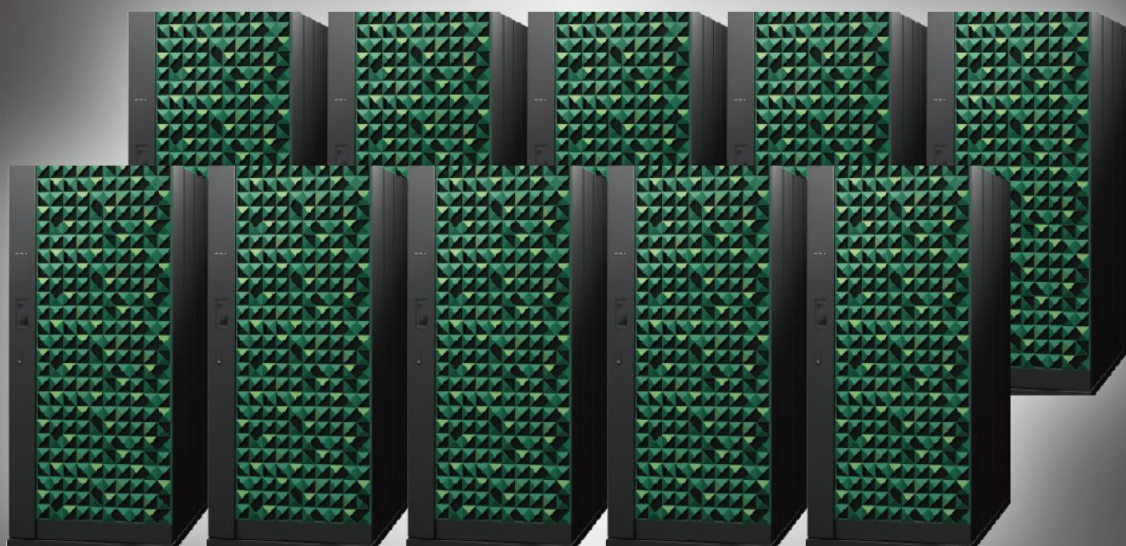


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ 責任部門教授あいさつ
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ AVS/Express のモジュール開発について
- ・ SC11 に本センター職員が参加
- ・ 日立 IT ユーザ会で本センター職員の論文が受賞

CCMS
NEWS
15

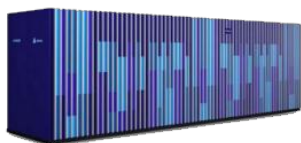
■ 計算材料学センターのスーパーコンピューターの変遷



スーパーコンピュータ HITACHI S-3800/380
1994年3月 - 2001年1月
最大ベクトル性能 24GFLOPS



スーパーテクニカルサーバ HITACHI SR8000 モデル G1
2001年2月 - 2007年2月
最大理論ピーク性能 921.6GFLOPS



スーパーテクニカルサーバ HITACHI SR11000 モデル K2
2007年3月 - 2012年3月
最大理論ピーク性能 7.5 TFLOPS



スーパーテクニカルサーバ HITACHI SR16000 モデル M1
2012年4月 - 2017年4月(予定)
理論演算性能 300.02 TFLOPS

※導入時の設置形態

責任部門教授あいさつ

四代目のスパコン

計算材料学センター 責任部門教授

川添良幸

平成 5 年度に初代のスパコンが導入された時の喜び。それは、計算材料学という名称自体も含め、そこでオリジナルな全電子混合基底法第一原理計算プログラムの実行プラットフォームの確立も意味していました。現在に至るまで、他では出来ない高度で信頼性のある物性量算定を目的として、現横浜国立大学大野教授や現デルフト工科大学スライター教授を中心として定式化からプログラム開発・実行に当たって来ました。初号機、日立製作所製 HITAC S-3800 は、水冷の 8GFLOPS のベクトル処理装置が 3 台で構成され、全処理能力 24GFLOPS、主メモリーが 2GB の巨大なマシンで、世界ランキング 16 位を達成しました。31bit アドレスの制限で、今ではパソコンのメモリー量の 2GB の範囲でプログラムを作成し、実行する必要がありました。

初号機導入から 7 年後に、レンタル化に成功したので、その後は順調に 5 年に一度の更新を継続することとなりました。概算要求はしなくて良くなったのですが、仕様書策定からベンチマークテストに至る国際競争入札過程は同じで、今回、4 代目の導入に当たっても、ほぼ 2 年間、責任部門の責任として機種選定に当たりました。お陰様で、今回も 1 ノードがほぼ 1TFLOPS という高速性を有する POWER7 搭載、理論演算性能 300TFLOPS、総主記憶容量 40TB という大学の計算センターでは上位のスパコン、日立製作所製 SR16000/M1 を導入することが出来ました。ただ、ノード数が 300 ともなると、運用を慎重にしなければなりません。現在、センタースタッフと共に、貴重な計算機資源を無駄遣いせず、高度な材料設計シミュレーション計算結果を生み出すことを可能とする環境設定に当たっています。今回のスパコンはエネルギー効率を良くするため水冷方式を採用しています。初代も水冷でしたが、2 代目と 3 代目は空冷、しかし、将来また水冷になるはずと、チラーの敷地を確保しておいたので、無理なく省エネルギーを実現出来ました。さらに、これまでの継続として、市販のソフトウェアを容易に提供できるインテルの CPU 搭載のアプリケーションサーバーも用意しました。上位 500 までのスパコンの CPU はインテル系が約 80%、POWER7 が約 20% とほぼ 2 社の独占状態ですので、今回導入予定の 2 システムで、理論材料設計に必要なソフトウェアをほぼ網羅して準備出来ることとなります。以下にシステム構成概念図を示します。4 月 16 日のサービス開始に向け、これからも数多くの必要な仕事をこなして行かなければなりません。4 代目のスパコンが、計算機シミュレーションによる材料設計を目指す国内外の利用者に使いやすいシステムとなるように努力して参ります。そのために、皆様からのご要望が大切です。ぜひ、多くのご意見を頂戴し、より良いシステム構築を実現したいと思っております。

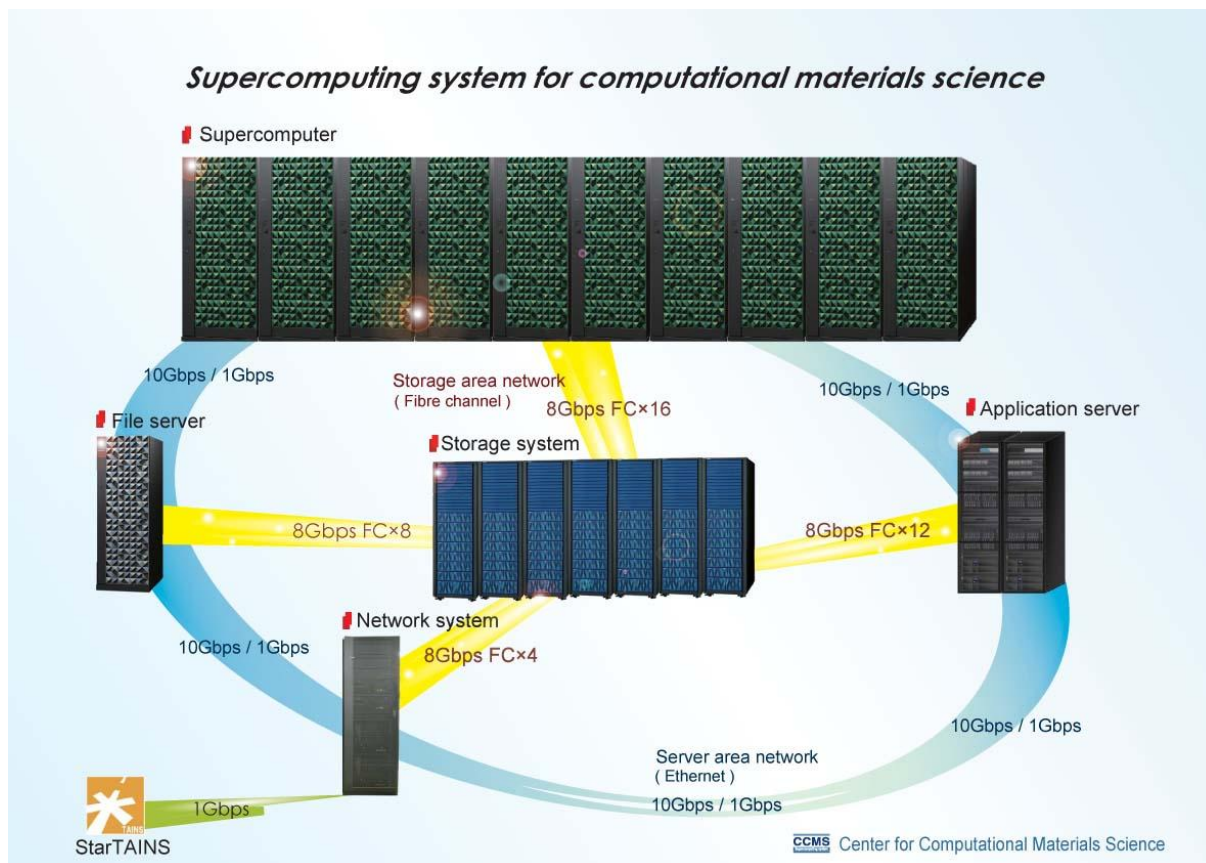


図 1. 新スーパーコンピューティングシステム構成概念図

新スーパーコンピューティングシステムの主な構成要素

- Supercomputer(スーパーコンピューター) HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデル M1

総ノード数	320 ノード
総計算ノード理論演算性能	300.02 TFLOPS (306 ノード)
総主記憶容量	42.25 TB(128 GB × 274 ノード, 256 GB × 32 ノード)
- Application server(アプリケーションサーバ) IBM BladeCenter HS22

総コア数	600 コア(12 コア/ノード × 50 ノード)
総理論演算性能	6.4 TFLOPS
総主記憶容量	1.776 TB
- Storage system(ストレージシステム) HITACHI AMS 2500

総ディスク容量	1.435 PB (物理容量)
SAS ディスク	326 TB
SATA ディスク	1.109 PB
- File server(ファイルサーバ) HITACHI エンタープライズサーバ EP8000 740

総主記憶容量	64 GB (16GB × 4)
--------	------------------

システム移行スケジュール

現スーパーコンピューティングシステムの停止 : 平成 24 年 3 月 15 日(木) 9 時
 新スーパーコンピューティングシステムの運用開始 : 平成 24 年 4 月 16 日(月)13 時
 試用期間 : 平成 24 年 4 月 16 日(月)から 5 月 15 日(火)まで

アプリケーションのバージョンアップについて

1. Gaussian 09

量子化学計算ソフトウェア Gaussian 09 Rev C.01 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広範囲の分子システムをモデリングできます。

Gaussian 09 Rev C.01 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。

- ・ Windows 64 ビット版のリリース
- ・ 構造最適化アルゴリズムとオプションの変更による SCF の収束性の向上およびメモリー使用量の削減
- ・ 交換相関汎関数 RevTPSS の追加
- ・ 第一遷移金属列用の cc-pVDZ 分散関数の追加
- ・ 読み込み専用の chk ファイルが指定可能
- ・ PCM 溶媒効果を取り入れた時の CIS 振動計算のバグフィックス

実行方法:

<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/user/app/gaussian09/gaussian.html>

Official web site:

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

2. Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab(VNL)

密度汎関数論と非平衡グリーン関数論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 11.8.1 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 11.8.1 では主に次のような機能の追加および拡張がなされました。

- ・ NEB 法の実装
- ・ meta-GGA の実装
- ・ Kubo-Greenwood 公式を用いて光学特性が計算可能
- ・ Hartwigsen-Goedecker-Hutter 擬ポテンシャルが利用可能
- ・ 新規マルチグリッドソルバによりメモリー使用量が削減
- ・ 新規ファイル形式のサポート

VNL 11.8.1 では主に次のような機能の追加および拡張がなされました。

- ・ 新規ビルダーの実装
- ・ ジョブマネージャーでジョブの停止やリスタートが可能
- ・ ファイルブラウザの変更

実行方法:

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

Official web site:

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

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で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、本所で独自開発した全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO の分子動力学(Molecular Dynamics、以下、MD という)シミュレーション計算結果を可視化するために、本年度は TOMBO MD モジュールを開発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.tohoku.ac.jp までご連絡ください。

TOMBO MD モジュールについて

TOMBO MD モジュールは、TOMBO による MD シミュレーション計算結果から時間経過に伴う原子、分子の動きをアニメーションとして表示します。図 2 に TOMBO MD モジュールの接続例を示します。

以下はニッケルの 2 量体の周りがある水素分子の励起状態での MD シミュレーション計算結果の可視化例です。以下はスナップショットですが、実際には図 3(a)から図 3(b)へ水素が解離していく様子が分かります。

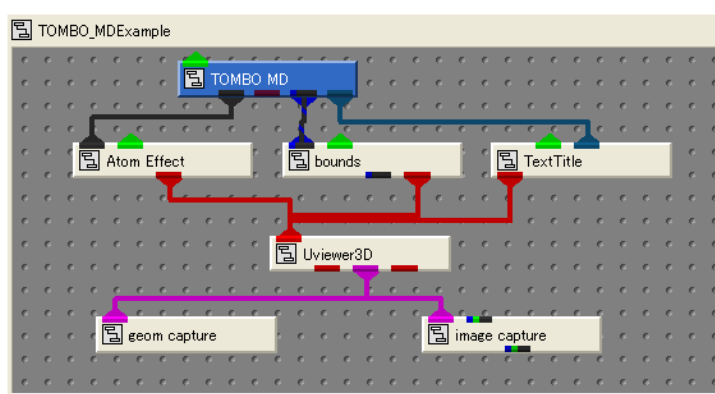


図 2. TOMBO MD モジュールの接続例

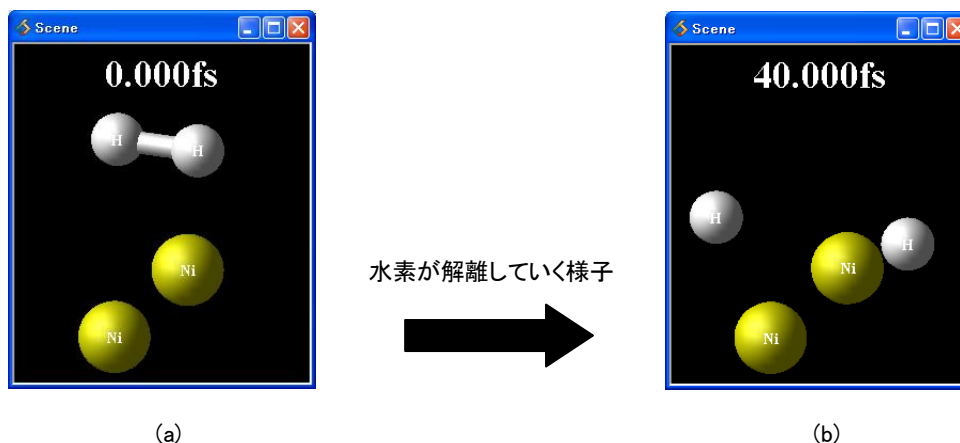


図 3. TOMBO による MD シミュレーション計算結果の可視化例

以下にアニメーションのファイルがありますので、ご覧ください。

http://www-lab.imr.edu/~ccms/avs/TOMBO_MD/Ni2H2.gfa

このファイルを再生するには 3D AVS Player が必要です。3D AVS Player は AVS/Express の可視化結果を 4D アニメーション(再生しながら視点変更が可能)で再生できるフリーのビューワで、以下からダウンロード可能です。

<http://www.cybernet.co.jp/avs/products/avsplayer/>

SC11 に本センター職員が参加

2011年11月12日(土)～18日(金)に Washington State Convention Center(米国 ワシントン州)で行われました標記カンファレンスに、責任部門の川添良幸教授と本センターの佐藤和弘技術専門職員、五十嵐伸昭技術専門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。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今回は 349 のブース出展、11,000 名を超える参加者がありました。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プロジェクターによる展示とともに、本所独自開発の全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO の説明等を行いました。また、来年度に導入される予定の新スーパーコンピューティングシステムの概要についても紹介しました。

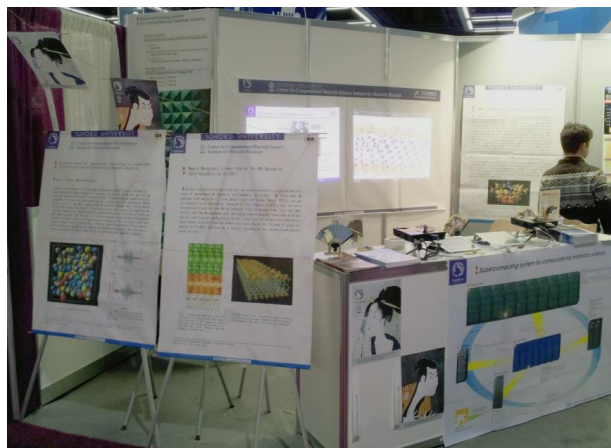


図 4. SC11 での展示の様子

日立 IT ユーザ会で本センター職員の論文が受賞

2011年5月26日に開催されました日立 IT ユーザ会 第48回大会において、以下の論文が「一般論文優良賞」を受賞しました。

「スーパーコンピューティングシステムにおけるジョブ制御機能の開発」

○五十嵐 伸昭、一関 京子

概要:

平成 18 年度に導入された現在のスーパーコンピューティングシステムは全国共同利用施設として運用しているため、システムの稼働率を上げるとともにユーザー間で平等にジョブが実行される必要があります。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ではジョブ管理システムを利用してジョブのスケジューリングを行っていましたが、ジョブの大規模化や利用状況の変化により、従来のジョブ管理システムの機能ではジョブの待ち時間の増加やユーザー間の平等性が確保できなくなるなどの問題が出てきました。そこで、それらの問題を解決するために開発した独自のジョブ制御機能について報告しました。

計算材料学センターだより No.15

2011年12月20日(火)発行

20th Dec (Tue), 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.tohoku.ac.jp



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