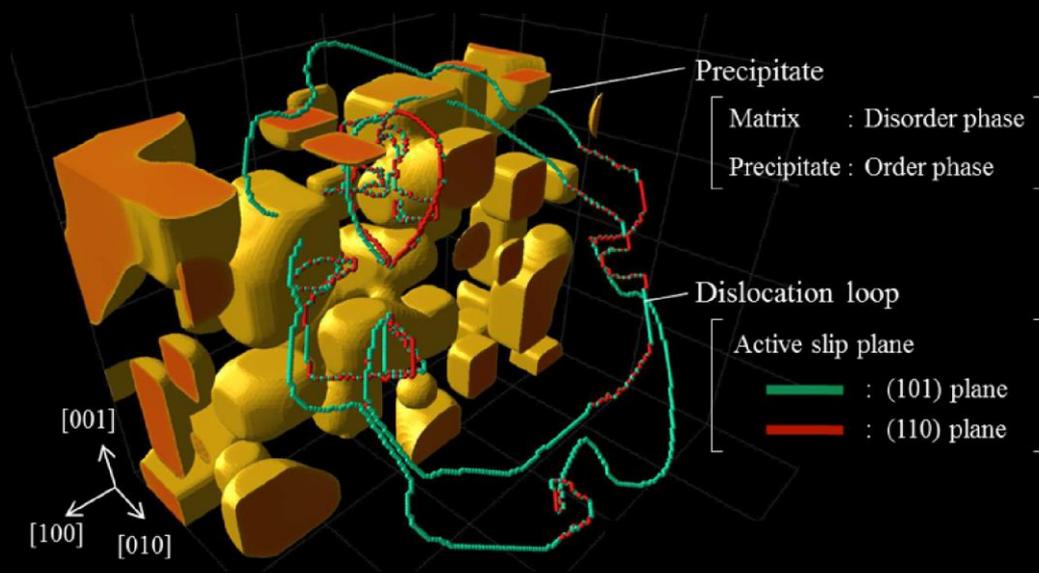


# 計算材料学センターだより



Calculated by Discrete Dislocation Dynamics combined with Phase Field Method

## CONTENTS

- ・ スーパーコンピューターの新しい運用スケジュール
- ・ コンパイラのバージョンアップ
- ・ アプリケーションのバージョンアップ
- ・ Web ページに FAQ を追加
- ・ SC14 に本センター技術職員が参加
- ・ Materials Studio 講習会を実施
- ・ 日立 IT ユーザ会で本センター技術職員の論文が受賞

CCMS  
NEWS  
22

## 表紙の図について

### ■ Discrete Dislocation Dynamics simulation および Phase Field Method のカップリングによる転位運動の解析

金属の変形は、多くの場合に“転位“と呼ばれる結晶欠陥の運動によって説明されます。そのため合金開発において、転位の運動をいかに制御するかは非常に重要な課題となっています。転位の運動を制御する方法の一つに材料中に”析出物“を生成させる方法があります。本研究では、析出物と転位の運動との相互作用の詳細を解析するために、析出物の生成過程の計算に長じた”Phase Field 法“と転位の運動の計算に優れた”Discrete Dislocation Dynamics simulation“を組み合わせ、析出物の生成過程および転位の運動の包括的な解析を行いました。表紙の図はその一例で、転位の運動が析出物によって妨げられている様子を示しています。

### ■ An analysis of dislocation behavior by Discrete Dislocation Dynamics simulation combined with Phase Field Method

Plastic deformation of an alloy can often be explained by the motion of “dislocations” which are defects often found in a crystal. Thus, the control of dislocation behavior is of great importance in developing a high strength alloys. One of effective techniques to prevent the dislocation motion is to introduce “precipitates” which interact with the dislocations to retard their movements. In the present research, in order to clarify the details of the interaction mechanisms, we combined “Phase Field Method” and “Discrete Dislocation Dynamics simulation” which have been recognized as the efficient tools to predict precipitation process and dislocation movements, respectively. By employing the coupled method, we attempted to visualize the dislocation behavior trapped by precipitates. The figure indicates the snapshot of dislocation interacting with precipitates.

## スーパーコンピューターの新しい運用スケジュール

既にご連絡しておりますが、電気料金の高騰に対処する為に、今年度の後期、下記の様に一定期間のスーパーコンピューターの稼働停止を含む新しい運用スケジュールを設定することとなりました。電気料金値上げ前の昨年 8 月までの年間の総電力使用量は 6,790,900kWh ですが、その後一年間の今年 8 月までの総電力使用量は 6,925,650kWh で、総電力使用量に殆ど変化はありません(正確には約 2%増)。従いまして、これに電気代の値上がり約 3.64 円/kWh(平均)をかけますと、一年間の電気代は約 2,500 万円の増加となります。さらに、大学運営資金(電子計算機経費)は毎年約 1,000 万円ずつの減額となっており、これまで通りの定常稼働を続けると、おおよそ 3,500 万円の赤字が見込まれます。今回の稼働停止はこれに対処するためのものでありますが、大学運営資金の定常的な減額は来年度も見込まれるために、今後さらに厳しい状況の中での運用が予想されます。

本センターは全国共同利用施設としての責務を担っており、採択課題の遂行に対して正常な稼働を行うことは最大の使命であります。今回の措置に対しては、8 月の片平地区の停電時および定期保守期間に続いて 2 週間程度の停止期間を設定し、この期間に冷却機器等に要する電気使用量を測定してスーパーコンピューターの実質的な電気使用量の算出を行い、さらにユーザーへのアンケートを実施、そして、今年度の採択件数とこれまでの CPU 利用率などを勘案し、新しい運用スケジュールの策定を行ったものですが、一定期間の部分稼働/全停止の設定は極めて残念なものでありユーザーの皆様方にお詫びするものであります。

来年度はさらに厳しい状況での運用が予想されますので、大きな抜本的措置が必須です。このことについては別途、対応策を示したいと思いますが、今一度、皆様方のご協力とご理解をお願いする次第です。

### 記

2014 年 10 月 1 日(水) ~ 11 月 16 日(日) : 通常運用

2014 年 11 月 17 日(月) ~ 11 月 18 日(火) : 定期保守

2014 年 11 月 18 日(火) ~ 2015 年 1 月 14 日(水) : スーパーコンピューターの部分稼働\*

2015 年 1 月 15 日(木) ~ : 定期保守(数日間にわたる可能性あり)

2015 年 1 月 16 日(金) ~ 3 月 15 日(日) : スーパーコンピューターの稼働停止

2015 年 3 月 6 日(金) ~ 3 月 8 日(日) : 本所の停電

2015 年 3 月 16 日(月) : 定期保守

2015 年 3 月 17 日(火) ~ : 通常運用

\* : 320 ノードのうち、192 ノードでの運用

また、スーパーコンピューターの停止期間中はスーパーコンピューターの SAS 領域のデータにもアクセスできませんので、御注意ください。なお、アプリケーションサーバーは定期保守や予告停電時を除いて、スーパーコンピューターの稼働停止期間中も通常運用いたしますが、上述の 2015 年 3 月 6 日(金)~3 月 8 日(日)の本所の停電時には稼働を停止します。

## コンパイラのバージョンアップ

### スーパーコンピューター

#### 1. 最適化 FORTRAN90

日立最適化 FORTRAN90 を 03-03 にバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- 64ビットアドレッシングモード時における要素並列化および OpenMP 機能による並列スレッドのスタックサイズの最大値を変更
- OpenMP 機能の COLLAPSE 指示節を追加
- OpenMP 機能に OMP\_PROC\_BIND、OMP\_STACKSIZE、OMP\_WAIT\_POLICY の環境変数を追加

### アプリケーションサーバー

#### 1. Intel Cluster Studio

Intel Cluster Studio を 2013 SP1 Update 1 へバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のようなパッケージが使用可能になりました。

- インテル C++ コンパイラ XE 14.0
- インテル Fortran コンパイラ XE 14.0
- インテル MKL 11.1
- インテル MPI library 4.1

#### 2. PGI Fortran, C/C++

PGI Fortran, C/C++を 14.4 にバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- MPICH 3.0.4 を新たにバンドル
- Pre-compiled 64-bit ScaLAPACK 2.0.2 library をバンドル
- -Mscalapack オプションを追加
- BLAS と LAPACK 3.4.2 に基づいた LAPACK のプリコンパイル版の提供

## アプリケーションのバージョンアップ

### スーパーコンピューター

#### 1. Gaussian09

量子化学計算ソフトウェア Gaussian09 を RevD.01 にバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- 新しい DFT 汎関数を追加
- Raman および ROA 強度を、力の定数や基準振動モード計算とは別に求めることが可能
- aug-cc-pV\*Z 基底関数を補強するオプションを追加

実行方法:

[http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/usage\\_gaussian09.html](http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/usage_gaussian09.html)

## アプリケーションサーバー

### 1. Gaussian09

量子化学計算ソフトウェア Gaussian09 を RevD.01 にバージョンアップしました。バージョンアップの内容については、スーパーコンピューターの項目をご覧ください。

実行方法:

[http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app\\_g09.html](http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_g09.html)

### 2. Q-CHEM

非経験的量子化学計算の統合パッケージ Q-CHEM をバージョン 4.2 にバージョンアップしました。今回のバージョンアップでは主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- NMR における間接スピン-スピンカップリング (J 結合) 計算が可能
- 励起状態計算のための制限開殻 (restricted open-shell) Kohn-Sham 法を追加
- CIS 励起状態間の微分結合 (derivative coupling) を追加
- HF および DFT における Fock 行列の交換項のための PARI-K アルゴリズムの実装

実行方法:

[http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app\\_q\\_chem.html](http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_q_chem.html)

※スーパーコンピューターではバージョンアップはされていません。

### 3. Amsterdam Density Functional Package (ADF)および ADF-GUI

密度汎関数法に基づく量子化学計算ソフトウェア ADF および ADF の GUI である ADF-GUI を 2014.04 にバージョンアップしました。

ADF では今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- 4 原子から定義される 2 原子間の距離の差に拘束を課した構造最適化計算が可能
- 振動子強度を指定した励起状態計算が可能
- 連続溶媒和モデルの COSMO 法が並列計算に対応

ADF-GUI では今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- 新配座異性体の取り扱いを追加
- ADFspectra 上で、配座異性体に対して重み付けしたスペクトルの計算が可能

実行方法:

[http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app\\_adf.html](http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_adf.html)

#### 4. Atomistix ToolKit (ATK)および Virtual NanoLab (VNL)

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 2014.1 にバージョンアップしました。

ATK-DFT 2014.1 では今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- Noncollinear spin の機能がアップグレードし、スピン軌道相互作用の考慮を追加
- パフォーマンスが改善し計算時間とメモリー使用量の両方が縮小

VNL 2014.1 では今回のバージョンアップで主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- サードパーティー製コードとして VASP, Quantum Espresso, Gpaw をサポート

実行方法:

[http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app\\_atk.html](http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/app_atk.html)

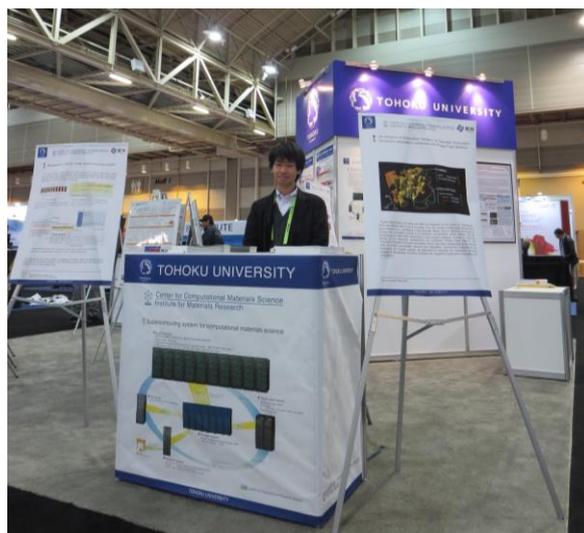
#### Web ページに FAQ を追加

本センターの日本語版ホームページに FAQ を追加しました。トップページ左側のメニューまたは次のアドレスからアクセスできます (<http://www-lab.imr.edu/~ccms/Jpn/faq/faq.php>)。FAQ には、これまでの本センターに対する問い合わせの中から頻度の多いものや、コンパイルおよびジョブ実行時のエラーの解決方法など、ユーザーの皆様役に役立つ情報をシステム全般、スーパーコンピューター、アプリケーションサーバー、アプリケーション、その他の項目に分けて Q&A 形式で掲載しています。今後も有益な情報があった場合には項目と内容を順次追加していく予定です。また、英語版の FAQ については 2015 年 1 月に公開予定です。

#### SC14 に本センター技術職員が参加

2014 年 11 月 16 日(日)~21 日(金)に The Ernest N. Morial Convention Center(米国 ルイジアナ州)で行われた SC14(Supercomputing Conference 2014)に、丹野航太技術職員が参加しました。

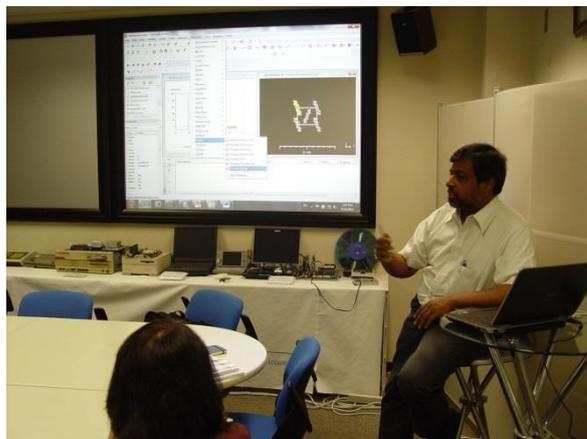
SC は毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワークング・ストレージ分野における世界最大のイベントです。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今回は 356 のブース出展、10,000 名を越える参加者がありました。東北大学ではサイバーサイエンスセンター、流体科学研究所、本所が合同で 1 ブースの展示を毎年行っています。今回は本センターの紹介、スーパーコンピューターを使った研究成果、および本所スパコンシステムのモニタリングツールであるリアルタイムグラフに関するパネル展示を行いました。



SC14 での展示と丹野航太技術職員

## Materials Studio 講習会を実施

2014年6月16日(月)に本所スーパーコンピューター棟でMaterials Studioの講習会を行い、所内外から4名の受講者がありました。Materials Studioは低分子化合物、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、シミュレーション結果のデータ解析まで行うことができるソフトウェアです。当日は、アクセルリス株式会社より講師をお招きし、約4時間にわたりMaterials Studioの概要と各種シミュレーションモジュールについての説明、質疑応答という内容で講習会を行いました。



Materials Studio 講習会の様子

## 日立 IT ユーザ会で本センター技術職員の論文が受賞

2014年6月5日(木)に開催されました日立 IT ユーザ会第51回大会において、以下の論文が「一般論文優秀賞」を受賞し、発表を行いました。

「スーパーコンピューティングシステムにおけるリアルタイムグラフ作成システムの機能拡張」

○ 五十嵐伸昭、大滝大河、一関京子\*1

\*1 東北大学 東北メディカル・メガバンク機構

概要:

スーパーコンピューティングシステムを効率よく運用するため、瞬間ごとの各 CPU の使用状況および一定期間の傾向をグラフ化して Web ブラウザへ表示するリアルタイムグラフ作成システムを構築し、利用状況を把握してきました。しかし、2012年4月に更新したシステムでは、スーパーコンピューターのノード数は320ノードと大幅に増加し、キュー構成の複雑化、複数ノードを使用する大規模ジョブの増加、利用形態の多様化などに伴い、スーパーコンピューターが効率的に利用されているかどうかを判断するために必要な情報を十分得ることができないことが明らかになってきました。また、個々のジョブについての計算資源の利用状況を把握するためには様々な情報を総合的に判断する必要があり、容易ではありませんでした。そこで、Web ブラウザでの操作だけでシステムの稼働状況やユーザーのジョブ実行状況、個々のジョブの計算資源利用状況について詳細に把握できるように、リアルタイムグラフ作成システムの機能拡張を行いました。

計算材料学センターだより No.22

2014年12月12日(金)発行

12<sup>th</sup> Dec. (Fri), 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](mailto: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