

計算材料学センターだより

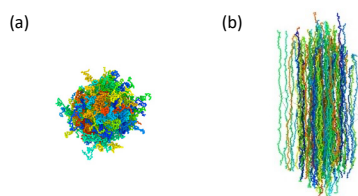


Figure 1: A CGMD simulation on a polymer melt under a steady elongational deformation. (a) Initial equilibrium state and (b) the final steady state. The system contains $M=100$ chains each with $N = 100$ segments. The elongation rate is 0.001.

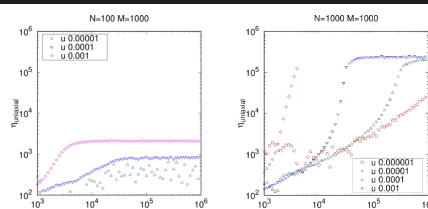


Figure 2: Stress-strain relations of polymer melts obtained by CGMD simulations under steady elongational deformations for $N=100$ and 1000 with elongation rate 0.00001, 0.0001 and 0.001.

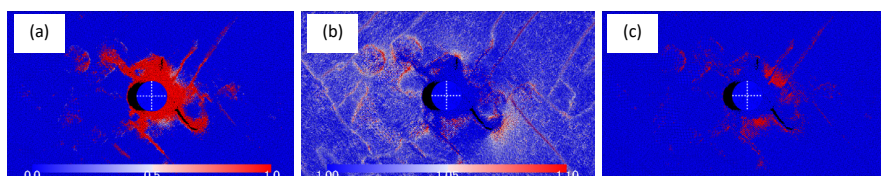


Figure 3: A fracture in an amorphous solid with a moving obstacle simulated using MSSP. (a) Plastic zone (red region) in the SPH model, (b) locally averaged strain in MicS's, and (c) distribution of molecular models (red) and continuum models (blue) used as MicS's. 2,560,000 SPH particles are used.

CONTENTS

- ・ コンパイラ、ライブラリのインストール
- ・ アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・ スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果
- ・ SC22 に本センター技術職員が参加
- ・ AVS/Express 講習会の開催
- ・ 高校生の見学の様子
- ・ 新職員あいさつ

表紙の図について

■ Multiscale Simulations on Viscoelastic and Elastoplastic Materials

Among many multi-scale simulation techniques, one promising approach is the hierarchical modeling where microscopic simulators (MicS) are embedded in each of the elements of a macroscopic simulator. In such a case, the boundary condition of the MicS plays a crucial role in determining the local stress generated by the macroscopic flow or macroscopic deformation. Under periodic boundary condition, one such example is the use of the Lees-Edwards boundary condition for shear deformations. However, there was no efficient technique to realize a large elongational deformation compatible with the periodic boundary condition. We introduced UEF method and QR decomposition [1] to coarse-grained molecular dynamics (CGMD) and succeeded in simulating a large elongational deformation of polymer melts. Figure 1 shows snapshot pictures of the system (a) before and (b) after the deformation. Obtained stress-strain relations are shown in Figure 2 for several chain length N .

We develop MSSP, which is a multipurpose simulation platform for multiscale modeling [2]. In MSSP, macroscopic flows and deformations are described by coarse-grained particle model named as smoothed particle hydrodynamics (SPH) method, while the local stress-strain relation is evaluated by MicS's which are embedded in each of the SPH particles. We applied this MSSP to a fracture phenomenon in an amorphous solid. Figure 3 shows snapshot pictures of the system where a moving cylindrical obstacle induces a fracture, where a molecular dynamics simulation of dumbbells and a continuous constitutive model are switched as the MicS according to the local stress. Figure 3 shows (a) the plastic zone (red region), (b) locally averaged strain in each MicS, and (c) the distribution of molecular models and continuous models as MicS, respectively.

1. T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, "Viscosity Overshoot in Biaxial Elongational Flow: Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Ring-Linear Polymer Mixtures", *Macromolecules* (2021) **54**, 7210.
2. Y. Morii, T. Kawakatsu, "Lagrangian multiscale simulation of complex flows", *Phys. Fluids* (2021) **33**, 093106.

コンパイラ、ライブラリのインストール

アクセラレータサーバ

1. CUDA Toolkit

CUDA Toolkit 11.6.2 をインストールしました。
使用方法は以下のマニュアルをご覧ください。
https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:acceleratorserver:compilers_libraries#nvcc コンパイラ

2. NVIDIA HPC SDK

NVIDIA HPC SDK 21.11 および 22.5 をインストールしました。
使用方法は以下のマニュアルをご覧ください。
https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:acceleratorserver:compilers_libraries#nvidia_hpc コンパイラ

アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ

大規模並列計算サーバ

1. QuantumATK

非平衡グリーン関数法による電子輸送計算アプリケーションである QuantumATK を 2022.03 にバージョンアップしました。QuantumATK では半経験的もしくは第一原理的手法により、材料の電気伝導特性を計算することが可能です。
実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。
<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantumatk>
QuantumATK の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。
<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk.html>

2. ADF

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである ADF を 2022.103 にバージョンアップしました。ADF は相対論効果を含めることができ、遷移金属や重元素を取り扱うことが可能です。また、構造最適化や遷移状態計算、IR スペクトルや紫外・可視吸光スペクトル、NMRなどを求めることも可能です。
実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。
<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:adf>
ADF の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。
<https://www.scm.com/>

3. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.3.2 をインストールしました。VASP では様々な系に対して、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を高速で行うことができ、構造最適化・応答関数・化学反応などの計算も可能です。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

4. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 7.1 をインストールしました。QUANTUM ESPRESSO では全エネルギーや構造最適化計算をすることが可能です。また、フォノンや X 線吸光スペクトルなどを求めることも可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

5. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 23Jun22 をインストールしました。LAMMPS は金属や半導体といった固体や生体分子やポリマーなどのソフトマターなど多くの系で動力学計算を行うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammmps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org/>

6. CP2K

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである CP2K のバージョン 2022.1 をインストールしました。CP2K では固体や液体、分子などに対して構造最適化や分子動力学計算を行うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:cp2k>

CP2K の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.cp2k.org/>

アクセラレータサーバ

1. Materials Studio

分子構造や結晶構造の持つ特性と挙動の関係を予測するための総合的なモデリング・シミュレーション環境である Materials Studio のバージョン 2022HF1 をインストールしました。本センターでは CASTEP、DMol3、Forcite Plus などの計算パッケージが利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:materials_studio

Materials Studio の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.3ds.com/ja/products-services/biovia/products/molecular-modeling-simulation/biovia-materials-studio>

2. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 7.1 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

3. LAMMPS

汎用古典分子動力学アプリケーションである LAMMPS のバージョン 23Jun22 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammmps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org/>

4. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.3.2 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

可視化サーバ

1. QuantumATK NanoLab

QuantumATK 専用グラフィカルユーザーインターフェースである QuantumATK NanoLab を 2022.03 にバージョンアップしました。QuantumATK NanoLab では、分子や材料のモデルをグラフィカルに作成できるほか、3次元データの可視化なども可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantumatk_nanolab

QuantumATK NanoLab の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk/resources/features.html#nanolab>

2. ADF-GUI

ADF 用のグラフィカルユーザーインターフェースである ADF-GUI を 2022.103 にバージョンアップしました。ADF-GUI では、エネルギー準位図や3次元データの等値面に加え、分子の振動モードなどのアニメーションを簡単に表示することができます。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:adf-gui>

ADF-GUI の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.molsis.co.jp/materialscience/ams/adf-gui/>

スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果

東北大学金属材料研究所の久保百司教授の研究グループによる、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用した研究成果がアメリカ化学会の The Journal of Physical Chemistry C 誌の Cover に選ばれました。

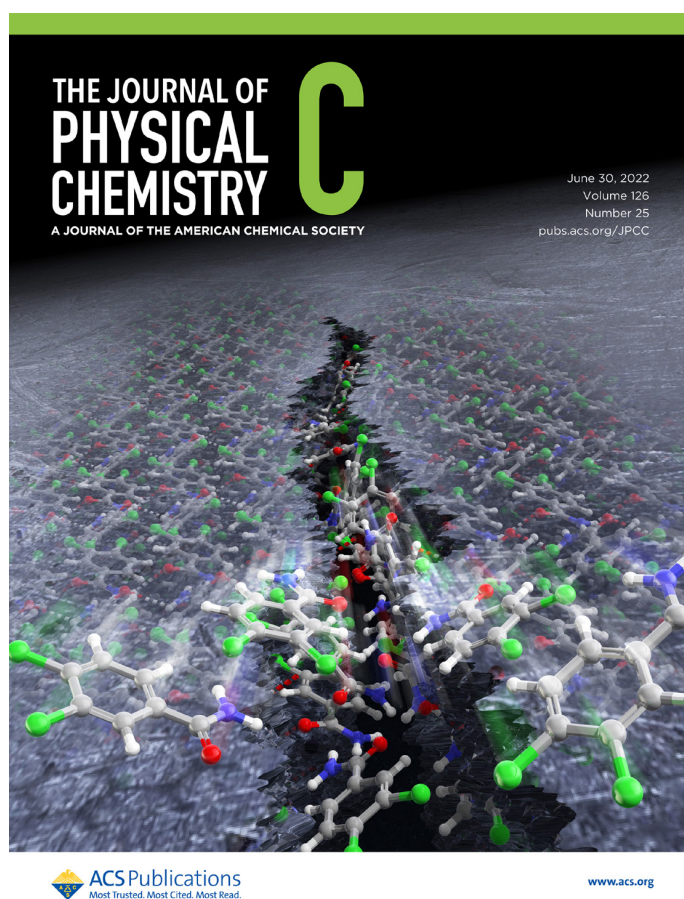
論文 : Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation of the Bending Mechanism of Molecular Crystals

J. Phys. Chem. C, **126** (25) 10554-10565, 2022.

Yusuke Ootani and Momoji Kubo

The Journal of Physical Chemistry C 誌の Web サイト :

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.2c02504>



J. Phys. Chem. C, **126** (25) 10554–10565,
2022 年 6 月 30 日

SC22 に本センター技術職員が参加

2022年11月13日（日）から18日（金）に開催されたSC22（Supercomputing Conference 2022）に、久保センター長、五十嵐伸昭技術職員、丹野航太技術職員、中野倅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国際会議です。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。今年のSC22は米国ダラスで開催されました。ハイブリッド形式での開催となった昨年のSC21からの変更点としてオンラインブースが廃止され、より多くの企業・団体が現地での展示を再開しました。

本センターからは久保センター長が現地参加し、MASAMUNE-IMRを用いた研究成果の展示やブース来訪者への対応などを行いました。本センター技術職員はオンラインでの参加となりましたが、各メーカーの新製品の情報収集や、技術・研究に関する講演の聴講を行いました。



SC22 での展示ブースの様子

AVS/Express 講習会の開催

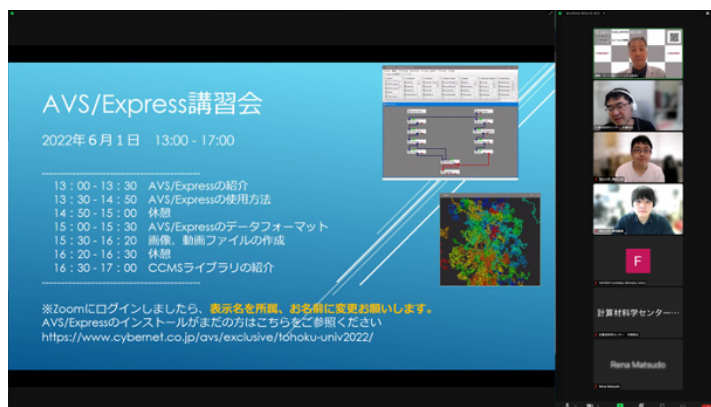
AVS/Express はモジュールを組み合わせることによって簡単に計算結果の可視化ができる、汎用 3 次元可視化ソフトウェアです。当センターではスーパーコンピュータで得られた計算結果の可視化のためにアプリケーションサーバーに AVS/Express をインストールし、ユーザーにサービスしております。この AVS/Express を活用していただくために、AVS/Express の概要、基本操作、便利なモジュールの

紹介、操作実習という内容で、2022 年 6 月 1 日に Zoom オンラインで AVS/Express 講習会を開催しました。講習会には金研の所内外より 4 名から参加応募して頂きました。

いつでも学習いただけるように AVS/Express オンデマンドセミナーコンテンツも用意してしておりますので、計算材料学センターのホームページよりアクセスしてご利用ください。

AVS/Express オンデマンドセミナー

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/avs_ondemand.html



AVS/Express 講習会の様子

高校生の見学の様子

2022年10月19日(水)、宮城第一高等学校2年次理数科での授業の一環として、本センターのスーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR を見学いただきました。

- ・見学日：2022年10月19日(水)
- ・見学者：宮城第一高等学校2年次理数科の生徒80名、引率5名



説明を行う久保センター長



説明を記録する生徒の様子

新職員あいさつ

このたび、計算材料学センターの事務補佐員として勤務することになりました石川いずみと申します。どうぞよろしくお願いいたします。これまででは本学の研究室秘書室や事務部支援室に勤務しておりました。

子供が硬式野球クラブチームに所属しているため休みの日は球場で過ごしています。スコアラーやアナウンスがご入用の際は、是非お声がけください。

至らぬ点もあるかと存じますが、計算材料学センターのお役に立てるよう努めて参ります。どうぞよろしくお願い申し上げます。



計算材料学センターだより No.38
2022年12月20日 発行

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



CCMS
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
Center for Computational Materials Science

TEL (022) 215 - 2411
URL <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp>
E-mail ccms-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp