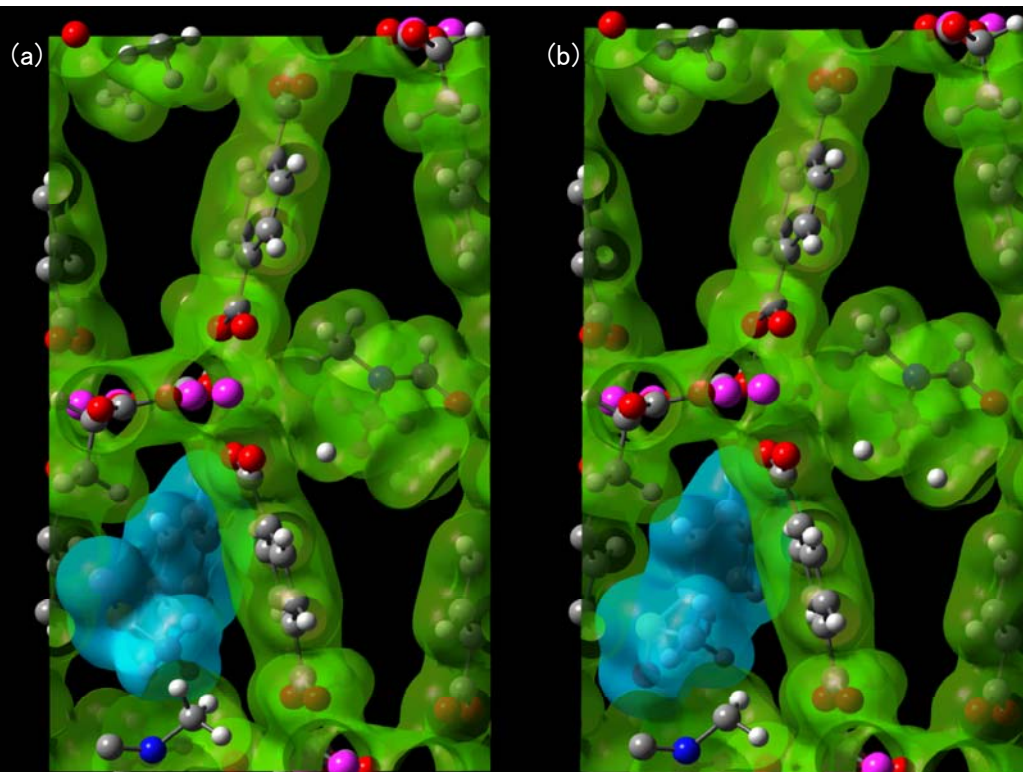


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ 責任部門教授あいさつ
- ・ AVS/Express のモジュール開発について
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ アジア計算材料学コンソーシアム仮想組織 ACCMS-VO 国際会議報告
- ・ 金属材料研究所第 120 回講演会で本センター職員が発表
- ・ SC10 に本センター職員が参加

CCMS
NEWS
13

表紙の図は、有機金属構造体を用いた光学異性体選択能のシミュレーション結果で、有機金属構造体中の光学異性体(水色部分)による吸着の違いがわかる。

薬剤には、ちょうど右手と左手のように互いに鏡像の構造を持つ光学異性体分子を含む場合があり、そのうち片方(a)だけが薬効を示し、もう一方(b)が薬害、副作用を引き起こす例が知られている。そのため、薬効を持つ分子のみを分離する技術に注目が集まっている。図は同じ分子構造をもつ有機金属構造体に、2種類の光学異性体(水色部分)を入れたときの電荷分布を示し、有機金属構造体との結合力が異なる様子が分かる。これは有機金属構造体中の分子の移動速度が異なり、この有機金属構造体は薬剤分離材料として適していることを示している。

Ab initio simulation on stereo-selective sorption ability of metal organic frameworks

Many drugs have two or more forms of the same chemical entity but the molecules are arranged differently in space. Of the isomers, only one generally offers all the therapeutic benefits with the others have side effects. Isolation of benefits results in smaller dosages with lesser side effects. A charge density *iso*-surface conveniently demonstrates the process of interaction between the porous coordination polymer host and the encapsulated molecules. The present theoretical calculations provide an explanation of the nature of multiple host-guest interactions responsible for the stereo-selective recognition of MOF (Metal Organic Frameworks) structures.

金研のスパコン

本所では、計算機シミュレーションによる材料設計を行う部門が必要とする計算量の算定に基づき、平成5年度に初代の HITAC S-3800 導入に成功しました。8GFLOPS の CPU が 3 台、メモリーは 2GB で、世界 26 番の速さでした。既に 17 年が経過しましたが、この間、実に様々なことがあり、責任部門の私の血圧は上がり続けています。しかし、本所を中心とするアジア計算材料コンソーシアム ACCMS の立ち上げに成功するなど良いことも沢山ありました。初号機は約 40 億円での買い取りで、ドンガラレポートから消えるまで使い続けました。電気だけを食いつける巨大な装置の更新を目指した概算要求が、事務部を含めた必死の努力で成功し、2 代目以降はレンタル化出来ました。国立大学法人化後も年に 1% の予算減はありますが、継続的な運用を行って来ることが出来ました。

当時は、大学附置研究所には最大で 3 施設・センターまでという規則があり、文部省との数限りない折衝でも、本センターの本所における 4 番目の組織化要求は困難を極めました。単なる所内組織としての「情報室」がスーパーコンピューター棟(名称無し)で所内最大の経費を使ったスパコン運用に当たってきました。これらの「縛り」もなくなり、名称も勝手に良いことになって、計算材料学センターを名乗りましたが(責任部門の名称も合金設計制御工学研究部門から計算材料学研究部門に名称変更)、必要な組織化の話は、もうスパコンがあるから良いだろうという判断の下、本所で続く新たな組織の発足の中、後回しどころか全く沙汰止みになってしまいました。ぜひ、概算要求の復活をお願いしたいものです。

現在の 3 代目が導入されて 4 年近くになります。最近では計算機の処理速度向上がさらに急速化し、5 年ごとの更新ではそれに追いつけないことも確かです。しかし、5 年に 1 回の更新でも責任部門の負担は膨大で、研究業績が半減するほどなのです。さらなる頻度での更新は困難だと思います。二段階調達という方策もありますが、その予算的な正当性はまだ不透明で将来的な問題だと判断しています。

4 代目には、300TFLOPS、40TB 以上の性能のスパコン導入を計画しています。利用開始は平成 24 年 4 月の予定です。初号機に比べると、処理速度もメモリー容量も何と一万倍以上になっています。しかも、電力量が現有設備の範囲という省エネタイプのもので、これだけのスパコンを使いこなし、良い成果を出し続けるためには、これまでの成果とこれからの準備が必須です。他所ではなし得ない超大規模シミュレーション計算による新材料設計を実施し、成果の社会還元を図ることは当然です。

11 月に米国で開催されたスパコンの展示会 SC10 では、日本勢の劣勢がひしひしと感じられました。ドンガラレポートが始まり、私がそれを日本に紹介した 1993 年頃は本当のトップのトップに常に日本勢が並んだものでした。日本勢の得意とした 1 台が速いコンピューターはもう夢だと思われる節がありますが、クロックアップやアーキテクチャーの革新は決して不可能ではないはず。米国の後追いや流行に流されず、利用者にとって本当に「スーパーな」コンピューターを提供して欲しいものです。そのためには材料の革新が必須です。本所と計算機メーカーのコラボによる真の意味での「次世代スパコン」の実現は、本所で計算材料学センターを立ち上げ、20 年近くにわたって継続的に運用とそれを活用した計算材料学の発展に携わってきた私の夢です。

計算材料学センター・責任部門教授
川添良幸

AVS/Express のモジュール開発について

AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって可視化を行うことのできる汎用の 3 次元可視化ソフトウェアです。計算材料学センターでは、利用率が高い計算アプリケーションである VASP に有効なモジュールとして、本年度は Copy Object モジュールを作成しましたのでご利用ください。サポート OS は Windows XP/Vista/7、Mac OS 10.5/10.6 です。

インストール CD は計算材料学センターにあります。利用希望の方は ccms-adm@imr.edu までご連絡ください。

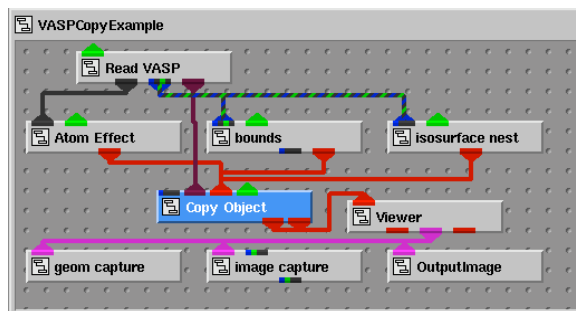


図 1 モジュールの接続例

Copy Object モジュールについて

Copy Object モジュールは、入力された表示オブジェクトを指定された方向に対して複製するモジュールです。例えば、計算材料学センターで使用されている第一原理分子動力学プログラム VASP では周期的に繰り返された結晶構造の計算をする際に、図 2-1 のように単位構造(ユニットセル)のみの分子構造を用いて計算を実行します。出力された分子構造や電荷密度などの結果を可視化するとユニットセルの部分だけなので、ユニットセルの境界部分の状態が分かりにくくなってしまいます。そのため、図 2-2 のように、Copy Object モジュールを使用してユニットセルを複数分コピーしてスーパーセルで表示すると、視覚的に分かりやすくなります。VASP については結果のファイルから自動的に複製方向と移動量を算出できるため、容易に利用可能です。

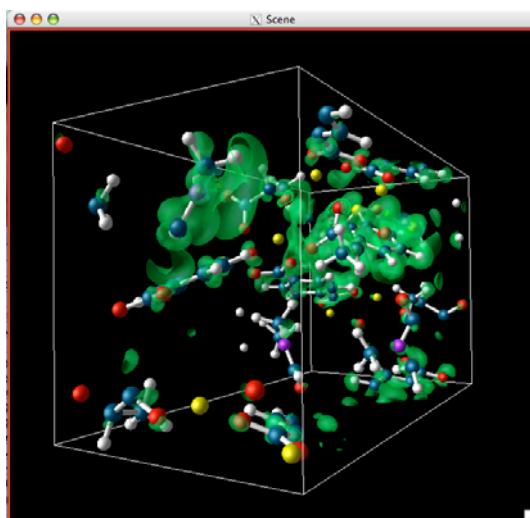


図 2-1 ユニットセルの可視化例

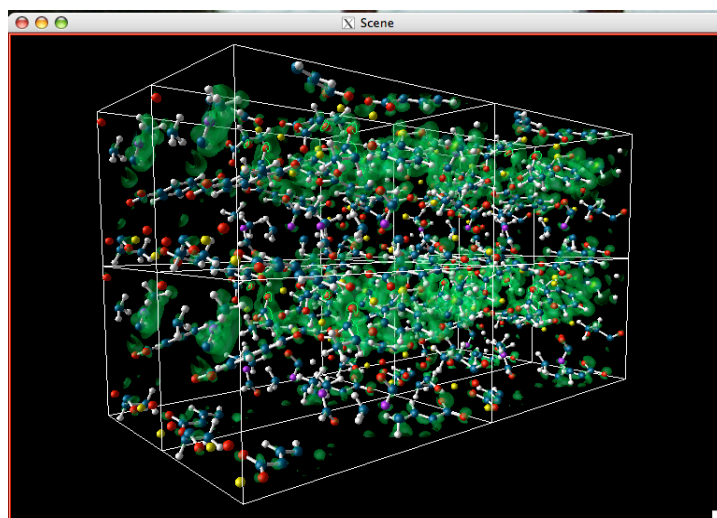


図 2-2 ユニットセルを 2×2×2 に拡張したスーパーセルの可視化例

参考 URL(Manual、sample 等): <http://www-lab.imr.edu/~avs/>

アプリケーションのバージョンアップについて

Atomistix ToolKit (ATK-DFT) および Virtual NanoLab (VNL)

密度汎関数論と非平衡グリーン関数法に基づいたナノスケールデバイスの第一原理電子状態計算ソフトウェア ATK-DFT および ATK-DFT の GUI である VNL のバージョン 10.8.2 をインストールしました。ATK-DFT 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す。

ATK-DFT 10.8.2 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。

- アルゴリズムの改良
- パフォーマンスの改良
- DFT+U の実装
- ブロッド波動関数の計算機能の実装
- バルク系に対する状態密度計算機能の実装
- 利用可能な交換相関汎関数の追加

VNL 10.8.2 では主に次の機能の追加がなされました。

- 磁気トンネル接合構造を作成するためのツールの実装
- 2 プローブ系や分子系の構造編集機能や分子系とバルク系の構造変換機能の実装
- 構造緩和過程の可視化

Official web site:

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

アジア計算材料学コンソーシアム仮想組織 ACCMS-VO 国際会議報告

ACCMS のコミュニティは、どこにでもある年に 1 回ほど集まるという単なる国際会議での交流ではなく、メンバー間での日常的な国際共同研究を基盤とし、アジア地区での計算材料学発展に着実な業績を挙げてきました。その活動をより一層活性化するため、2006 年から、本センターを中心とする仮想組織 ACCMS-VO を立ち上げました。VO としての国際会議はその「オフ会議」という位置づけになります。計算材料学センターの業務として、ACCMS-VO を計算機ネットワーク・ミドルウェア NAREGI の上に構築し、本所独自開発の第一原理計算プログラム TOMBO 等の分散処理環境構築と幅広い啓蒙活動を開始しています。

12 月 10 日(金)から 13 日(月)にわたり、本所のワークショップ及び水素吸蔵研究グループ HydroStar の国際会議との共同開催で、ACCMS-VO の第 5 回会議を開催しました。アジア地区のみならず世界中の 13ヶ国から、グラフェン等のナノ物質に関する第一原理シミュレーション計算を中心として、25 件の招待講演、31 件の口頭発表、55 件のポスター発表を得て、120 名ほどの参加者間での「オフ会議」としての国際交流を盛んになすことが出来ました。参加者からは、最近の新材料設計に関する高度な内容の研究発表ばかりで、大変に意義のある国際会議になっているとのお褒めの言葉をたくさん頂戴したことを述べさせていただきます。



ACCMS-VO 国際会議の参加メンバー

計算材料学部門・計算材料学センター

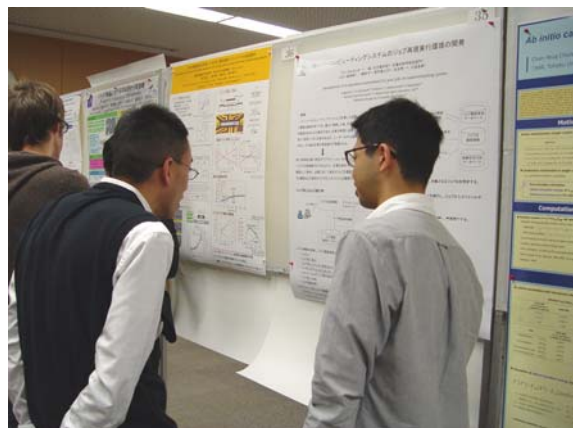
川添良幸

金属材料研究所第 120 回講演会で本センター職員が発表

「スーパーコンピューティングシステムのジョブ再現実行可能環境の開発」

○五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、松本秀一、川添良幸

概要:スーパーコンピューティングシステムで実行された特定のアプリケーションについてジョブの再現実行ができるように、計算の条件や入力データをジョブの履歴として保存し、必要に応じて過去のジョブの履歴を検索できるようにする機能および過去のジョブの入力ファイルなどを展開する機能を開発したので紹介しました。

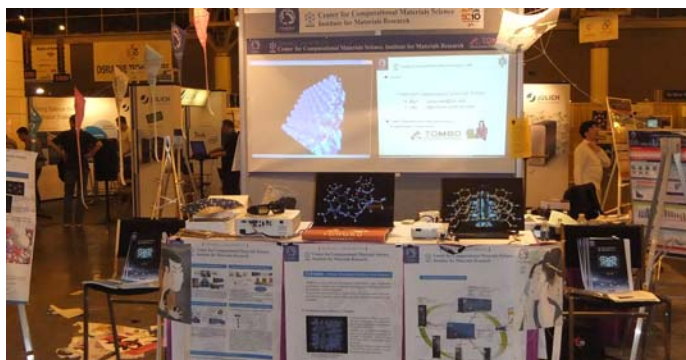


五十嵐伸昭技術一般職員のポスター発表

SC10 に本センター職員が参加

2010年11月13日(土)~18日(木)に New Orleans Convention Center(米国 ルイジアナ州)で行われました標記 Conference に、責任部門の川添良幸教授、水関博志准教授と本センターの佐藤和弘技術専門職員、川添研究室の田中秀彦氏が参加しました。

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



最新研究成果発表とその 3D ホログラム展示等

の発表や展示で構成されています。東北大学では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計算材料学センターの紹介、スーパーコンピューターを使った研究成果に関するパネルや 3 次元プロジェクターによる研究成果の展示とともに、本所独自開発の第一原理計算プログラム TOMBO の説明等を行いました。

計算材料学センターだより No.13

2010年12月24日(金)発行

24th December (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) 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

