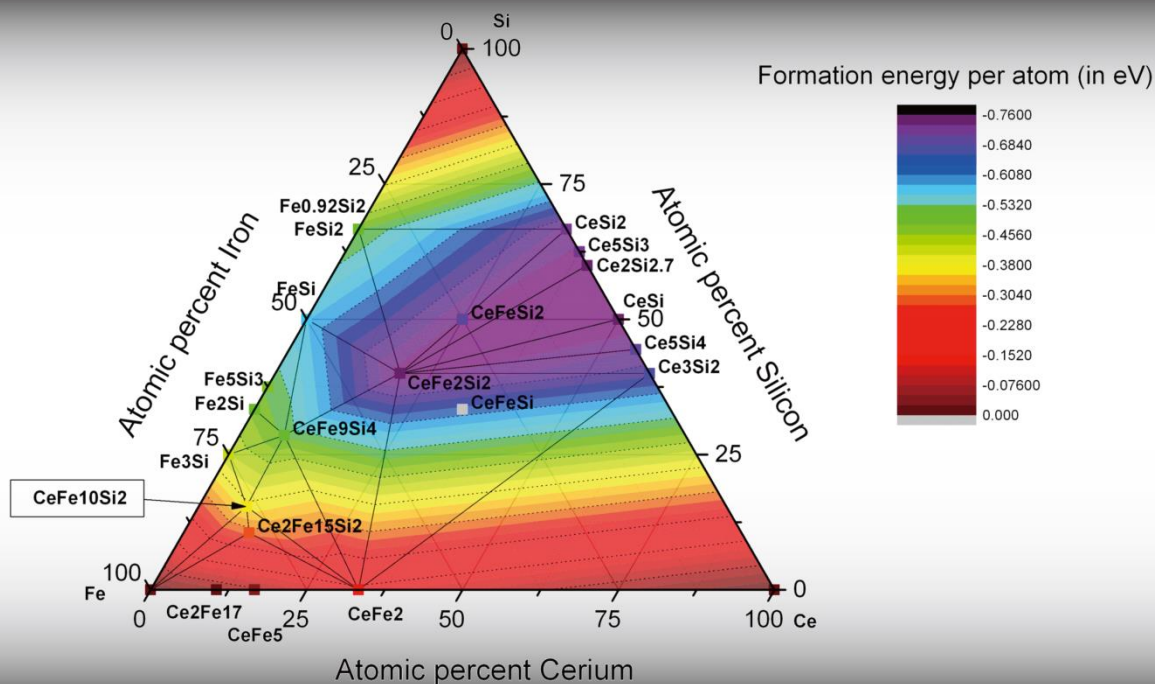


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・ アプリケーションのバージョンアップ
- ・ gprof の Call graph の可視化の紹介
- ・ CMSI 粹
- ・ 外国人ユーザーに関わるチェックリスト
- ・ 平成 25 年度の計算材料学センターの技術支援の実績
- ・ 平成 26 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 25 年度計算材料学センター見学者

CCMS
NEWS
21

表紙の図について

■ 強磁性相の熱力学的安定性

強磁性相に関するキュリー温度の様な磁気物性の次に研究すべき計算科学的課題は、対象とする相の熱力学的安定性の検討です。生成エネルギーの計算結果が簡単な目安を与えますが、競合する相との相対的な安定性を考慮できません。そこで本研究では、新しい強磁性相に対する3元系相図を理論的に算出しました。

表紙の図は、硬磁性材料の候補である $\text{CeFe}_{10}\text{Si}_2$ を含む Ce-Fe-Si 系に対する計算結果の一部です。我々の全エネルギー計算の結果は、 $\text{CeFe}_{10}\text{Si}_2$ 相の形成エネルギーが下に凸となっており、安定相であることを示しています。

■ Thermodynamic Stability of Ferromagnetic Phases

For computational search of ferromagnetic phases next to their magnetic properties like Curie temperature, the thermodynamic stability is necessary to estimate their existence. A first indication is given by the formation energy compared to the pure elements, but there, competing phases are neglected. Therefore we calculated ternary phase diagrams for new ferromagnetic phases.

Cover figure shows the result from our calculations for the Ce-Fe-Si system, including the hard magnetic candidate $\text{CeFe}_{10}\text{Si}_2$. In the framework of our approximated total energies, the proposed phase is part of the convex hull of the ternary system and in this way also stable.

Nedko Drebov, Alberto Martinez-Limia, Lothar Kunz, Adrien Gola, Takashi Shigematsu, Thomas Eckl, Peter Gumbsch and Christian Elsässer, *New J. Phys.* **15**, 125023(2013).

アプリケーションのバージョンアップ

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 13.8.1 にバージョンアップしました。

ATK-DFT 13.8.1 では主に次のような機能の追加、拡張がなされました。

- ・フォノンの計算が導入され、Seebeck 係数、ZT の計算など熱電特性の計算が可能
- ・ NonCollinear Spin の導入
- ・ 平面波コード ABINIT が統合
- ・ Van der Waals DFT の導入
- ・ 分子動力学コードが改善

VNL 13.8.1 では主に次のような機能の追加、拡張がなされました。

- ・ 新規の Windows Interface が導入され、プロジェクトによる計算結果ファイル管理が可能
- ・ 解析機能の強化

実行方法:

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

Official web site:

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

2. Materials Studio

低分子化合物、有機・無機材料、結晶、ポリマー、金属、半導体、触媒など様々な分野でモデルの構築から各種シミュレーションの実行、シミュレーションデータの解析まで行うことができるソフトウェア Materials Studio を 7.0 SP1 にバージョンアップしました。

Materials Studio 7.0 SP1 では主に次のような機能の追加、拡張がなされました。

- ・ CASTEP の TS Confirmation タスクを使用して反応経路の把握を支援
- ・ CASTEP を使用して分子の励起エネルギーを計算し、励起状態の構造を最適化可能
- ・ DMol³ でスケーリング機能が強化
- ・ DMol³ を使用して弾性定数および力学的特性が計算可能

実行方法:

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

Official web site:

<http://accelrys.co.jp/>

gprof の Call graph の可視化の紹介

アプリケーションサーバーで Linux のプロファイラ gprof の出力結果の Call graph 部分を可視化し画像ファイルとして保存する方法を紹介します。

1. プロファイルを取得するプログラムのコンパイル

gprof でプロファイルを取得するため、対象のプログラムに `-pg` オプションを付けてコンパイルします。このようにして作成したプログラムを実行すると `gmon.out` というファイルが生成されます。

```
$ gfortran test.f -pg
$ app_launcher./a.out
$ ls
a.out      gmon.out  test.f
```

2. プロファイルの取得

ここで、下記のコマンドを実行すると各関数の処理時間が全体のどれだけの割合になっているか、各関数がどの関数を呼び出しているかなどのプロファイルをテキスト形式で出力することができます。

```
$ gprof ./a.out ./gmon.out
```

3. プロファイルの可視化

可視化するには `gprof2dot.py` (<https://code.google.com/p/jrfonseca/wiki/Gprof2Dot>) という python スクリプトを利用します。前述のサイトからも入手できます。またアプリケーションサーバーから `wget` コマンドでダウンロードする場合には下記のコマンドを実行します。実行権限が必要なので `chmod` コマンドでパーミッションを変更します。

```
$ export http_proxy=http://proxy.imr.tohoku.ac.jp:8080/
$ wget http://gprof2dot.jrfonseca.googlecode.com/git/gprof2dot.py
$ chmod 755 gprof2dot.py
```

下記のコマンドを実行すると Call graph 部分が可視化された画像ファイルが生成されます。

```
$ gprof ./a.out | ./gprof2dot.py | dot -Tpng -o test_graph.png
```

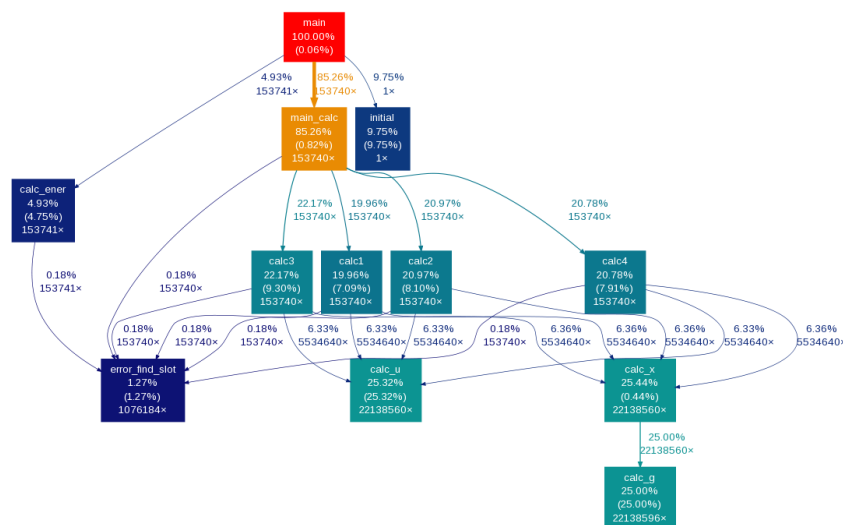


図 1. 可視化した Call graph の例

CMSI 枠

本センターを利用するには3つの経路があります。一つ目は本所・研究部共同研究のスーパーコンピューター(以下スパコン)利用課題としての申請、二つ目は本センターの共同利用に申請、そして最後の三つ目がCMSI 枠というものです。前二者は本所の共同利用係を通じて申請を行い、それぞれの採択専門委員会での審査を経て採択/不採択の決定がなされます。これに対して、CMSI 枠とは、HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)戦略プログラム分野2に参画している3研究拠点、即ち、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、そして東北大学金属材料研究所のスパコンを一定限度、相互に共用するという制度に基づいています。戦略プログラム分野2とは、「新物質・エネルギー創成」を課題とし、物性科学、分子科学、材料科学の3つのコミュニティから成り立っていますが、この拠点の英語名Computational Materials Science Initiativeを略してCMSIと称しています。CMSI 枠では、上述の3つの研究所に設置しているスパコンを、それぞれの総(計算)資源量の20%まで共用に資することとしています。そして、CMSIの重点課題、特別支援課題などに参画している研究者に申請の門戸を開いていますが、基本的には各センターでスクリーニングを行い、CMSI スパコン連携小委員会の議を経て、CMSI 拠点代表者・部会代表者・統括責任者の承認を得て採択するという共通の手順をとっています。

CMSI 枠が始まったのは平成24年11月からですが、本センターにおける24年度の利用者(申請が認められて登録した人)は14名、25年度は28名でした。そして、本年度は4月上旬に採択者を決定しましたが、合計22名(共通の課題に複数のユーザーが属するケースがある為に、課題数では9課題)で、割り当てたノード時間積は487500、これは本センターの総ノード時間積の19.8%に相当します。また、平成26年度に本センターのスパコン利用の課題として採択したのは、研究部共同研究が7件、本センター共同利用が27件ですので、CMSI 枠の9課題も全課題数43件の約21%に相当します。

CMSI 枠でのアクセスはSR16000のみに限定しており、アプリケーションサーバーの利用は認めていませんが、共同研究や共同利用のユーザーとは異なり、独自に開発したプログラムを流す、いわば本格派のユーザーが多く、我々センター職員にとっても対応すべき範疇が広がることで新たな勉強の機会になっています。

CMSI 枠のような材料科学コミュニティの外にいる人達がユーザーになることのメリットは、単に計算機資源の有効利用という点のみにとどまるものではないと考えています。物性科学のコミュニティでは、スパコンの利用者が集まって成果を報告・発表する機会を設けており、このような発表会でのピアレビューがコミュニティの醸成に大きな役割を担っていると聞いたことがあります。これまで本センターでは年度末の報告書を個々に提出してもらい^(*注意)、これをまとめて発刊することで、一年間の業務の仕上げとしてきました。本センターのユーザー支援の側面はこのような業務を粛々とこなしていくことで達成されるものですが、一方において、本センターが全国共同利用機関に位置付けられており、また、HPCI コンソーシアムの一員としての責務も担っていることを考えると、計算材料科学のコミュニティの健全な育成に対して主導的な役割を果たしていく責任があるように思います。コミュニティの健全な発展のためには、ユーザーがどのようなスーパーコンピューティングを行っているのかを相互に知ることが大切であり、さらに、相互に評価しあうことが重要です。そして、このような相互に啓発する機会を設けることが私達のミッションの一つではないかと思えます。本センターが限定された予算と人員の中でどのようにかかるミッションに関わっていくべきか、何よりも、本センターをどのように位置づけるべきなのか、課題は数々あります。CMSI 枠という外部コミュニティを受け入れたことによって、運用のみならず、本センターの果たすべき役割についても多くのことを学び始めました。

(*注意)平成25年度から報告書は課題ごとに課題代表者にまとめて本センターに提出してもらうことになりました。よろしくご協力をお願いします。

外国人ユーザーに関わるチェックリスト

皆様もご存じのように、スパコンは安全保障輸出管理下に置かれています。そして、管理対象には、ハードのみならず、ソフトやマニュアルも含まれています。これまで本学では、スパコンの利用に際して輸出管理シートの提出等を求めてきたのですが、本部によりますと、この対応には部局ごとに温度差があり、また、提出された輸出管理シートの取り扱いについても例外規定適用の可否の確認や、使用技術に関する該非の確認などは十分な対応ができていなかったのが実態のようです。このようなことに鑑み、輸出管理上の手続きを遺漏なく進めるべく、本学安全保障輸出管理室より新たな手続きの制定の依頼がありました。

これを受けて、安全保障輸出管理室や本所研究協力係とも相談の上、利用申請の際に新たに Check-list の提出を求め(本センターホームページに利用申請書とともにアップロードされています)、申請者の国籍および在日滞在期間と所属機関の確認を行うこととなりました。Check-list に基づいて、場合によっては、安全保障輸出管理室から更なる資料の提供を求められる場合もありますが、多くの場合には、Check-list の提出のみでクリアできると考えています。本センターのユーザーには外国籍の方が多く、研究協力係とも相談の上、できるだけ煩雑な手続きを回避することができるような方策をとっています。ユーザーの皆様のご理解とご協力をお願いします。

平成 25 年度の計算材料学センターの技術支援の実績

本センターは、所内のみならず、国内外の研究機関に計算機資源の提供をしており、ユーザーに対しての技術支援を行っています。

平成 25 年度の技術支援内容と件数について、所内 12 研究室および所外 64 研究機関へ合計 424 件の支援を行いました(表 1)。

技術支援の内容

計算機資源の提供、スーパーコンピューティングシステム関連の利用支援、アプリケーション関連の利用支援、ネットワークの設定、リモートアクセス等の接続支援および大判プリンタの利用支援

表 1. 技術支援先の内訳と件数

技術支援先	支援先研究機関の数	件数
所内	12 研究室	150
学内	4 研究機関	63
国内の研究機関	27 研究機関	91
国外の研究機関	33 研究機関 (12ヶ国)	120
合計	76	424

平成 26 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。

今年度、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、片平キャンパスの計画停電の際にも停止する予定です。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

2014 年（平成 26 年）奇数月の最終週月曜日

5 月 26 日、7 月 28 日、9 月 29 日、11 月 25 日

2015 年（平成 27 年）奇数月の最終週月曜日

1 月 26 日、3 月 23 日

片平キャンパスの計画停電の予定

2014 年 8 月 9 日(土)7:30 から 8 月 10 日(日)18:00 まで

定期保守日については、本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/news/maintenanceyear.php>

平成 25 年度計算材料学センター見学者

期間:2013 年 4 月～2014 年 3 月

見学日	見学者	所属 / 会議など
2013 年 5 月 10 日	木村 好里氏	東京工業大学大学院総合理工学研究科
2013 年 5 月 20 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
2013 年 5 月 23 日	林 重成氏	北海道大学大学院工学研究院
2013 年 6 月 20 日	基礎ゼミ受講生 11 名	東北大学
2013 年 6 月 23 日	仙台市小学生 50 名	仙台市青葉少年少女発明クラブ
2013 年 8 月 28 日	三浦 誠司氏 他 5 名	北海道大学大学院工学研究院
2013 年 10 月 2 日	大野 宗一氏	北海道大学大学院工学研究院
2013 年 12 月 18 日	聖ウルスラ学院英智中学校 3 年生 16 名	聖ウルスラ学院英智中学校
2014 年 1 月 9 日	CMRI 国際シンポジウム出席者 12 名	計算材料科学研究拠点 (CMRI)
2014 年 3 月 7 日	Irina Stockem 氏 他 1 名	FH Bielefeld University of Applied Sciences

他 見学者総数 176 名



■ 仙台市青葉少年少女発明クラブ 50 名
2013 年 6 月 23 日



■ 聖ウルスラ学院英智中学校 3 年生 16 名
2013 年 12 月 18 日

計算材料学センターだより No.21

2014年5月21日(水)発行

21st May (Wed), 2014

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, 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