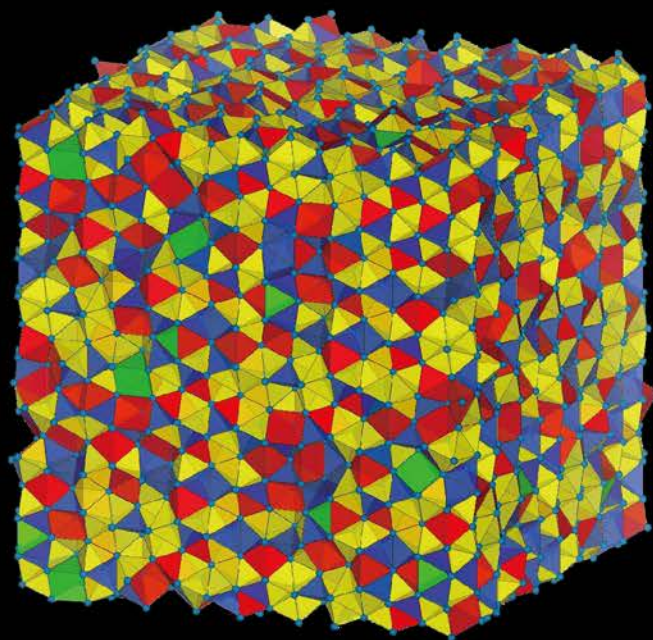


計算材料学センターだより



Three-dimensional tiling for representing the cluster packing in icosahedral quasicrystals

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・アプリケーションのバージョンアップ
- ・Web マニュアルの更新
- ・AVS/Express 講習会の開催
- ・東京工業大学学術国際センターでの研修
- ・平成 26 年度の計算材料学センターの技術支援の実績
- ・平成 27 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 26 年度の計算材料学センター見学者

CCMS
NEWS
23

表紙の図について

■ 正二十面体準結晶におけるクラスタのパッキングを表す三次元タイリング

正二十面体準結晶は金属元素からなるクラスタが準周期的に空間を充填した構造を持つと考えられています。そのようなクラスタの空間配列を幾何学的に表現するために、四種類の多面体を基本タイルとする「カノニカルセルタイリング」が提唱されています。実際に、準結晶と近い化学組成を持つ多くの近似結晶は周期的なカノニカルセルタイリングの頂点にクラスタを配置した結晶構造を持つことが、X線構造解析により示されています。一方、準結晶に対しては、周期を無限大に拡大した「準周期的なカノニカルセルタイリング」を用いる必要があります。しかし、後者が存在することの理論的証明はまだありません。本研究では、準周期タイリングの自己相似性という観点から、カノニカルセルタイリングの周期を黄金比(τ)の3乗倍に拡大する計算機アルゴリズムを開発し、単純な初期構造から多数の長周期カノニカルセルタイリングを生成することに成功しました。表紙の図はその一例で、Pa-3の対称性を持ち一周期あたり2,464個の頂点を含みます。また、四種類のタイルは黄・赤・青・緑に色分けされています。この手法は、無限大の周期を持つ準周期的なカノニカルセルタイリングの存在証明にも活用できることが期待されます。

■ Three-dimensional tiling for representing the cluster packing in icosahedral quasicrystals

The atomic structure of an icosahedral quasicrystal exhibits a quasiperiodic packing of clusters made up of a few metallic elements. As a geometrical framework to represent the cluster packing, 'canonical-cell tiling', or tiling with four kinds of basic polyhedra as the proto-tiles, has been proposed. In X-ray crystallography, indeed, approximant crystals with similar chemical composition to icosahedral quasicrystals are shown to have crystal structures in which clusters occupy the vertices of a periodic canonical-cell tiling. For representing an icosahedral quasicrystal, a quasiperiodic canonical-cell tiling is indispensable. However, it has never been proved theoretically that such a tiling could exist. In this study, a computer algorithm for expanding the dimensions of the unit cell of a periodic canonical-cell tiling by a factor of the cube of the golden mean (τ) has been implemented, whereby a number of new tilings with enlarged unit cells have been generated. The figure on the front cover shows a new tiling whose space group is Pa-3 and which contains 2,464 vertices per unit cell. The four basic polyhedra are colored yellow, red, blue, and green. The method may possibly be used to prove the existence of quasiperiodic canonical-cell tiling, that is, a tiling with infinitely large unit cell.

□ Nobuhisa Fujita

センター長あいさつ

計算材料学センター長 毛利哲夫

平成 26 年度は運営交付金の定常的な減額と電気料金の高騰によりセンターの正常稼働が不可能となり、スーパーコンピュータを 11 月中旬から 1 月中旬まで部分稼働、そしてその後 3 月中旬まで全停止というこれまでに未経験の対応策を余儀なくされました。運営財政が赤字にならざるを得ないことは既に前年度あるいは前々年度よりわかっていたことですので、このような停止期間を設けることも既に昨年度の前半には予定しており、8 月の片平キャンパスの定期停電時を利用して、試験的に 2 週間にわたる全停止を予行し、この間に電力使用量の実測、解析、検討を行ってまいりました。実測値が必ずしもカタログ値とは一致しないこと、その原因が空調や冷却水のような共用設備を完全に停止できないことに起因するだけでなく、外気温も微妙に影響を与えることなどを新たに認識しました。これらの経験とユーザーのアンケートに基づいて全停止期間と部分稼働時の運転ノードの決定を行いました。勿論、運営会議での承認を経て、ベンダーとの十分な打ち合わせを行った上での実施ではありました。

しかし、共同利用施設がその任を十分に果たせないことに忸怩たる思いがあります。このことに対してはいかなる言い訳もありません。又、何よりもユーザーの皆様にご迷惑をおかけしたことに対し、衷心よりお詫びを申し上げます。このような措置により、致命的な赤字は回避することができましたが、今年度も依然として赤字の上での運用を行わなければならないことを御報告しなければなりません。財政の健全化に向かって更なる努力をする所存です。

今年度は通年の部分稼働を行う予定です。昨年度の経験に照らし合わせて全停止は回避したいということ、しかし、一方において単年度の運用赤字をこれ以上増やすことはできないという要請、両者のせめぎ合いの中で部分稼働を通年続けるという決定に至りました。但し、本件は、正式には 6 月から 7 月にかけて行われます運営会議での承認を得る必要があり、又、8 月の定期停電時には多少の全停止期間を設ける予定であることを付記します。

このような緊縮予算の下での運用は各ユーザーの使用量の精確な把握と管理が前提になります。これまで、無課金で運用してきました本センターにとりまして、使用量の管理は第一義的な業務とは考えておりませんでした。今回の危機を好機に変える一助にたく、システムに使用量の把握を行う機能の導入を考えています。幾ばくかの出費を伴うものでありますが、使用量の把握と制御は、年度初めのユーザーへの資源割り当ての審査をより厳密化するものであり、本センターの運営を改善の方向に導くものであると考えています。

新機能の導入による運用制度の見直しなどにつきましては別途にご報告をさせていただきます。いわゆる“非常事態下”での運用が続きますが、職員一同、どのような事態下でも全力を挙げて職務を全うする所存です。ユーザー各位の御理解と御協力をお願い申し上げます。

アプリケーションのバージョンアップ

1. 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 5.3.5 をインストールしました。

VASP 5.3.5 では主に次のような機能の追加および拡張が行われました。

- ・ GW と ACFDT 計算に対して SHMEM サポートが追加
- ・ FOCK_FORCE でのメモリーークを修正
- ・ D-行列の評価を追加

実行方法については、計算材料学センターまでお問い合わせください。

Official web site:

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

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 8.0 にバージョンアップしました。

Materials Studio 8.0 では主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- ・ DMol³ もしくは CASTEP を使って、気体中および表面上での反応速度定数を計算する機能の追加
- ・ DMol³ の並列化計算時のメモリ分散処理が改良され、より大きな系の計算が可能
- ・ DMol³ を使って分子デバイスの透過率や電流電圧特性を予測する機能の追加

実行方法:

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

Official web site:

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/index.html>

3. AVS/Express

モジュールを組み合わせることによって可視化を行うことのできる汎用の 3 次元可視化ソフトウェア AVS/Express を 8.2 にバージョンアップしました。

AVS/Express 8.2 では主に次のような機能の追加、拡張が行われました。

- ・ LAMMPS データ読み込み機能の追加
- ・ VTK ファイル読み込み機能の追加

また、本センターで開発した窓関数、フーリエ変換の演算機能を CCMS ライブラリに追加しました。

実行方法:

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

Official web site:

<http://www.cybernet.co.jp/avs/>

Web マニュアルの更新

本センターのスーパーコンピュータおよびアプリケーションサーバーのマニュアルページの使い勝手を向上させるため、全体的な改修を行いました。それぞれ次のアドレスからアクセスできます。

スーパーコンピュータ

日本語版：<http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super/top.html>

英語版：http://www-lab.imr.edu/~hitachi/super_en/top_en.html

アプリケーションサーバー

日本語版：<http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app/top.html>

英語版：http://www-lab.imr.edu/~hitachi/app_en/top_en.html

使い勝手の向上のため、トップページの作成やスーパーコンピュータ、アプリケーションサーバーマニュアルの相互リンク、パン屑の表示、ページ下部にトップページへのリンクや戻るボタンの追加を行いました。また、目的の情報を探し易くするため、「ジョブ投入・管理コマンド」、「コンパイラ・ライブラリ使用方法」、「アプリケーション実行方法」、「詳細マニュアル」の項目で目次のページを追加しました。さらに、各ページ上部には項目ごとのリンクを表示しているため、違う項目の情報でもすぐに探すことができます。サイトマップも追加し、全てのマニュアルページへのリンクを一覧で表示できます。

新しいマニュアルページについてのご意見、ご要望などございましたら計算材料学センターまでお知らせください。

AVS/Express 講習会の開催

AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって簡単に計算結果の可視化ができる、汎用の 3 次元可視化ソフトウェアです。本センターではスーパーコンピュータで得られた計算結果の可視化のために AVS/Express をアプリケーションサーバーにインストールしユーザーにサービスしています。この AVS/Express の利用推進のため、AVS/Express の概要、基本的なモジュール結線等の操作、そして、応用と実習という内容で、2015 年 4 月 10 日(金)に本所スーパーコンピュータ棟を会場として AVS/Express の講習会を開催し、所内外より外国人を含む 8 名の受講者がありました。



AVS/Express 講習会の様子

東京工業大学学術国際センターでの研修

技術職員 丹野航太

2015年2月16日(月)～20日(金)期間に、スーパーコンピューターTSUBAMEを運用する東京工業大学学術国際センターで研修させて頂きました。

5日間にわたる研修では、TSUBAME、油浸冷却実験機 TSUBAME-KFC 等の施設やシステムの見学、先生や技術職員の方々との情報交換、会議や打ち合わせなど普段の業務にも参加させて頂きました。施設やシステムの見学だけでなく、実際の運用に関わる部分を見ることができ、そして、他センターの運用方法の一端を直接学べたことはとても貴重な経験でした。また、先生や職員の方々との情報交換では TSUBAME の運用方針や教員、技術職員、SE のそれぞれの役割、ユーザーへの関わり方などを丁寧に説明していただき、全学基盤センターと研究所における運用方針の違いなど、今まで見えていなかったことにも気づくことができました。普段の業務では関わることのできない方々と様々なお話ができ、とても刺激的で充実した研修でした。今後はこの経験を計算材料学センターの運用に役立てていきたいと思っております。

最後となりましたが、東京工業大学学術国際センターの方々には本当にお世話になりました。このような貴重な機会を与えて頂き、大変感謝しております。

平成 26 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 26 年度の技術支援内容と件数について、所内 10 研究室および、所外 63 研究機関へ合計 366 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	10 研究室	72
学内	4 研究機関	81
国内の研究機関	27 研究機関	98
国外の研究機関	32 研究機関 (12ヶ国)	115
合計	73	366

平成 27 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

2015 年（平成 27 年） 奇数月の最終週月曜日
5 月 25 日、7 月 27 日、9 月 28 日、11 月 30 日
2016 年（平成 28 年） 奇数月の最終週月曜日
1 月 25 日、3 月 22 日

片平キャンパスの計画停電の予定

2015 年 8 月 9 日（日） 7:30 から 18:00 まで
定期保守日については、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 26 年度の計算材料学センター見学者

期間: 2014 年 4 月～2015 年 3 月

見学日	見学者	所属 / 会議など
2014 年 4 月 25 日	吉田 成博氏他 2 名	東北大学 東北メディカル・メガバンク機構
2014 年 5 月 7 日	マテリアル・開発系プレゼミ 30 名	東北大学大学院工学研究科・工学部
2014 年 5 月 19 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
2014 年 6 月 2 日	基礎ゼミ受講者 18 名	東北大学
2014 年 10 月 20 日	A.N. Tsoi 氏他 2 名	Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the RAS
2014 年 11 月 13 日	Dipl.-Ing. Andreas Reiter 氏	Karlsruhe Institute of Technology
2014 年 12 月 24 日	竹之内 郁人氏	群馬工業高等専門学校
2015 年 2 月 25 日	IISER 代表団 7 名	Indian Institutes of Science Education and Research

他 見学者総数 111 名



■ 東北大学基礎ゼミ受講生 18 名
2014 年 6 月 2 日



■ IISER 代表団 7 名
2015 年 2 月 25 日

計算材料学センターだより No.23

2015年5月19日(火)発行

19th May (Tue), 2015

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