の固有チャネルおよび固有値の計算機能の追加
- 2 プローブ系の構造をバルク系の構造に変換する機能の追加
- 最適構造計算アルゴリズムに Quasi-Newton 法、Steepest-Descent 法を採用

VNL

- NanoLanguage Scripter の追加
- Method Tool の追加

ATK & VNL web site:

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

4. ANSYS

汎用有限要素法解析プログラム ANSYS の新バージョン 11.0 がリリースされました。

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。

今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、および改良がなされました。

- 構造解析: 3 次元の線-面接触をモデル化可能になるなどの機能追加および改良
- 連成場解析: 静電気力が計算可能になるなどの機能追加および改良
- 低周波電磁場解析: 電気伝導解析で遠距離場の減衰をモデル化可能になるなどの機能追加および改良
- 高周波電磁場解析: 準最少残差法による反復ソルバーがフル周波数応答解析で利用可能になるなどの機能追加および改良
- 電熱解析と流体/CFD 解析: LINK34 要素に対して、内部発熱率を要素の物体荷重として入力可能になるなどの機能追加および改良

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。

ANSYS web site:

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

5. AVS/Express Developer

汎用可視化ソフトウェア AVS/Express Developer の新バージョン 7.2 がリリースされました。

AVS/Express では様々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。

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不具合の修正がなされました。

- 新しいユーザーインターフェースの採用
- ノードデータによる半透明表示機能の追加
- ソフトウェア球用モジュールの追加
- ソフトウェアレンダラの透視投影でテクスチャが歪んで表示される不具合などの修正

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。

AVS/Express web site:

<http://www.kgt.co.jp/feature/express>

スーパーコンピュータジョブの実行順の話

ユーザーのみなさまがスーパーコンピュータにジョブを投入した時、すぐ実行されたことも長時間待たされたこともあると思います。ジョブの実行順には決まりがあります。本センターのスーパーコンピュータジョブの実行順は、各々のユーザーが公平にリソース(CPU、メモリー)を使えるよう工夫してあります。ユーザーは投入時のキュー

<http://www-lab.imr.edu/~hitachi/MAN/OneCommand/AZ020310.HTM>

(スーパーコンピュータのキュー一覧)

によりリソースをどのくらい使いたいという意思表示をします。それに基づき実行順が決定されます。この順番を決める際の方針は次の通りです。

- ・たくさんリソースを使うジョブはそうでないジョブに比べて優先度を下げる
- ・同時にたくさんのジョブを実行しているユーザーのジョブはそうでないユーザーのジョブより優先度を下げる

ジョブを投入する側の立場で言い直すと、EB キューに-largememory や-longtime オプションをつけて投入すると、オプションを付けずに投入したジョブより長時間待たされる。EB キューでジョブを 1 つも実行していない時は最初の 1 ジョブはほとんど待たされず、2 ジョブ、3 ジョブと同時実行ジョブが増えるにつれ次のジョブの待ちが長くなる。ということになります。この傾向を頭に入れて、効率的なジョブ投入をお願いします。

AVS/Express による計算結果の3次元可視化ソフトウェアの統一

計算結果データを可視化するには、それぞれ専用の可視化ソフトウェアが必要でしたが、TOMBO、Gaussian、VASP、ATK 等の計算結果データを汎用 3 次元可視化ソフトウェアである AVS/Express ですべて可視化できるよう、インターフェースモジュールを開発しました。可視化されたデータは AVS の機能で簡単に GFA ファイルに変換でき、GFA ファイルはフリーソフトウェア 3D AVS Player を使って 3 次元可視化できます。それはそのまま PowerPoint に貼り付けて表示したり動かしたりすることができますので、プレゼンテーションでも大いに活用できます。また、GFA ファイルをインターネットで配信すれば、3D AVS Player で世界中の人に大規模シミュレーションの結果を見てもらうことが可能です。

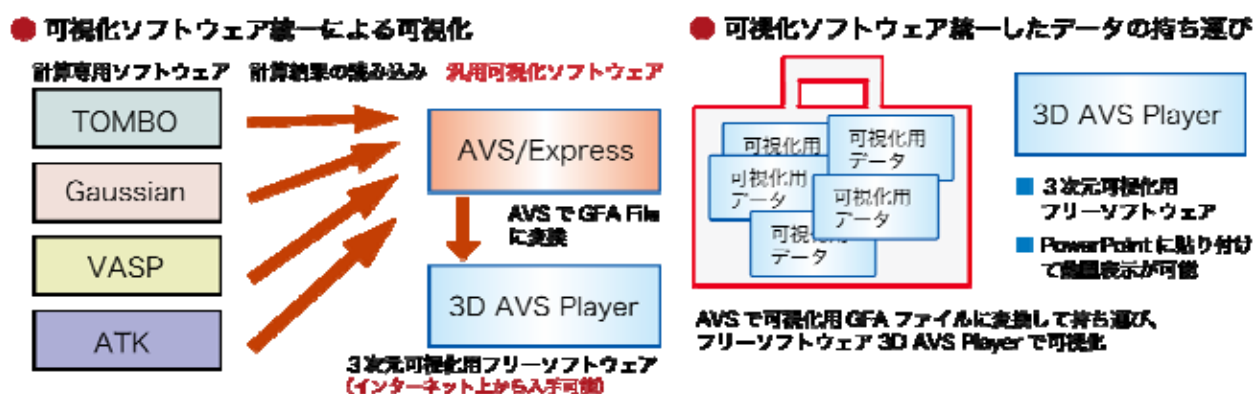


図 1. AVS/Express による 3 次元可視化ソフトウェア統一のイメージ

●AVS による可視化例

図 2 は AVS の操作モジュールの結線例ですが、簡単なモジュールの結線と直感的な操作で図 2 の①の出力から図 3 のような 3 次元可視化が可能です。また、図 2 の②からは GFA ファイルを出力することができ、3D AVS Player を使用し、図 4 のように簡易な裸眼立体視表示も可能です。

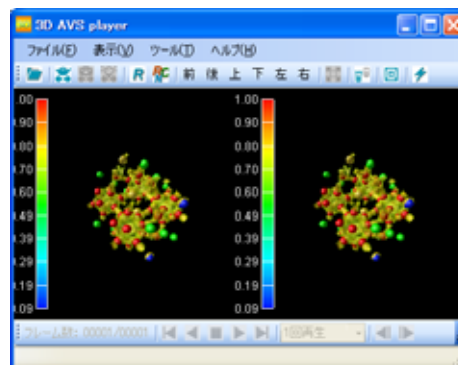
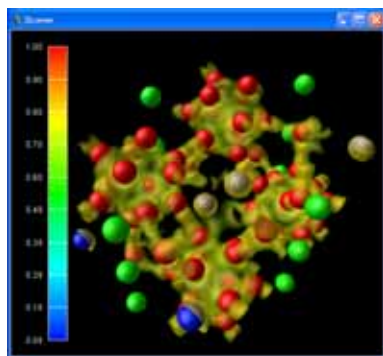
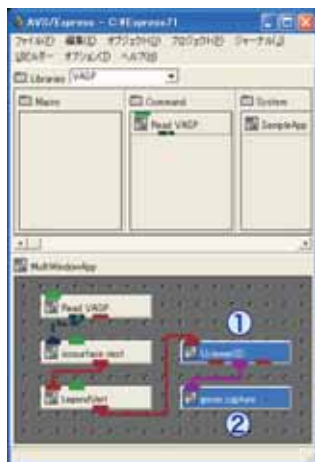


図 2. AVS の操作モジュール結線図

図 3. AVS での計算結果の可視化例

図 4. 3D AVS Player の表示

現在、使用法の説明書を作成中ですので、完成しましたらお知らせします。

3次元可視化プレゼンテーションシステム

計算材料学センター2 階には、AVS/Express による 3 次元立体視システムと PowerPoint、VTR など多用途に利用できる 2 面スクリーンをもつ 3 次元可視化プレゼンテーションシステムもご用意しておりますので合わせてご利用下さい。



3 次元可視化プレゼンテーションシステム



3 次元立体視メガネ

スパム対策システムの運用変更のお知らせ

スパコンシステムネットワークでは、平成 18 年度末のスパコンシステム更新時に、近年急激に増大してきた迷惑メール（スパムメール）への対策として、スパム対策システムを新規導入し、件名に>>>SPAM<<<、>>>BULK<<<という文字を付加してユーザー宛てに配信してきました。約 10 ヶ月間この運用を行った結果、誤検知は殆ど無いことが確認できましたので、2 月 16 日よりスパムメール、バルクメールと判定したメールはユーザー宛てに配信せず、スパム対策サーバー上のユーザー毎の隔離フォルダに保管しています。ユーザーは Web ブラウザを介してスパム対策サーバーにログインし隔離フォルダの状況を確認できますので定期的に確認してください。

以下の URL にアクセスしていただくとスパム対策サーバーのログイン画面が表示されます。この画面でメールアドレスおよびメールのパスワードを入力し[ログイン]をクリックすると各自の隔離フォルダの管理画面が表示されます。

<http://cmssspam1.imr.edu/mxs/>

必要なメールが隔離されていた場合は「ポリシーエディタ」でホワイトリストとして登録し正常メールとして配信されるように設定できます。

なお、詳しくは以下の Web ページを参照ください。

<http://cmsmail.imr.edu/~gcns/Jpn/info/network/antispampolicy.htm>

センターWeb ページの紹介

スーパーコンピューティングシステムの使い方など、メールでの広報や個別に対応してきましたが、スーパーコンピューティングシステム更新後、センターの Web ページの体裁が整ってきましたので、お知らせします。今後も充実させていく予定ですので、ご意見がありましたらお寄せください。

ホームページ

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

ニュースや定期保守日の案内を掲載しています。

初めて利用する方へ

スーパーコンピューティングシステムを利用したいと思っている方が、このシステムで何ができるかを知ることができます。

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



利用者の方へ

スーパーコンピューティングシステムの具体的な使用方法を知ることができます。

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

スーパーコンピューターにジョブを投入するとき

<http://www-lab.imr.edu/~hitachi/MAN/COMMON/FRMMLST.HTM>

使えるアプリケーションについて見たいとき

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

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/application.html#calc>

スーパーコンピューティングシステムの基本的な操作について知りたいとき

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/basic.html>

SC07 に本センター職員が参加

2007 年 11 月 10 日(土)～16 日(金)に、Reno-Sparks Convention Center (米国) で行われた標記 Conference に、本センターの野手技術職員と責任部門の水関准教授が参加しました。

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。東北大ではスーパーコンピューターを所有する部局である旧シナジーセンター、金研、流体研が合同で 1 ブースの展示を毎年行っています。今回の金研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、本所計算材料学研究部門にてオリジナル開発された全電子混合基底法プログラム TOMBO の実行デモを実機を持ち込んで行いました。他各ブースの展示では、昨今のトレンドである 3D 投影のデモが多く見られました。また次世代高速 I/O バスアーキテクチャである InfiniBand の構成機器類をいくつかの関連有名メーカーが展示しており、実際の構成パーツに触れることのできるよい機会でした。その他にもさまざまな展示が行われていました。



会議での展示の様子

平成 19 年度 機器・分析研究会で本センター職員が発表

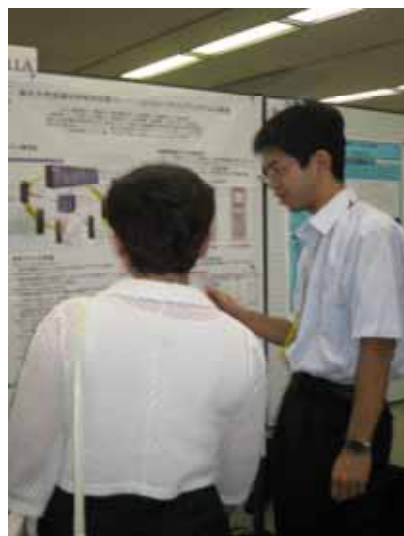
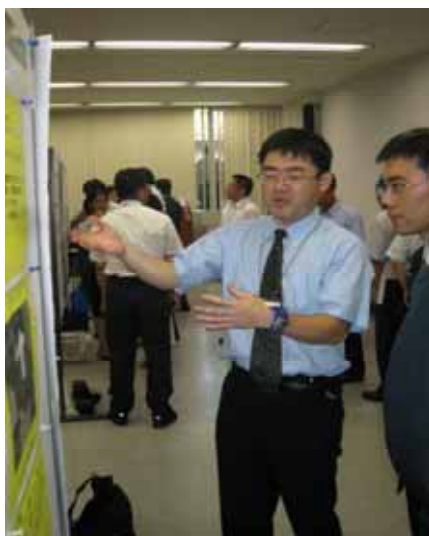
2007 年 8 月 23 日(木)～24 日(金)に富山大学五福キャンパス黒田講堂で行われた機器・分析研究会 in とやまに、本センター職員 2 名がポスター発表として参加しました。

「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た。

「東北大学金属材料研究所新スーパーコンピューティングシステムの概要」
○五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、三浦重幸、佐藤和弘、松本秀一、山口裕、石川真二、宮崎北斗、三森悟毅、武尾寛、古田正俊、永島裕之、川添良幸

概要：東北大学金属材料研究所では 2007 年 3 月にスーパーコンピューティングシステムを更新し、運用を開始した。このシステムは高度なシミュレーション計算による材料設計開発に特化したシステムで複数のコンピューターから構成されている。すべてのジョブを一元管理できるシステムの構築やネットブックシステムの導入、ネットワーク系管理ツールの開発などユーザーが使いやすく、管理者が管理しやすいシステムを構築したので報告した。



質問者に説明する佐藤技術職員(左)と五十嵐技術職員(右)

平成 19 年度 核融合科学研究所技術研究会で本センター職員が発表

2008 年 3 月 10 日(月)～3 月 11 日(火) に土岐市産業文化振興センター セラトピア土岐で行われた標記研究会に、本センター職員 4 名が参加し、発表しました。

「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」

○一関京子、三浦重幸、野手竜之介、佐藤和弘、五十嵐伸昭、川添良幸

概要：平成 19 年 3 月に材料設計に特化した世界でも類を見ない専用のスーパーコンピューティングシステムを導入した。その設計思想および現在のシステムを紹介するとともに稼働率向上のためのツールについて紹介した。

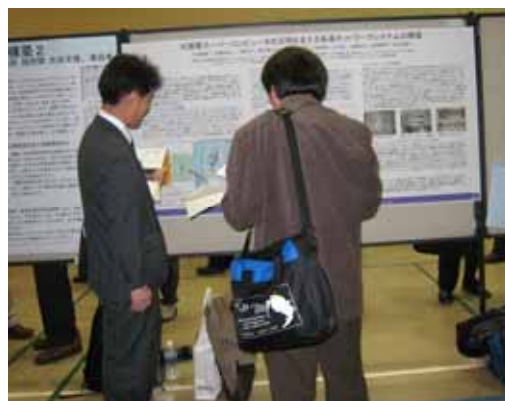
「大規模スーパーコンピュータの活用を支える高速ネットワークシステムの構築」

○三浦重幸、佐藤和弘、一関京子、野手竜之介、五十嵐伸昭、川添良幸、山口裕、永島裕之、高橋英明、池上忠嗣

概要：平成 19 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を導入した。基幹部分では 10Gbps の帯域を確保し、利用者端末側でも最大 1Gbps のフレキシブルなネットワーク環境を構築した。耐障害性や信頼性の向上を目指したその設計思想について紹介した。



発表する一関技術職員



質問者に説明する三浦技術職員

「第一原理計算における各種問題点の解決法」

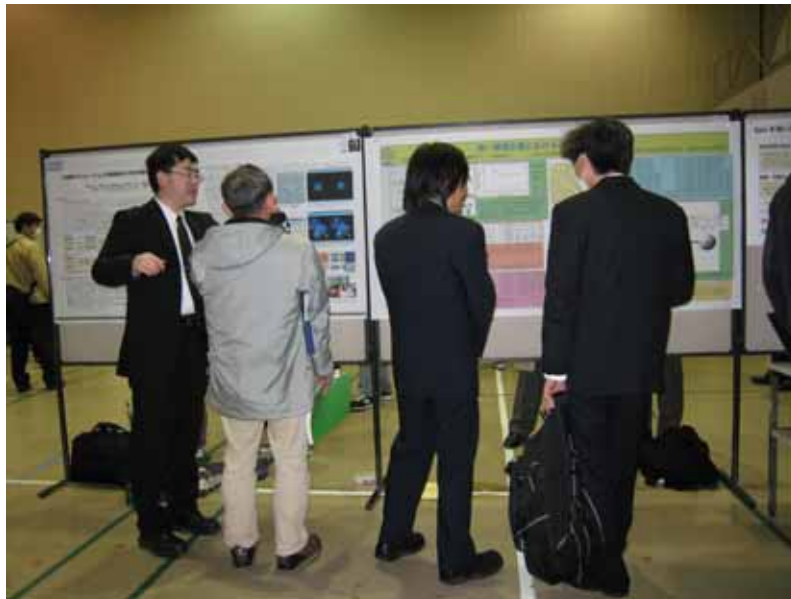
○野手竜之介、五十嵐伸昭、一関京子、川添良幸

概要：第一原理計算は物質の原子構造と電子状態を計算により導出し、その物質の各種特性を予想、評価するのに有用な方法であるが、複数のカテゴリーでの不備が組み合わさった結果として、実際の計算時に不具合が生じる場合も多い。それぞれの不備が引き起こす現象の特徴から問題点を特定し、回避策を決定して適切な結果を得る方法を紹介した。

「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」

○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、TOMBO 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に AVS/Express のインターフェースを開発したので紹介した。



質問者に説明する佐藤技術職員(左)と野手技術職員(右から2人目)

本センター職員の論文が日立 IT ユーザ会で受賞

平成 19 年 7 月 26 日に開催されました日立 IT ユーザ会 第 44 回大会において、以下の論文が「一般論文優秀賞」を受賞しました。

「ITBL 活用スーパーコンピューター広域連携シミュレーション環境構築とナノテクノロジー用超大規模計算実行」

川添 良幸^{a)}、水関 博志^{a)}、一関 京子^{b)}

^{a)} 計算材料学研究部門、^{b)} 計算材料学センター

金属材料研究所第 114 回講演会で本センター職員が発表

平成 19 年 11 月 29 日(木)、30 日(金)に行われました標記講演会に、本センターより 3 編、ポスター発表しました。

「第一原理計算による籠状シルセスキオキサン(POSS)の熱的安定性の研究」

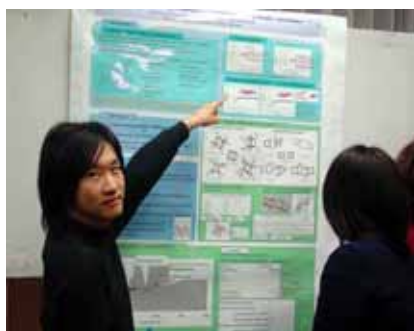
阿部弘、○野手竜之介、高橋まさえ、川添良幸

「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」

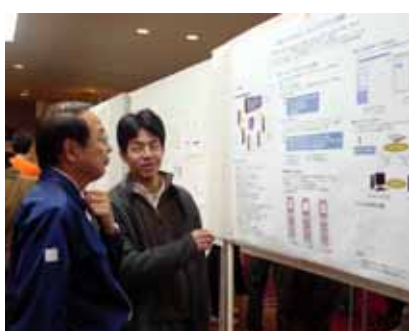
○佐藤和弘、一関京子、三浦重幸、野手竜之介、五十嵐伸昭、川添良幸、古田正俊、桐山智文、北川千夏、衛藤奈緒美

「新スーパーコンピューティングシステムの概要」

○五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、三浦重幸、佐藤和弘、松本秀一、山口裕、石川真二、宮崎北斗、三森悟毅、武尾寛、古田正俊、永島裕之、川添良幸



野手技術職員



五十嵐技術職員(右)



佐藤技術職員

平成 19 年度計算材料学センター見学者

期間:2007 年 4 月～2008 年 3 月

2007 年 4 月 25 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 120 名
2007 年 6 月 5 日	Ryan Hadt 氏	University of Minnesota, Duluth, USA
2007 年 6 月 5 日	Szieberth Denes 氏	Budapest University of Technology and Economics, Hungary
2007 年 6 月 5 日	Karen Menzel 氏	Dresden Technical University, Germany
2007 年 7 月 6 日	及川 勝成氏	東北大学工学研究科准教授 他 鑄造工学会ダイカスト部会 35 名
2007 年 7 月 9 日	中島 純三氏	株式会社日立製作所 他 計算材料学センター新システム 披露式関連来訪者 41 名
2007 年 7 月 9 日	宮中 雅昭氏	神戸市機械金属工業会事務局長 他 12 名
2007 年 8 月 6 日	古原 忠氏	東北大学金属材料研究所教授 他 JSP サマープログラム 参加者 21 名
2007 年 8 月 26 日	李 嗣浚氏	中華民国国立台湾大学校長 他 2 名
2007 年 10 月 19 日	Racault Cathy 氏	Netropole Inc. Rennes, France 他 レンヌ市訪問団 4 名
2007 年 12 月 12 日	劉 英氏	中国河北師範大学 他 2 名
2008 年 1 月 26 日	Jer-Lat Kuo 氏	Nanyang Technological University, Singapore 他 ACCMS-VO 参加者 1 名

見学者総数 293 名



■東北大学工学部プレゼミ一行見学風景

(2007 年 4 月 25 日、マテリアル・開発系 1 年生 120 名)



■新システム披露式出席者一行見学風景

(2007 年 7 月 9 日、中島純三氏 他 39 名)



■神戸市機械金属工業会事務局一行見学風景
(2007 年 7 月 9 日、宮中雅昭氏 他 12 名)



■JSP サマープログラム参加者一行見学風景
(2007 年 8 月 6 日、古原忠教授 他 21 名)



■フランス・レンヌ市訪問団一行見学風景
(2007 年 10 月 19 日、クロード・ラビ氏他 3 名
引率者 1 名)



■中国河北師範大学一行見学風景
(2007 年 12 月 12 日、劉英氏 他 2 名)

計算材料科学 WG ホームページ開設のお知らせ

本計算材料科学センターは、次世代スーパーコンピューター・プロジェクトに関する計算材料科学ワーキンググループの活動を支援しています。これは、計算物質科学連絡会議の要請の下に行われている本センターの業務の一部で、本ホームページもその趣旨に沿って本センターが開設したものです。以下に、計算材料科学ワーキンググループ設置の趣旨を示します。趣旨にご賛同いただいた場合には、ぜひ、ご参加を御願いたします。具体的には以下のホームページをご覧ください。

<http://www.ccmswg.jp/>



計算材料科学ワーキンググループは、計算材料科学の諸分野の連携を深め、将来に向けてよりよいコミュニティを形成していくためのグループです。次世代スーパーコンピューティングのプロジェクトを契機とし、物性や量子化学など他のコミュニティの同様な活動に呼応するかたちで設立されました。次世代スパコンの健全な発展のために、計算材料科学の分野から積極的に意見を発信していくことが一つの目的ですが、これに加えて、大規模計算はもとより、中規模・小規模の計算に従事している人々も含めて、材料科学における計算科学・計算機科学の発展のために情報を交換し、個々の研究にフィードバックさせていくことができればと考えています。セミナーやシンポジウムの開催を企画し、将来的には、計算材料科学の教育に対しても効果的な方策を探っていく予定です。本格的な計算を行っている人々のみならず、実験に従事している人も含めて計算材料科学に興味を持っている全ての人々にオープンなグループです。

平成 20 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。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いたします。

定期保守日

平成 20 年 奇数月の最終週月曜日

5 月 26 日、7 月 28 日、9 月 29 日、11 月 25 日

平成 21 年 奇数月の最終週月曜日

1 月 26 日、3 月 23 日

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>

計算材料学センターだより No.10

2008 年 4 月 21 日(月)発行

21th April (Mon),2008

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.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

