

計算材料学センターだより

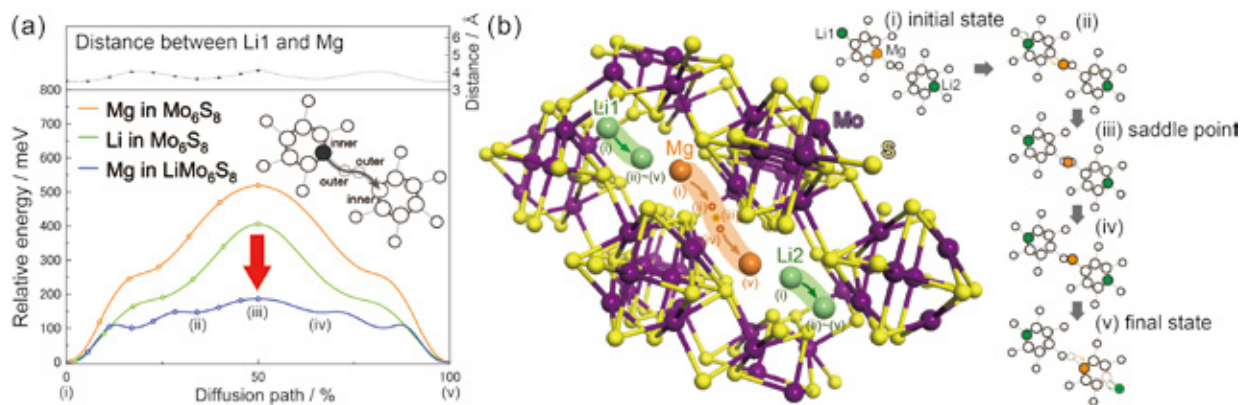


Fig. (a) Activation energies for Li- and Mg-ion diffusion in a Mo₆S₈ host with the Chevrel structure computed by the nudged elastic band method. (b) Schematic figure illustrating the minimum energy diffusion path of a Mg ion in a LiMo₆S₈ host.

CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・コンパイラ、ライブラリのインストールおよびバージョンアップ
- ・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
- ・AVS/Express のモジュール開発
- ・AVS/Express 講習会の開催
- ・MATLAB 講習会の開催
- ・セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催
- ・平成 30 年度 計算材料学センター見学者
- ・平成 30 年度 計算材料学センターの技術支援の実績
- ・新任教員あいさつ
- ・新職員あいさつ

表紙の図について

■ Fast Diffusion of Multivalent Ions Facilitated by Concerted Interactions in Dual-Ion Battery Systems

Minimum energy paths of Li- and Mg-ion diffusion in a Mo_6S_8 host with the Chevrel structure were calculated by the nudged elastic band (NEB) method in combination with VASP. (a) Activation energies computed for the diffusion processes of (orange) a Mg ion in a pristine Mo_6S_8 host, (green) a Li ion in a pristine Mo_6S_8 host and (blue) a Mg ion in a LiMo_6S_8 host, where a Li ion has been precedingly inserted. A schematic figure illustrating single Li- or Mg-ion diffusion in a Mo_6S_8 host is shown in the right side above the energy curves. The activation energy for Mg hopping in the LiMo_6S_8 host is reduced remarkably in Li-Mg dual-cation systems compared to that for Mg or Li hopping in the pristine Mo_6S_8 host, owing to the “concerted” motion of following Mg and leading Li ions with the Li-Mg distance being kept almost constant in the range of 3.5–4 Å during the diffusion process as indicated by the gray dotted curve. (b) Schematic figure illustrating the diffusion process of a Mg ion in a LiMo_6S_8 host. Mg and Li ions are colored orange and green, respectively. (i) and (v) show the initial and final states of the NEB calculation, respectively. Atomic arrangements of the inserted ions in several important configurations are illustrated as (ii)–(iv). The present results prove that dual-ion battery systems are a promising way to construct novel high-performance rechargeable batteries employing multivalent ions with an enhanced diffusion rate.

□ Hongyi Li, Norihiko L. Okamoto, Takuya Hatakeyama, Yu Kumagai, Fumiyasu Oba and Tetsu Ichitsubo, *Adv. Energy Mater.*, **8**, 1801475 (2018). DOI: 10.1002/aenm.201801475

センター長あいさつ

計算材料学センター 久保百司

本センターでは、昨年度の8月から新しいスーパーコンピューティングシステム "MASAMUNE-IMR" (MAterials science Supercomputing system for Advanced MUlti-scale simulations towards NExt-generation - Institute for Materials Research) の稼働をスタートさせました。本システムは主に、1) スーパーコンピュータ Cray XC50-LC と、2) スーパーコンピュータ Cray CS-Storm 500GT から構成されます。Cray XC50-LC は、CPU を主体とするスーパーコンピュータで、320 ノード (11,520 コア) を有し、大規模計算用に 768GiB もの大きな主記憶容量を有していることが大きな特徴です。一方、Cray CS-Storm 500GT は、本センターの初の試みである GPU を主体とするスーパーコンピュータで、29 ノード (1,484,800 コア) を有し、特定の計算に対しては CPU よりも高速計算が可能なが大きな特徴です。"MASAMUNE-IMR" を構成する両方のスーパーコンピュータをあわせた総理論演算性能は 3.03 ペタ FLOPS となり、先代のスーパーコンピュータと比較すると、約 10 倍もの高速な演算が可能ながシステムとなっております。また、"MASAMUNE-IMR" は、マテリアルズ・インフォマティクスを活用した材料設計を推進するための並列計算・インフォマティクスサーバも有しており、膨大なデータを統合するデータベースの構築環境やビッグデータの解析ツールなどが導入されています。さらに本システムは、高速な描画処理を実現するための可視化サーバ、4.0PB の大容量ディスクを有するストレージシステム、ネットワークシステムなどから構成されます。また、先代のスーパーコンピューティングシステムと比較して、約半分の消費電力で稼働する低消費電力型のスーパーコンピューティングシステムであることも大きな特徴の一つです。さらに、スーパーコンピュータの筐体パネルに、墨絵師の御歌頭氏により力強い伊達政宗公の絵を描いて頂いたことで、"MASAMUNE-IMR" は、昨年度、多数のメディアに採り上げて頂きました。特に、昨年度の7月12日にはNHKと仙台放送にて "MASAMUNE-IMR" を紹介して頂き、さらに9月20日には東日本放送にて "MASAMUNE-IMR" の特集を組んで頂き、6分間もの長きにわたって "MASAMUNE-IMR" の紹介と本センターの使命と今後の展望について放映して頂きました。センター職員一同、次は "MASAMUNE-IMR" で得られた研究成果によって、多くのメディアに取り上げられることを期待して、現在、センターの運営とサービスに一丸となって取り組んでおります。

さらに、もう一つの昨年度の大きなニュースとしては、昨年5月に文部科学省から公募が行われた国際共同利用・共同研究拠点制度に、東北大学金属材料研究所が採択され、昨年11月から金属材料研究所が全国共同利用・共同研究拠点から国際共同利用・共同研究拠点に移行致しました。これに伴い、本センターも全国共同利用・共同研究施設から、国際共同利用・共同研究施設に移行致しました。この移行に伴い、海外の機関に所属する研究者がメンバーに含まれる共同利用研究課題では、国内の研究代表者に加えて、海外機関の研究者の中から海外PI (Principal Investigator) を選定して頂くことになりました。国際共同利用・共同研究施設に移行したのを機に、本センターの国際化にも取り組んでいきたいと思っております。日本国内のみならず、世界における計算材料科学コミュニティの発展、さらには、世界の材料科学全体の発展にも貢献できればと思っております。

さらに、「MASAMUNE-IMR」を導入したことを機に、本センターでは新しい試みとして、「大規模 HPC チャレンジ」、「プログラム並列化・高速化支援サービス」、「GPGPU 移植・高速化支援サービス」の3つのサービスを本年度から開始致します。1つ目の「大規模 HPC チャレンジ」は、大規模計算を目的として独自にプログラムの開発を行っているユーザーの方の支援を目的としております。具体的には、本センターのスーパーコンピュータ Cray XC50-LC が持つ最大計算ノード数である 293 ノード (10,548 コア) を1つの計算で最大 24 時間占有利用ができる公募型プロジェクトです。定期保守後の 24 時間、スーパーコンピュータ Cray XC50-LC をたった1つの計算が占有利用できます。是非、大規模計算を目的として独自にプログラムの開発を行っているユーザーの方には、積極的に応募を頂ければと思っております。2つ目の「プログラム並列化・高速化支援サービス」は、独自にプログラム開発を行っているユーザーの方に対して、CPU を主体とした大規模並列計算サーバ上でのプログラムの並列化、チューニングを支援することで、本センターのスーパーコンピュータ Cray XC50-LC 上で独自開発プログラムを高速に活用して頂くためのプロジェクトです。3つ目の「GPGPU 移植・高速化支援サービス」は、独自開発のプログラムの GPGPU への移植およびチューニングを支援することを目的としております。具体的には、ユーザーが独自に開発されたプログラムに対して、OpenACC/CUDA 化、CUDA 対応ライブラリへの接続などを本センターが支援することで、GPGPU を主体とする本センターのスーパーコンピュータ Cray CS-Storm 500GT 上で独自開発プログラムを高速に活用して頂くためのプロジェクトです。「プログラム並列化・高速化支援サービス」、「GPGPU 移植・高速化支援サービス」も公募型とさせて頂き、それぞれ年間に最大 2 件の申請を採択致します。是非、本センターのスーパーコンピュータを活用した高速計算に興味があるユーザーの方には、これらにも積極的に応募を頂ければと思っております。

また、新しいセンター職員として、昨年度の 12 月から柳有起助教、今年度の 4 月から中野倅太技術職員を迎えました。柳有起助教には、新しいスーパーコンピューティングシステムを活用して、超大規模計算、GPGPU コンピューティング、マテリアルズ・インフォマティクスなどの分野において活躍してもらうことを期待しております。中野倅太氏には、本センターにおけるスーパーコンピューティングシステムの運用・サービスの将来を担ってもらえることを期待しております。この 4 月から新体制となったセンター職員が一丸となって、国際共同利用・共同研究施設という新しい役割、新しいスーパーコンピューティングシステムの運用、「大規模 HPC チャレンジ」・「プログラム並列化・高速化支援サービス」・「GPGPU 移植・高速化支援サービス」という新しい公募制度などを通して、前述のように、日本国内のみならず世界における計算材料科学コミュニティの発展、さらには、世界の材料科学全体の発展に貢献していきたいと考えております。今後とも、計算材料学センターへの皆様のご協力・ご支援をよろしくお願い申し上げます。

コンパイラ、ライブラリ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. PGI コンパイラ

PGI コンパイラを 19.1-0 にバージョンアップしました。

使用方法は以下のマニュアルの 5.1.4 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

アクセラレータサーバ

1. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 19.0.2.187 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアル 5.1.1 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf

2. Intel MKL

Intel MKL 19.0.2.187 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアル 5.2.1 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf

3. PGI コンパイラ

PGI コンパイラを 19.1-0 にバージョンアップしました。

使用方法は以下のマニュアルの 5.1.2 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf

並列計算・インフォマティクスサーバ

1. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 19.0.2.187 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアル 5.1.1 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

2. Intel MKL

Intel MKL 19.0.2.187 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアル 5.2.1 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

3. PGI コンパイラ

PGI コンパイラを 19.1-0 にバージョンアップしました。

使用方法は以下のマニュアルの 5.1.2 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

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. 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 2018.105 へ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の 6.3 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

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/>

2. 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 2019 をインストールしました。本センターでは CASTEP、DMol3 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の 6.4 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

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

<http://accelrys.co.jp/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>

3. WIEN2k

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 WIEN2k のバージョン 18.2 をインストールしました。WIEN2k では、(L)APW+lo 法を用いた高精度のバンド構造計算を行うことが可能です。また、相対論効果を考慮した全電子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の 6.8 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://susi.theochem.tuwien.ac.at/>

4. ABINIT

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 ABINIT のバージョン 8.10.2 をインストールしました。ABINIT では固体の全エネルギーや電荷密度、電子状態などの計算を行うことが可能です。また、構造最適化や分子動力学計算、フォノンや Born 有効電荷、誘電テンソ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の 6.10 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

ABINITの詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

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

5. 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 6.3 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行うことが可能です。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の 6.12 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

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/>

6. 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 12Dec18 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の 6.13 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

LAMMPS の詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

<https://lammps.sandia.gov/>

7. RSDFT

密度汎関数理論に基づく第一原理アプリケーションである RSDFT のバージョン 1.3.0 をインストールしました。RSDFT では全エネルギーやバンド構造などの計算を行うことが可能です。また、実空間差分擬ポテンシャル法を用いており、高速フーリエ変換が必要ないため高並列で実行可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.17 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

RSDFT の詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

<https://github.com/j-iwata/RSDFT>

8. HPhi

数値厳密対角化法による有限モデルソルバーパッケージである HPhi のバージョン 3.1.2 をインストールしました。HPhi は基底状態および有限温度での内部エネルギー、比熱や電荷・スピン構造因子など様々な物理量を計算可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.18 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

HPhi の詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

<http://issp-center-dev.github.io/HPhi/index.html>

9. mVMC

広汎な多体量子系の有効模型の基底状態の高精度な波動関数を変分モンテカルロ法によって数値的に求める有効模型ソルバーパッケージである mVMC のバージョン 1.0.3 をインストールしました。グッツヴィラー・ジャストロー、ダブルロン - ホロン束縛因子の相関因子を取り扱うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.19 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

mVMC の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://github.com/issp-center-dev/mVMC>

10. 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 7.0 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の 6.20 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf

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. 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 12Dec18 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の 6.4 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://lammps.sandia.gov/>

並列計算・インフォマティクスサーバ

1. ANSYS Mechanical CFD

有限要素法による解析ツールである ANSYS Mechanical CFD を 19.3 にバージョンアップしました。実行方法は以下のマニュアルの 6.3.4 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

ANSYS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.ansys.com/ja-JP>

2. 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 2019 をインストールしました。本センターでは CASTEP、DMol3 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の 6.1.10 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

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

<http://accelrys.co.jp/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>

3. AVS/Express

汎用 3 次元可視化ソフトウェアである AVS/Express のバージョン 8.4 に本センターで開発した電子構造のトポロジデータ可視化のためのモジュールをインストールしました。本モジュールの詳細については AVS/Express のモジュール開発の項目をご覧ください。

実行方法は以下のマニュアルの 6.2.4 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

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

<https://www.cybernet.co.jp/avs/products/avsexpress/>

4. VESTA

結晶構造、電子・核密度等の三次元データ及び結晶外形の可視化ソフトウェアである VESTA のバージョン 3.4.6 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 6.2.10 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf

VESTA の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>

AVS/Express のモジュール開発

AVS/Express はモジュールを組み合わせることで様々な可視化を行うことができる汎用の 3 次元可視化ソフトウェアです。計算材料学センターではユーザーサービスの一環として、第一原理計算から得られるシミュレーション計算結果のトポロジーデータを可視化する TOPOSEARCH モジュールを開発し、ユーザーに提供しています。

最新の AVS/Express8.4 は、スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の可視化サーバで利用できますが、ご自分の PC にインストールしてご利用いただくこともできます。ご希望の方は、計算材料学センター (ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp) までご連絡ください。サポートする OS は、Windows8 以上、MacOS10.10-12、RedHat Enterprise Linux7.X です

電子構造のトポロジーデータの可視化モジュール TOPOSEARCH について

TOPOSEARCH モジュールは、エネルギーバンドなど、複数のスカラー値やそれらに付随するベクトル分布のデータを含むファイルから、スカラー値の等値面や等値面上のベクトル分布を表示することができ、電子構造のトポロジーデータの可視化などに応用することができます。ベクトルデータの空間分布の表示機能として、ベクトルの絶対値やベクトル成分値をしきい値として設定した表示範囲の指定や間引き表示への対応の他、バンドの縮退点などの情報を持つ離散スカラー値（特徴点）のデータを与えることで、特徴点周囲におけるベクトル分布を抽出して表示する機能も有しています。図 1 はエネルギーの等値面上のベクトル分布の表示例、および特徴点分布の表示例です。

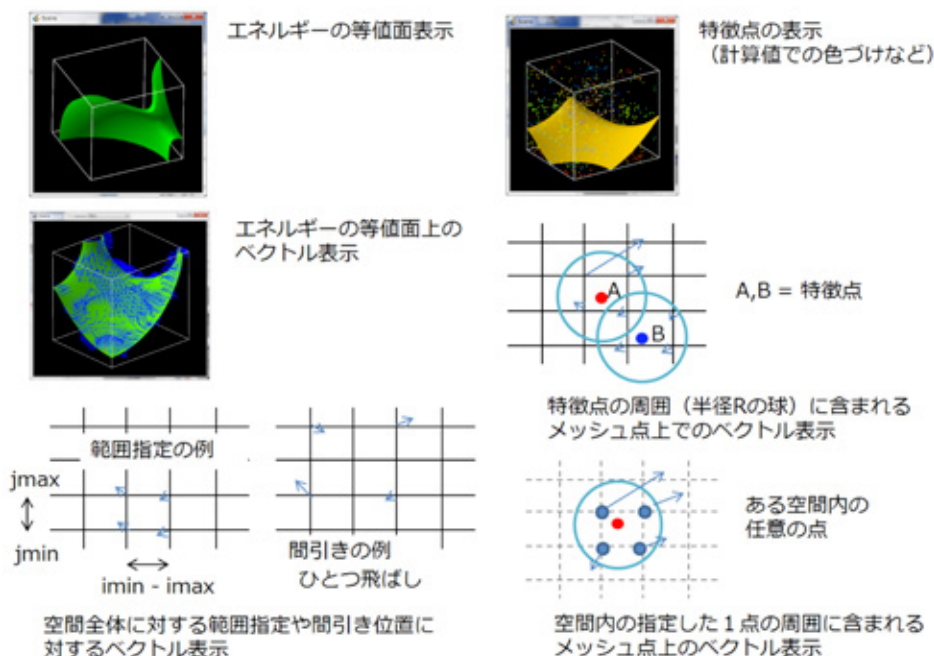


図 1. エネルギーの等値面の等値面上のベクトル表示例、および特徴点の表示例

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出来る、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可視化サーバに AVS/Express をインストールし、ユーザーに提供しています。そして AVS/Express を活用していただくために、AVS/Express の概要、基本的なモジュール結線、計算材料学センターで開発した VASP 用のモジュール、Boundary Surface モジュール、そして平成 30 年度に開発した電子構造のトポロジデータ可視化モジュール、その他の便利なモジュールの紹介と操作、そして、応用と実習という内容で、2 月 28 日にスーパーコンピュータ棟を会場として講習会を開催いたしました。学内外より 4 名にご参加いただきました。



AVS/Express 講習会の様子

MATLAB 講習会の開催

MATLAB は工学や理学、医学など幅広い分野で利用されている数値解析ソフトウェアです。行列計算や関数解析やデータの可視化、アルゴリズム開発に向いており、数多くの企業・研究機関での実績があります。また、Material Discovery の領域での研究では、機械学習の活用が増えてきています。本センターでは、並列計算・インフォマティクスサーバに MATLAB をインストールし、ユーザーに提供しています。MATLAB の利用促進のため、MATLAB の基本的な機能、機械学習、高速化および Python との連携といった内容で、3 月 13 日に講習会を開催いたしました。学内外より 13 名にご参加いただきました。



MATLAB 講習会の様子

セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催

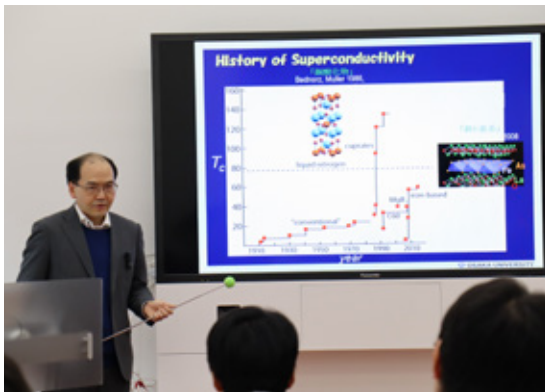
セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」は、スパコンの応用事例を紹介するべく、金研で行われている研究テーマに近い話題を選び、シリーズで開催しているセミナーです。1, 2月、そして5月にセミナーを開催し、いずれの回も多くの方にご参加いただきました。

- ・ No.19 2019年1月28日(月) 大阪大学 大学院理学研究科 物理学専攻 黒木 和彦 教授
「物質に即した有効モデルに基づく非従来型超伝導に関する研究」
- ・ No.20 2019年2月14日(木) 東北大学 未来科学技術共同研究センター シニアリサーチ・フェロー 川添良幸 教授
「正しい計算材料学のあり方—間違った理論でも実験は説明出来る—」
- ・ No.21 2019年5月15日(水) 日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター 防食材料技術開発グループ 研究副主幹 五十嵐 誉廣 先生
「金属腐食現象に対するミクロ・マクロ計算科学的アプローチ」

今後のセミナーの予定

- ・ No.22 2019年6月25日(火) 14:00～15:30 東北大学理学研究科 是常 隆 准教授

※詳細は計算材料学センターまでお問合せください。



黒木教授の講演の様子 (2019年1月28日)



川添教授の講演の様子 (2019年2月14日)



五十嵐先生の講演の様子 (2019年5月15日)

平成 30 年度の計算材料学センター見学者

期間 :2018 年 4 月～2019 年 3 月

見学日	見学者	所属 / 会議など
2018 年 7 月 3 日	シンポジウム参加者 65 名	ポスト京合同公開シンポジウム
2018 年 7 月 12 日	久保 百司氏 他 1 名	東北大学金属材料研究所
2018 年 7 月 15 日	久保 百司氏 他 13 名	東北大学金属材料研究所
2018 年 7 月 27 日	講習会参加者 7 名	東北大学金属材料研究所夏期講習会
2018 年 8 月 1 日	久保 百司氏 他 6 名	東北大学金属材料研究所久保研
2018 年 8 月 8 日	川添 良幸氏 他 1 名	東北大学未来科学技術共同研究センター
2018 年 8 月 18 日	一般見学 28 名	MASAMUNE-IMR 一般見学会
2018 年 8 月 19 日	一般見学 31 名	MASAMUNE-IMR 一般見学会
2018 年 8 月 23 日	久保 百司氏 他 2 名	東北大学金属材料研究所
2018 年 8 月 29 日	受講者 33 名	みやぎ県民大学講座
2018 年 9 月 13 日	久保 百司氏 他 3 名	東北大学金属材料研究所
2018 年 9 月 21 日	北見工業大学生 4 名	北見工業大学
2018 年 9 月 26 日	仙台市高校生 42 名	宮城県立仙台向山高校
2018 年 9 月 27 日	芝 隼人氏 他 2 名	東北大学金属材料研究所
2018 年 10 月 1 日	参加者 47 名	MASAMUNE-IMR お披露目式
2018 年 10 月 29 日	委員会参加者 7 名	外部評価準備委員会
2018 年 11 月 7 日	加藤 秀実氏 他 14 名	材料科学国際共同大学院 キックオフミーティング
2018 年 11 月 16 日	仙台市小学生 27 名	仙台市立田子小学校
2018 年 12 月 21 日	Kwang Seon Shin 氏	Seoul National University
2019 年 2 月 14 日	参加者 9 名	International workshop on science at x-ray free electron lasers
2019 年 2 月 15 日	久保 百司氏 他 16 名	東北大学金属材料研究所
2019 年 2 月 19 日	参加者 9 名	全国技術室長会議
2019 年 2 月 20 日	参加者 7 名	日本鉄鋼協会創形創質工学部 若手交流フォーラム
2019 年 3 月 5 日	池田陽一氏 他 3 名	東北大学金属材料研究所藤田研

見学者総数 のべ 388 名



■ MASAMUNE-IMR 一般見学 31 名
2018 年 8 月 19 日



■ 仙台市立向山高校 42 名
2018 年 9 月 26 日



■ 日本鉄鋼協会創形創質工学部
若手交流フォーラム 7 名
2019 年 2 月 20 日



■ 東北大学金属材料研究所藤田研 4 名
2019 年 3 月 5 日

平成 30 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 30 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 62 研究機関へ合計 346 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	84
学内	6 研究機関	57
国内の研究機関	26 研究機関	78
国外の研究機関	30 研究機関 (13 ヶ国)	127
合 計	72	346

新任教員あいさつ

昨年度12月に計算材料学センター教員（助教）として着任した柳有起と申します。主に、強相関電子系と呼ばれる物質群が示す磁性や超伝導といった様々な物理現象に関する理論研究を行ってきました。これらの研究を進める上でスーパーコンピュータを使用した経験はありますが、運用に携わったことはこれまでありませんでした。本センターでは、スーパーコンピュータの運営・利用支援に従事し、計算機資源を安定的に提供することで計算材料学の発展に貢献できればと考えています。また、本センターの教員として充実した計算機環境を積極的に活用し、独自の研究成果をあげられるよう努力していく所存です。

センター教員としてまだ不慣れな部分も多く、久保先生や鈴木先生、職員の皆様方から多くのことを毎日教えて頂いています。至らぬ点多いかと存じますが、計算材料学センター教員としての責務を果たせるよう尽力して参りますので、今後ともよろしくお願い申し上げます。



助教 柳 有起

新職員あいさつ

今年度4月より計算材料学センターの技術職員として勤務しております中野倅太と申します。前年度まで東北大学工学研究科の修士課程に在籍しており、炭化ケイ素の結晶成長に関する研究を行っていました。

専門分野は計算機とは無関係ですが、学生時代より個人的な興味からコンピュータに関しても独学を続けておりました。一日でも早くスーパーコンピュータや計算材料学センターの役割を理解し、円滑に業務を進められるよう努力してまいります。

最近ではスパコンシステムのユーザー登録手続きや資料作成などの業務を少しずつ任せていただく中で、世界中の研究者が計算材料学センターのスーパーコンピュータを利用していることを実感いたしました。世界的な研究拠点としての東北大学における計算材料学センターの担う役割の重要性を再認識し、身の引き締まる思いがいたします。

未熟者ですが精一杯努力いたしますので、これからも皆様のご指導のほどよろしくお願いいたします。



技術職員 中野 倅太

計算材料学センターだより No.31

2019年 5月22日 発行

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



TEL (022) 215 - 2411

URL <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>

E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp