

Title	北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告2009
Author(s)	太田, 理; 尾崎, 泰助; 佐藤, 幸紀ほか
Citation	Technical memorandum (School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology), IS-TM-2010-001: 1-43
Issue Date	2010-07-27
Type	Others
Text version	publisher
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/9085">http://hdl.handle.net/10119/9085</a>
Rights	
Description	テクニカルメモランダム (北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科)

# 北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2009

太田理, 尾崎泰助, 佐藤幸紀 編

2010年7月27日

IS-TM-2010-001

北陸先端科学技術大学院大学  
情報科学研究科  
〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

## 要旨

2009 年度に北陸先端科学技術大学院大学において学内で共同利用されている計算サーバや並列計算機を用いて行われた研究の概要および発表論文リストを紹介する.

# 目次

1	計算サーバ環境	
1.1	JAISTにおける共有計算サーバ環境	4
2	情報科学分野の計算サーバ利用研究	
2.1	数値流体力学における $\lambda 2$ 法を用いた渦の可視化手法の提案	9
2.2	Cray XT5における数値流体プログラミングのHybrid並列による高速化について	11
2.3	アクセラレータを利用した並列計算	13
2.4	細孔を通る浸透流の静電モデル	14
2.5	Performance Evaluation of a Green Scheduling Algorithm for Energy Savings in Cloud Computing	15
2.6	Dynamic Communication Performance Evaluation of Hierarchical Interconnection Network	16
2.7	The report on use of JAIST's computational facilities	17
3	マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究	
3.1	不均一系 Ziegler-Natta オレフィン重合における活性点のフレキシビリティ	19
3.2	OpenMXを用いたLT-GaAsの物性シミュレーション	22
3.3	Li イオン 2 次電池用 Si 系負極-電解質界面における電気化学反応の第一原理分子動力学シミュレーション	23
3.4	オーダーN 大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用	25
3.5	生物系のプロトトランスファに関する理論的解析 -酵素触媒機構の解明-	27
3.6	第一原理計算による表面光学応答解析	28
3.7	全原子型シミュレーションによる球状タンパク質の水和特性評価	29
3.8	数値局在基底に対する非局所交換エネルギーの計算	30
3.9	Report of scientific activity on mpc machines	32
3.10	Phase diagram of LaVO <sub>3</sub> under epitaxial strain: Jahn-Teller distortion Versus Orbital Fluctuations	34
3.11	Defect States Induced by Oxygen Vacancies in SrTiO <sub>3</sub>	35
3.12	First-principles calculation of the electronic properties of graphene clusters doped with nitrogen and boron	36
3.13	First-Principles Study of Contact Between Co Surface and Single-Walled Carbon Nanotubes	37
3.14	First-principle study on transport phenomena of nano-scale organic materials	38
3.15	Physisorption of hydrogen molecule on graphene and carbon nanotube surfaces adhered by Pt atom	39
4	知識科学分野の計算サーバ利用研究	
4.1	データマイニングと計算機シミュレーションによる物性評価	41
5	謝辞	

## 1. 計算サーバ環境

## 1. JAIST における共有計算サーバ環境

情報科学センター 佐藤幸紀  
情報科学研究科 太田 理

北陸先端科学技術大学院大学 (JAIST) では、全学で共有利用可能な計算サーバは、利用者組織である MPC グループ (超並列計算機 Massively Parallel Computing systems に由来)、MPC グループメンバー内のコアユーザーかつ各研究科 (情報科学研究科、マテリアルサイエンス研究科、知識科学研究科) と先端融合領域研究院を代表するメンバーを中心に構成される MPC 管理グループと計算機の実務的な運用を担当する情報科学センターとが親密な連携をとりながら運用されている。情報科学センターと MPC グループ・MPC 管理グループの関係は参考文献[9] や[10]を参照願いたい。

2009 年度の JAIST における共有計算サーバ環境の更新点及び主だった活動を以下説明する。MPC グループとしては、HP を公開してきたが (<http://www.jaist.ac.jp/mpc/>), 2009 年度には新規にメーリングリストへの登録フォームや過去の情報などを提供するページを作成した。

MPC 管理グループは MPC グループのユーザーからの声を吸い上げキュークラスの設定の調整として反映することや mpc メーリングリストにおける利用者間の利用の調停を行っている。2009 年度は 2 月 10 日に MPC 管理グループと mpc ヘビーユーザーと情報科学センターによるミーティングを開催し、xt5 にデバッグ用のキューの追加およびユーザー当たりの最大実行 job 数の設定や、2010 年 3 月から稼働開始の SX-9 と PCC のキューイングシステムの構成について議論を行い、キュー構成と利用方針を決定した。

情報科学センターは並列計算機の導入、H/W や S/W の運用保守、およびユーザーへの各種サポートを行っている。加えて、並列計算機ユーザーの技術レベルの向上へのサポートの一環として半期に一度程度の利用者講習会を行っている。2009 年度は 6 月に Cray XT5, SGI Altix4700, NEC SX-8, SGI AltixXE クラスタ FPGA ノードの講習会を開催し、12 月に Cray XT5 利用者講習会 (中級編)、IBM QS22 CellB.E.利用者勉強会を開催した。また、2009 年 3 月より稼働を開始した Cray XT5 の上級者向け講習会的な位置づけとなる HPC ワークショップ金沢 2009 を 5 月 25 日～26 日にクレイ・ジャパン・インクと情報科学センターの共同で開催した。

2010 年 3 月に提供されていた計算サーバの概要を表 1 にまとめた。2010 年 3 月より SX-8 から SX-9 にリプレースが行われた。これにより、6 倍強の理論性能を有するベクトル機となった。また、PCC と呼称している Appro 社のクラスタシステムも導入当初からキューイングシステムが導入された。このシステムでは、Intel の CPU を持つ高速演算ノードと AMD の 6-core CPU をノードあたり 4 ソケット持つ大規模容量ノードとが一つのシステムとなっている。その

ため、アプリケーションの特性に合わせてそれぞれの CPU に特化したプログラミングを行うことにより高いパフォーマンスが期待できる。また、新しい PCC は QDR インフィニバンドネットワークにて接続された分散メモリのシステムであるが、システム全体では 704CPU コアをもちメモリは分散共有メモリの Altix4700 に匹敵する 2560GB の容量を備える。また、今年度のリプレースにより v890 のサービスが停止したことにより sparc 系の CPU が並列計算機群の中から姿を消した。しかしながら、Fujitsu SPARC Enterprise M4000 (SPARC64 VII 2.4GHz 4core×4CPU, 64GB メモリ)にて構成される情報科学センターの UNIX ターミナルサービスにて sparc 系のバイナリファイルは実行可能である。

本報告「北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告書 2009」は情報科学センターから提供されている共有計算サーバを利用した研究の概要とその成果報告である。各ユーザーのニーズを的確に把握し、さらに充実した計算機環境を構築することを目的として、MPC グループの有志と情報科学センターにより mpc メーリングリストにおいて本報告への協力の依頼を行った。その結果、各著者のご厚意によって情報科学分野から 7 件、材料科学分野から 15 件、知識科学分野から 1 件の報告の提出をいただいた。これらの報告より材料科学分野において多数の研究が共有計算サーバを用いて行なわれていることがわかる。また、ここ数年の傾向として、材料科学分野における汎用的なアプリケーションを実行する環境としても共有計算サーバが広く利用されている。以上のように、共有計算サーバは基礎的な研究環境の一つとしてますます重要性を増しているといえる。

表 1:JAIST で利用可能な計算サーバ(2010 年 7 月 1 日現在)

機種名	主な仕様
Cray XT5	分散・共有メモリ, スカラー型 CPU: Quad-Core AMD Opteron 2.4GHz (Shanghai) 計算ノード: CPU: AMD Opteron 2.4GHz×256×8(19.6TFLOPS) メモリ: 16GB×256 = 4TB CPU 間接続: 3D トーラス結合 帯域幅: CPU-CPU 間 6.4GB/s(HyperTransport) CPU-メモリ間 5.3GB/s ノードから外部へのデータ転送 7.68×18 = 138.24GB/s(双方向) サービスノード: CPU: AMD Opteron 2.4GHz×4×8 メモリ: 16GB×8 = 128GB

NEC SX シリーズ	NEC SX-8(2010年3月サービス終了) CPU: ベクトル型 16GFLOPS/CPU(合計 128GFLOPS) メモリ:64GB(共有メモリ) メモリバンド幅:1CPUあたり 64GB/s(合計 612GB/s) ディスク装置:5TB(RAID5) OS: SUPER-UX(UNIX System V 準拠)
	NEC SX-9 CPU: ベクトル型 102.4GFLOPS/CPU(合計 409.6GFLOPS) メモリ:256GB(共有メモリ) メモリバンド幅:1CPUあたり 256GB/s(合計 1024GB/s) ディスク装置:5TB(RAID6) OS: SUPER-UX(UNIX System V 準拠)
Sun Fire V890	共有メモリ型(2010年3月サービス終了) CPU: Sun UltraSPARC-IV (1.35GHz) × 8 メモリ: 64GB interconnection Sun Fireplane (9.6GB/s) ディスク装置: /work 400GB network: 1000Base-SX, 1000Base-T OS: Solaris 10
SGI Altix4700	共有メモリ型 CPU: デュアルコア インテル(R) Itanium2(R) プロセッサ メモリ: 24GB × 96 台 NUMALink4(6.4GB/秒)ファブリック結合させた共有メモリ型 合計 96 個のプロセッサ(192 個のコア), 2304GB OS: SUSE Linux Enterprise Server 10 SP1
SGI AltixXE250	分散共有メモリ型 Master ノード: Intel Xeon 2.8GHz/12MB(8 コア) × 1 ノード CPU: Intel Xeon 2.8GHz/12MB × 2 (8 コア) × 4 ノード FPGA: Intel Xeon 2.13GHz/12MB(4 コア) × 1 ノード FPGA モジュール: XtremeData Inc XD2260i (Altera Stratix III SE260 FPGA × 2)
IBM Cell B.E.	分散共有メモリ型 CPU: IBM Power5+ 2.1GHz(管理ノード) IBM PowerX 8i Cell 3.2GHz × 2 × 8 ノード 理論性能: 217GFlops × 8 = 1.7TFlops
Apollo PC クラスタ	<Apollo>(2010年3月サービス終了) CPU: AMD Opteron DP Model 250(2.4GHz) × 32 メモリ: 4GB × 32 ディスク装置: 160GB × 32 OS: SuSE Linux Enterprise Server 8, SCore 5.8
	<Apollo gB222X/1143H> 分散共有メモリ型 システム全体で 704CPU コア, 2560GB のメモリ (高速演算ノード) 64node CPU: Intel Xeon 2.93GHz(Nehalem-EP 4core) × 2 メモリ: 24GB DDR3 (大容量メモリノード) 8node CPU: AMD Istanbul 2.93GHz(Istanbul 6core) × 4 メモリ: 128GB DDR2 ディスク装置: /work 4.8TB(RAID6 Luster ファイルシステム) OS: Rad Hat 5.4 Infiniband 4 × QDR
Hitachi SR11000 モデル K1	[知識センターの管理] CPU: POWER5(2.1GHz) × 4 メモリ: 128GB ディスク装置 /work0, /work1: 730GB, 1073GB OS: AIX



## 参考文献

- [1] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1992 年度-1993 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-94-0001, (1994).
- [2] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1994 年度-1996 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-97-3, (1997).
- [3] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究(1997 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-98-1, (1998).
- [4] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(1998 年度-2000 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-003, (2002).
- [5] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2001 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-004, (2002).
- [6] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2002 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2003-001, (2003).
- [7] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2003 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2004-002, (2004).
- [8] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2004 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2005-001, (2005).
- [9] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2007”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2008-002, (2008).
- [10] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2008”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2009-001, (2009).

## 2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

## 数値流体力学における $\lambda_2$ 法を用いた渦の可視化手法の提案

埴田翔

北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科

利用計算機: Altix4700, Asterism.

計算機性能の向上によって、近年、大規模な数値流体力学(Computational Fluid Dynamics)解析が行われている。その結果、計算結果のデータサイズも非常に大規模になっている。大規模な数値流体力学計算の例として、海洋流や気象などのシミュレーションがあげられる。

大規模な流れの現象を観察する際に、重要となるのが渦の含まれる領域である渦領域である。また、流れの現象においても、渦は流れにおける重要な特徴である。

大規模な計算結果を可視化する場合、現在用いられているような一般的な可視化手法では、可視化のための表示オブジェクトが増加するために情報量が多くなり過ぎて、ユーザーが流れの現象を観察しづらい状態となってしまう。また、非常に大規模な計算結果になると、計算結果をそのまま可視化することが難しくなっている。

非常に大規模な計算結果の可視化を行なう場合、一般的には格子点を間引くことでデータサイズを小さくして可視化を行う方法が使用されることがある。この時データサイズを小さくするために、格子点を均一の間隔で間引きを行った場合に、間引きの割合が大きいと、流れにおいて重要な特徴を持った格子点まで間引かれてしまいう可能性がある。

数値流体力学における流れの可視化手法においては、Vector やStreamline, LIC (Line Integral Convolution) 法が広く用いられてきた。これら可視化手法は、ベクトル表示では流れにおける渦の強さや方向、流速線では流れの様相を見る事ができる。また、LIC 法では渦の中心を視覚的に表現することができる。

流れの強さや方向、渦の中心などといった流れの詳細を見るにはこれらの方法は、非常に有効である。しかし、渦領域を捉えようとした場合、これらの方法では経験を背景に視覚的な判断基準に頼ることになり、正確な渦領域を把握することは困難である。したがって、何らかの渦の境界の抽出手法を用いて渦の境界を明かにする必要があると考える。

一般的に渦を評価するために広く用いられている手法に、渦度の大きさを評価するVorticity Magnitude がある。渦の強さを評価するには良い手法である。しかし、この手法を渦の抽出に用いる場合には、渦を判定するために、一定以上の渦度の値を持った領域を渦領域とするといったような閾値を設定する必要がある。また、渦の抽出手法には、他にもいくつかの方法があるが、渦を判定するために、人為的に閾値などの条件を設定しなければならない方法もある。渦のなるべく定性的に捉える為には、閾値など人為的な条件を設定する必要がない方法が望ましいと考える。他の渦領域の定義としては、Chong et al.(1990)により提案された  $\Delta$ -criterion やHunt et al.(1988) により提案されたQ-criterion等がある。

しかし、Jeong et al. によると、Q-criterion は強い外部応力による渦の場合、渦の検出が不正確になる可能性があることが指摘されており、 $\Delta$ -criterion に関しても渦が、正確に抽出

出来ない場合があることが示されている。渦領域を的確に抽出できる手法を用いる必要がある。

また、時系列における非圧縮性粘性流れにおいて渦領域などの変化を観察しようとした場合、アニメーションまたは複数の静止画で表現する方法がある。アニメーションによる可視化は、渦領域の変化を視覚的に捉え、直感的に変化を理解できるが、定量的な渦領域境界の比較を行う場合には不都合である。また、複数の静止画で表現する方法でも、視覚的に渦領域の変化を捉えることができるが定量的でなく、多くの時系列データある場合は多くの比較を行わなければならない。

また、大規模や複雑な形状における数値流体力学計算の計算結果をわかりやすく可視化できるような可視化手法が望まれている。

したがって、本研究では、時系列における渦領域の変化を明示的に表現することができる可視化手法を提案／開発した。

流れにおける重要な特徴である渦領域の抽出には、Jeong et.al によって開発された  $\lambda_2$  法を渦領域の抽出手法として選択した。この手法は閾値などを設定しなくても一意的に渦領域の抽出することができる。さらに、時系列における渦領域の状態の変化を渦領域の生成、渦領域の消滅、渦領域の継続、非渦領域と定義することで、時系列における渦領域の変化を明示的に表現した。

Cavity Flow 及びKarman 渦列を対象に、提案手法を適用し可視化した結果について検討を行なった。また、時系列データの差分の間隔を変化させた場合の提案手法を適用した場合の可視化結果について検討を行ない、その結果を考察した。さらに、提案手法と一般的な可視化手法であるVector やLIC 法などと重畳し表示することにより、時系列における渦領域の変化と渦領域の内部の流れの詳細を表現する重畳可視化について検討を行なった。

## 研究業績

1. 埴田 翔, 渡邊 正宏, 安里 彰, 門岡 良昌, 松澤 照男 “非圧縮粘性流れにおける渦領域の抽出及び可視化” 第 23 回数値流体シンポジウム講演要旨集 pp.119, 2009.12
2. 埴田 翔, 渡邊 正宏, 安里 彰, 門岡 良昌, 松澤 照男 “非圧縮性粘性流れにおける渦領域の可視化手法の提案” 第 6 回生体工学と流体工学に関するシンポジウム講演論文集 pp.1-6, 2010.2

# Cray XT5 における数値流体プログラミングの Hybrid 並列による高速化について

情報科学研究科 西條晶彦  
使用計算機 Cray XT5

並列計算機のアーキテクチャは変化している。大規模な計算を高速に行うには並列計算機による並列処理が欠かせない。並列計算機の能力を決める要素にはコアプロセッサの性能やネットワーク構造など様々なものがあるが、メモリアーキテクチャは影響の大きいものの一つである。並列計算機のメモリアーキテクチャは大きく分けて、複数のプロセッサがメモリ空間を共有する共有メモリ型、計算機をネットワークで結び通信によって大規模メモリを実現する分散メモリ型、そしてこれら組み合わせである分散共有メモリ型がある。コストパフォーマンスの良さから、現在の並列計算機の多くは分散共有メモリ型である。

分散共有メモリ型並列計算機は共有メモリ型の計算機を1ノードとし、複数のノードをネットワークで接続した形態の計算機である。このようなアーキテクチャの計算機においてはノード内の並列計算を OpenMP などによる共有メモリ並列で、ノード間の並列計算をメッセージパッシングによる通信 (MPI) で行うという、二つの並列化モデルを混ぜ込んだ Hybrid 並列化手法が性能を引き出すのに有効であると言われている。先行研究ではほとんどの数値計算において Hybrid 並列は MPI のみを用いる Pure 並列の方と比べて同程度かやや劣るが、Hybrid 並列の方が性能を出す場合もあるという結果が報告されている。

このように Hybrid 並列の有効性は未だ明らかではない。Hybrid 並列は MPI の通信オーバーヘッドを避けることができるが、その代わりに共有メモリ並列を混ぜ込むことによって生じるスレッド間の同期オーバーヘッドが加わるため、どちらかのモデルが決定的に良いとは言えない。コードを実行する計算機のメモリ性能、ネットワーク性能、計算対象の性質やプログラミングの手法によっても、Hybrid 並列の性能は変わりうる。

本研究では、ターゲットとなる大規模並列分散共有メモリ型計算機として、本学に2009年に導入された Cray XT5 を用いる。本学における Cray XT5 の構成はノードあたりクアドコア CPU を2ソケット、全体で256ノードが使用可能な大規模並列計算機である。本研究では Cray XT5 の OpenMP によるノード内の並列処理性能、MPI によるノード間の通信性能を調査し、Cray XT5 に適した Hybrid 並列プログラミングモデルを調べ、性能の高い数値流体ソルバを構築することである。

Hybrid 並列の性能を向上させるには、OpenMP 並列部の性能を上げるのが効果的である。その一つとして SPMD 的に OpenMP を実行するのが有効であることによって指摘されている。既存のほとんどの研究では、Hybrid 並列のプログラミングモデルとして MPI コードのループの部分に OpenMP スレッド内からは MPI 手続きを呼ばない Hybrid

マスターオンリーモデルが用いられている．そこで，本研究では SPMD 的に実行された OpenMP スレッドから MPI 手続きを呼ぶ手法を用いて OpenMP 並列部を高速化する技法を用いて Hybrid 並列を用い，有限要素法による共役勾配法ポテンシャルソルバに適用した．

その結果，Hybrid 並列が Pure 並列よりも性能が高くなるのは，高並列時に負荷分散がうまくいかずアプリケーションの通信時間が計算時間よりも大きくなる場合であった．2次元ポテンシャルソルバを Hybrid 並列化した数値流体アプリケーションとして用い，Hybrid 並列プログラミングのマスターオンリーモデルと MPI+OpenMP SPMD を比較した結果，問題サイズの小さい場合は Pure 並列と比べて同程度からやや優れた結果を得た．問題サイズが大きい場合は並列度が上がると Hybrid 並列との差がなくなっていくことがわかった．

## 研究業績

西條晶彦, 松澤照男 情報処理学会第 123 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会 (HOKKE-17) 講演論文集 No.2, Vol.2009-HPC-123, pp.1-5(2009.11.30-1) 北海道大学

西條晶彦, 松澤照男 Cray XT5 における数値流体アプリケーションの Hybrid 並列による高速化 第 6 回生体工学と流体工学に関するシンポジウム (6th-JK) 講演論文集 pp.1-6(2010.2.20)

## アクセラレータを利用した並列計算

情報科学研究科 太田 理

利用した計算機：QS22

プロセスルールの向上により、クロック向上よりも複数のCPU(コア)をオンダイにして、一つのノードに搭載できるCPU数が増えている。そのため、MPI(Message Passing Interface)とOpenMPなどを利用したハイブリッド並列が主流となり、ノード間同士はMPI、ノード内はOpenMPによる並列としているプログラミングが多い。しかしながら、Green500[1]などにおいては、GPGPUなどCPUとは異なる処理を利用したヘテロな演算環境を利用したシステムが上位を占める。そのため、マルチコア用のプログラミングモデル、ノード間通信にはMPIノード内通信にはOpenMPとするハイブリッド並列では有効にシステムを利用できない。そのため、ヘテロな環境を利用した計算システムの場合、それぞれのシステムに適合したプログラミングを行う必要が出てくる。GPGPUにおいては専用のコンパイラを使用してGPGPUのメモリに同じ配列をマップして使用する。一方、ヘテロなCPU環境を利用したシステムとしてCell B.E. (Cell Broadband Engine)アーキテクチャがある。Cell B.E.の場合、libspe2というライブラリとpthreadを使用することにより、処理を別なCPUに託す。そこで、我々はヘテロな環境におけるアルゴリズムを構築することを目的としている。

北陸先端科学技術大学院大学(以下、当大学)情報科学センターが所有するqs22はCell B.E.アーキテクチャを基に倍精度演算を強化させたPowerXCell 8iを二つ搭載しているノードが8台と管理ノードから構成されている。Cell B.E.アーキテクチャはppuとspuから構成され、spuにはLSと呼ばれるメモリがある。このLSは256KBの容量である。

図1. にpthreadの生成と結合にかかった時間を示す。これにより、スレッドの生成が最大0.02秒弱かかっていることが解る。また、図2. に行列×ベクトルの計測時間と速度向上率の結果を示す。行列のデータを複数回受け取ることにより、SPE上に一度マッピングしてから計算をしている。これにより、2048×2048のサイズになるとスケールアップしていることが解る。しかしながら、スレッドの生成には0.02秒、行列×ベクトルの計算には0.035秒とほぼ変わらない時間がかかっていることより、より大きい行列をSPEにストアした方が効率がよいと考えられる。なお、全データは8バイトで宣言している。

今回は行列×ベクトルの演算による速度向上率を計測した。演算にはPower系で使用できるSIMD演算は使用していない。この演算機能を使用すれば行列×ベクトルの計測時間はより短くなると考えられる。

[参考文献]

1) <http://www.green500.org/>

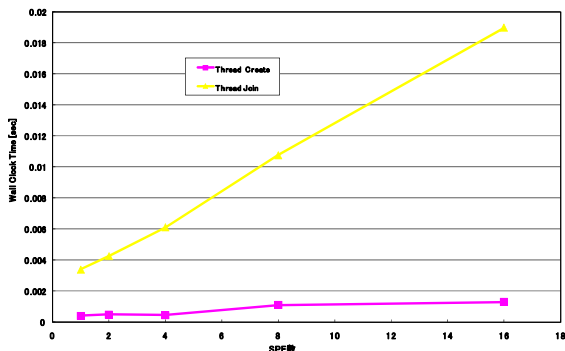


図1. Pthreadの生成と結合に要する時間

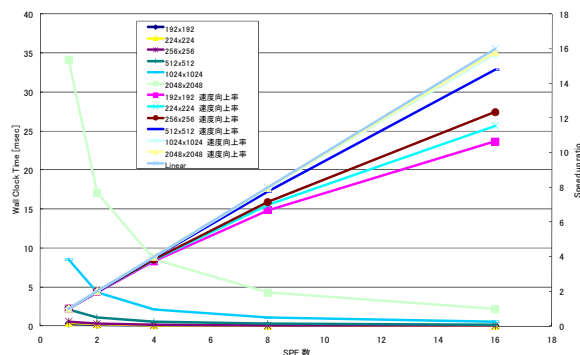


図2. 行列×ベクトルの計測時間と速度向上率

## 細孔を通る浸透流の静電モデル

関西大学システム理工学部 関 眞佐子  
使用機 SGI Altix4700

微小血管の血管内腔と血管外組織の間で行われる、種々の物質輸送は生命維持のために不可欠である。高分子などの溶質の輸送においては、溶質の帯電の符号により微小血管壁の透過性が大きな影響を受けることが実験的に知られている。これは、血管壁あるいは壁表面に存在する高分子の層（糖鎖層）が負に帯電しているため、これらの間の静電相互作用が原因であると考えられる。

本研究では、浸透圧に起因する流れ、即ち浸透流に対する電気的な影響について、微小血管壁透過性を調べる基本モデルである細孔モデルを用いて解析した。帯電した溶質を含む溶液を考え、溶質濃度の異なる溶液が、溶質サイズより大きな径の多数の細孔を有する半透膜により隔てられている。膜の両側における溶質の濃度差によって浸透圧が生じて、細孔内に浸透流が起きる場合を考える。溶質は球形粒子とし、溶質表面と細孔表面には同符号の電荷が一様に分布しているものと仮定する。媒質は小さな正負イオンを含む電解質溶液であり、膜の両側でイオン濃度は等しい場合を考える。

ポアソン・ボルツマン方程式をスペクトル有限要素法を用いて数値的に解き、1個の溶質粒子周りの細孔内の電場を求めた。得られた電場から静電自由エネルギーを計算し、溶質粒子と細孔表面電荷の間の静電相互作用エネルギーを評価した。これを溶質粒子に対するポテンシャルとして、細孔内のニュートン流体の流れを解析し、浸透流の強さを評価した。

解析の結果、膜と溶質が同符号に帯電している場合には、浸透流の強さを表す係数である反射率が大きくなり、浸透流が増加することが分かった。これは、膜と溶質の間に反発力が働く結果、実質的に溶質粒子の半径が大きくなった場合と同等であることから理解できる。反射率の増大の程度は、帯電量が大きく、媒質のイオン濃度が低いほど大きいことが分かった。相反定理を用いれば、反射率は溶質の透過性の程度にも関係することが導かれる。本解析結果から、溶質の透過性は、デバイ長が短い場合でも電荷の有無や符号により顕著に影響されることが示唆された。

### 研究業績

- [1] Sugihara-Seki, M., Akinaga, T., Itano, T. and Matsuzawa, T.: Electrostatic Analysis for Osmotic Flow through Rectangular Channels. *Theoretical and Applied Mechanics*, Japan, 56, 365-372 (2008).
- [2] 秋永剛、板野智昭、関眞佐子、松澤照男：浸透流の静電モデル。第12回関西大学先端科学技術シンポジウム講演集, p.171-172 (2008).



## Performance Evaluation of a Green Scheduling Algorithm for Energy Savings in Cloud Computing

*Truong Vinh Truong Duy (0820006)*

*Inoguchi Lab, School of Information Science*

*Machines in use: Altix-XE*

With energy shortages and global climate change leading our concerns these days, the power consumption of datacenters has become a key issue. Obviously, a substantial reduction in energy consumption can be made by powering down servers when they are not in use. In this work, we aim to design, implement and evaluate a Green Scheduling Algorithm integrating a neural network predictor for optimizing server power consumption in Cloud computing environments by shutting down unused servers.

We have developed a neural predictor and performed experiments to prove its accurate prediction ability with low overhead to fit in dynamic real time settings [1]. For example, the 20:10:1 network with a learning rate of 0.3 has reduced the mean and standard deviation of the prediction errors by approximately 60% and 70%, respectively. The network needs only a few seconds to be trained with more than 100,000 samples, and then makes tens of thousands of accurate predictions within a second, without the need of being trained again. The use of this predictor is thought to help the algorithm cleverly make appropriate turning off/on decisions, and to make the approach more practical. As virtual machines are spawned on demand to meet the user's needs in Clouds, the neural predictor is employed to predict future load demand on servers based on historical demand.

Our scheduling algorithm works as follows. According to the prediction, the algorithm first estimates the required dynamic workload on the servers. Then unnecessary servers are turned off in order to minimize the number of running servers, thus minimizing the energy use at the points of consumption to provide benefits to all other levels. Also, several servers are added to help assure service-level agreement. The bottom line is to protect the environment and to reduce the total cost of ownership while ensuring quality of service.

To evaluate the algorithm, we performed simulations with four different running modes and parameters. The simulations were conducted on SGI Altix XE nodes having the configuration: Intel Quad-Core Xeon, 8GB RAM, Linux OS, and JDK 1.6 during the period from July, 2009 to January, 2010. Evaluation results show that in the optimal mode, the power consumption reduction rate can be significantly achieved, up to 72.2% compared to the conventional mode, without affecting performance [2]. The prediction mode can save energy even more, up to 79.5%, although the drop rate is quite high. Lastly, the mode running prediction plus 20% additional servers offers the best combination: a drop rate of 0.03% and a power reduction rate of 46.3%. More experiments are being carried out on Altix XE for the purpose of improving our work.

- [1] T.V.T. Duy, Y. Sato, and Y. Inoguchi, "Improving Accuracy of Host Load Predictions on Computational Grids by Artificial Neural Networks", In Proceedings of the 23rd IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (The 11th Workshop on Advances in Parallel and Distributed Computational Models), pp. 1-8, 2009.
- [2] T.V.T. Duy, Y. Sato, and Y. Inoguchi, "Performance Evaluation of a Green Scheduling Algorithm for Energy Savings in Cloud Computing", In Proceedings of the 24th IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (The 6th Workshop on High-Performance, Power-Aware Computing), pp. 1-8, 2010.

## **Dynamic Communication Performance Evaluation of Hierarchical Interconnection Network.**

School of Information Science, Inoguchi Lab., JAIST

Used Machine: Altix 4700

M.M. Hafizur Rahman

### **Abstract:**

The dynamic communication performance of a massively parallel computer is characterized by message latency and network throughput. Message latency is the time required for a packet to traverse the network from source to destination. Network throughput is the maximum amount of information delivered per unit of time through the network. Evaluation of dynamic communication performance of an interconnection network consisting of thousands of nodes using a PC is possible; however, it takes long time to evaluate it. High speed computation environment of JAIST significantly reduced the simulation time in our experiment. We used our simulator written in C code and run it on Altix 4700 using gcc compiler. Some of the recent results are published in the following journals.

### **Publications:**

- ① M.M. Hafizur Rahman, Yasushi Inoguchi, Yukinori Sato, Susumu Horiguchi, “TTN: A High Performance Hierarchical Interconnection Network for Massively Parallel Computers” *IEICE Transactions on Information and Systems, Japan*, vol.E92-D, No.5, pp.1062 –1078, May 2009.
- ② M.M. Hafizur Rahman, Xiaohong Jiang, Md. Shahin-Al Masud, Susumu Horiguchi, “Network Performance of Pruned Hierarchical Torus Network,” *Proc. of the 6<sup>th</sup> IFIP conf. NPC, pp 9-15. Gold Coast, Australia, 2009.*
- ③ M.M. Hafizur Rahman, Yasushi Inoguchi, Y. Sato, S. Horiguchi, and Yasuyuki Miura, “Dynamic Communication Performance of the TESH Network under Nonuniform Traffic Patterns,” *Journal of Networks*, Academy Publisher, vol. 4, No. 10, pp.941 –951, Dec. 2009.

# The report on use of JAIST's computational facilities

School of information science

Nguyen Thanh Cuong (Collaboration with Dr. Ryo Maezono)

Used Machine: SX8, Cray-XT5

## 1. Quantum Monte Carlo Calculations of bulk modulus of Si nanocrystal

Recently, the mechanical enhancement of semiconductor nanocrystals is reported experimentally in several nanocrystal than those of their bulk crystals. However, the microscopic origin of the enhanced properties has not been well established. Since their structures are difficult to be controlled and identified experimentally, first-principles electronic structure calculations are expected to be a useful tool to understand/predict what occurs in experiments. Hence we studied it by using ab-initio density functional theory (DFT) and quantum Monte Carlo (QMC) calculations, applying them to  $\text{Si}_{87}\text{H}_{76}$  nanocrystal. We evaluated the bulk modulus this nanocrystal by using LDA-DFT, GGA-DFT, VMC (variational QMC) and DMC (diffusion QMC) method. It found that the DMC method give the most reliable results, and well agreement with LDA-DFT in this system.

For this work, we use density functional theory calculations with Gaussian 03 software on SX8 machine with 4 cpus/job in 4 days with large memory. The quantum Monte Carlo calculations are carried out on Cray XT5 with 16 nodes/job.

### Publications

R. Cherian, C. Gerard, P. Mahadevan, N. T. Cuong, and R. Maezono, *Phys. Rev. B*, submitted.

## 2. Quantum Monte Carlo calculation of CO adsorption on Cu (111) surface

For decades, the density functional theory (DFT) has been the main theoretical tool used to analyze, understand, and predict material properties and chemical processes. However, it fails in some cases, in particular, in weakly bound systems where van der Waals forces play a major rule. One of the well-known examples is the CO adsorption on transition metal surfaces. DFT method systematically predicts that CO prefers the hollow site on Cu, Rh, Pt (111) surfaces while the experiments show the adsorption into the top. Therefore, many researches have tried to understand and propose the new approaches to solve this problem. Here, we use many-body quantum Monte Carlo method, an extremely accurate method, to study the CO puzzle on Pt (111) surface.

We use density functional theory calculations with Quantum-Espresso code, and Quantum Monte Carlo with CASINO code. The calculations are carried out on Cray XT5 machine with 16 nodes/job.

### 3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

## 不均一系 Ziegler-Natta オレフィン重合における活性点のフレキシビリティ

(マテリアルサイエンス研究科 助教) 谷池 俊明

使用計算機 : Altix4700

## 概要

不均一系 Ziegler-Natta(ZN)触媒を用いたプロピレンのイソ立体選択重合において、ルイス塩基化合物(ドナー)の添加は触媒の立体特異性を著しく向上するだけでなく、活性・水素応答性・共重合性や PP の分子量分布といったあらゆる触媒特性に大きな影響を及ぼす。そのため、現行触媒の性能改良を目指した新規ドナーの開発が盛んに行なわれてきたが、ドナーが触媒性能に影響する機構の理解の欠如が大きな問題となっている。

ドナーによる触媒の立体特異性の向上機構は、ドナーと触媒の相互作用を考える上で最も基本的かつ重要な要素である。近年、我々は実験結果に裏打ちされた密度汎関数計算により、活性 Ti 種近傍に共吸着したドナーが Ti 種と立体・電子的に相互作用することで触媒特性に直接的に影響を与える機構を示した。具体的には、 $MgCl_2$  (110)活性表面上の Ti 単核種と共吸着した安息香酸エチル(EB)は、成長鎖の配向を立体的に制御することで Ti 単核種にイソ立体特異性を付与するだけでなく、電子供与効果によりプロピレン挿入の位置選択性を向上し、かつ、プロピレンへの連鎖移動反応を抑制することがわかった。本研究では、この“共吸着モデル”に基づき、Ti 種と EB から成る活性点構造のフレキシビリティがプロピレン重合特性(活性、立体選択性、位置選択性、連鎖移動特性)に与える影響を密度汎関数計算により明らかにすることを目的とした。

## 計算方法

密度汎関数計算には DMol3 を用い、主に Altix4700 で実行した。汎関数として GGA PBE を、基底関数には DNP 及び有効殻ポテンシャルを用いた。活性点構造を Fig. 1 に示されるようなクラスター ( $TiCl_2iBu-EB-5MgCl_2$  あるいは  $TiCl_2iBu-EB-10MgCl_2$ ) で表現し、EB や  $TiCl_2$  の自由度の固定の有無によって柔軟性の異なる複数のモデルを用意した。ここでは EB の柔軟性の異なる以下の 3 つのモデルについて述べる(Fig. 2)。  
 モデル A:  $TiCl_2$  及び EB の自由度を完全に固定。  
 モデル B:  $TiCl_2$  及び EB の構造を最適化。  
 モデル C:  $TiCl_2$  及び EB の C=O 基のみを固定。

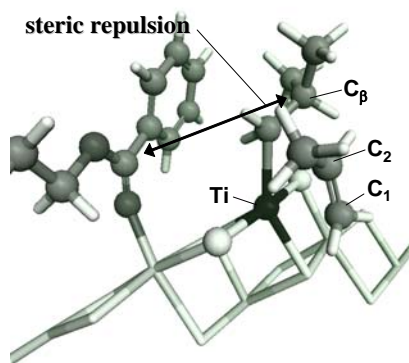


Fig. 1. Coadsorption of ethylbenzoate with Ti active species. Ti: black, C: gray, Mg: light gray, Cl,H: white, O: dark gray.

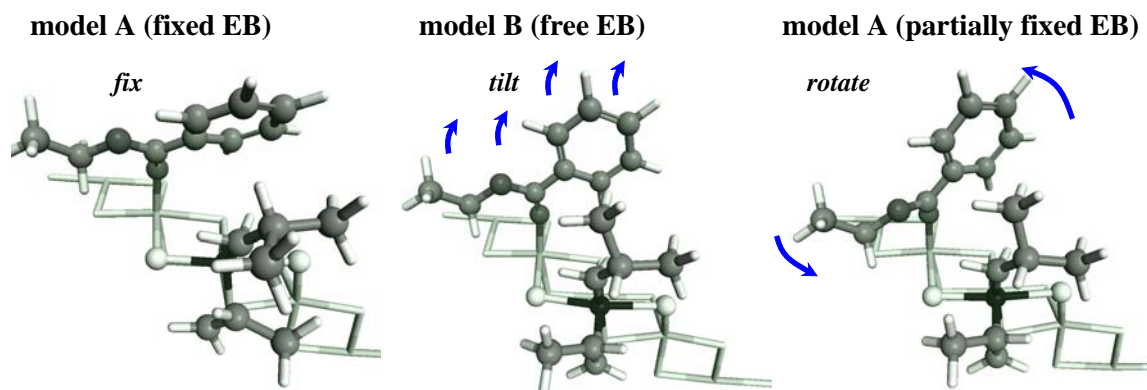


Fig. 2. Employed models. The arrows indicate the direction of the structural relaxation of EB.

## 成果

Tab. 1 にモデルにおけるプロピレン挿入の見かけの活性障壁 ( $\Delta E_{\text{ap}}$ )、立体選択性 ( $\Delta\Delta E_{\text{stereo}}$ )、位置選択性 ( $\Delta\Delta E_{\text{regio}}$ )、挿入とプロピレンへの連鎖移動反応のエネルギー差 ( $\Delta\Delta E_{\text{CT}}$ ) を比較した。EB を完全に固定した場合 (モデル A)、3.5 kcal/mol もの高いイソ立体選択性が得られたが、活性障壁は 21.7 kcal/mol と実験値 (6–12 kcal/mol) と比較して著しく高かった。これは、EB と成長鎖の立体反発が re, si 面挿入共に顕著であることに起因する。一方、プロピレン挿入中に EB の構造を完全に最適化した場合 (モデル B)、活性障壁は 6.3 kcal/mol まで下がるが、EB が表面方向に倒れることで成長鎖との立体反発が完全に消失し (Fig. 2)、立体選択性はほぼ零になってしまう。これらの結果は、高い立体選択性と低い活性障壁を両立するに当たって、EB が適度な自由度を持つ重要性を示唆している。実際に EB の C=O 基の自由度を固定したモデル C では、実験値と同程度の活性障壁を持ちながら、立体選択性は 4.8 kcal/mol とモデル A の値よりも高く、EB はより高効率な立体障害となる。位置選択性は立体選択性とは逆の傾向を示し、EB による立体障害は位置選択性をわずかに低下させる。これは位置選択性の起源が成長鎖に対する立体障害とは異なることを意味している。

## 結論

ZN 触媒の Ti 種とドナーのフレキシビリティが、プロピレン挿入の活性障壁と立体選択性の双方において支配的要因になることを初めて示した。

Tab. 1. Activation barriers and selectivities for propylene polymerization with models A-C.

	model A	model B	model C
$\Delta E_{\text{ap}}$	21.7	6.3	11.6
$\Delta\Delta E_{\text{stereo}}$	3.5	0.3	4.8
$\Delta\Delta E_{\text{regio}}$	-0.6	0.8	-0.9
$\Delta\Delta E_{\text{CT}}$	10.7	4.5	15.1

\*Energies are shown in kcal/mol.

\*\* $\Delta E_{\text{ap}}$ ,  $\Delta\Delta E_{\text{stereo}}$ ,  $\Delta\Delta E_{\text{regio}}$ , and  $\Delta\Delta E_{\text{CT}}$  are the apparent activation energy of the most stable 1,2 insertion, stereoselectivity, regioselectivity, and energetic difference between the 1,2 insertion and chain transfer to propylene, respectively.

### 発表論文リスト

1. “A Density Functional Study for Influences of Molecular Flexibility of Donors on Insertion Barrier and Stereoselectivity of Ziegler-Natta Propylene Polymerization”, Toshiaki Taniike, Minoru Terano, *Macromol. Chem. Phys.*, **2009**, 210, .2188-2193, 査読有.
2. “Ti種とドナーの共吸着に基づくMgCl<sub>2</sub>担持型Ziegler-Natta触媒の設計指針に関する第一原理的説明”, 谷池 俊明, 寺野 稔, 次世代ポリオレフィン総合研究, Vol. 3, 三恵社, 2009, 査読無.

### 主な国際発表

1. “Influence of Donors on Propylene Polymerization Properties of Heterogeneous Ziegler-Natta Catalysts Studied by Density Functional Calculations”, T. Taniike, and M. Terano, International Workshop on Polyolefin Engineering and Processing, Ishikawa, Japan, Mar. 19, 2009, *Poster*.
2. “First-Principle Explanation on Cooperative Roles of MgCl<sub>2</sub> and Donors in Ziegler-Natta Propylene Polymerization”, Toshiaki Taniike, and Minoru Terano, LSP/JAIST INTERNATIONAL COLLOQUIUM ON HETEROGENEOUS ZIEGLER-NATTA CATALYSTS, Naples, Italy, Jun. 25–26, 2009, *Invited Lecture*.
3. “Theoretical Elucidation of Molecular Behavior of Donors in Ziegler-Natta Propylene Polymerization”, Toshiaki Taniike, Minoru Terano, Advances in Polyolefins 2009, Santa Rosa, USA, Sept. 20–23, 2009, *Invited Lecture*.
4. “Coadsorption Model for the Catalyst Design of Heterogeneous Ziegler-Natta Catalysts”, Toshiaki Taniike, and Minoru Terano, 3<sup>rd</sup> Asian Polyolefin Workshop 2009, Seoul, Korea, Oct. 27, 2009, *Oral*.
5. “Theoretical Explanation of MgCl<sub>2</sub>-Supported Ziegler-Natta Catalysts based on a “Coadsorption Model” of Donors with Ti Species”, Toshiaki Taniike, Minoru Terano, Invited Youth Talented Talk on Polymer Chemistry, Beijing, China, Nov. 4, 2009, *Invited Lecture*.
6. “Coadsorption Model for a First-Principle Explanation of Roles of Donors”, Toshiaki Taniike and Minoru Terano, JAIST International Workshop “Molecular Architecture of Heterogeneous Olefin Polymerization Catalysts”, Ishikawa, Japan, Dec. 14–15, 2009, *Invited Lecture*.

## 共有計算サーバー使用成果報告書 2009 年度

マテリアルサイエンス研究科

学籍番号 0830009

大塚研究室 岩滝幸司

使用計算機：XT5

### [使用内容]

副テーマの研究として並列計算機 Cray XT5 を用いて物性シミュレーションを行った。この研究では、擬ポテンシャルと擬原子局在基底を用いた密度汎関数法で物性のシミュレーションを行える openmx というソフトを Cray XT5 上で用いて、LT-GaAs (MBE 法による低温成長 GaAs) の物性シミュレーションを行った。また、報告されている LT-GaAs の実験結果と物性シミュレーションの結果を比較して、実験結果の妥当性を考察した。なかでも、LT-GaAs 中のイオン化したアンチサイト As が持つ磁気モーメントの再現を目標に計算を行った。

### [使用成果]

並列計算機 Cray XT5 上で LT-GaAs について 64 原子のスーパーセルを用いて密度汎関数法で計算を行った。結果、高濃度にアンチサイト As が導入された LT-GaAs の実験結果と良く一致する結果が得られた。また、スーパーセル内に Ga 空孔を導入した場合は局在スピンの得られた。また、アンチサイト As および Ga 空孔が導入された GaAs の特徴的な電子構造の形成には、それら点欠陥の隣の As 原子の p 電子が重要な役割を果たしていることが分かった。

しかし、実験の目的である LT-GaAs 中のイオン化したアンチサイト As の磁気モーメントの再現は出来なかったため、再現を行うためには計算モデルの工夫が必要と考えられる。



## Li イオン 2 次電池用 Si 系負極－電解質界面における電気化学反応の第一原理分子動力学シミュレーション

日産自動車株式会社 総合研究所 大脇 創

使用計算機：XT5

計算規模：1~128 プロセッサ，計算時間は最大で 30 日程度

**【概要】**有効遮蔽体（Effective Screening Medium, ESM）法[1]を導入した大規模第一原理計算プログラム OpenMX（OpenMX+ESM）を用いて，Li イオン 2 次電池用 Si 系負極－プロピレンカーボネート（PC）界面における，充電条件下での電気化学反応のシミュレーションを行ない，SEI 生成に関連し得る電気化学的反応を確認した。

**【背景】**本研究チームでは，Li イオン 2 次電池用の高容量負極材料として Si 系材料をターゲットに据えている。Si 系負極材料は充電時に合金化を経ながら Li を取り込むが，その詳細なプロセスについては，基礎的観点からも大いに興味を持たれている。また，Si 系負極表面に生成される SEI は，Si 系負極材料の高サイクル耐性化のための重要な要素であり，反応機構の解明や生成物の特定，更にはそれらが電解質や添加物の違いによってどのように変化するのか，といった課題について精力的に研究が為されている[2]。このような Si 系負極表面と電解質との界面における電気化学反応についての分子レベルでの理解を得るために，計算科学によるアプローチを行なった。今回我々は，Si 系負極表面－電解質界面系についての第一原理分子動力学シミュレーションを，既に本研究チームで作成した OpenMX+ESM[3]に基づいて実行した。

**【計算モデル】**電極表面モデルは H 終端 Si(111) スラブとし，電解質領域は溶媒和構造を有する  $\text{Li}^+$  1 個を含む PC 分子群とし，それらから Si 系負極－電解質界面モデルを構築した（Figure 1）。1 ユニットセル中において，スラブモデルは  $\text{Si}_96\text{H}_{32}$ ，PC 分子は 20 分子とし， $\text{Li}^+$  を含めて全系 389 原子で構成されている。第一原理に基づく分子動力学（MD）計算用の初期構造は，4 配位の  $\text{Li}^+$  溶媒和構造（Figure 2）を含む電解質領域の構造を古典 MD 計算で緩和することで作成した。OpenMX+ESM による MD 計算では，スラブモデルの下端 H-Si の座標を固定した。

**【計算方法・条件】**密度汎関数法計算の交換相関汎関数は LDA（局所密度近似）とし，カットオフエネルギーは 120 Ry，k 点サンプリングは  $\Gamma$  点とした。O(N) 計算は Krylov subspace 法に基づいて実行した。MD アンサンブルは NVT で，MD 温度は 800 K，温度制御は velocity scaling 法を 50 MD-step 毎に適用し，MD-step 幅は 1 fs とした。電気化学的条件としては，モデル系全体の初期電荷 +1（Li イオン由来）から開始し，それから後に余剰電子を段階的にドーピングすることで，充電条件下における負極側の印加バイアスを増加させながら MD 計算を実行した。

**【計算結果および考察】**余剰電子を 2 個付加した後， $\text{Li}^+$  に配位していた PC 分子が Si 表面と反応を開始した。Figure 3 に沿って一連の反応を確認すると，(a) → (c) ではカルボニル基 C による終端 H 引抜き，(c) → (d) では Si-O 結合生成が起こった。

カルボニル基 C に表面終端 H が付加したことにより，生成した PC 誘導体は 3 つの O 原子と結合している  $\text{sp}^3$  系 C を有するが，この化学種は不安定であり，（現時点ではシミュレーションで確認されていないが）この後に PC 誘導体の 5 員環が開裂して他の PC

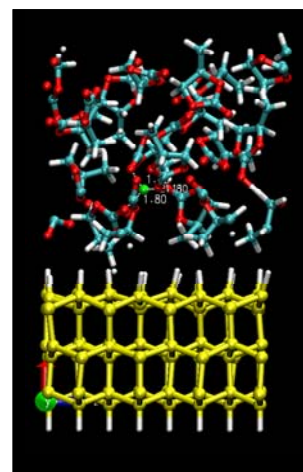


Figure 1. Si 系負極－電解質界面系モデルのユニットセル（H-Si(111)-PC 界面 +  $\text{Li}^+$  溶媒和構造）。

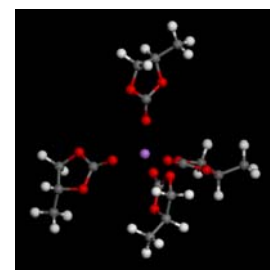


Figure 2.  $\text{Li}^+$  と PC 分子の 4 配位溶媒和構造。

分子と重合反応を起こす可能性、すなわち SEI 生成反応のトリガーになる可能性があると考えられる。

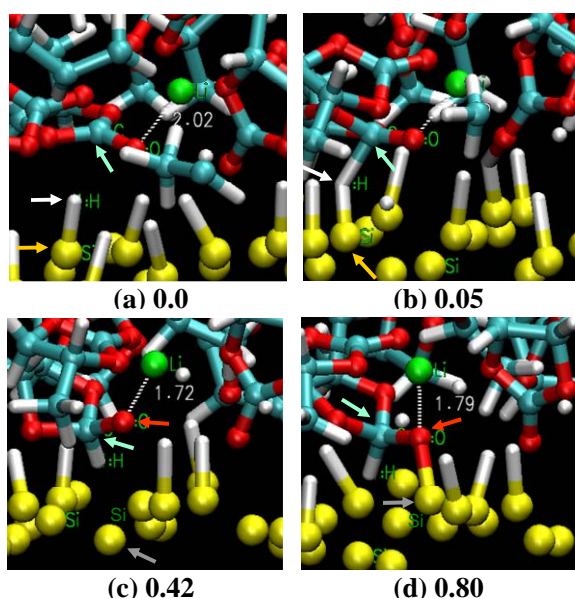
また、生成した Si-O 結合の Si は、末端 H を引抜かれた Si に最近接結合している Si であり、末端 H の引抜による Si 表面の活性化の一つの形態であると考えられる。またこの Si-O 結合は、生成後も 1.6~1.7 Å の結合長を安定に保持していたことから、酸化 Si 無機物質系 SEI の生成反応の可能性もシミュレーションで示唆された。これは本研究チームの XPS 観測結果[2]との対応する。これら 2 つの反応は、全電荷中性のままの計算では反応は起こらなかった。また Li<sup>+</sup> に配位していた PC 分子が反応を起こしていることから、充電条件下における負極 Li<sup>+</sup> の触媒的作用がシミュレーションにより示唆された。

#### 【参考文献等】

- [1] M. Otani and O. Sugino, PRB 73, 115407 (2006), O. Sugino et al., Surf. Sci. 601, 5237 (2007), M. Otani et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77, 024802 (2008).
- [2] 第 50 回電池討論会 (2009 年 京都), 竹川寿弘ほか, 「電解液添加剤によるシリコン系負極のサイクル特性改善」.
- [3] 第 49 回電池討論会 (2008 年 大阪), 大脇創ほか, 「第一原理計算に基づく Li イオン 2 次電池用電極材料のシミュレーション」.

#### 【成果発表】

- [a] 第 50 回電池討論会 (2009 年 京都), 大脇 創, 大谷 実, 尾崎泰助, 池庄司民夫, 秦野正治, 堀江英明, 「第一原理分子動力学計算による電極 - 電解質界面のシミュレーション」.
- [b] OpenMX/QMAS Workshop 2010 (東京), T. Ohwaki, M. Otani, T. Ozaki, T. Ikeshoji, M. Hatano, H. Horie, "First-Principles Molecular Dynamics Simulations for Electrode-Electrolyte Interfaces in Li-Ion Secondary Battery Systems".



**Figure 3.** 2 つ目の余剰電子付加後に起こった反応のスナップショット. 各時間表示は (a) を基準としたもの. 水色矢印: 末端 H (白色矢印) が付加したカルボニル炭素, 赤色矢印: Si (灰色矢印) と結合を生成した PC 誘導体中の酸素.

先端融合領域研究院 尾崎泰助

使用計算サーバ：xt5

計算規模：1～128 プロセッサ，計算時間は最大で7日程度

研究の概要；『オーダーN 大規模密度汎関数法コード:OpenMX の開発と応用』

密度汎関数理論は金属、半導体、生体分子等の広範囲の物質群に適用可能な汎用性の高い手法であるが、その計算時間は系のサイズ(基底関数もしくは原子数)の三乗に比例しており、ナノメートルサイズの系を取り扱うことは実際上、困難である。我々は大規模系への密度汎関数理論の適用限界を拡張するために計算量が原子数に単に比例したオーダーN 法と呼ばれる新しい計算手法を開発している。開発された新しい計算手法はプログラムパッケージ:OpenMX (<http://www.openmx-square.org/>) に組み込み、GNU-GPL の規約の下で無償公開している。本年度の研究内容を以下に要約する。

#### (1) 電気伝導計算のための非平衡グリーン関数法の開発

非平衡グリーン関数(NEGF)法と密度汎関数理論の組み合わせは次の観点からナノスケール物質の有限バイアス下での電気伝導特性を計算するための一つの有効な方法である。(i) 同一の理論的枠組みで電極と散乱領域を取り扱うことが可能、(ii) 有限バイアス電圧下で散乱領域を自己無撞着に計算できる。(iii) フォノン散乱や電子間クーロン相互作用などの多体効果が自己エネルギーを通してほぼ同一の枠組みで取り込まれ得る。(iv) 基底関数の局在性に基づいた定式化のため、大規模系への適用が本質的に可能。

今回、我々はこの NEGF 法の大規模系への適用性を拡張するために、グリーン関数の高速な積分方法を開発し[1]、OpenMX[2]への NEGF 法の効率的な実装を行った。NEGF 法ではグリーン関数の積分によって密度行列を算出する部分が計算律速となる。この積分を高精度かつ効率的に行うために、フェルミ分布関数の連分数展開し、そのポールでの留数を足し合わせる新しい方法を開発した[1]。二次元FFTと有限差分法を用いて電極-散乱領域間の境界条件付でハートリーポテンシャルを容易に計算する方法を開発し実装した[3]。

#### (2) グラフェンナノリボンにおけるスピフィルター効果の第一原理計算

有限バイアス電圧下におけるジグザググラフェンナノリボン(ZGNR)の電気伝導特性を非平衡グリーン関数法・密度汎関数理論に基づく第一原理計算手法を用いて計算した[4]。その結果、サブ格子内の原子数が偶数の場合においてZGNRが特異なスピフィルター効果を持っていることを見出した。それぞれの有限

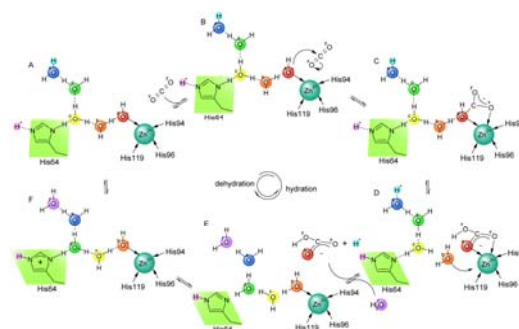
バイアス下で SCF 計算を行い、透過率及び電流を計算し、各スピン成分に分解した電流-電圧特性を評価した。その結果、この ZGNR においてアップスピン電子は負バイアス下でのみ透過するのに対し、ダウンスピン電子は正バイアス下においてのみ透過し、それぞれ反対方向のスピン整流特性を示した。この整流特性のため、バイアス電圧の方向によってフィルターされる電子のスピン方向が反転し、ZGNR はある種の二重スピンフィルターとして振舞うことが分かった。このフィルター効果はジグザグエッジ間のスピンの平行配置で、かつ長軸方向に対して反強磁性接合を持った場合にのみ発現し、他のスピン配置に対しては現れない。我々はこの特異なフィルター効果の機構を明らかにするため、フェルミエネルギー近傍の  $\pi$  及び  $\pi^*$  バンドに対して、ワニア関数を第一原理的に計算し[5]、これを用いてタイトバインディング(TB)パラメーターを算出した。その結果、サブ格子内の原子数が偶数の場合において  $\pi$  と  $\pi^*$  状態の遷移が禁制となることが、このスピンフィルター効果において重要な役割を果たしていることが明らかとなった。

#### 発表論文等

- [1] “Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic structure calculations” , T. Ozaki, Phys. Rev. B 75, 035123 (2007).
- [2] <http://www.openmx-square.org/>
- [3] “Efficient implementation of the nonequilibrium Green function method for electronic transport calculations” , T. Ozaki, K. Nishio, and H. Kino, Phys. Rev. B 81, 035116 (19 pages) (2010).
- [4] “Dual spin filter effect in a zigzag graphene nanoribbon” , T. Ozaki, K. Nishio, H. Weng, and H. Kino, Phys. Rev. B 81, 075422 (5 pages) (2010).
- [5] “Revisiting magnetic coupling in transition-metal-benzene complexes with maximally localized Wannier functions” , H. Weng, T. Ozaki, and K. Terakura, PRB 79, 235118 (2009).

**目的 :** 本研究は, 炭酸脱水酵素 (CA) をはじめバクテリオロドプシンやシトクローム c オキシダーゼ等自らの機能発現に必須な生物系水仲介型プロトントランスファ (PT) 過程について, 機能発現に係る水素結合相互作用様式を解明することでその基本原理を探索する構想をもち, 具体的に, 亜鉛含有 CA 触媒反応の金属イオン触媒と His 残基による一般酸・塩基触媒の観点から, その側鎖イミダゾールの互変異性平衡, 酸-塩基平衡, 及び水素結合能の NMR 情報を反応速度論解析と関連させた提唱機構について, 溶液・結晶構造情報に基づく量子化学計算を行うことにより実験-理論間の整合性を検証し, 得られる最適化構造に含まれる情報から触媒機構を完全に記述することを目的とする。

**概要 :** CA は二酸化炭素と水を  $H^+$  と重炭酸イオンに変換する亜鉛含有酵素である。右は報告者が提案した触媒スキームであり, His64 の配向変化を必要としない PT 機構を含む (Shimahara et al. 2007, *JBC*, 13, 9646)。報告から 3 年, それまで主流とされた“触媒反応に対する His64 配向変化の関与”の是非について界を二分する激しい論争が続けられたが, 昨年 8 月遂に界の権威者である Silverman によって報告者の主張が適切であることが認められた。それは彼が最近報告した総説の最終段落において



“Finally, it is appropriate to point out results supporting the conclusion that a change in orientation of His64 does not contribute to the energy barrier of intramolecular proton transfer in catalysis by carbonic anhydrase. Shimahara et al. have devised a mechanistic scheme in which the two neutral tautomers of the imidazole of His64 participate in a manner that does not require reorientation of the side chain.”と紹介されたことから理解される (Mikulski & Silverman, *BBA*, 2009, Aug11, Epub ahead of print)。そのような状況の中, 報告者は今年度, 量子化学的手法を用いて His64 互変異性変化と配向変化を誘導する因子を探索することによって, PT 過程に関わる水素結合ネットワークの挙動を検証するための計算機実験を行った。具体的には, 結晶構造活性部位 ( $His64-(H_2O)_n-Zn^{2+}$  と, これを囲む官能基) に付加した水素の位置を, DFT 法, CPCM 法又は SMD 法を用いて構造最適化を行い, このモデルを用いてプロトントランスファ, His64 配向変化に関するエネルギーダイアグラムの作成を行った。現在, そこで予想された水素結合について酵素変異体を用いた NMR 解析を行いつつある。ここで使用したモデル系は, 量子化学的計算として大きな系に属するため, ハイスペックかつ高機能な計算機マシンが必要とされた。本学の Gaussian03 実装 SX-8 マシンを用いることによって, 国際的にハイレベルな競争にあるこの領域に対し本研究を遂行することが可能であった。来年度, さらに高機能な Gaussian09 実装 SX-9 マシンが導入されることによって, より大きな水素結合ネットワークの関与を調べることが可能となることが期待される。

### 講演リスト :

Proton-Transfer Mechanism in Catalysis by Carbonic Anhydrase---Tautomerism of Histidine 64---, Hideto Shimahara (7 人中 1 番目), 8th International Conference on the Carbonic Anhydrase, Florence, Italy, 2009. 09. 16-19

酵素のプロトントランスファに関わる酸塩基触媒ヒスチジン残基の互変異性, 島原秀登 (8 人中 1 番目), 第 9 回日本蛋白質科学会年会, 熊本, 2009. 05. 20-22

## ＜目的＞

本研究では、表面の線形及び非線形光学応答を第一原理計算により求める手法を開発し、表面電子状態を反映した光学応答の起源を探ると共に、実験結果の解析方法を確立することにより SHG 法や STM 発光分光法などの応用分野を開拓することを目指す。

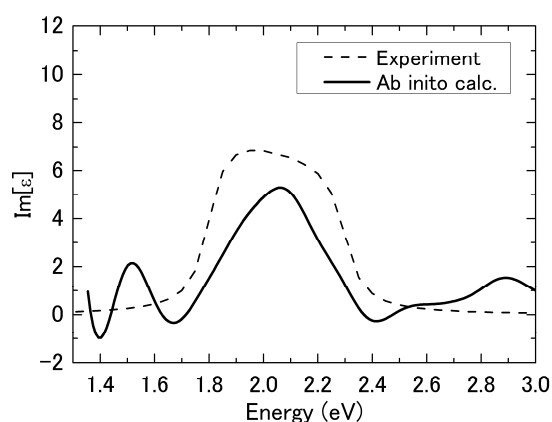
## ＜計算手法について＞

密度汎関数を用いた第一原理計算である FLAPW (full-potential linearized-augmented-plane-wave)法によって系の電子状態を求め、さらに光による電子の遷移確率を摂動法により求めることによって、1次の線形感受率と2次の非線形感受率(非線形光学応答の大きさを表す物理量)を計算する。

## ＜主要な結果＞

東北大学の上原教授らによって Ni(110)表面の STM 発光測定が行われ、酸素吸着により光子エネルギー 2eV 付近に特異な光学吸収があることが実験的に示された(下図の誘電率虚部の点線に対応)。この局所的な光学吸収の起源を探るため、Ni(110)清浄表面と Ni(110)-(2x1)O 表面の光学応答の計算を行った。Ni(110)-(2x1)O 表面及び清浄表面は、それぞれ 13 及び 11 原子層のスラブでモデル化し、LDA 近似のもと spin を考慮した FLAPW 計算を行った。下図の実線は、計算によって求められた酸素吸着表面と清浄表面の誘電率の差スペクトルである。これより、実験から予測された酸素吸着に伴う 2eV の吸収ピークが、第一原理計算によっても確認された。

ある電子状態の波動関数に関して特定の原子サイト(MT 球)内のもののみを抽出して誘電率を計算することにより、スラブ内の原子サイト毎の光学応答を求めた。これを解析したところ、Ni(110)-(2x1)O スラブ内の最表面の酸素原子とそれに隣接した Ni 原子に局在した電子状態に関する光学遷移が 2eV の光学吸収の起源であることが分かった。この結果は、STM 発光測定が表面数原子層の光学応答に極めて敏感であることを示唆している。



☆本研究は、JAIST マテリアルサイエンス研究科の水谷教授との共同研究に基づいて、JAIST の NEC-SX8 を用いて実施した。

## ☆学会発表

- (1) W. Iida, S. Katano, H. Sano, K. Sakamoto, and Y. Uehara, “Determination of local dielectric function by scanning tunneling microscope light emission with nanometer scale spatial resolution”,  
The Second French Research Organizations-Tohoku University Joint Workshop on Frontier Materials (FRONTIER-2009), Sendai Japan, November 20-December 3, 2009.
- (2) 佐野陽之, W. Wolf, R. Podloucky, 水谷五郎, 片野諭, 上原洋一, “Ni(110)-O表面の表面光学応答の第一原理計算”, 日本物理学会 2010年3月21日 (岡山大), 21pPSA-7

## 全原子型シミュレーションによる球状タンパク質の水和特性評価

研究者：長尾秀実（金沢大学理工），齋藤大明（金沢大学理工），松林伸幸（京都大学）  
 使用計算サーバ：XT5

【序】 生体内におけるタンパク質の機能理解にはタンパク質の自由エネルギー変化が最も重要な物理量である。本研究では，全原子型溶媒モデルによる5種類の球状タンパク質（BPTI, RNase A, Lysozyme,  $\beta$ -lactoglobulin A,  $\alpha$ -chymotrypsinogen）の溶媒和自由エネルギーを分子動力学(MD)シミュレーションにより計算し，各々のタンパク質の溶液中における水和特性を評価する。

【方法】 タンパク質の水和特性評価には共同研究者の松林伸幸氏が開発したエネルギー表示法を用いた。

【結果と考察】 表1に計算された5種類のタンパク質の溶媒和自由エネルギーを示す。球状タンパク質は多くの親水性残基がタンパク質表面の溶媒露出部位に存在している事から，一般的に露出溶媒和面積(SASA)の増加に従って溶媒和自由エネルギーも増加することが考えられており，本計算結果でも同様の特性が示された。これらのタンパク質のなかでは2番目に大きな SASA をもつ  $\beta$ -lactoglobulin A が最も低い  $\Delta\mu$  を示した。更なる SASA の解析の結果，これは  $\beta$ -lactoglobulin A が他のタンパク質に比べて荷電性残基を SASA に有している事に起因していることが示された。

	BPTI	RNase	Lysozyme	$\beta$ -lactoglobulin	$\alpha$ -chymotrypsinogen
SASA [ $\text{\AA}^2$ ]	4304.3	7674.6	6852.0	8280.4	11006.3
$\Delta\mu$ [kcal/mol]	-790	-1069	-687	-2288	-1491

表1. 各タンパク質の溶媒露出面積，溶媒和自由エネルギー  $\Delta\mu$  [kcal/mol]

### 【成果公表（学会発表）】

- 齋藤 大明，松本 圭介，中村 力，水上 卓，松林 伸幸，西川 清，長尾 秀実，“分子動力学法による球状タンパク質の水和特性評価”，第3回 分子科学討論会，名古屋，9月 2009年
- Hiroaki Saito, Keisuke Matsumoto, Riki Nakamura, Taku Mizukami, Kiyoshi Nishikawa, Hidemi Nagao “Solvation free energy of globular protein: an estimation by means of energy representation method”，第47回 日本生物物理学会年会，徳島，10月 2009年
- Hiroaki Saito, Taku Mizukami, Nobuyuki Matubayasi, Kiyoshi Nishikawa, Hidemi Nagao “Solvation Free Energy of Globular Proteins: A Molecular Dynamics Study” International Symposium on Computational Science (ISCS 2009), Bali-Indonesia, October 27th-28th, 2009
- 齋藤大明，松本圭介，中村力，水上卓，松林伸幸，西川清，長尾秀実，“全原子型シミュレーションによる球状タンパク質の水和特性評価”，第23回分子シミュレーション討論会，名古屋，11月 2009年
- Hiroaki Saito, Taku Mizukami, Nobuyuki Matubayasi, Hidemi Nagao “Solvation free energy of globular protein: a molecular dynamics study” International Symposium on Molecular Theory for Real Systems, January 7th-9th, 2010

### 【成果公表（論文）】

- H.Saito, N. Matubayasi, K. Nishikawa, H. Nagao, in preparation.
- T.V.B Phung, T.Hashimoto, K.Nishikawa, H.Nagao, *Int. J. Quant. Chem.* **109** (2009)3457. (査読あり)
- T.V.B Phung, T.Hashimoto, K.Nishikawa, H.Nagao, *Int. J. Quant. Chem.* **109** (2009)3602. (査読あり)

# 数値局在基底に対する非局所交換エネルギーの計算

先端融合領域研究院 豊田雅之

使用計算機: xt-5

計算規模: 1-128 core, 1day~1week

## 研究の概要

密度汎関数理論に基づく第一原理計算では、電子間の相互作用を記述するエネルギー汎関数が局所密度の関数として近似的に扱われることが多い。しかし、近年では計算機性能の向上により、非局所な交換エネルギーを計算することも容易に行えるようになった。局所近似された汎関数と非局所な交換エネルギーの混成 (hybridization) を用いる「ハイブリッド汎関数法」は、様々な物性値の計算結果を改善することが報告されている。本研究では、我々のグループで開発している大規模密度汎関数法計算プログラム OpenMX において、非局所な交換エネルギーを計算するためのルーチンを開発した。

## 非局所な交換エネルギーを計算するルーチン (LIBERI)

擬原子波動関数に対する四中心積分を計算するルーチンを前年度に完成させた。本年度は、これを OpenMX に組み込んで自己無撞着計算を行うことを目標にプログラミングを行った。巨大分子や周期系では多大な計算量を要求するため、本学の Cray XT5 上で並列計算を行った。本研究の成果を、二件の国際学会 [1,2]および一件の国内学会[3]で発表した。現在、成果をまとめた論文の執筆準備中である。

## 数値積分変換

波動関数の球ベッセル変換を効率的に行う数値手法を新たに開発した。これは上記の計算において必要となる変換であり、この新手法を用いることによって計算効率の向上が得られた。本研究のプログラミングおよびテスト計算を本学の Cray XT5 を用いて行った。本研究の成果を論文にまとめ Computer Physics Communications 誌に投稿し、掲載された[4]。また、国内学会 [5]で発表を行った。

[1] M. Toyoda and T. Ozaki, "Hartree-Fock-type Exchange for Pseudo-atomic Orbitals," (Poster) in the 12th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN12) held at Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China on Oct. 26-28, 2009.

[2] M. Toyoda and T. Ozaki, "Numerical Evaluation of Two-electron Four-Center



Integrals for Pseudo-Atomic Orbitals," (Poster) in 13th international Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics (DFT09) held in Lyon, France from 31st August to 4th September 2009.

[3] 豊田雅之, 尾崎泰助『数値局在基底に対する非局所交換エネルギーの計算』(口頭発表) 日本物理学会第65回年次大会, 岡山大学津山キャンパス, 2009年3月20日~23日

[4] M. Toyoda and T. Ozaki, "Fast spherical Bessel transform via fast Fourier transform and recurrence formula," *Computer Physics Communications* **181**, 277-282 (2010).

[5] 豊田雅之, 尾崎泰助『漸化的手法による高速球ベッセル変換法』日本応用数学会2009年度年会, 大阪大学豊中キャンパス, 2009年9月28日~30日

# Report of scientific activity on mpc machines

Giulio Biddau and Ruben Perez  
Using Machine:XT5

In the last year, ab initio simulations based on DFT have been carried out on the supercomputer Cray XT5 in order to study the adsorption of planar polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) on the Pt(111) surface. Our previous work [1] has shown that these PAHs can act as molecular precursors for the controlled synthesis of fullerenes and novel heterofullerenes through a cyclo-dehydrogenation process catalyzed by the Pt substrate.

We have focused mainly our attention on the adsorption of the poliarene C<sub>60</sub>H<sub>30</sub>. This is a large planar molecule formed by a central part with benzene-like ring and three pentagons that link this central hexagon with three wings that contain four benzene rings each. The size of the molecule is approximately 19 nm. Thus, large unit cells are required to study the on the Pt(111) surface. In particular, we have considered a slab with a 10\*10 surface unit cell and 3 metal layers, with almost 400 atoms in the unit cell. Performing a full relaxation of such a large system (all the atoms in the molecule and those in the two upper metal layers are allowed to relax) requires significant computational resources, even with a very efficient code like OPENMX (developed by Prof. T Ozaki, RCIS). This research has required large computational resources in both shared memory and CPUs, that has been mostly provided by the Center of Integrated Science.

We have performed geometrical relaxations for a wide range of initial configurations in order to characterize the potential energy surface for the adsorption of this molecule. In particular, we want to understand the highly preferential adsorption orientation experimentally observed with STM. The systematic analysis of the behaviour of the molecular precursor under translation of the molecule central hexagon and its overall rotational has helped us to map the phase space and to show that there is a deep energy minimum for a particular orientation with respect to Pt crystallographic directions. We have demonstrated that prove that the molecule - substrate interaction can be understood in terms of the energetics of a single benzene adsorbed on the same Pt surface: the molecule tries to maximize the number of its benzene-like rings that are in a favourable adsorption configuration. The rings in the molecular wings, that shared the same orientation, dominate over the central part and

define the preferential orientation. A publication describing this work, done in collaboration with Prof. Ozaki, is now under preparation [2].

We have also started a similar study for the C<sub>57</sub>N<sub>3</sub>H<sub>33</sub> molecule. This PAH can be used as a precursor for the synthesis of C<sub>57</sub>N<sub>3</sub>, a closed triazafullerene that has been synthesized for the first time using our approach [1]. The presence of these three nitrogen atoms (each one replacing a C atom in one of the pentagons) modifies significantly the adsorption process as they make the molecule significantly stiffer, precluding some of the molecular deformation processes needed for a strong adsorption on the Pt surface.

[1] G. Otero, G. Biddau, et al., *Nature* 464, 865–869 (2008).

[2] G. Biddau, et al, to be submitted to *Angewandte Chemie Int. Edition* (2010).

# Phase diagram of LaVO<sub>3</sub> under epitaxial strain: Jahn-Teller distortion Versus Orbital Fluctuations

Research Center for Integrated Science

Hongming Weng, Taisuke Ozaki, and Kiyoyuki Terakura

Using machine xt5

We have studied the epitaxial strain effects on the electronic structure of Mott insulator LaVO<sub>3</sub> with density-functional theory calculations. The Jahn-Teller (JT) distortion, tuned by growing LaVO<sub>3</sub> on different substrates, competes with orbital fluctuation (OF) in this  $t_{2g}^2$  system, leading to three different antiferromagnetic spin ordering (SO) phases. For  $0.98 < c/a < 1.005$ , Kugel-Khomskii superexchange (KKSE) interaction is dominant and stabilizes the C-type SO and G-type orbital ordering (OO). The G-OO induces compatible JT distortion, which enhances the stability of G-OO when  $c/a < 1.0$ . For  $1.005 < c/a < 1.085$ , JT distortion works in the way opposite to KKSE interaction by pushing the  $d_{xy}$  orbital higher than the other two. Due to the comparable interacting strength of them, OF is enhanced and manifested by different OO for different SO. A-type SO is found to be the stablest one. When  $c/a > 1.085$ , JT distortion fully overwhelms OF. G-type SO with ferromagnetic OO becomes the ground state. The rotation and tilting of octahedra lead to different splittings of  $t_{2g}$  orbitals. Only GdFeO<sub>3</sub>-type distortion cannot explain C-SO and G-OO in LaVO<sub>3</sub>.

Analysis is done with construction of maximally localized wannier function using OpenMX code.[1,2]

## References

- (1) <http://www.openmx-square.org/>
- (2) H. Weng, T. Ozaki and K. Terakura, *Phys. Rev. B*, **2009**, 79, 235118.

## Defect States Induced by Oxygen Vacancies in SrTiO<sub>3</sub>

Research Center for Integrated Science, JAIST

Zhufeng HOU

Used machine: Cray xt5,

Oxygen vacancy is known to act as electron donor in strontium titanate (SrTiO<sub>3</sub>) which is a typical perovskite insulating oxide with a wide range of technological applications. Extensive studies showed that O vacancies are intimately related to several interesting phenomena observed in the low temperature conductivity measurements and the optical excitation of oxygen-deficient SrTiO<sub>3</sub>. However, the picture at atomic scale for understanding the role of O vacancies in these phenomena is still in controversy. Particularly for a single O vacancy and O divacancy in SrTiO<sub>3</sub>, there are puzzling findings reported in literature (Cuong et al, Phys. Rev. Lett.98, 115503 (2007); Kim et al, Appl. Phys. Lett.94, 202906 (2009); and Choi et al, Phys. Rev. Lett.103,185502(2009)).

In order to understand properly the defect states induced by oxygen vacancies in SrTiO<sub>3</sub>, we have performed the first-principles calculations with the correction of on-site Coulomb interaction, as implemented in the QMAS and VASP software packages, to study the structural properties, formation energies, and electronic structures of a single oxygen vacancy and O divacancy in cubic SrTiO<sub>3</sub>. We found that single O vacancy ( $V_O$ ) in cubic SrTiO<sub>3</sub> is a magnetic state in which  $V_O$  induces a singly-occupied localized state in the band gap and a delocalized state in the conduction band. We also found two local minima with strikingly different electronic structures in the nonmagnetic state of  $V_O$ . Our calculations showed that a single  $V_O$  energetically prefers the singly-ionized state, which is also suggested by experimental studies. Furthermore, we found that two O vacancies tend to align in a magnetically anti-parallel shoulder-to-shoulder configuration in the  $xy$  plane, rather than in a nonmagnetic head-to-head configuration along the  $z$  direction as predicted in an available theoretical work (Cuong et al, Phys. Rev. Lett.98, 115503 (2007)). For O divacancies in the all five configurations under study, localized states were found in the band gap. Our results not only clarify the puzzling findings reported in literature, but also can provide a better understanding of the role of O vacancies in the low temperature conductivity and the optical excitation of oxygen-deficient SrTiO<sub>3</sub>.

### References

Zhufeng Hou and Kiyoyuki Terakura, *New Picture for Defect States Induced by Oxygen Vacancies in Cubic SrTiO<sub>3</sub>*, submitted for publication (Mar.2010).

## First-principles calculation of the electronic properties of graphene clusters doped with nitrogen and boron

Used machine: xt5

Due to serious global environmental problems and also the limitation in natural resources, the polymer electrolyte fuel cell (PEFC) has been regarded as one of the promising candidates for the future energy source, particularly for automobiles. It has many advantages such as high efficiency, low operation temperature, and, in principle, no environment load. However, as the reaction rate of oxygen reduction reaction (ORR) at the cathode is much slower than that of the hydrogen oxidation reaction at the anode, plenty amount of Pt is currently used as cathode catalyst for ORR. This hinders the wide use of PEFC because of the high cost and limited natural resources of Pt. Although there are some other technical issues to enhance the efficiency and durability of PEFC, search for cathode catalysts alternative to Pt is one of the most important tasks in the research of PEFC.

Recent studies suggest that the carbon-alloy catalyst with doped nitrogen may be a powerful candidate for cathode catalyst of fuel cell. In order to design and produce CAC with higher performance, the detailed knowledge about the reaction site and the reaction mechanism is needed. There are two targets in this first principles research. One is studying the activities and processes of oxygen reduction reaction, which we want to find the active site of carbon alloys by first-principles molecule dynamics calculations. The other one is understanding the effect of nitrogen doping, which is done by analyzing the energetic stabilities and electronic structures of carbon alloys with different nitrogen doping configurations. The calculations are done by CPMD for the molecule dynamical simulations, and by OpenMX for the electronic structure analyses.

The analysis are extended to the case of co-doping boron and nitrogen in carbon alloy, and proposed further enhancement of catalytic activity. This result could be one of the suggestions for experimental researches. Furthermore, the simulations of X-ray absorption spectroscopy (XAS) and scan tunneling microscopy (STM) are planned to be performed to compare with the experimental measurements.

Published paper: Phys. Rev. B **80**, 235410 (2009)

Carbon nanotubes (CNTs) are quasi-one-dimensional structures with semiconducting or metallic properties that make them promising material for electronic/spintronic devices. Carbon nanotube field-effect transistors (CNTFETs), which are fabricated by direct growth of single wall carbon nanotubes (SWNT) between source and drain electrodes, show ambipolar operation with very small carrier injection barriers. However, these devices show spin-dependent transport property with small hysteretic magneto-resistance (MR=1.8%) at low temperatures.

In order to understand the mechanism of spin transport, first-principles density functional calculations was exploited to clarify the nature of contact between Co electrode and semiconducting and metallic SWNT. The results show that strong interaction between Co(100) and SWNT results in the reconstruction of the top layers of Co surface. Changes of electron density occur mainly at interface region between Co surface and SWNT, where a substantial concentration of electron accumulates as Co-C bonds. In addition, the spin polarization of Co atoms of the top layer at the interface region has been cancelled due to the interaction with SWNT (Fig. 1). Thus, the spin transport through this layer can be low, and resulted in the small hysteretic magnetoresistance of CNTFET devices.

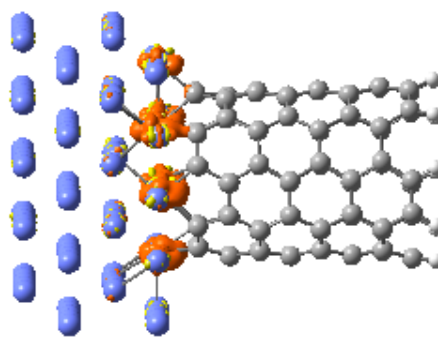


Figure 1. Spin-density difference of Co(100) – 5 x 5 surface-(5,5) SWNT at 0.01 (a.u) isosurface value. Spin density flows from the red regions into yellow regions.

## **First-principle study on transport phenomena of nano-scale organic materials**

School of Materials Science, JAIST

Nguyen Tien Cuong, s0840208, Ph.D. Student, Otsuka's Lab

Used Machine: Cray XT5, PC cluster (pcc) and Altix4700

### **My research proposal**

In general, a spintronics device requires an efficient transport of generated non-equilibrium spins (spin-polarized current) across the electrode/sample interface. However, the spin injection is hindered by the impedance mismatch between different materials which makes a contact resistance. In the cases of devices based on organic materials, the interfaces between layers of different organic materials or between an organic materials and a metal electrode have larger contact resistances. In addition, the chemical bond structures at these interfaces are very complicated. They sensitively affect the transport properties. The inefficient injection and transportation of the spin-polarized electrons through the interface results in the loss of information. Therefore, it is necessary to investigate the electronic structures and transport properties of the contact on the atomic scale in order to understand the transport phenomena at the interface.

The electronic structure and chemical bonding nature at the interface between organic materials and electrodes can be studied in detail by the density functional theory (DFT) method. The non-equilibrium Green function (NEGF) method, on the other hand, has several advantages to investigate electronic transport properties based on quantum mechanics. The electronic structure of the scattering region is self-consistently determined by combining it with first-principle calculations such as DFT methods. In my research, the transport phenomena of nano-scale organic materials are investigated based on the DFT method combined with the NEGF formalism. These calculations are mainly performed by using OpenMX (Open source package for Material eXplorer) software package [<http://www.openmx-square.org>]

### **The works which I have been carrying out**

1/ DFT calculations of Cobalt electrode/Single Wall Carbon Nanotubes (SWNTs) systems:

+ Optimized Cobalt electrodes materials

+ Optimized SWNTs materials

+ Optimized reconstructions at interface between electrodes and CNTs

2/ Carrying out NEGF calculations of some single systems: SWNTs, zigzag graphene nanoribbons, Fe/MgO/Fe tunneling junction.



# **Physisorption of hydrogen molecule on graphene and carbon nanotube surfaces adhered by Pt atom**

School of Materials Science, JAIST

PHAM TIEN LAM, Otsuka Lab

Poly electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) have been considered to be the most promising, among different types of fuel cell, because they operate at low temperature and give high specific power and power density. In PEMFCs platinum catalysts, as an active component, is the most important component for electro-catalysts .

Carbon materials are considered as the best support materials for electro-catalysts in fuel cells because of its conductivity, surface area, corrosion resistance and low cost. Among various types of carbon materials, carbon nanotubes with high surface area, good electronic conductivity, and high chemical stability, have been found to be an ideal support material for Pt clusters . Fundamental information regarding properties of Pt nano clusters on SWNTs under gas environment is strongly required for designing catalyst for fuel cell.

We have carried out the first principle study on the absorptions of gas molecules on surfaces of SWNTs and graphene adhered by a Pt atom. Physisorptions of hydrogen, oxygen and carbon monoxide molecules on the systems have been investigated by density functional theory calculation (DFT). The calculations were carried out by Dmol3, OpenMX and on Altix and xt5 machines.

## **Publication**

Pham Tien Lam , Phan Viet Dung, Ayumu Sugiyama, Nguyen Dinh Duc, Tatsuya Shimoda, Akihiko Fujiwara , Dam Hieu Chi, Computational materials science (in press)

#### 4. 知識科学分野の計算サーバ利用研究

## データマイニングと計算機シミュレーションによる物性評価

知識科学研究科 Dam研究室 研究員

杉山歩

使用計算機：XT-5，Altix

### データマイニング法による水溶液の分類問題に関する研究

本研究では古典分子動力学(MD) 計算によって得られた蛋白質周辺の水分子をそのダイナミクスの上により、分類する研究である。各々の分子はそれぞれ相互作用する事でランダムで複雑な振る舞いをしている様に見受けられるが、この分子個々のダイナミクスをデータマイニングを利用し、分類する事でシステムが持つ特徴が溶媒水溶液におよぼす影響を考察した。本研究に使用したMD データは数百ギガバイトと膨大であり、この分類は困難である。そこでSupport VectorMachine (SVM) と呼ばれる教師付き学習を利用したアルゴリズムを利用し、個々の水分子の分類を行なった。蛋白質周辺水分子は水和水と呼ばれる特殊な振る舞いをする水分子が層状に存在する事が知られているが、この分類方法は蛋白質表面からの距離による分類が一般的で、個別のダイナミクスに着目した分類はなされてこなかった。本研究ではSVM を利用したデータマイニングにより、複雑かつ膨大なデータを一括処理する事で、水分子を二種類のカテゴリーへの分類を試みた。その結果、水分子は従来定義での水和水とバルク水に近い分類がなされ、さらに水和水的振る舞いの水は蛋白質周辺のみならず、遠方においても確認された。また、計算モデル中に蛋白質を2 つ配置した場合においては、蛋白質間距離に依存し、水和水的振る舞いの水の個数は増減することも確認された。

尚、本研究の解析は自作のプログラムを利用し、Altix 上で行なった。

### 白金クラスターによるカーボンナノチューブ電子状態の制御に関する研究

本研究では密度汎関数理論(DFT) に基づいた計算によりSWNT上に吸着されたPt からSWNTへの電荷移動の移動の物性への影響の考察を行なった。本研究はXT-5 とAltix を利用し研究を進め、Xt-5 上ではJAIST 融合領域研究院の尾崎准教授らが中心となり開発を進めている第一原理計算パッケージOpenMX を利用ならびに、XT-5 で利用可能な第一原理計算ソフトウェアVASP を利用し計算を行ない、Altix では同計算機で利用可能な第一原理計算ソフトウェアMaterialsStudioを利用し計算を行なった。それぞれのソフトウェアで同じモデルを計算する事で計算結果の妥当性を議論する事が可能となった。

## 5. 謝辭

本報告は、並列計算機利用者メーリングリスト **mpc** において報告を依頼し、さらにメーリングリストのメンバから他のユーザに声をかけていただき、各著者のご厚意によって提出をいただいた文書をまとめたものである。ご多忙のところ、ご協力をいただいた著者、紹介者各位に感謝します。