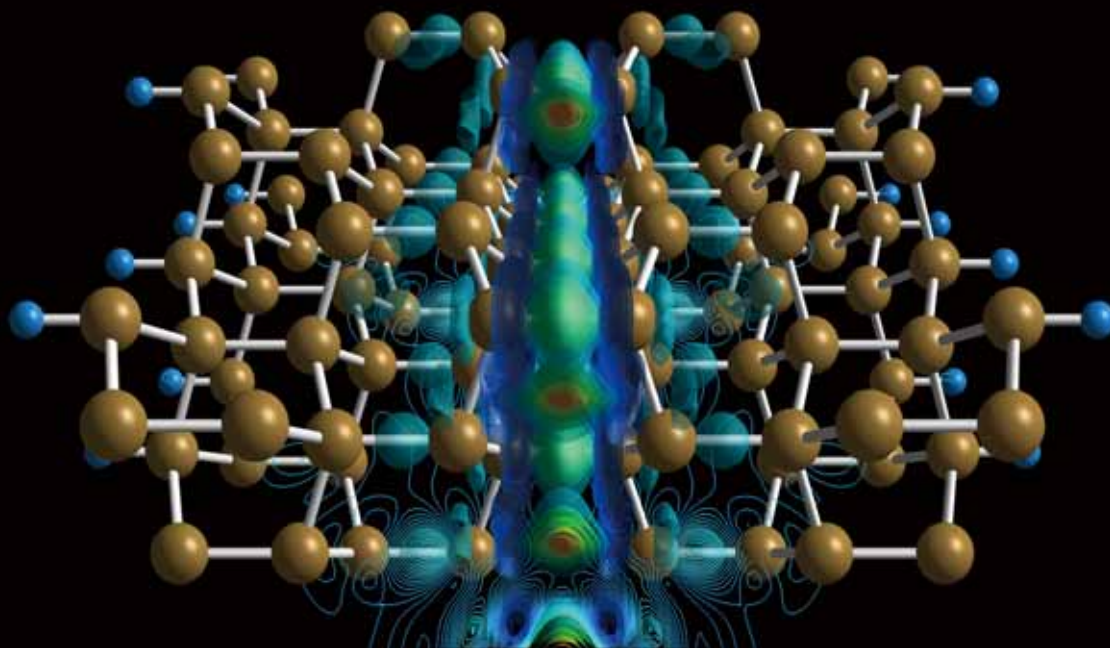


# 計算材料学センターだより



## CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ 責任部門教授あいさつ
- ・ ジョブ再現実行機能の拡張について
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ SC09 に本センター職員が参加
- ・ 3次元ホログラムポスターについて
- ・ スーパーコンピューティングシステム利用者に対するサービス
- ・ 計算材料学センターのその他のサービス
- ・ 本センター職員の論文が日立 IT ユーザ会で受賞
- ・ 平成 22 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 21 年度計算材料学センター見学者

CCMS  
NEWS  
12

## 太陽電池用多結晶シリコンのシミュレーション

現在、世界で生産されている太陽電池の約 50%は多結晶シリコンを利用したものであり、この系のエネルギー変換効率を向上させることは、低炭素社会を実現する一助になります。多結晶シリコンに含まれる粒界およびその近傍での不純物原子の振る舞いを調べ、低品質化の主要因を探っています。

## Simulation of polycrystalline Silicon for Solar Cell

Presently, since about 50% of the solar cell produced over the world is based on multicrystalline silicon, to increase the energy conversion rate will contribute to realize low carbon emission society. We are studying behavior of grain boundaries and impurity atoms there in the multicrystalline silicon to understand the main reason of the reduction in quality.

## センター長あいさつ

自由民主党から民主党への政権交代がなされ、新政権に対して国民が多くの期待を寄せたのとは裏腹に、様々な分野で混乱が生じ、それがますます増強している昨今です。同じ利権者が長期にわたって担当してきた後を改革するには大変なエネルギーを必要とするので、安定状態を達成するにはかなりの時間を要すると思われます。しかし、良きに付け、悪きに付け、これまでの長い安定状態から突然不安定状態に身を置かされることになった一般人は、短気で、早期に満足が得られないと大いに不安を感じ、不満をまき散らすようです。私を含め科学者も例外ではなく、前年度の新政権下での行政刷新会議の仕分け作業で、金研に大いに関係する文部科学省の「次世代スーパーコンピュータープロジェクト」がやり玉に上がり、露と消えかかった折には大変な不安感を覚えました。きっと計算材料学センターのスタッフ全員が同じ思いであったと推察します。幸いなことに、同プロジェクトは、予算が縮減されたものの、多くの有力科学者からの科学研究への予算投入の重要性が主張され、復活致しました。ただし、予算縮減もあって次世代スーパーコンピューターの世界一の地位をねらうことが出来なくなったのは残念であります。仕分け作業以前に、既に日本のスーパーコンピューターの世界でのレベルは急速に落ち込んで来ていましたが、そのような中でも、金研の計算材料学センターは、日本で数少ないスーパーコンピューターを有し、少ない数のスタッフにもかかわらず大いに頑張っています。



センター長 新家光雄

次世代スーパーコンピュータープロジェクトでは、金研が材料科学分野の拠点に位置付けられています。このプロジェクトを推進し、材料科学分野の活性化と攻勢を推し測るために、金研の計算材料学センターの果たす役割は極めて重要で重責を背負っております。物理や化学分野等の他のコミュニティーとの円滑な連携を図りながら、金研独自の特徴を出せる運営が望まれます。計算材料学センターは、昨年度より共同利用型のセンターとして位置付けられ、新たな運営の推進が求められています。このことから、共同研究数も増加して来ており、今後ますますその数を増加させることが求められています。

既に述べましたが、その中で金研の計算材料学センターの研究の特徴を出して行くことが肝要です。金研の計算材料学センターのスーパーコンピューターの更新時期も、2年後に迫ってきており、同センターの人的および物的充実を早期に達成しなければならない時期にきています。次世代スーパーコンピュータープロジェクトにおいて、材料科学分野の研究者が活躍することは、今後の材料科学分全体の活性化にも繋がり、材料科学分野の研究者や技術者を勇気づけ、彼らの革新的材料開発への意欲を掻き立てると期待されます。金研の計算材料学センターへの期待は大きく、したがって、計算材料学センタースタッフを始め、金研の教職員の皆さまのご協力とご支援を是非とも宜しくお願い致します。

## 責任部門教授あいさつ

計算材料学センターのアクティビティを広く知っていただくために、この「計算材料学センターだより」を発行しています。今回は、ちょっと間があいてしまいました。3年前に現スーパーコンピューティングシステムを導入し、高度な材料設計シミュレーション計算を可能とするために、様々なアプリケーションを整備し、その利用促進に当たって来ました。とは言っても、最初のうちは広報したい多くの事柄がありましたが、最近では、以下に示しますようにジョブの再現実行やアプリケーションのバージョンアップなどの地味な内容なのですが手間暇のかかるものが多くなり、広報の頻度か下がっておりました。



責任部門教授 川添良幸

職員一同は納入メーカーと共に、誠意安定運用に努めております。24時間安定稼働のためには、技術職員がスーパーコンピューティングシステムを生き物というか子供の様に大切に扱っていることはあまり知られていません。電気をいれておけば計算してくれ続ける、というほど、単純な仕掛けではありません。利用者に対する平等で迅速なジョブ実行環境提供を維持するにも自動管理システムだけでは完全ではなく、常に人間が見張っている必要があります。これらの努力の継続には本当に敬意を表する次第です。

この4月から新センター長に新家所長をお迎えし、計算材料学センター一同、心機一転気を入れてまた仕事に励む所存ですので、金研の皆様や全国共同利用の利用者にはぜひより一層のご活用をお願い申し上げます。新センター長のごあいさつにもありますように、事業仕分けでスーパーコンピューターという名前が人口に膾炙するようになりました。それはそれで嬉しいことですが、本当の超大規模シミュレーション計算を実行して意味のある材料設計を行うことは容易ではありません。そのため、計算材料学センターでは利用者の必要とするアプリケーションのチューニングを実施し、実際の実行速度の向上に努めております。カタログ性能で何TFLOPSを誇っても、実際の稼働における速度が遅くは何にもなりません。利用者にとっては、ウォールクロック(実際にかかる時間)というよりさらにはターンアラウンドタイム(ジョブを投入してから結果が出るまでの時間)が短いことが一番のサービスです。巨大なスーパーコンピューターも多くの利用者が殺到して使えば、好ましい研究環境が達成される訳ではありません。超巨大ジョブのサイズに比例して計算時間が増えるならそんなに問題はないのですが、本センターのジョブの大半を占める第一原理計算では最低でもメモリー量の3乗位は計算時間がかかります。10年前には2GBのメモリー容量制限が一番のネックでしたが、今では64ビットシステムになり、メモリーが安価になって使い放題に近い状態です。しかし、今度はここ数年間クロックの上がっていないCPUの処理速度がネックになってメモリーを使い切れないのです。100GBを超えるようなメモリーを使うジョブの計算時間は10日もかかることになりますから、1TBともなればもうほとんど無限大の計算時間が必要です。

今年度から新スーパーコンピューティングシステムの導入プロセスが始まります。ほぼ2年かかる長期戦の国際競争入札で、責任部門の業務の相当部分がそのために費やされることになりすし、事務部にも大変ご厄介になります。しかし、5年に1回のチャンスですので、何としても必要な性能を達成する新システムの導入を実現し、利用者の皆様に世界最高の材料設計シミュレーション環境を提供し続けたいと考えております。利用者にとって使いやすく、本当に必要なアプリケーションが高速処理できるシステムの構築を目指します。

今後とも金研の皆様、全国共同利用者の皆様、さらにはアジア計算材料学コンソーシアム参加者の皆様には、本計算材料学センターのご活用とご支援・ご鞭撻をお願いいたします。

## ジョブ再現実行機能の拡張について

昨今、各分野で論文や実験データの捏造が騒がれています。計算材料学分野においても他人事ではありません。事と次第によっては、過去の計算の証拠を要求されることも考えられます。昨年本センターでは、ジョブ再現実行機能の提供を開始しました。この機能は VASP ジョブのみにおいて有効でしたが、このたび機能を拡張し、Gaussian ジョブでも可能となりました。2009 年 4 月以降に投入された、初期状態を com、gif ファイル以外から読み込まない Gaussian ジョブに対して有効です。詳細は以下のマニュアルを参照下さい。

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

当機能は、あくまでも不慮の入力データ喪失時の補完的機能です。ユーザーのみなさまにおかれましては、この機能に頼ることなく、各自重要計算データの整理保存に心がけて頂きますようお願い致します。

## アプリケーションのバージョンアップについて

### 1. Gaussian および GaussView

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09 および Gaussian 09 の GUI である GaussView 5 をインストールしました。Gaussian 09 は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。

Gaussian 09 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。

- ONIOM 法: 遷移状態の構造最適化計算や MM 部分電荷存在下での振動計算が可能
- 気相および溶媒中での励起状態計算: TD-DFT 法における解析的エネルギー微分や State-specific モデルに基づく溶媒効果を考慮した吸収・発光スペクトルの計算が可能
- 溶媒和機能の大幅な強化: 溶媒中の分子に対して、より高速で信頼性のある構造最適化計算と高精度の振動数計算が可能
- 多くの DFT の新機能: 長距離補正、経験的分散および double hybrid 汎関数が実装
- パフォーマンス向上: 大規模系の構造最適化計算、大規模系の振動数計算、IRC 計算等で性能向上

GaussView 5 では主に次のような機能の追加がなされました。

- 選択した複数の原子の重心に原子やフラグメントを配置する Centroid 機能
- 非標準の同位体の指定が可能
- NMR のスピン スピンカップリングの原子の指定が可能
- 表示に利用する振動モードの複数選択が可能

Gaussian 09 および GaussView 5 の Windows 版もあります。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しますので、[ccms-adm@imr.edu](mailto:ccms-adm@imr.edu) までご連絡ください。

Official web site:

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



## 2. Atomistix Toolkit (ATK) および Virtual NanoLab (VNL)

第一原理電子状態計算ソフトウェア ATK および ATK の GUI である VNL のバージョン 2008.10 をインストールしました。ATK は 2 つの半無限の電極に挟まれたナノスケール構造体の電気伝導特性をモデリングできません。

ATK 2008.10 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。

- メモリ使用量の軽減および計算時間の短縮
- バルク計算用の新しいソルバーの実装

VNL では主に次の機能の追加がなされました。

- Bulk Builder の実装

Official web site:

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

## 3. Materials Studio

分子設計ソフトウェア Materials Studio のバージョン 5.0 をインストールしました。Materials Studio は低分子化合物、有機・無機材料、結晶、ポリマー、金属、半導体、触媒など様々な分野でモデルの構築から各種シミュレーションの実行、シミュレーションデータの解析まで行うことができるソフトウェアです。

Materials Studio 5.0 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: 固体材料および分子のラマン振動数と密度が予測可能
- DMol3: 並列処理のパフォーマンス向上
- Visualizer: パフォーマンスの改善

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しますので、[ccms-adm@imr.edu](mailto:ccms-adm@imr.edu) までご連絡ください。

Official web site:

<http://accelrys.co.jp/products/accelrys/ms/ms.html>

## 4. MedeA

材料設計支援ソフトウェア MedeA を 2.5.14 へバージョンアップしました。MedeA は金属・セラミックス・半導体などの材料に対する、構造評価、光学物性、磁性、振動などを評価することができます。

MedeA 2.5.14 では主に次の機能の追加がなされました。

- VASP 5.2 が使用可能となり、GW 近似や Hybrid 汎関数による計算および線型応答計算が可能

Official web site:

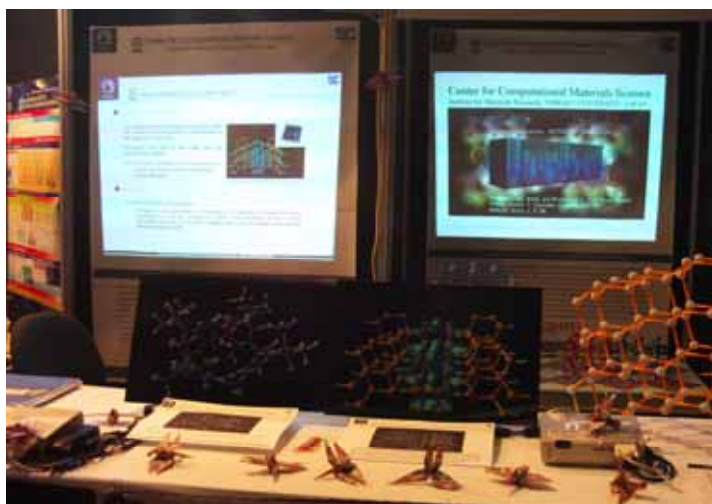
<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/medea/index.html>

## SC09 に本センター職員が参加

2009年11月14日(土)～20日(金)に Oregon Convention Center(米国 オレゴン州)で行われました標記 Conference に、責任部門の水関博志准教授と本センターの佐藤和弘技術専門職員、五十嵐伸昭技術一般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 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。東北大学ではスーパーコンピューターを所有する部局であるサイバーサイエンスセンター、流体科学研究所、本所が合同で、1 ブースの展示を毎年行っています。今回の本所の展示はスーパーコンピューターの紹介、研究成果に関するパネルや3次元ホログラム(レンチキュラー)の展示とともに、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 の説明等を行いました。

会場の各ブースの展示ではブレードサーバーやクラウドコンピューティング関係の展示が多く見られました。また、スーパーコンピューターに関しては省電力・エコを考慮した設計がされており、最新の情報を得ることができるよい機会でした。その他にも3D 投影やGPU などさまざまな展示および発表が行われていました。



最新研究成果発表とその3Dホログラム展示等

## 3次元ホログラムポスターについて

前述の SC09 で好評を博した3次元ホログラム(レンチキュラー)と同様のA1サイズのポスターを作成し、本所内に展示しています。このポスターはスーパーコンピューターで計算した結果を可視化した約40枚の立体画像データを元に作成され、裸眼の左右の視差により立体視ができる構造になっています。分子の構造が立体模型を見るようにとても分かりやすく表示されます。2号館7階705室前と計算材料学センターに展示していますので是非ご覧下さい。



太陽電池用多結晶シリコンのシミュレーション

## スーパーコンピューティングシステム利用者に対するサービス

以下はスーパーコンピューティングシステムネットワーク内から利用できます。

各詳細は以下の URL でご確認ください。

<http://www-lab.imr.edu/~gcns/Jpn/>

### 1. PDF ファイル変換サービス (PDFstaffWeb)

Adobe Acrobat が無くても、スパコンネットワーク上で Internet Explorer さえあれば簡単な操作で PDF ファイルの作成をすることができます。また、編集、ファイルセキュリティ設定なども行うことができます。Windows のみのサービスです。

<http://pdf-serv.imr.edu/PDFstaff/>



### 2. 大判プリントサービス

B0 サイズ幅(長さは 3.5m まで)の光沢紙による印刷。そのほか、折りたたんで持ち運びに便利な布ロール紙による A0 サイズ幅(長さは 3.5m まで)の印刷もサービスを始めました。場所は、計算材料学センター(スーパーコンピュータ棟)2 階です。印刷用 PC は、WindowsXP と Macintosh-OSX で Microsoft Office と Adobe CS3 のソフトウェアを用意していますので、USB メモリー等でデータをお持ち下さい。



### 3. PHP 対応 Homepage サービス

PHP 言語対応の Web サーバーを用意しております。動的な Web ページを実現することができます。たとえば外注などで作成する場合、PHP を使って見栄え良く作成されることが多くなっています。世界にアピールするホームページに大変効果的です。

PHP のホームページを外注ではなく研究室で作成の場合は、サーバーセキュリティに不具合をおこすこともあるため、十分ご注意の上作成して下さい。

### 4. メーリングリストサービス

Mailman メーリングリストサービスを行っています。利用管理者からの依頼による登録制のため登録されたメンバー以外からの投稿や閲覧できないようセキュリティが確保されています。また、Web を利用した過去履歴メール閲覧にも対応しています。



## 計算材料学センターのその他のサービス

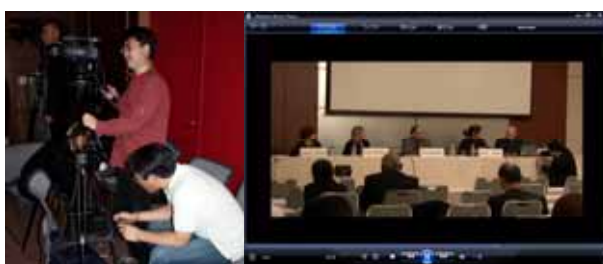
### 1. Video 撮影、編集、メディア変換サービス

研究会、国際会議、ホームページ作成用動画等の撮影を行い、それを編集し、各メディア(DVD、ホームページやストリーミング用の動画ファイル)などへの変換を行っています。VHS ビデオで撮影された映像の編集や変換も可能です。



### 2. ストリーミング配信サービス

研究会等を撮影しリアルタイムに Web 上でストリーミング配信することが可能です。また、撮影された映像は Video 編集サービスで、各メディアへの変換を行っています。



ストリーミング配信レートは所内のネットワークに負荷を掛けないアナログ TV 程度の品質になりますことをご了承下さい。DVD に編集される映像は SD 高品質です。

## 本センター職員の論文が日立 IT ユーザ会で受賞

2009年5月21日(木)、22日(金)に開催されました日立 IT ユーザ会 第46回大会において、以下の論文が「小論文優良賞」を受賞しました。

「NAREGI ミドルウェアを利用した超大規模材料設計シミュレーション計算環境の最先端学術情報基盤への構築」

一関 京子・川添 良幸<sup>\*1</sup>・五十嵐 伸昭・佐原 亮二<sup>\*1</sup>

<sup>\*1</sup> 計算材料学研究部門

概要: 計算材料学センターは、「アジア材料設計シミュレーション VO (Virtual Organization) 形成支援」を業務のひとつとして行っている。1998年に発足された ACCMS (アジア計算材料学コンソーシアム) は、仮想のスパコンシステムが形成されれば、ナノテクノロジーの進展への寄与が十分に期待される。

学術情報基盤である SINET3 の上に、最先端のグリッドミドルウェア NAREGI を利用し、金研のスーパーコンピューター SR11000 を中心とした超大規模シミュレーション計算環境を共有するグリッド環境 ACCMS-VO (Virtual Organization) の構築を行った。また、これに自由に参画できるよう、必要なインストールすべきモジュールを DVD にパッケージングし、その DVD で ACCMS のメンバーが自分の計算機を起動すると、ACCMS-VO を形成する1つの計算ノードの環境が自動的に構築されるシステムを開発したので報告した。

## 平成22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

2010年 奇数月の最終週月曜日

5月31日、7月26日、9月27日、11月29日

2011年 奇数月の最終週月曜日

1月31日、3月28日

### 片平地区停電のためのシステム停止

2010年8月6日(金)18時から8月9日(月)10時(予定)

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>

## 平成 21 年度計算材料学センター見学者

期間:2009 年 4 月 ~ 2010 年 3 月

年 月 日	見学者名	所 属
2009 年 5 月 27 日	マテリアル系プレゼミ 40 名	東北大学工学研究科
2009 年 6 月 2 日	嶋 敏之氏 他 6 名	東北学院大学工学部電子工学科
2009 年 7 月 14 日	理数科 2 年生 42 名	仙台向山高校
2009 年 9 月 3 日	池井 満氏 他 1 名	インテル株式会社
2009 年 9 月 29 日	化学部会仙塩支部 15 名	宮城県高等学校理科研究会
2009 年 10 月 5 日	郡 信一郎氏 他 1 名	デル株式会社
2009 年 10 月 16 日	金属部会 20 名	社団法人日本技術士会
2009 年 10 月 21 日	1 年生 7 名	仙台市上杉山中学校
2009 年 10 月 30 日	齊藤研究室 13 名	東北大学金属材料研究所
2009 年 11 月 18 日	加藤 陽治氏 他 3 名	弘前大学
2009 年 11 月 26 日	川又 進氏 他 1 名	笹氣出版「まなびのめ」
2010 年 1 月 21 日	Phillip A. Kessel 他 6 名	Air Force Research Laboratory
2010 年 2 月 9 日	John gren 他 2 名	スウェーデン王立工科大学
2010 年 2 月 18 日	Guang-Hong Liu	北京航空航天大学
2010 年 3 月 30 日	臼井 英之氏	神戸大学大学院システム情報学研究科
2010 年 3 月 30 日	鳥山 研二氏	愛媛大学理工学研究科

他 見学者総数 93 名



マテリアル系プレゼミ

(2009 年 5 月 27 日 40 名)



化学部会仙塩支部

(2009 年 9 月 29 日 15 名)

計算材料学センターだより No.12

2010年5月14日(金)発行

14<sup>th</sup> May (Fri) ,2010

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)216-2166

URL <http://www.ccms.imr.edu/>  
E-mail [ccms-adm@imr.edu](mailto: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

**CCMS**  
Supercomputing system