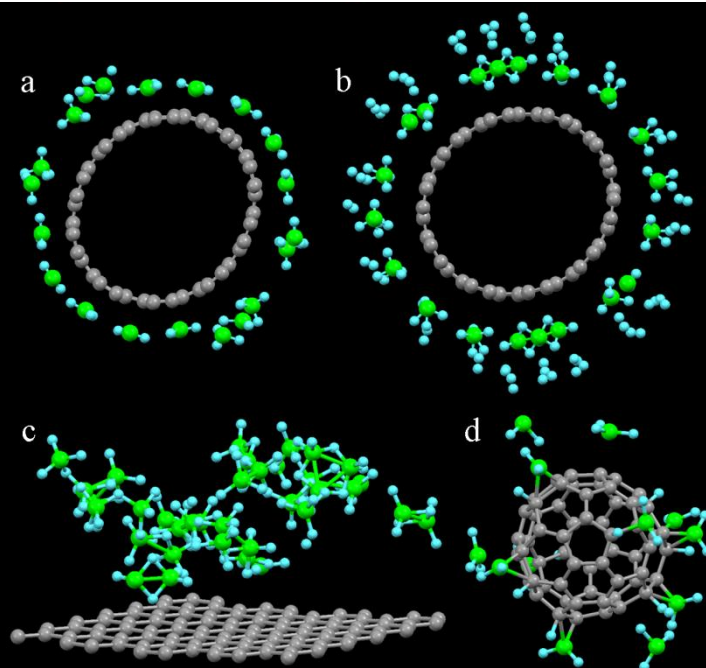


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・スーパーコンピュータSR16000 の特性を生かした実行方法について
- ・金属材料研究所第 123 回講演会で本センター職員が発表
- ・新任教員あいさつ
- ・新人職員あいさつ
- ・本センター職員が本間記念賞を受賞

CCMS
NEWS
17

■ ボラン分子により機能付加したカーボンナノ構造体の第一原理計算研究: 水素貯蔵能の解析

本研究では第一原理計算を用いて、ボラン分子により機能付加した大きな直径をもつ SWCNT (10, 10)、グラフェンシート、フラーレン(C_{60})の水素貯蔵能を評価した。図は各々 (a) SWCNT (10, 10)、(c) グラフェンシート、(d) フラーレンである。ボラン分子をドープした SWCNT (10, 10)は適切な吸着エネルギーを持ち、6.12wt%の貯蔵能を示した(図 b 参照)。一方、ボラン分子をドープしたグラフェンシート、フラーレンは適切な吸着エネルギーでの水素貯蔵は難しく、水素貯蔵材料に適さないことが明らかになった。グラフェンシートの平面構造はボラン分子による機能付加、水素貯蔵材料には不適である(図 c 参照)。一方、ボラン分子を吸着させたフラーレンでは、ボラン分子とフラーレン間の相互作用が強く、ボラン分子は大きく変形し、解離吸着している(図 d 参照)。さらに、水素分子と材料間には斥力が働き、水素貯蔵材料には適していない。ボラン分子とカーボンナノ構造体間の相互作用は、これらの系の C-C 結合の曲率に強く依存している。これらの研究から、適切な貯蔵材料を探索するのみならず、活性な表面状態をもつ最適なホスト材料の探索も高性能な水素貯蔵材料を設計する上で重要であることがわかった。

■ First principles investigation on carbon nanostructures functionalized with borane: An analysis on their hydrogen storage capacity

We have investigated the hydrogen storage capability of large diameter SWCNT (10, 10), graphene and C_{60} (Figs. a, c and d) functionalized with borane. The SWCNT (10, 10)- BH_3 is able to adsorb 6.12 wt.% of hydrogen with optimum binding energy (Fig. b). But, both graphene and C_{60} functionalized with borane failed to satisfy the criteria set for a hydrogen storage medium (HSM). The planar structure of graphene is not conducive for the functionalization with borane and hydrogen storage (Fig. c). On other hand, the interaction between BH_3 and C_{60} is such that the borane molecule is dissociatively absorbed (Fig. d). But, the interaction with hydrogen molecules is found to be repulsive and hence C_{60} - BH_3 is not eligible for hydrogen storage. The interaction between BH_3 and the carbon nanostructures strongly depends on the curvature of C-C bonds in these systems. From our study, we infer that not only the selection of suitable adsorbates but also the suitable host material with active interacting surface states will assist to design a good hydrogen storage material.

□ V. J. Surya, K. Iyakutti, V. Prasanna Venkatesh, H. Mizuseki, and Y. Kawazoe, *Physica E*, **43**, 1528–1534 (2011).

センター長あいさつ



計算材料学センター長
高梨 弘毅

本年 4 月より計算材料学センター長を拝命いたしました高梨です。どうぞよろしくお願い申し上げます。

計算機シミュレーションは、実験と理論に次ぐ第三の研究手段として、その重要性はますます高まっています。特に材料設計開発に関しては、計算機の性能向上と新しい計算手法の開発により、そのカバーする研究領域が基礎から実際に我々の生活の中で利用される実用材料へと発展してきています。このようなニーズに応えるべく、本センターには新しい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 が導入されました。このスーパーコンピューターは、300 TFLOPS の処理速度、42.2 TB のメモリー、1.4 PB のディスク容量を有し、今年 6 月にハンブルクで開催された International Supercomputing Conference (ISC' 12)によれば国内第 7 位、世界 70 位の性能を有しています。

スーパーコンピューターを取り巻く環境は、前システムを導入した 5 年前とは大きく変化し、よりいっそうの成果が求められるようになっていきます。スーパーコンピューター「京」の本格稼働を前にして、国内のスーパーコンピューター群を効率的に利用し、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現することを目指した High Performance Computing Infrastructure (HPCI) が構築されました。その戦略プログラム分野 2「新物質・エネルギー創成」の中で、本所（東北大学金属材料研究所）は、物理学の東京大学物性研究所、化学の分子科学研究所と並んで、材料科学分野の拠点と位置付けられています。コミュニティへの貢献のために、本所では計算材料科学研究拠点 (Computational Materials Research Initiative: CMRI) を設置し、活動に取り組んでいます。このような状況の中で、計算材料学センターの果たすべき役割はこれまで以上に重要になっているといえるでしょう。

本年 3 月には、計算材料学センターの責任部門教授として、センターの運営と発展に多大なるご尽力とご貢献をされた川添良幸教授が定年退職されました。一方で、昨年センターの専任教員ポストが認められ、本年 4 月から佐原亮二准教授が着任しました。ちょうど同じ時期に新しいスーパーコンピューターの導入や CMRI の設置という重要な出来事が起きたわけで、計算材料学センターはまさに一つの節目、激動期を迎えているといってもよいでしょう。このようなときに私はセンター長を拝命し、身が引き締まる思いであります。私自身は磁性材料の実験研究が専門であり、計算材料学やスーパーコンピューターに詳しいわけではありません。しかし、センターの職員の方々のご努力に支えられ、計算材料学の国内外拠点たるにふさわしいセンターの運営と環境整備に邁進する所存ですので、皆様方のご理解とご協力をお願い申し上げます。

スーパーコンピューターSR16000/M1 の特性を生かした実行方法について

平成 24 年 4 月 16 日(月)に運用を開始しました新スーパーコンピューターは、すでに紹介していますように、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。前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。

SR16000 は SR11000 よりも 1 ノード内の並列度が上がっており、より並列度の良いプログラムのコード作成や計算資源の効率の良い利用が求められています。プログラム全体の計算時間の中で並列化されていないルーチンの計算時間が、計算資源を利用できていない時間としてより大きく現れるようになり、この問題解決および回避が望まれます。この傾向は 8 ノード、32 ノード実行などの大規模計算ではさらに顕著です。メモリー内のデータ格納にも注意が必要です。SR11000 ではどのコアからもメモリーのアクセス速度は等価でしたが、SR16000 の 1 ノード内のメモリーはどのコアからも等価ということではなく、メモリーとそれを利用するコアの位置関係も、プログラム作成時、実行時に考慮する必要があります。本ドキュメントでは、お仕着せの実行方法だけではなく、個々に試行して、高速に実行できる環境をユーザー自身で見つけるために、指針となるいくつかの設定方法について説明します。

センターに導入された 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・チップ(32 コア)が搭載されています。図 1 に 1 ノードの概念図を示します。ノード内では 32 コアすべてがメモリーを共有し、直接アクセス可能です。メモリーは、通常は、128GB/4 プロセッサ・チップですが、大メモリー 256GB/4 プロセッサ・チップのノードも用意しており、ジョブ実行時にオプションを指定することで使用可能です。

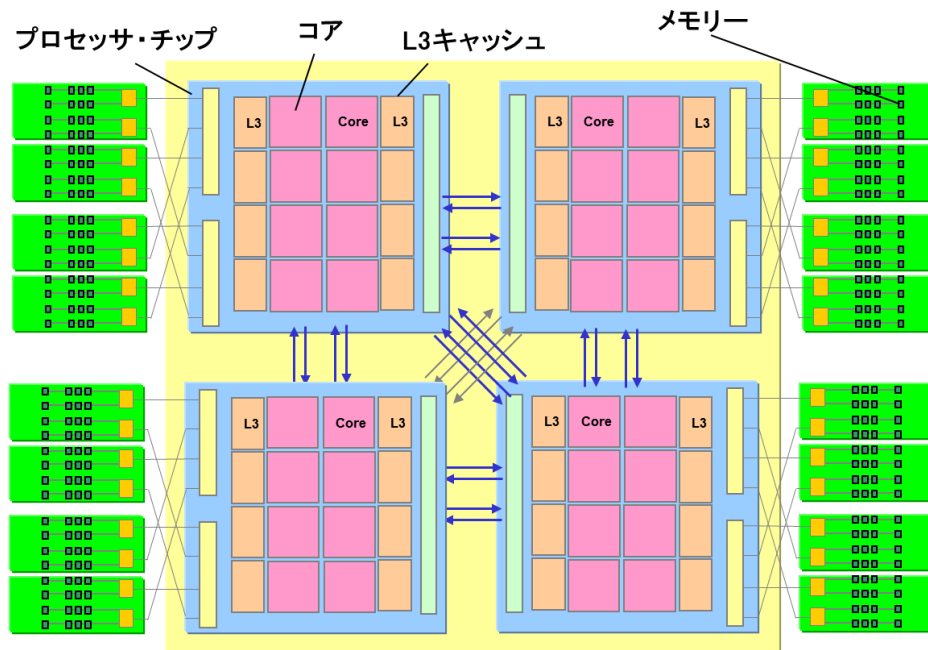


図1. 1ノードの概念図

SR16000 は、この 1 ノード単位で OS を起動し、論理的なノードとして動作します。

1. POWER7 の特徴

POWER7の特徴について説明します。

- (1) RISCプロセッサで、1プロセッサ・チップに8コアを搭載しています。
- (2) 32MBの大容量L3 キャッシュをプロセッサ・チップに内蔵しています。コアとL3キャッシュ間のスループットが大幅向上し、L3キャッシュレイテンシを削減しました。
- (3) SMT (Simultaneous Multi-Threading)を使用することで1コアを2コアとして利用することができます。これにより、1ノード64スレッドの並列実行ができます。スレッドとは、OS上でのプログラムの最小の実行単位をいいます。

2. SR16000のメモリアクセス

SR16000のメモリアクセスの特徴について説明します。

- (1) メモリーアーキテクチャにNUMA (Non-Uniform Memory Access)を採用しているための特徴ですが、コアからメモリーへのアクセスに遠近があります。ローカルメモリアクセスは高速にアクセスしますが、リモートメモリアクセスは低速になります。L2、L3キャッシュは超高速にアクセスします。
- (2) 初めにデータを参照もしくは格納したタイミングで、物理メモリーに領域を確保します (ファーストタッチ)。この際、システム既定値の設定 (MEMORY AFFINITY)により、スレッドのローカルメモリーにデータをアロケートします。
- (3) プロセッサ・チップ (8コア) 単位にメモリーインターリーブ。

メモリーインターリーブとは、主記憶装置とCPUとの間のデータ転送を高速化する方法の一つです。ある一つの配列を確保する場合、OSがメモリー管理する単位 (ページサイズをいう) ごとに、循環するように、それぞれのローカルメモリーに割り当てられます。

3. 理想的なメモリアクセスの実行環境設定

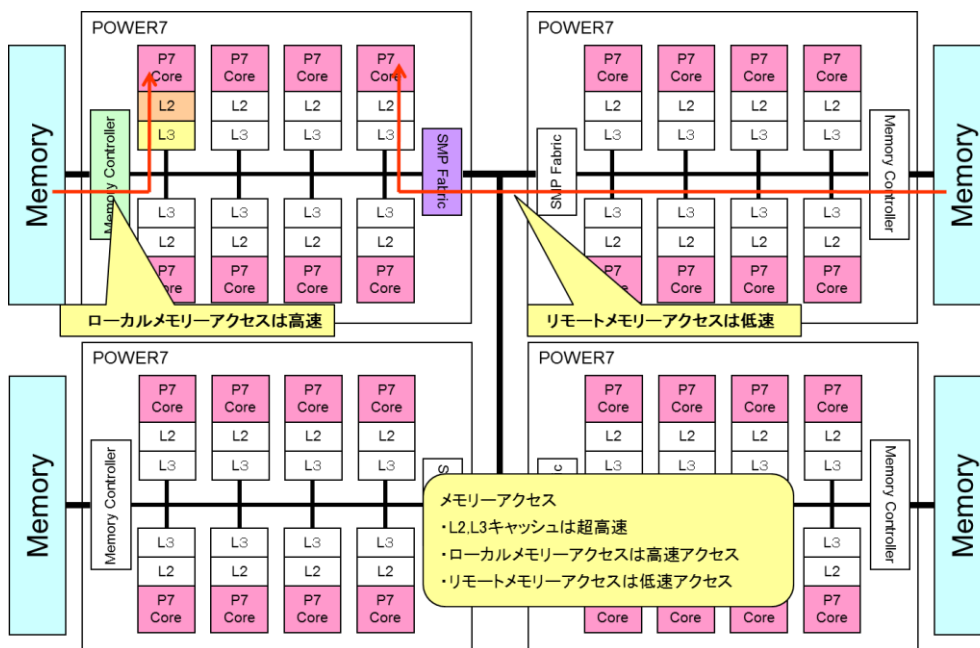


図2. メモリアクセス

ローカルメモリーにアクセスする方が高速ですので、できるだけローカルメモリーにすべての配列を確保するようにした方が良く、以下の環境変数で指定します。センターでは、システムの既定値として設定しています。

```
setenv MEMORY_AFFINITY MCM
```

- * スーパーコンピューターにsubmitコマンドでジョブを投入する場合はすでに設定されていますので、不要です。また、設定を解除したい場合は、submitコマンドの generalで実行し、以下を指定します。
unsetenv MEMORY_AFFINITY

4. ファーストタッチのためのソースプログラム変更

プログラムが使用するメモリー領域は、初めに割り当てられた場所(DIMM: Dual Inline Memory Module)に確保され、メモリーを開放(deallocate)するまで、そのアドレスは同じになります。ここでは説明を省略しますので、センターのWebサイトを参照ください。

5. スレッドのCPUへの割り当て

スレッドの割り当てルールについて説明します。

(1) スレッドとプロセス

ジョブは複数のプロセスを起動することができます。また、プロセスは複数のスレッドを起動することができます。並列プログラムで考えると、MPIはプロセス並列にあたり、SMPはスレッド並列にあたります。プロセス間通信の特長はノード間で通信ができることです。スレッドはノードを跨いで起動することはできません。

(2) スレッドの割り当てルール

- ・ 空いているコアにスレッドを割り当てます。
- ・ 割り込み処理があるとスレッドは、別のコアに引っ越しをします。
→ スレッドは放浪する

6. スレッド固定の設定

「スレッドが放浪する」と、メモリーへのアクセスがリモートアクセスになりますので、スレッドを固定(バインド)します。それに加え、メモリーをローカルに確保します。図3は、スレッドを最初から最後まで固定し、メモリーアクセスをローカルに固定していることを示しています。コアに記載の番号は論理コア番号で、同じ色のメモリーを確保しようとしています。

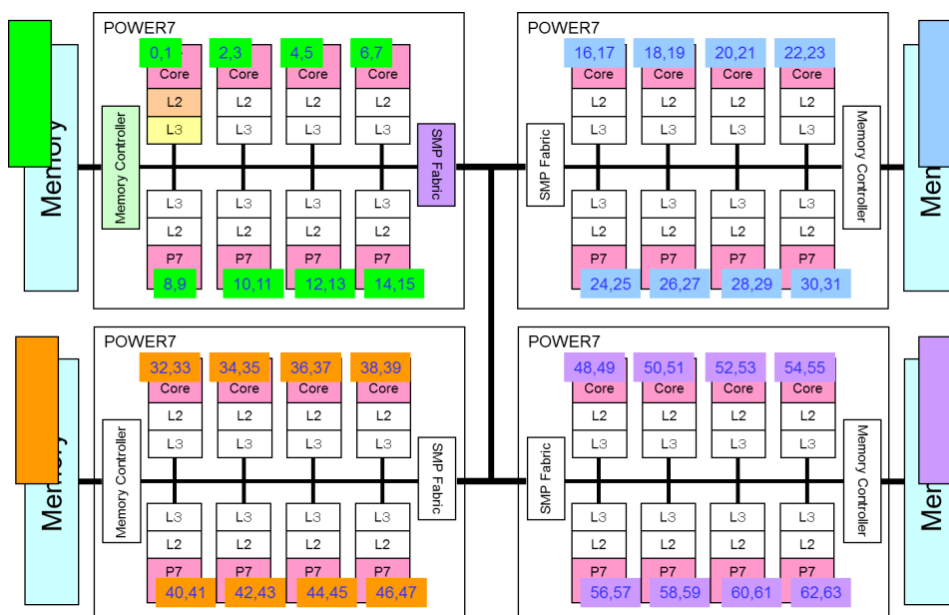


図3. スレッドとメモリーの固定

これにより、メモリアクセスの高速化、ジョブのスループット向上が図れます。

スレッド並列ジョブにおいて、スレッドを固定的に割り当てるための環境変数の指定は、以下です。

- | | |
|-------------------------------|--------------------------------------|
| setenv HF_PRUNST_THREADNUM 32 | SMP 並列数を指定する |
| setenv HF_PRUNST_BIND 1 | スレッドを固定する(デフォルトは 0 で、非固定) |
| setenv HF_BINDPROC_NUM 0 | 固定する際のスタートの論理コア番号を指定する
(デフォルトは 0) |
| setenv HF_BINDPROC_STRIDE 2 | 固定する際のスレッドのストライド幅を指定する
(デフォルトは 1) |
| setenv OMP_NUM_THREADS 32 | 32 スレッド実行時の指定 (OpenMP 利用時) |

固定する際のスレッドのストライド幅について:

計算材料学センターのシステムは、デフォルトで、SMT 機能を使用する設定にしていますので、32 コアしか使用しない場合は、ストライド幅を 2 に指定し、1 とびに論理コアを割り当てます。これは、SMT 機能を OFF にするのと同じです。1 コアあたり 1 スレッドが保証されますので、1 論理コアあたりのキャッシュサイズの増加が望めます。メインメモリーからキャッシュまでの物理結線の転送量が、SMT 機能を ON にした場合より増加しますので、メモリー負荷の高いプログラムでは、高速化される可能性があります。

7. その他

すでにチューニングし実行モジュールが提供されています VASP について、個々のデータの特性があるため、実行環境を変えて試してみる価値があります。これについては、センターの Web ページで今後、紹介していく予定です。

金属材料研究所第 123 回講演会で本センター職員が発表

平成 24 年 5 月 23 日(水)、24 日(木)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。

「新スーパーコンピューティングシステムの概要」

- 五十嵐伸昭、一関京子、野手竜之介、三浦重幸、佐藤和弘、八鍬友一*1、勝倉真*1、松本秀一*1、石川真二*2、三森悟毅*3、水関博志*4、川添良幸*4

*1 (株)日立東日本ソリューションズ

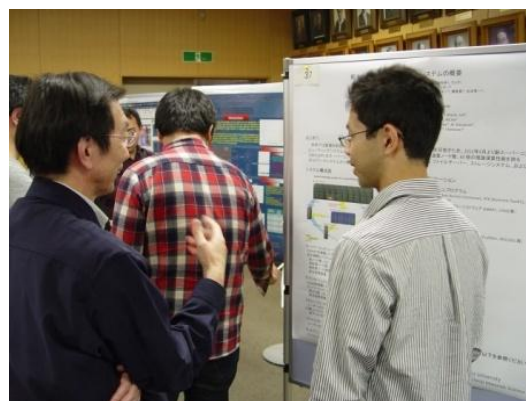
*2 (株)日立製作所

*3 (株)ラック

*4 計算材料学研究部門

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ため、平成 24 年 4 月より新スーパーコンピューティングの運用を開始しました。システムの概要やそれぞれの計算機の特徴、利用できるアプリケーションなどについて紹介しました。



技術専門職員 五十嵐 伸昭氏のポスター発表

新任教員あいさつ

本年 4 月 1 日付けで、計算材料学センターの准教授に着任いたしました。どうぞよろしくお願いいたします。私はこれまで主として、第一原理計算や統計力学的手法に基づくシミュレーション研究により、新規物質設計や特性計算、高精度計算による状態図の作成等の研究をおこなってきました。この数年は、計算材料学研究部門で長年にわたり開発され、本センターで利用支援している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 による材料開発にも携わってきました。

本センターは 20 年以上の歴史を有するセンターです。私は初代スーパーコンピューター HITAC S-3800/380 の時代からユーザーとしてお世話になってきました。今年 4 月 15 日からは、4 世代目となる新スーパーコンピューティングシステムのサービスが開始されました。本システムは、今年 6 月に ISC12 において発表された TOP500 で、世界 70 位の処理能力を有します。私も策定委員の一人として本システムの導入に携わりましたが、今後は、本システムを効率良く安定運用できるよう、頑張りたいと思います。

私自身、微力ではありますが、本センターと計算材料学の発展に少しでも貢献できるよう努力する所存です。どうぞ皆様のご協力、ご支援をよろしくお願い申し上げます。



准教授 佐原 亮二

新人職員あいさつ

4月より技術一般職員として計算材料学センターでお世話になっております大滝大河と申します。出身は秋田で、秋田の有名なスポーツの一つとしてバスケットボールがあります。私は中学、高校の頃に部活でバスケットボールをしていましたが、大学ではサークル等に入っていなかったため運動不足を感じていました。しかし、先日、所属の金属材料研究所のバスケットボール部の活動に参加しました。当日は久しぶりにバスケットボールができて楽しかったのですが、次の日から筋肉痛に悩まされてしまい、歩くことさえ大変でした。今後もバスケットボール部に参加して運動不足にならないように気を付けたいと思います。

また、バスケットボール等のサークルに入っていなかった大学では情報の勉強をしてきたので、スーパーコンピューティングシステムに関わる仕事に就けたことを嬉しく思っています。私は現在、計算材料学センターの職員として仕事ができるようになるためにアプリケーションとネットワークの勉強をしている毎日です。まだまだ基礎を勉強しているところですが、知らないことを勉強する大変さを感じながら少しずつ勉強を進めて知識を蓄え、実戦で勉強の成果を発揮できるように頑張りたいと思います。

社会人としても、計算材料学センター職員としても未熟な新人ですが、一人前となれるように努力したいと思います。最後になりますが、ご迷惑をおかけすることがあるかもしれませんが、計算材料学センターの職員として頑張っていきたいと思いますので、よろしくお願いします。



技術一般職員 大滝 大河

本センター職員が本間記念賞を受賞

本センターの一関京子技術専門員が、平成24年5月21日(月)、本所本多記念館3階視聴覚室において執り行われた平成24年度本間記念賞の授賞式において、本間記念賞(技術職員の部)を受賞しました。この賞は、本所の研究支援に多大な貢献をされた方々に贈られるものです。

一関京子氏は平成8年4月に本学大型計算機センター(現サイバーサイエンスセンター)より本所に異動してから一貫して、所内の情報基盤の整備、技術職員の情報技術の向上、計算材料学センターのスーパーコンピューターの利用促進および利用環境の整備に努めてきました。その間、NAREGIグリッドミドルウェアを使用し、より完成度の高いグリッドコンピューティング環境における超大規模シミュレーション計算環境を実現する、本所が中心となって推進しているACCMS(アジア計算材料学コンソーシアム)に対し、本所のスーパーコンピューターSR11000を中心とした大規模なグリッド環境の利用支援を行うなど、精力的に本所における計算材料学分野の研究環境の整備に尽力したことが評価されました。



技術専門員 一関 京子

計算材料学センターだより No.17

2012年8月3日(金)発行

3rd Aug. (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



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