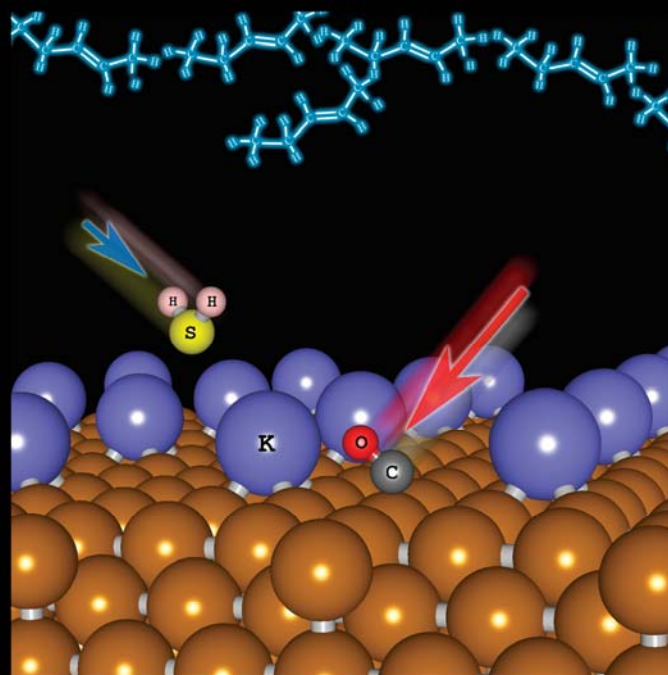


# 計算材料学センターだより



## CONTENTS

- ・ 責任部門教授あいさつ
- ・ スーパーコンピューティングシステムの概要
  - I. 移行スケジュール
  - II. 新スーパーコンピューティングシステム概要
  - III. 利用方法
  - IV. アプリケーション一覧
  - V. 変更点
  - VI. 注意事項
- ・ 平成 24 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タ-SR11000 稼働終了
- ・ 平成 23 年度計算材料学センター見学者

■ 高品質な輸送燃料生産のための Fe(100)表面上の CO と H<sub>2</sub>S の吸着に対するアルカリ吸着原子の影響解明に成功しエコロジーに寄与

様々な金属触媒中でも Fe と Co 触媒は、CO と H<sub>2</sub> のガスの混合物からの燃料生産用のフィッシャー・トロプシュ合成の中で、最も一般的に使用されています。Fe は高いアクティビティを持ち埋蔵量が豊富で安価で高選択性のため、産業上良く利用されます。しかし、触媒としては硫黄と非常に反応しやすく、そのため選択性が低くなっています。

本シミュレーション研究により、この現象は Fe(100)表面上の Na と K の吸着原子の存在が、CO 分子の吸着を促進し、H<sub>2</sub>S 分子の吸着を妨害することが原因であると分かりました。また、K 吸着原子が、吸着エネルギーに大きな影響を及ぼすことも示されました。さらに、局所電子密度およびバーダー・チャージ分析を行うことによって、アルカリ吸着原子と分子の間の静電的相互作用が上記効果の促進および毒性効果の主な原因であることを突き止めました。

■ Effects of Alkali Adatoms on CO and H<sub>2</sub>S Adsorptions on the Fe(100) Surface for Production of Ecologically High-Quality Transportation Fuels

Among different metal catalysts, Fe and Co catalysts are the most commonly used in the Fischer-Tropsch synthesis for fuel production from a mixture of CO and H<sub>2</sub> gases. Fe is industrially preferred due to its low price, high abundance, high activity, and high selectivity. Unfortunately, an iron catalyst is very sensitive to sulfur poisoning and has a lower selectivity.

It has been found that the presence of Na and K adatoms on the Fe(100) surface promotes the adsorption of the CO molecule and hinders the adsorption of the H<sub>2</sub>S molecule, and in particular, the K adatom has been found to exert the largest variation effect on the adsorption energies. Through the examinations of local density of states and Bader charge analysis, we have shown that the electrostatic interactions between the alkali adatoms and the molecules are mainly responsible for such promotion and poison effects.

- Extract passages from the article of " Effects of Alkali Adatoms on CO and H<sub>2</sub>S Adsorptions on the Fe(100) Surface ", M. H. Mahyuddin, R. V. Belosludov, M. Khazaei, H. Mizuseki, Y. Kawazoe, J. Phys. Chem. C, 115, 23893-23901(2011).

## 責任部門教授あいさつ



計算材料学センター 責任部門教授  
川添良幸

金研に教授として呼んでいただいてから 22 年近くになりました。最初は大型計算機センターの端末室があっただけの組織を任せられ、そこに所属していた中名生、伊藤、和田の 3 名の技官のみが私の部下でした。新規に設定された私の研究部門には、材料データベースの構築と計算機シミュレーションによる材料設計という 2 つの目標が課せられていました。ちょっと見積もっただけでも専用のスパコンがなければ何も出来ないことは明白でした。その実現のため、本当に夜も寝ずに概算要求書作りに励みました。平成 6 年度に最初のスパコンが入った時は心から嬉しかったものです。その使用目的として全電子混合基底法第一原理シミュレーションプログラム TOMBO の開発とナノスケールの材料設計が挙げられ、24GFLOPS のマシンのほとんどはこの計算に当てられました。初号機は7年間働いてくれ、その後、2 号機、3 号機と指数関数的に処理速度が増大して行きましたが、1 ノードの処理能力向上というよりは、小型化と省エネによるノード数の増大に支えられたものでした。そのため、処理件数も指数関数的に増大し、国内外の利用者による市販のソフトウェアの利用が増え続けました。オリジナルに拘る私としては、この状況を改善したかったのですが、業績を挙げることを主とするしかなければ、時間のかかるオリジナルプログラム開発に携われる研究者はそんなには期待できないのです。それでも、この 20 年、他では出来ない計算が可能なプログラム作成に当たり、優れた成果を出すことが出来たのは、一緒に働いてくれた責任部門及び共同研究者の教員とセンター職員、それを支えてくれた納入メーカーの方々のおかげです。感謝申し上げます。

今回、これまでの経験を踏まえ、我々の要求仕様に対してもっともバランスの取れたスパコンとして、日立製作所製 SR16000 が選ばれました。300TFLOPS、40TB の総合処理能力を、306 ノードで達成した水冷マシーンです。1 ノード当たりの処理速度が約 1TFLOPS でメモリーは 128GB(一部 256GB)です。第一原理計算でもっとも時間のかかる行列の対角化やフーリエ変換に必要な最適仕様となっていると判断しています。我々は、独自の定式化と他では出来ない物性値算定に拘って来ました。これだけの規模のスパコンを活用出来れば、TOMBO を使い、実用材料のバンドギャップ値の絶対値算定や、触媒反応の動的シミュレーション等の実行が可能となります。初号機の 1 万倍以上のカタログ性能なのですが、最近の計算機は、クロック数はそんなには上らず、コア、CPU、ノード、システムという 4 段階構成で、多段のキャッシュメモリーも付いた複雑なシステム構成ですから、最大効率を出すにはプログラマーサイドの努力が必要です。

大きな計算機が好きな私が最後に機種選定委員長として選ばせたいただいた新スパコンです。ぜひ、ご活用下さい。利用者の皆様のご期待に応えられる素晴らしいシミュレーターとして働いてくれるはずですよ。また、スーパーコンピューター「京」等との連携も視野に入れたサービス体制を充実していく予定ですので、より幅広い利用がなされるものと期待しています。

## スーパーコンピューティングシステムの概要

2011年12月20日発行の計算材料学センターだより(Vol.15)でお知らせしましたが、スーパーコンピューティングシステムの更新を2012年4月に行います。以下にその概要、利用方法、主なアプリケーション、変更点などについて説明します。約1ヶ月の停止になり利用者の方々へはご迷惑をおかけしますが、事情ご拝察の上、どうぞよろしくお願ひします。

### I. 移行スケジュール

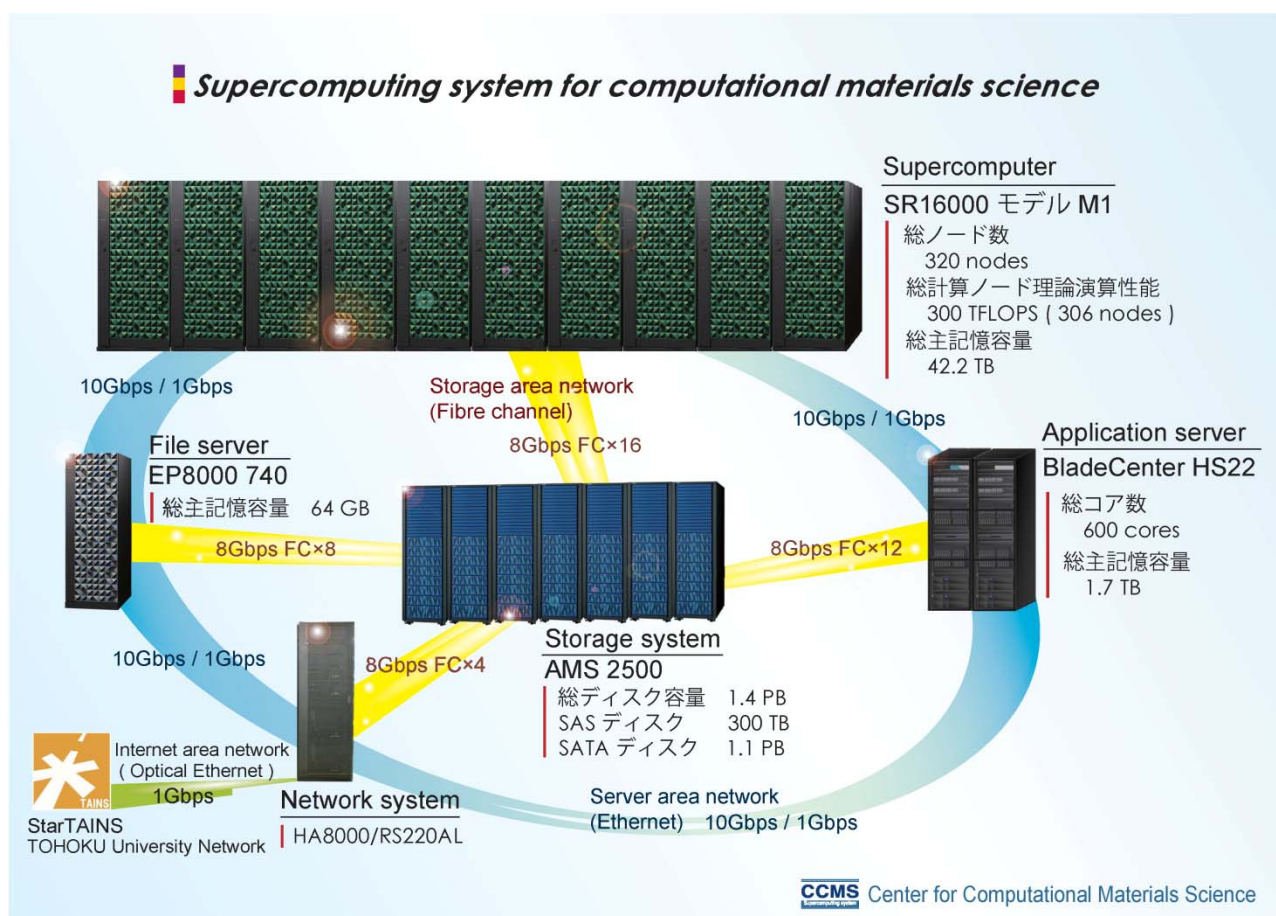
旧スーパーコンピューティングシステムの停止 : 2012年3月14日(水) 17時

新スーパーコンピューティングシステムの運用開始 : 2012年4月16日(月) 13時

試験期間 : 2012年4月16日(月)から5月14日(月)まで

### II. 新スーパーコンピューティングシステム概要

「新規材料設計により抜本的な新エネルギー創成と環境問題解決」を目指す300TFLOPSの新スーパーコンピューティングシステム(以下「新スパコンシステム」という)は以下のマシンより構成されます。



## 1. 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

スーパーコンピューターは、HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデル M1(以下「SR16000」という)で、「POWER7」を搭載する分散メモリー型並列計算機(水冷方式)です。「POWER7」は 1 プロセッサチップ内に 8 コアを有するマルチチップで、1 コアあたりの理論演算性能は 30.6GFLOPS です。旧スーパーコンピューターSR11000 に比べ総理論演算性能で 40 倍の 300 TFLOPS の性能を誇ります。メモリーは約 8.5 倍の 42.2 TB を搭載しました。センターに導入される SR16000 は 10 筐体で、1 筐体は 32 ノードで構成され、1 ノードには 4 プロセッサ(32 コア)が搭載されています。

1 ノード使用のキューから 32 ノード使用のキューまでを用意する予定ですが、実行ジョブは従来のようにフロントエンドノードから投入します。

### (1) ハードウェア構成

#### a. スーパーコンピューター本体

総ノード数 : 320

計算ノード数 : 306

総計算ノード理論演算性能 : 300TFLOPS (306 ノード)

総主記憶容量 : 42.2 TB (128 GB × 274 ノード、256 GB × 32 ノード)

#### b. フロントエンドノード

ノード数 : 2

ホスト名 : super1.imr.edu、super2.imr.edu

#### c. TSS ノード

ノード数 : 2

ホスト名 : super3t.imr.edu、super4t.imr.edu

### (2) ソフトウェア構成

#### a. オペレーティングシステム

AIX 7.1

#### b. アプリケーション

Gaussian 09、VASP、TOMBO、WIEN2k、SIESTA、ABINIT、CPMD、Quantum Espresso、CP2K、GAMESS、Q-CHEM

#### c. コンパイラ

最適化 FORTRAN90、IBM XL Fortran V13 for AIX Concurrent User、  
IBM XL C/C++ V11 for AIX Concurrent User

#### d. ライブラリ

MATRIX/MPP、IBM ESSL V5.1/IBM Parallel ESSL V4.1、  
IBM Parallel Environment Runtime Edition V1.1

## 2. アプリケーションサーバー : IBM BladeCenter HS22

アプリケーションサーバーは、スーパーコンピューターSR16000 の補助システムとして、インテル・アーキテクチャーの CPU を搭載した、分散メモリー型並列計算機です。50 台の計算ノードは大容量メモリーと高速な I/O を必要とするプログラム実行用に 12 台(144 コア)用意されます。アプリケーションサーバーは、スーパーコンピューターSR16000 では稼働しないようなアプリケーションを提供します。また、標準的な Linux クラスタ

サーバーとしての機能も提供します。

(1) ハードウェア構成

a. アプリケーションサーバー本体

総コア数 : 600 (12 コア/ノード × 50 ノード)

総主記憶容量 : 1.7 TB

50 ノードは大容量メモリー・SAN 接続計算ノードと通常計算ノード、フロントエンドノード、TSS ノードから構成されます。

b. 大容量メモリー・SAN 接続計算ノード

ノード数 : 12(1 ノード 12 コア 72GB メモリーの SMP 構成)

総主記憶容量 : 864GB

c. 通常計算ノード

ノード数 : 34(1ノード 12 コア 24GB メモリーの SMP 構成)

総主記憶容量 : 816GB

d. フロントエンドノード

ノード数 : 2

ホスト名 : app1.imr.edu、app2.imr.edu

e. TSS ノード

ノード数 : 2

ホスト名 : app3t.imr.edu、app4t.imr.edu

(2) ソフトウェア構成

a. オペレーティングシステム

RedHat Enterprise Linux V6.2

b. アプリケーション

GaussView 5、ADF、ADF-GUI、MATLAB、ANSYS Multiphysics、ATK、VNL、AVS/Express Developer、Materials Studio、MOLDEN、MOLEKEL、XCrySDen、PHOENICS、Mathematica

c. コンパイラ

インテルコンパイラ Cluster Studio 2012 Linux 版

PGI コンパイラ 12.2

d. ライブラリ

インテル マス・カーネル・ライブラリー (インテル MKL)

インテル インテグレートッド・パフォーマンス・プリミティブ (インテル IPP)

AMD Core Math Library (ACML)

3. ファイルサーバー : HITACHI エンタープライズサーバ EP8000 740 × 2

利用者のホームディレクトリを管理します。ファイルサーバーへログインすることにより、各自のディスク情報を得ることができます。

(1) ハードウェア構成

CPU 数 : 4

総主記憶容量 : 64 GB (16GB × 4)

- a. ホスト名  
serv.imr.edu
- (2) ソフトウェア構成
  - a. オペレーティングシステム  
AIX 7L

#### 4. ストレージシステム : HITACHI AMS(Adaptable Modular Storage) 2500

- (1) ハードウェア構成
    - a. 総ディスク容量 : 1.4 PB (物理容量)
      - SAS ディスク : 300TB
      - SATA ディスク : 1.1PB
- 新規申請ユーザーのディスククォータは、初期値が 500GB です。

### III. 利用方法

4月16日(月)からの利用方法は、以下のようになります。

- (1) ログイン
 

新スパコンシステムの各サーバーへのログインは従来どおり ssh で接続します。

所内のマシンからログインする場合は ssh のパスワード認証となります。金研外のマシンからログインする際は、従来と同様に一旦 SSH リレーサーバー(cms-ssh.imr.edu)に鍵認証でログインしてから、内部の計算サーバー等に ssh のパスワード認証でログインすることになります。

スーパーコンピュータのフロントエンドノード(super1.imr.edu、super2.imr.edu)、ファイルサーバー(serv.imr.edu)およびSSHリレーサーバー(cms-ssh.imr.edu)については、ssh 接続のためのホスト鍵はそのまま移行されます。
- (2) ジョブの実行
 

新スパコンシステムのジョブ管理システムは、すべて LL(LoadLeveler)になります。ジョブの実行は、統一的なコマンドで行なっていましたが、それを踏襲します。

表1がジョブ実行時の操作コマンドです。新たに、自分の実行中のジョブのプロセスを表示する機能、また、従来の statj コマンドに全ユーザーのジョブの状況を表示する機能を追加します。

詳しい使い方およびキュー構成については、追って公開予定の Web マニュアルを参照ください。

表1. ジョブ実行の主なコマンド

機能	コマンド
ジョブの投入	submit
ジョブの状況確認 全ユーザーの待ちジョブの状況表示	statj
実行中のプロセス表示	jobps
ジョブの取り消し	jobdel
キューの情報表示	qinfo

## 【 実行例 】

- ・ VASP ジョブをスーパーコンピュータで実行する。  
`submit EB vasp`
- ・ Gaussian ジョブをスーパーコンピュータで実行する。入力ファイル名は H2O.com。  
`submit SC g09 H2O.com`
- ・ ATK ジョブをアプリケーションサーバーで実行する。  
`submit ASB atk -exec script.sh`

## IV. アプリケーション一覧

以下に新スーパーコンピューティングシステムで導入されるアプリケーションを紹介します。それぞれの使用法については、追って公開予定の Web マニュアルを参照ください。

- ・ Gaussian 社製量子力学計算シミュレーションプログラム Gaussian 09 および GaussView 5
- ・ Scientific Computing & Modeling 社製密度汎関数シミュレーションプログラム ADF および ADF-GUI
- ・ QuantumWise 社製ナノデバイスシミュレーションプログラム ATK および VNL
- ・ Materials Design 社製材料設計支援統合プログラム MedeA
- ・ Accelrys 社製マテリアルサイエンスシミュレーションプログラム Materials Studio
- ・ ANSYS 社製有限要素法プログラム ANSYS Multiphysics
- ・ CHAM 社製流体解析プログラム PHOENICS
- ・ Advanced Visual Systems 社製可視化プログラム AVS/Express Developer
- ・ Wolfram Research 社製数式処理プログラム Mathematica
- ・ MathWorks 社製数値解析プログラム MATLAB
- ・ Q-CHEM 社製非経験的量子化学シミュレーションプログラム Q-CHEM
- ・ 全電子混合基底法第一原理シミュレーションプログラム TOMBO
- ・ 第一原理分子動力学シミュレーションプログラム VASP
- ・ 第一原理電子状態シミュレーションプログラム WIEN2k

その他

SIESTA、ABINIT、CPMD、Quantum Espresso、CP2K、GAMESS

## V. 変更点

### (1) ログイン環境

今まではログインシェルに「tcsh」を使用していましたが、新スパコンシステムでは「bash」に変更します。bash は GNU システム用の標準シェルとして開発されたもので、Bourne シェルとの互換性を持つ一つの B シェル系のシェルです。bash 以外の tcsh、csh などでも使用可能です。旧システムでは、ホームディレクトリ直下に .login、.cshrc というファイルがあり、スパコンシステム実行のための環境を設定していましたが、新システムでは、.bashrc、.bash\_profile により設定されます。.cshrc に設定していましたがアプリケーション実行のための環境は、アプリケーション実行の際に設定するよう変更します。

### (2) プロキシサーバー

新スパコンシステムネットワークではインターネット接続の際のプロキシサービスは提供しません。所内ネットワークの Web プロキシをご利用ください。自動プロキシ設定スクリプトに以下を記述します。



<http://proxy.imr.tohoku.ac.jp/proxy.pac>

- (3) SSL-VPNの使用方法が変更になります。  
追って公開予定の Web マニュアルを参照ください。

## VI. 注意事項

- (1) 新スパコンシステムではすべてのマシンが入れ替えとなります。バイナリーファイルは機種依存性がありますので、旧システムで作成したバイナリーファイルについては、新スパコンシステムでは基本的に利用できないとお考えください。
- (2) 各自においてコンパイルされた実行モジュールはバイナリーファイルです。新スパコンシステムで利用するには再コンパイルが必要となります。コンパイル方法は機種により異なります。追って公開予定の Web マニュアルに記載される各マシンについてのコンパイル方法を参照ください。
- (3) 旧システムで、各自にて .login、.cshrc ファイルをカスタマイズしていた場合は、新スパコンシステムの、.bashrc、.bash\_profile を変更していただく必要があります。新システムでもしばらくの間、.cshrc で対処したい場合については、追ってその方法をお知らせします。旧システムで、.bashrc、.bash\_profile を各自のホームディレクトリ以下に持っていた方は、バックアップをホームディレクトリに作成した上で、センター標準の .bashrc、.bash\_profile に置き換えられます。
- (4) 旧システムのホームディレクトリにあったデータは、3月14日(水)17時時点のものが、新スパコンシステムに移行されます。ホームディレクトリ以外のデータは移行されません。
- (5) 以下のネットワークサーバーは従来と同じホスト名です。

SSH リレーサーバー : cms-ssh.imr.edu

NTP サーバー : cmsntp.imr.edu

メールサーバー(SMTP、POP、IMAP)は2011年12月1日に移行処置を行ないましたので、その設定に従ってください。

- (6) センターのホームページは以下です。

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

新スパコンシステムに関するマニュアル類は4月2日(月)以降、順次公開していきます。

## 平成 24 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。  
来年度、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。

### 定期保守予定日

2012 年(平成 24 年) 奇数月の最終週月曜日

5 月 28 日、7 月 30 日、9 月 24 日、11 月 26 日

2013 年(平成 25 年) 奇数月の最終週月曜日

1 月 28 日、3 月 25 日

定期保守日については、センターのホームページも参照ください。

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

## スーパーコンピューターSR11000 稼働終了

2007 年 3 月から 2012 年 3 月まで活躍したスーパーコンピューティングシステムのサービスが終了しました。  
2012 年 3 月 15 日から 4 月 15 日まで旧システム撤去と新システムの導入、構築を行います。



「スパコン」と記念撮影

## 平成 23 年度計算材料学センター見学者

期間:2011 年 4 月～2012 年 3 月

年 月 日	見 学 者 名	所 属
2011 年 4 月 4 日	テクニカルセンター初任者研修 2 名	東北大学金属材料研究所
2011 年 6 月 8 日	マテリアル・開発系プレゼミ 39 名	東北大学大学院工学研究科
2011 年 6 月 29 日	尾藤 三津雄氏 他 2 名	アルプス電気株式会社
2011 年 7 月 21 日	古賀 真氏 他 3 名	京セラミタジャパン株式会社
2011 年 8 月 19 日	沼倉 宏氏	大阪府立大学大学院工学研究科
2011 年 8 月 25 日	藤井 千弘氏	独立行政法人新エネルギー・産業 技術総合開発機構
2011 年 10 月 13 日	サイエンス・パートナーシップ・プロジェクト 1 年生 23 名	宮城県工業高等学校
2011 年 10 月 19 日	1 年生 5 名	仙台市立上杉山中学校
2011 年 10 月 31 日	萩田 克美氏	防衛大学校応用物理学科
2011 年 12 月 3 日	塗 溶氏	東北大学金属材料研究所
2011 年 12 月 3 日	陳 宇氏 他 13 名	Monash University
2011 年 12 月 14 日	津田 信哉氏	三洋電機株式会社
2012 年 2 月 10 日	崔 廷旭氏	LG 化学技術研究院
2012 年 2 月 27 日	中尾 光之氏 他 3 名	東北大学大学院情報科学研究科

見学者総数 104 名



■ マテリアル・開発系プレゼミ 39 名  
2011 年 6 月 8 日



■ サイエンス・パートナーシップ・プロジェクト 23 名  
2011 年 10 月 13 日

計算材料学センターだより No.16

2012年3月23日(金)発行

23<sup>rd</sup> Mar (Fri), 2012

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](mailto: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