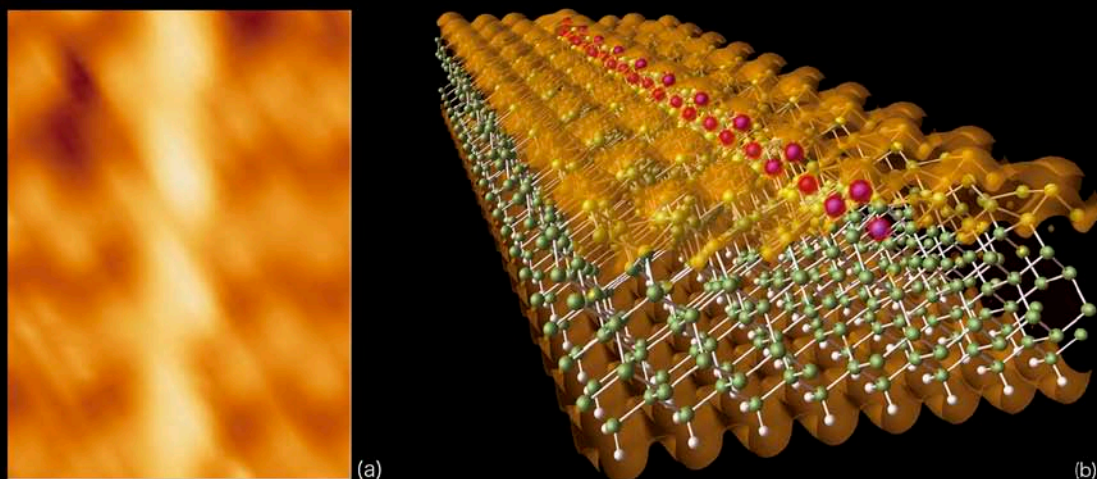


計算材料学センターだより



■ シリコン結晶表面上に自己整列したマンガン原子ナノワイヤー

- (a) 観測された走査トンネル顕微鏡像。明るいところがマンガン原子に対応すると思われる。
(b) 第一原理計算による原子構造と電子密度。赤球で示すマンガン原子の自己整列の理由が解明された。

CONTENTS

- ・ 責任部門教授あいさつ
- ・ 平成 23 年(2011 年)東日本大震災発生からスーパーコンピューティングシステム稼働までの作業報告
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ 平成 22 年度熊本大学総合技術研究会で本センター職員が発表
- ・ 金属材料研究所第 121 回講演会で本センター職員が発表
- ・ 平成 23 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 22 年度計算材料学センター見学者

■ シリコン結晶表面上に自己整列したマンガン原子ナノワイヤー

シリコン技術の終焉の後に期待されているナノテクノロジーで一番重要な1ナノメートルールのデバイス。その実現に向け、実験・理論の研究が精力的になされています。そこでは、従来の写真技術は全く役に立たないため、ナノスケールの配線の実現方策が探求されています。

表紙の図は、(a) 実験的にシリコン表面に自己整列させることに成功したことを、走査トンネル顕微鏡で観測した例です。明るいところがマンガン原子に対応するというレベルの解像度です。そこで(b) 第一原理計算を行い、原子構造と電子密度を求めました。その結果、赤球で示すマンガン原子の自己整列の理由が解明されました。スピントロニクス用材料としての可能性も示す結果であり、応用上も重要な成果です。

■ Nanowire of Mn Atoms Self-assembled on Si Crystal Surface

After the Silicon technology, it is expected to establish nanotechnology, where the most important subject is to realize 1 nanometer-rule devices. To achieve this next generation devices, both experimental and theoretical works are conducted. In nanotechnology, photographic technique is not applicable, and it is studied how to establish wiring in 1 nanometer.

The figures on the cover page show; (a) Experimental success in self-assembling Mn atoms on Si crystal surface, and observed by scanning tunneling microscope. The bright part indicates the Mn atoms, but not clear. (b) By the *ab initio* calculation, atomic structure and electronic states were computed, and the reason of self-assembly of Mn atoms (red balls) was understood. This result suggests that this material has important potential for spintronics device.

- Extract passages from the article of "Magic Monatomic Linear Chains for Mn Nanowire Self-Assembly on Si(001)", Jian-Tao Wang, Changfeng Chen, Enge Wang, and Yoshiyuki Kawazoe, Phys. Rev. Lett., **105**, 116102 (2010).

責任部門教授あいさつ

3月11日の地震で、東北大学も甚大な被害を被っています。幸い、本計算材料学センターのスーパーコンピューターは、今回のような想定外の強い地震にもびくともしませんでした。それは、頑丈な専用の建物と、そこにやはり頑丈に作られたフリーアクセスフロアにしっかりと固定してあったからで、日頃からの備えの大切さを身にしみて感じました。また、余震の続く中で、無停電電源の働く限り、安全を確保しながら、システムのシャットダウンに当たっていただいた技術スタッフに依るところも大きいのです。残念ながら、無停電電源の容量では、1PBもあるディスクの停止作業を行うことは出来ませんでした。そのため、電源が回復してから、論理的に不整合の生じたデータの修復に2週間程かかりました。電気を節約しながらの分割作業でしたので、余計に時間がかかってしまい、利用者の皆様への開放が遅れたことをお詫びいたします。現在はすっかり復旧し、従来通りのサービスを行なっております。震災での遅れを取り戻すべく多くのジョブが投入され、大変に混んでおりますが、ぜひ、ご活用をお願いいたします。

昨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作業に当たっております。すでに、国内のこの規模のセンターでは抜群の処理速度 300TFLOPS 以上などの基本仕様は固まっており、仕様書作成の最終的な段階に至っています。今後はベンチマークテストに入り、来年4月には新システムのサービス開始の予定です。利用者の皆様のご期待に応えられるシステムが導入出来るように頑張りますので、利用者サイドからのご支援をお願いいたします。

国内外の研究者の皆様の震災復興に寄与できる様に努力致しますので、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。

計算材料学センター・責任部門教授

川添良幸

平成 23 年(2011 年)東日本大震災発生から

スーパーコンピューティングシステム稼働までの作業報告

2011 年 3 月 11 日 14 時 46 分に発生しましたマグニチュード 9 の東北地方太平洋沖地震により、片平地区が停電になり、スーパーコンピューティングシステム(以下、「スパコンシステム」という)が停止しました。未曾有の大地震でしたが、計算材料学センターの建物は被害に遭わず、またスパコンシステムもハードウェア的には、ほとんど影響を受けなかったと言ってもよい状況でした。震災直後から、建物の安全確認、システムの安全確認を行ない、所内安全確認のために作業の制限を受けるなか、少しずつシステムの稼働確認を行ない、1 ヶ月後に全システムの稼働を開始しました。

年度末でスパコンシステム利用の多い時期に、長期間システムを停止しましたことを、深くお詫びするとともに、ここに震災後からシステム稼働までの作業状況を報告いたします。

3 月 11 日(金)

震災による停電の影響により、スパコンシステム全系が停止した。停電発生後、UPS 給電が終了するまでに、スーパーコンピューターの停止処理を実施し、動作 LED 消灯を確認した。その後、管理端末が電源断となったため、管理ツールでの終了確認は不可能であった。ストレージシステム、ファイルサーバー、各アプリケーションサーバーについては、UPS 給電断による電源断となり、停止処理は実施できなかった。

3 月 14 日(月)

- ・ファイルサーバーのハードウェア確認(未通電での目視確認)を行なった。問題なし。
- ・1 階スーパーコンピュータ室加湿器動作せず(金研断水のため)。

3 月 15 日(火)

- ・ネットワーク/インターネットサーバーのサービスを再開した。

3 月 16 日(水)

- ・スーパーコンピューター、スーパーコンピューターフロントエンド、ストレージシステムのハードウェア確認(未通電での目視確認)を行なった。問題なし。
- ・アプリケーションサーバー A のハードウェア確認(未通電での目視確認)を行なった。問題なし。

3 月 22 日(火)

- ・アプリケーションサーバー B のハードウェア確認(未通電での目視確認)を行なった。管理サーバーがラックから数センチ飛びだしている。戻せば問題なし。
- ・アプリケーションサーバー B の新ラックがずれて、足 1 本が床面の穴にかかっている。修復が必要。
- ・ネットワーク系サーバーのハードウェア確認(未通電での目視確認)を行なった。ラックがずれている。修復が必要。
- ・1 階スーパーコンピュータ室加湿器、給水後復旧。
- ・1 階スーパーコンピュータ室のエアコンの動作確認を行なった。問題なし。

3 月 24 日(木)

- ・ストレージシステム SANRISE の全サブシステム(#1~#8)で WARNING(パリティエラー)が発生した。

3月28日(月)

- ・ SANRISE サブシステム#1~4 の回復作業を開始した。
- ・ アプリケーションサーバーA の通電確認を行なった。問題なし。
- ・ アプリケーションサーバーB のラック等の復旧作業を実施した。
- ・ アプリケーションサーバーB の通電確認を行なった。問題なし。
- ・ ネットワーク系サーバーのラックの復旧作業を実施した。

3月31日(木)

- ・ SANRISE サブシステム#5~8 の回復作業を開始した。

4月3日(日)

- ・ SANRISE サブシステム#1~4 の回復作業を終了した。

4月4日(月)

- ・ ファイルサーバーの通電確認を行なった。問題なし。
- ・ ファイルサーバーのファイルシステム整合性チェック作業を終了した。
- ・ アプリケーションサーバーC のハードウェア確認後、通電確認を行なった。問題なし。
- ・ 可視化サーバーA、B のハードウェア確認後、通電確認を行なった。問題なし。
- ・ スーパーコンピューターのフロントエンド super1/super2 の通電確認を行なった。問題なし。
- ・ スーパーコンピューターのフロントエンド super1 をログインサーバーとして開放した。

4月5日(火)

- ・ ホームディレクトリ領域へのファイル転送(ftp)のサービスを開始した。

4月7日(木)

- ・ SANRISE サブシステム#5~8 の回復作業を終了した。
- ・ SANRISE サブシステム#5~8 の SANRISE バックアップ領域(ShadowImage,TrueCopy 領域)の回復作業を開始した。
- ・ スーパーコンピューターの通電確認を行なった。問題なし。
- ・ スーパーコンピューター、アプリケーションサーバーB、C、可視化サーバーA、B の起動、マウント確認を行なった。
- ・ アプリケーションサーバーA のサービスを開始した。

4月11日(月)

- ・ SANRISE サブシステム#5~8 SANRISE バックアップ領域(ShadowImage,TrueCopy 領域)の回復作業を終了した。
- ・ 13:00 より、スパコンシステムのサービスを再開した。

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 11.2 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 11.2 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。

- ・ 計算速度の向上
- ・ メモリ使用量の削減
- ・ SCF 計算の収束性改善
- ・ LDOS の計算機能の実装
- ・ 透過固有値の計算機能の実装
- ・ 透過経路の計算機能の実装
- ・ 複素バンド構造の計算機能の実装

VNL 11.2 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。

- ・ 原子間のボンドを表示する機能の実装
- ・ Builder を用いてバルク系から 2 プローブ系への変換機能の実装
- ・ 系の総電荷数を設定可能
- ・ VASP の入力ファイルをインポート可能

Official web site:

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

平成 22 年度熊本大学総合技術研究会で本センター職員が発表

2011 年 3 月 17 日(木)、18 日(金)に熊本大学で行われた熊本大学総合技術研究会に、本センター職員が参加し、2 名が発表する予定でしたが、震災のため参加できませんでした。

「汎用 3 次元可視化ソフトウェア AVS/Express におけるユニットセルのコピーモジュールの開発」

○佐藤和弘、五十嵐伸昭、一関京子、佐原亮二^{*1}、川添良幸^{*1}、幸谷有子^{*2}、林幸子^{*2}

*1 計算材料学研究部門
*2(株)サイバネットシステム

概要:

スーパーコンピューティングシステムの計算結果を、AVS/Express という 3 次元可視化ソフトウェアにより計算ソフトウェアの種類によらず容易に可視化できるよう、モジュール開発により対応を行ってきました。今回、小さい単位結晶構造をコピーして空間に展開し大きな 3 次元結晶構造の可視化表示するコピーオブジェクトモジュールを開発し導入したので紹介しました。

参考 URL(Manual、sample 等):

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

「スーパーコンピューティングシステムにおけるジョブ再現実行可能環境の構築」

○五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、松本秀一^{*2}、川添良幸^{*1}

*1 計算材料学研究部門
*2(株)日立東日本ソリューションズ

概要:

スーパーコンピューティングシステムで実行した特定の計算アプリケーションのジョブについて、計算を再現できるように計算の条件や入力データを履歴として保持し、必要に応じて過去の計算ジョブの履歴を検索できるようにするための機能を開発したので報告しました。

金属材料研究所第 121 回講演会で本センター職員が発表

2011 年 5 月 24 日(火)、25 日(水)に行われました標記講演会で、本センター職員がポスター発表を行いました。

「スーパーコンピューティングシステムにおける利用状況把握」

○五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、石川真二*3、勝倉真*2、八鍬友一*2、川添良幸*1

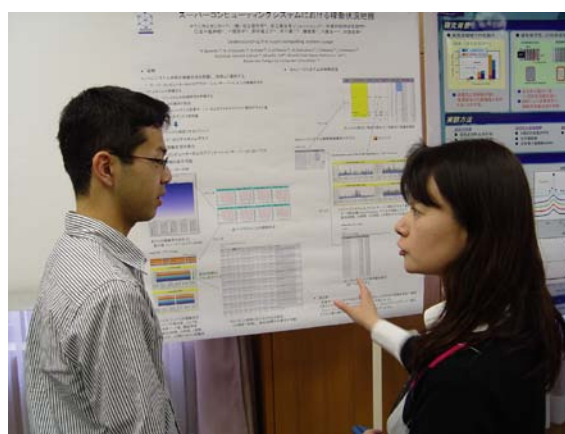
*1 計算材料学研究部門

*2(株)日立東日本ソリューションズ

*3(株)日立製作所

概要:

スーパーコンピューティングシステムの利用状況を把握するために、スーパーコンピューターおよびアプリケーションサーバーにおける CPU ごとの稼働状況に加えて、各ノードで実行中のプロセス情報を取得して Web 上で表示する機能を開発しました。また、ストレージシステムと計算サーバーおよびファイルサーバー間のアクセス量、ユーザーのディスク使用量を Web 上で表示する機能を開発したので紹介しました。



五十嵐伸昭技術専門職員のポスター発表

平成 23 年度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。

今年度はスーパーコンピューティングシステムの機種更新を予定しています。3 月中旬に現在のシステムを撤去し、新システムは4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

2011 年 奇数月の最終週月曜日

5 月 30 日、9 月 26 日、11 月 28 日

2012 年 奇数月の最終週月曜日

1 月 30 日

片平地区停電のためのシステム停止

2011 年 8 月 5 日(金)18 時～8 月 8 日(月)10 時

引き続き定期保守を行ないます。

スーパーコンピューティングシステム更新による停止

2012 年 3 月中旬～4 月中旬

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。

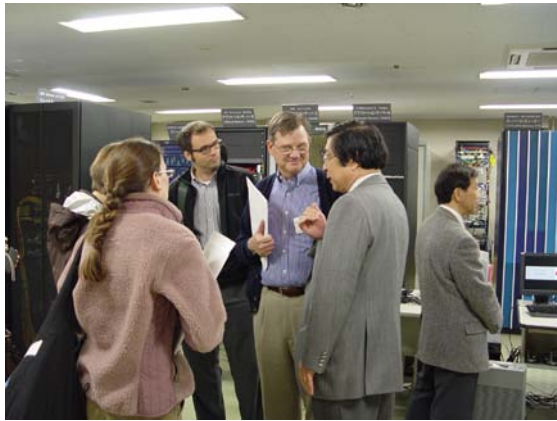
<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/index.html>

平成 22 年度計算材料学センター見学者

期間:2010 年 4 月～2011 年 3 月

年 月 日	見学者名	所 属
2010 年 4 月 13 日	Doyle C, Tinkey 他 4 名	コロラド GSE チーム
2010 年 4 月 15 日	小谷 元子氏 他 4 名	東北大学大学院理学研究科 数学専攻
2010 年 5 月 27 日	青芝 康弘氏 他 2 名	デル株式会社
2010 年 6 月 9 日	Kuzuetsov F. 他 2 名	Delegation of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (Novosibirsk)
2010 年 7 月 9 日	渡辺 建人氏 他 1 名	ブロードコミュニケーションズシステムズ株式会社
2010 年 7 月 14 日	理数科 2 年生 41 名	宮城県仙台向山高等学校
2010 年 7 月 20 日	釜石市議会議員 11 名	岩手県釜石市議会
2010 年 7 月 26 日	井上 諭一氏	文部科学省研究振興局情報課
2010 年 7 月 28 日	夏期講習会 参加者 30 名	東北大学 金属材料研究所 夏期講習会
2010 年 8 月 2 日	理数科 1 年生 42 名	宮城県仙台第三高等学校
2010 年 10 月 20 日	1 年生 5 名	仙台市立上杉山中学校
2010 年 11 月 2 日	手塚 靖氏	東北大学産学連携推進本部
2010 年 11 月 29 日	Bing Joe Hwang 他 7 名	The National Science Council Delegation (Taiwan)
2010 年 12 月 8 日	Hasan AlMatrouk	Kuwait Institute for Scientific Research
2010 年 12 月 15 日	勝間田 業氏 他 4 名	東北大学工学部材料科学総合学科
2011 年 3 月 4 日	伊藤 敏行氏 他 4 名	国立大学附置研究所技術室室長会議

見学者総数 206 名



■ コロラド GSE チーム
2010年4月13日 5名



■ 宮城県仙台向山高等学校
2010年7月14日 41名



■ 東北大学 金属材料研究所 夏期講習会
2010年7月28日 30名



■ 宮城県仙台第三高等学校
2010年8月2日 42名



■ 仙台市立上杉山中学校
2010年10月20日 5名



■ The National Science Council Delegation (Taiwan)
2010年11月29日 8名

計算材料学センターだより No.14

2011年6月10日(金)発行

10th June (Fri), 2011

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

CCMS
Supercomputing system