

第9章 計算材料学センター

センター長（教授）：川添良幸

教務職員：一関京子、技術職員 2 名、技能補佐員 6 名、事務補佐員 3 名

1. 組織

平成 15 年度より、計算材料学センターは、センター運用体制の高度化と安定化を図るため、川添研究室を責任部門とすることが、教授会で承認された。従来から、スーパーコンピューター導入時及び更新時の機種選定作業や、月に一度の納入メーカーとの定例会等では川添研究室は本センターの運営に主体的に関わって来ていた。また、センター所属の技術職員の支援スキルの向上を目指し、国内外学会・研修等への参加や、計算機関連の講習会への出席・論文発表を支援・指導していた。機材に関しても、常に新しい装置が入り、最新の技術を体得できるように、川添研究室が関与しているプロジェクト研究から供出するように努めている。

本センターのスーパーコンピューターの能力を最大限に発揮させることのできる全電子混合基底法プログラム TOMBO (Tohoku Mixed-Basis Orbitals *ab initio* program) は、カタログ性能の 70% の実行効率を達成し、全体の平均をも 30% 程度まで上げている。また、納入メーカーと技術職員との連携で、システム安定運用が実現されているだけでなく、常にパフォーマンスの改善を行っており、スーパーコンピューターは 90% 以上の稼働率になっている。計算需要の伸びはすさまじいものがあり、既に、さらなる超大規模計算環境を構築するため、スーパー SINET ナノテクノロジー研究部会及びスーパーコンピューター連携実験を目的とした学術創成プログラムの実行部隊として、一関技術職員を中心に、本所と東京大学物性研究所、岡崎国立共同研究機構分子科学研究所、及び九州大学情報基盤センター間の分散処理用超高速光コンピューターネットワーク構築を行った。地理的に離れたスーパーコンピューターの連携を行い、超大規模シミュレーション計算まで実行している例はなく、本所はその最初の重要な実験を行っている。

他にも、本学が医工学連携で振興調整費を認められたことに従い、本センターは、このプロジェクトで、医療の高度化を実現するためにスーパーコンピューターを用いた第一原理シミュレーション計算による新材料設計でも積極的に関わって行く予定である。

平成 16 年度に独立行政法人がスタートし、本センターもより良い体制を実現すべく、既に種々の検討を始めている。特に、本学には、情報シナジーセンター、流体科学研究所、及び本所にスーパーコンピューターが導入されている。各々、最大限に設置目的を達成すべく継続的に活動している訳であるが、今後のあり方を模索するため、これら 3 組織間での検討会を密に行っている。

スーパーコンピューターは、今後とも重要な戦略物資である。それを活用した効率の良い新材料設計は、材料立国日本の存在基盤確立に欠かせないものである。

2. 平成 16 年度における活動概要

本室の主要業務は、現在次の通りである。

- (1) スーパーコンピューター (cmssuper, HITACHI SR8000-G1/64) 運用管理
- (2) ファイルサーバー (cmsserv, IBM RS/6000 Enterprise S80) 運用管理
- (3) アプリケーションサーバー A (cmsappa, Compaq AlphaServer GS320) 運用管理
- (4) アプリケーションサーバー B (cmsappb, SGI Onyx3400) 運用管理
- (5) スーパーコンピューティングシステム、各種 WS、及び各種 PC 運用管理
- (6) ユーザ管理
- (7) スーパーコンピューティングシステム全体のジョブ運用コーディネート
- (8) システム利用相談
- (9) アプリケーション利用相談
- (10) 材料設計シミュレーション計算支援
- (11) プログラム最適化支援
- (12) 結果の可視化支援
- (13) スーパーコンピューティングシステム関連設備運用管理
- (14) 本所材料データベースシステムの開発運用管理

2.1 利用実績

計算材料学センターで行っている業務に対する利用実績状況を表 1 及び表 2 に示す。
なお、スーパーコンピューティングシステムを利用した研究成果をまとめた報告書として、第 9 巻 (平成 15 年度版、原著論文数 79 編) を平成 16 年 9 月に出版した。

表 1 スーパーコンピューティングシステム利用申請者数

年度	利用申請者数
平成 16 年度	193

表 2 スーパーコンピューター利用状況

年度	ジョブ投入件数
平成 16 年度	25,160

2.2 スーパーコンピューティングシステム概要

本所最初のスーパーコンピューティングシステムは 1994 年に導入され、1999 年 12 月までの約 7 年間に約 350 件の原著論文を発表する等数多くの成果を挙げた。しかしながら、コンピューターの進展は目覚しく、7 年目における性能は、単純比較ではあるが、現在の高性能パソコンレベル近くまで落ちてしまう程であった。こうして、三次元数値積分、大規模行列の固有問題、高速フーリエ変換 (FFT)

等の大規模計算が高速で行え、且つ膨大な記憶容量を有し、世界のトップレベルの材料設計シミュレーション研究設備と肩を並べられる新スーパーコンピューティングシステム導入の概算要求を行い、2001年1月に2世代目として現スーパーコンピューティングシステムが設置された。図1に現在のスーパーコンピューティングシステムの構成概要を示す。

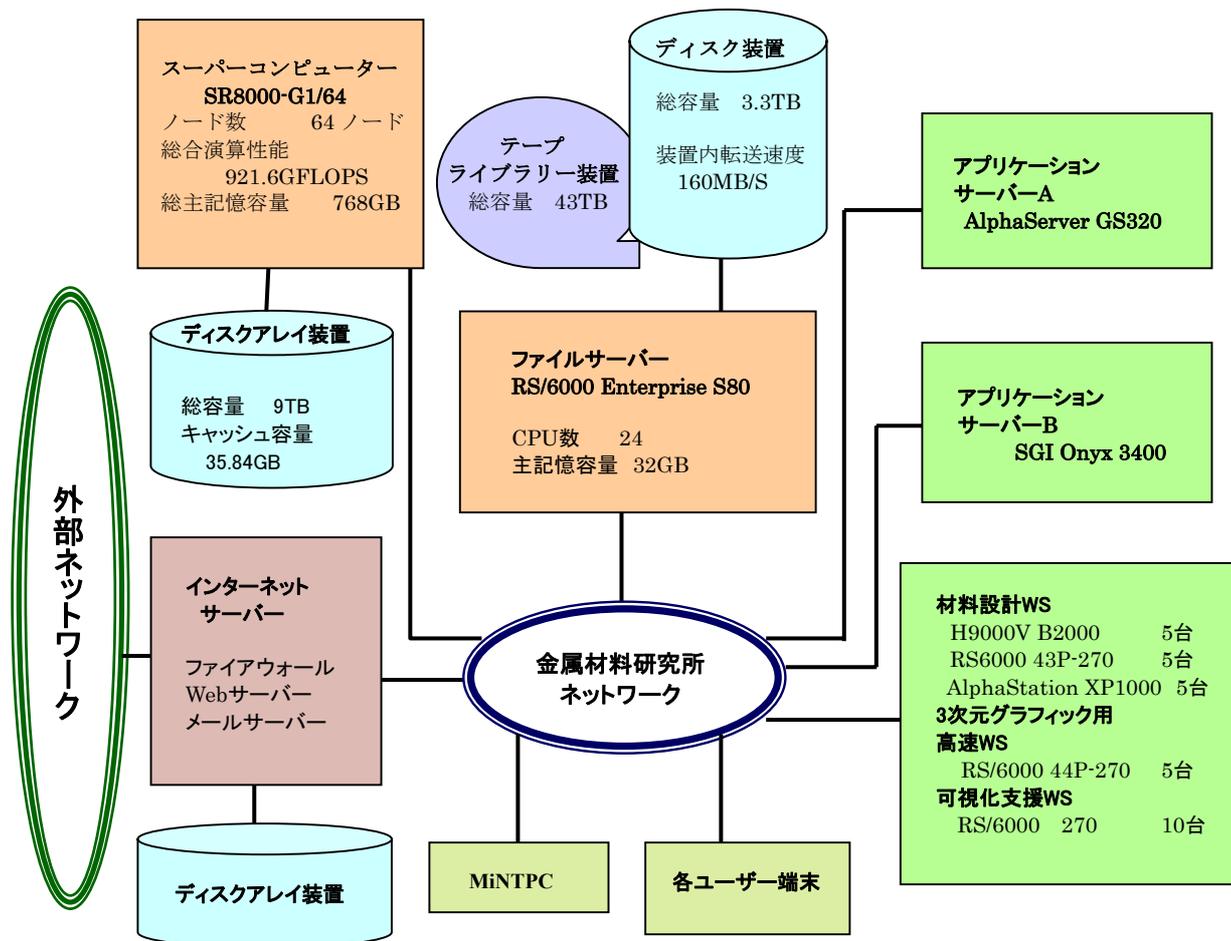


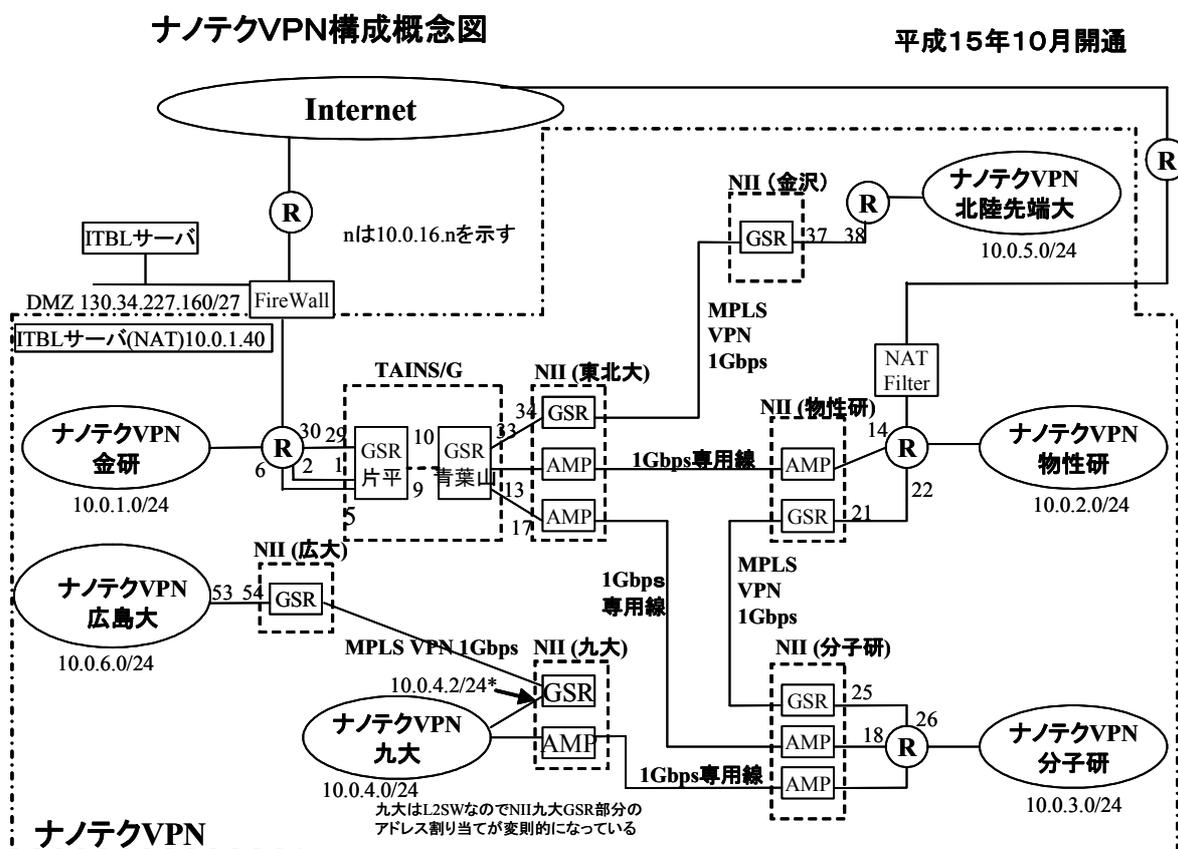
図1 スーパーコンピューティングシステム構成概要

メインのスーパーコンピューターの計算速度は旧システムの約40倍、記憶容量は約60倍となり、2001年導入時の国際性能比較で15位に入る高性能の日立SR8000-G1/64システムである。この他、ユーザ用ファイルサーバーとしてIBM RS/6000 S80、アプリケーションサーバーとして、COMPAQ GS320、SGI Onyx3400、他にメールサーバー、WWWサーバー、ネットワーク(ファイアウォール)管理マシンと、各種ワークステーション30台などが導入された。

設置後、第一原理シミュレーション計算により、金属原子1個を内包する最小の籠型安定シリコンクラスターの構造決定に成功したことや拡散量子モンテカルロ法により、精密に量子力学方程式を解くことにより、フント則が成立する理由を定量的に明らかにすることに成功する等、多くの実績を挙げている。

2.3 ナノテク VPN の構築

世界的にみてもほとんど試みられたことのないスーパーコンピューターのネットワーク経路結合による超大規模ナノテクノロジー用シミュレーション計算環境（以下、ナノテク VPN）をスーパーSINET上に実現するため、金研・東京大学物性研究所・自然科学研究機構分子科学研究所・九州大学情報基盤センターの4機関によるVPN（Virtual Private Network）を構築し、平成14年10月1日に各機関間を1Gbpsで接続し、通信効率測定を開始するとともに、平成15年2月、3月に、金研のSR8000の8ノードと分子研のSR8000の6ノードを1ヶ月にわたって占有利用し、全電子混合基底法プログラムTOMBO(Tohoku Mixed-Basis Orbitals *ab initio* program)を使用した入力パラメーターを変えた同一プログラムの並列実行制御による実証実験を行い、水素吸蔵クラスレート・ハイドレートの最安定原子構造を決定した。また、平成15年10月1日には北陸先端技術大学院大学、広島大学が1Gbpsで接続され、現在シミュレーション計算結果の可視化なども検討中である。さらにナノテク VPN にファイアウォールを導入し、環境整備が行われたことによりナノテク VPN は外部ネットワークと接続することが可能となった。これにより、ITBL 基盤を使用して、ナノテク VPN 上の計算機だけでなく、外部ネットワークである日本原子力研究所の計算機と連携した大規模並列実行環境が利用できるようになった。図2にナノテク VPN 構成概念図を示す。



3. 成果

3.1 研究・技術の成果状況

計算材料学センター所属の技術職員の活動成果報告の詳細を、表3～表5にまとめて示す。

表3 論文、技術報告等

掲 載 雑 誌 名	2004 年
J Phys. Let. A	1
Chin. Phys. Lett.	1
Physica E	1
Phys. Rev. B	1
J. J. A. P.	1
Mater. Trans.	2
金属材料研究所技術部技術研究報告	1

表4 口頭発表

学 会 名 等	2004 年
3rd Int. Conf. Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT'02)	1
超微粒子とクラスター懇談会第6回研究会	1
Shanghai International Nanotechnology Cooperation Symposium (SINCS) 2002	1
日本金属学会 2004 年秋期大会	2
日本金属学会 2005 年春期大会	1
東北大学総合技術研究会	1
第3回日本金属学会東北支部大会	1
平成16年度大阪大学総合技術研究会	1

表5 ポスター発表

ポスター発表	2004年
金属材料研究所第107回春季講演会	2
金属材料研究所第108回秋季講演会	1
The 3rd NAREGI Int. Nanoscience Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxides	1
ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム	2
The Eur. Mater. Res. Soc. '04 (E-MRS)	1
The 2nd Conf. Asian Consortium for Computational Materials Science (ACCMS-2)	1
2004 Int. Conf. Solid State Devices and Materials	1
1st Conf. Advanced Nanotechnology: Research, Applications, and Policy	1
Int. Workshop on Novel Quantum Phenomena in Transition Metal Oxide	1
7th Eng. Found. Conf. Molecular-Scale Electronics	1
Computational Science Workshop 2005	1
ナノ学会第2回大会	1
第2回 NAREGI 冬の学校	1

4. 見学者

平成16年度の計算材料学センターの見学者として、中国浙江大学医学院教授の羅建紅氏を始めとして国内外から165名の見学者があり対応した。