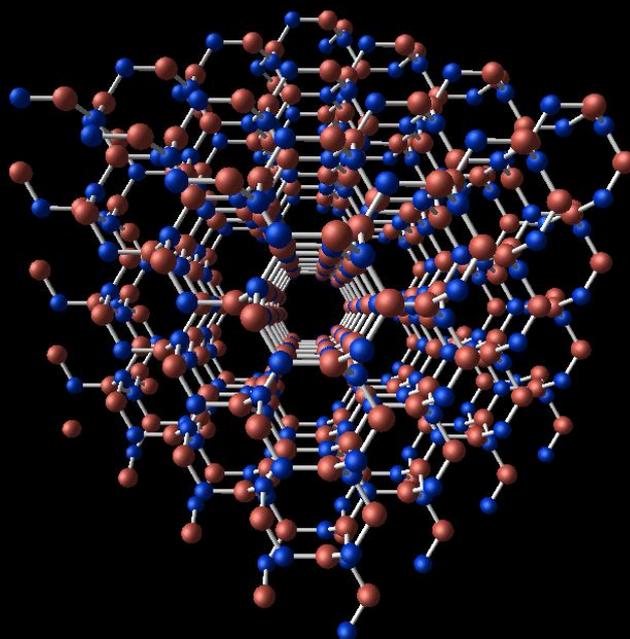


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ センター長あいさつ
- ・ VASP 実行のためのチューニング方法について
- ・ ホームディレクトリからシンボリックリンクした SAS 領域の利用について
- ・ アプリケーションのバージョンアップについて
- ・ 計算物質科学イニシアティブについて
- ・ 計算材料学センター新システム披露式
- ・ SC12 に本センター職員が参加

CCMS
NEWS
18

■ 炭素をドーピングした窒素系 K_4 構造: 新しい高エネルギー密度材料

本研究では、窒素系 K_4 構造の安定性を第一原理計算により評価しました。その結果、本系は炭素をドーピングさせることで安定になることが分かりました。特に、炭素を 50% 添加した窒素系 K_4 構造は準安定構造であり、実験で合成可能であることが明らかになりました。図中、赤と青で示した球は各々炭素、窒素原子です。本材料は、高エネルギー密度材料の候補の一つとして期待されます。

■ Carbon-doped K_4 nitrogen: A novel high energy density material

The structural stability of K_4 nitrogen was studied by performing first-principles calculations. Our results indicated that structural stability can be maintained by doping the K_4 nitrogen lattice with carbon. The 50% carbon-doped K_4 nitrogen is a metastable phase, and it may be synthesized experimentally. In the figure, red and blue balls are carbon and nitrogen atoms, respectively. The resulting material will be a promising candidate as a high energy density material.

□ B. Wen, S. Takami, Y. Kawazoe, and T. Adschiri, *Chemical Physics Letters*, **506(4-6)**, 175-178 (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 月に計算材料学センター長を拝命してから、はや半年が過ぎました。私自身は計算材料学やスーパーコンピューターを専門とする者ではないので、右も左も分からない状態でのスタートでしたが、佐原亮二准教授をはじめとしてセンターのスタッフの皆様方に全面的に支えられ、何とか職務をこなしてきております。

私のセンター長就任と同時にスーパーコンピューティングシステムが更新され、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する新システムは、順調に稼働しています。7 月 23 日(月)には、本所 2 号館講堂にて披露式を開催し、里見進教授(東北大学総長)や平尾公彦氏(独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 機構長)にもご臨席を賜り、ご祝辞をいただくことが出来ました。ここに関係各位に深く感謝いたします。

計算材料学センターだより(Vol.17)のあいさつでも申し上げましたが、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全国組織 High Performance Computing Infrastructure (HPCI) が構築され、本所は「次世代スーパーコンピューター戦略プログラム」分野 2(新物質・エネルギー創成)のもとで、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所とともに構成する「計算物質科学イニシアティブ (CMSI: Computational Materials Science Initiative)」(以下、「CMSI」という)の拠点と位置付けられています。これにともない、本センターでは従来の共同利用に加え、CMSI の戦略機関活動への協力の一環として、スーパーコンピューターの CPU 資源の 20%までを CMSI 研究課題の推進に利用できる「CMSI 利用枠」を新たに設置し、本年 11 月末から運用を開始いたしました。

ところで、11 月 10 日(土)~16 日(金)に Salt Palace Convention Center(米国 ユタ州)で行われた The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12)では、世界のスーパーコンピューターのトップ 500 ランキングの最新データが発表され、「京」は前回の 2 位から 3 位に、本所のスーパーコンピューターは前回の 70 位から 100 位にランクダウンしました。スーパーコンピューターの性能に対する国際競争のスピードに驚いております。現在のシステムが「旬」のうちに、ユーザーの皆様方に優れた成果を出していただけるよう、良い運用を心がけていきたいと思っておりますので、これまで同様、ご指導ご鞭撻のほど、よろしくお願い申し上げます。

VASP 実行のためのチューニング方法について

計算材料学センターだより(Vol.17)では、HITACHI スーパーテクニカルサーバ SR16000 モデルM1(以下、「SR16000」という)の特性を生かした実行方法について紹介しました。今回は、SR16000 において利用率の高いアプリケーションの1つである VASP(Vienna *Ab-initio* Simulation Package)について紹介します。

すでに本センターでチューニングした実行モジュールが提供されている VASP は個々のデータに特性があるため、実行環境、入力データを変えて試してみる価値があります。本センターのキュー設定で概ね良い実行環境は提供できていますが、以下に述べるように入力データの違いによって実行性能に差異があるかもしれませんので、一度ご確認ください。

NPAR は、VASP の入力ファイルである INCAR で定義する k 点並列化に関するパラメーターです。例として表 1 に、NPAR の値の違いによる VASP の実行時間の比較を示します。原子数が 348 個(Si 298 個、H 49 個、Ag 1 個)で、使用メモリーが 10GB 程度であるジョブについて、NPAR の値を 1 から 32 まで順次変化させ、1 ノードを用いて実行した場合の各々の実行時間(単位:秒)の結果です。ジョブ投入法は

```
$ submit EB vasp
```

です。

表 1. NPAR の値の違いによる VASP の実行時間の比較

NPAR	実行時間
1	632 秒
4	532 秒
8	541 秒
16	533 秒
32	528 秒

NPAR=32 の場合に最速であることが分かりました。NPAR=1 と 32 の場合では実行時間に 2 割程度の差がでました。

なお、過去に終了したジョブの情報を表示するため、本センターでは histj コマンドを提供しています。例えば、上記のうち(1) NPAR=1 (*jobid*= htcf04c01p08.68971.0)および(2) NPAR=32 (*jobid*= htcf04c01p08.68806.0)の詳細情報を表示するためには

```
$ histj -l jobid
```

とします。すると図 1 に示すように、ジョブ ID(JOB ID)、実行時間(ETIME)、使用 CPU 時間(CPU)、使用メモリー量(MEM)、理論演算性能比(FLOPS)*、実行開始時刻(STARTED TIME)、終了時刻(ENDED TIME)などの情報が表示されます。

* FLOPS(Floating-point Operations Per Second)は、1 秒あたりの浮動小数点演算量です。スーパーコンピューターでは、(ジョブの FLOPS)/(ノードの最大 FLOPS(980.48GFLOPS) × 実行ノード数)のように理論演算性能値に対する割合で示しており、CPU を有効活用している指標として利用できます。

```

$ histj -l htcf04c01p08.68971.0
| JOB ID | JOB NAME | | | | |
| QUEUE | ETIME (H) | CPU (H) | MEM (GB) | FLOPS (%) | NODES/SLOTS |
| SUBMITTED TIME | STARTED TIME | ENDED TIME |
| submit COMMAND |
| WORK DIR |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| htcf04c01p08.68971.0 | htcf04c01p08.68971 |
| EB | 0.18 | 4.24 | 10.11 | 15.84% | 1 |
| 2012/07/03 22:43:14 | 2012/07/04 00:54:04 | 2012/07/04 01:04:36 |
| submit EB vasp |
| /home/username/dir1 |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|

$ histj -l htcf04c01p08.69410.0
| JOB ID | JOB NAME | | | | |
| QUEUE | ETIME (H) | CPU (H) | MEM (GB) | FLOPS (%) | NODES/SLOTS |
| SUBMITTED TIME | STARTED TIME | ENDED TIME |
| submit COMMAND |
| WORK DIR |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| htcf04c01p08.69410.0 | htcf04c01p08.69410 |
| EB | 0.15 | 3.94 | N/A | 19.90% | 1 |
| 2012/07/04 13:47:59 | 2012/07/04 14:22:41 | 2012/07/04 14:31:29 |
| submit EB vasp |
| /home/username/dir2 |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|

```

図 1. histj コマンドによる終了ジョブの情報

FLOPS も NPAR=32 の場合は NPAR=1 に比べて 2 割程度大きいことが分かります。

このように、histj コマンドを用いて得られるこれらの情報を比較することで、最適な入力パラメーターの検討を行うことが可能ですので、ぜひ試してみてください。

histj コマンドの詳細については、以下を参照ください。

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/detail_histj.html

ホームディレクトリからシンボリックリンクした SAS 領域の利用について

新スーパーコンピューティングシステムでは、ユーザーのホームディレクトリは、ストレージシステムの SATA 領域に作成しています。そのため、ランダムライトアクセスが多発し、ディスクドライブにドライブ性能以上の負荷がかかった場合、/home 領域へのリード・ライト要求が遅延する、という問題が発生しています。

この問題を回避し、できるだけ高速アクセス可能な領域を提供するため、11 月末の定期メンテナンス時に、ホームディレクトリに SAS 領域へのシンボリックリンクを作成しました(以下、「SAS ホーム」という)ので、ぜひご利用ください。

/home/username/sassuper:

スーパーコンピューターの SAS 領域にシンボリックリンクしています。

/home/username/sasapp:

アプリケーションサーバーの SAS 領域にシンボリックリンクしています。

注意) スーパーコンピューター、アプリケーションサーバーのそれぞれの領域に確保していますので、スーパーコンピューターから/home/username/sasapp にはアクセスできません。同様にアプリケーションサーバーから/home/username/sassuper にはアクセスできません。

表 1 に、SAS ホームとホームディレクトリでのテストジョブ実行時間と理論演算性能比の比較を示します。VASP4.6 を用いたスーパーコンピューターでのテスト計算の結果です。

表 1. SAS ホームとホームディレクトリでのテストジョブ実行時間と理論演算性能比の比較

	実行時間	理論演算性能比
SAS ホーム	2.96 時間	19.98 %
ホームディレクトリ	3.60 時間	16.45 %

約 2GB の CHGCAR ファイルを用いてリスタートした場合、SAS ホームとホームディレクトリで実行した場合に、上記のように SAS ホームの方がホームディレクトリよりも 2 割ほど速くなりました。このように、SAS ホームを用いると、ジョブ実行速度の向上が見込めますので、できるだけ SAS ホームのご利用をお願いいたします。

アプリケーションのバージョンアップについて

1. 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 を 12.2.2 にバージョンアップしました。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 12.2.2 では主に次のような機能の追加、拡張および変更がなされました。

- ・ Electron Localization Function が計算可能
- ・ NEB 法における反応経路構造発生法として、Halgren-Lipscomb 法が導入
- ・ 分子動力学法の機能が改善
- ・ Fire Optimization 法の実装
- ・ 光学特性の計算が並列化され、メモリー使用量が減少
- ・ デフォルトの default tolerance 値が $5e-4$ から $1e-4$ に、History Step 値が 10 から 20 に変更
- ・ デフォルトの透過係数の計算手法が KrylovSelfEnergy 法から DirectSelfEnergy 法に変更

VNL 12.2.2 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。

- ・ 新規ビルダーツールの実装
- ・ 電流密度が可視化可能
- ・ さまざまなファイル形式のインポート・エクスポート機能の強化
- ・ グラフィックの描画が大幅に改善

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_atk.html

Official web site:

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

2. Quantum Espresso

擬ポテンシャルファイルと平面波基底を用いた密度汎関数法シミュレーションプログラムである Quantum Espresso を 5.0.1 にバージョンアップしました。

Quantum Espresso 5.0.1 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。

- ・ 新規汎関数の追加
- ・ フル DFT+U 法の実装
- ・ 電子-フォノン相互作用係数の計算方法の追加

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/usage_quantum.espresso.html

Official web site:

<http://www.quantum-espresso.org/>

3. VASP

擬ポテンシャルファイルと平面波基底を用いた第一原理分子動力学シミュレーションプログラムである VASP のバージョン 5.3.2 をインストールしました。

VASP 5.3.2 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。

- ・ ACFTD、MP2、HF/hybrid クラスタ計算における多重極補正
- ・ k 点並列化
- ・ 定圧分子動力学法が利用可能
- ・ RMM-DIIS 法で TPSS、revTPSS 汎関数が利用可能
- ・ ハイパーファインパラメーター計算の実装

実行方法:

http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/usage_vasp5.2.html

Official web site:

<http://www.vasp.at/>

計算物質科学イニシアティブについて

本所が東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所とともに構成する「計算物質科学イニシアティブ (CMSI)」が「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」分野 2 (新物質・エネルギー創成) の戦略機関に選定されました。これにともない、本センターでは従来の共同利用に加え、CMSI の戦略機関活動への協力の一環として、本センターのスーパーコンピュータ SR16000 の CPU 資源の 20% までを CMSI 研究課題の推進に利用できる「CMSI 利用枠」を新たに設置いたしました。

本センターでは、新システムの構築段階からキュー構成、使用したノード時間積の集計システムなど準備を開始してきました。平成 24 年度の利用枠は 8 月上旬から 9 月 14 日 (金) まで公募申請され、CMSI スパコン連携小委員会にて、10 件 15 名の課題が採択されました。今後は、より一層幅広いユーザーの要望に応えるべく、サポート体制を充実させていきます。

CMSI 枠 (東北大学・金属材料研究所) については、以下を参照ください。

<http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/~cmsiwaku/>

CMSI 枠・基本操作については、以下を参照ください。

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

計算材料学センター新システム披露式

平成 24 年 7 月 23 日(月)に、計算材料学センター新システム披露式が開催されました。本所 2 号館講堂で行われた披露式では、新家光雄教授(本所所長)の式辞に続き、里見進教授(東北大学総長)と、平尾公彦氏(独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 機構長)から祝辞を賜りました。次に、新家光雄教授から中島純三氏(株式会社日立製作所 代表執行役 執行役副社長)へ、感謝状が贈呈されました。最後に、新システム紹介を行いました。披露式終了後、本センターにおいて新システム披露、および 3D アニメーションによる研究成果の紹介等を行いました。披露式出席者は 60 名以上でした。なお、当日の披露式の模様は、7 月 23 日(月)に N スタみやぎ (TBC 東北放送)、news every (MMT ミヤギテレビ) にて、7 月 25 日(水)に FNN スピーク (OXT 仙台放送) にて放送されました。



披露式の模様



新システム披露

SC12 に本センター職員が参加

2012 年 11 月 10 日(土)～16 日(金)に Salt Palace Convention Center(米国 ユタ州)で行われました標記カンファレンスに、責任部門の水関博志准教授と本センターの佐原亮二准教授が参加しました。

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・ネットワーク・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 366 のブース出展、10,000 名を越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。今回は本センターの紹介、スーパーコンピューターを使った研究成果、および本所独自開発の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 に関するパネルやプロジェクターによる展示を行いました。



SC12 での展示の様子

計算材料学センターだより No.18

2012年12月17日(月)発行

17th Dec (Mon), 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