

計算材料学センターだより

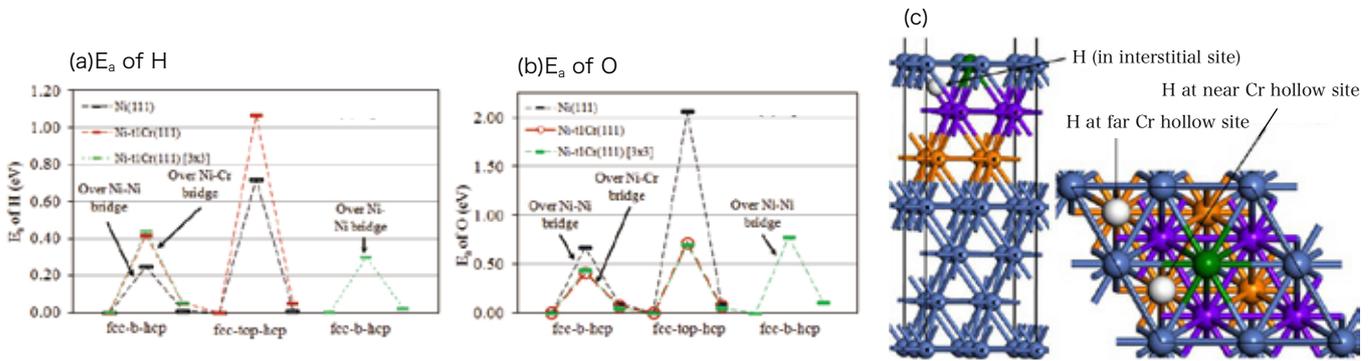


Fig. Activation energy of (a) H and (b) O on Ni(111) and Ni-t1Cr(111) surfaces, (c) side view of Ni-t1Cr(111) surface with H in the interstitial site(left), and top view of Ni-t1Cr(111) surface with H on the surface(right).

■ Adsorption and Diffusion of H and O on an Ni(111) Surface Containing Different Amounts of Cr

CONTENTS

- ・スーパーコンピューティングシステム更新
- ・コンパイラ、ライブラリ、アプリケーション情報
- ・Cray XC50-LC および Cray CS-Storm プログラミング講習会の開催
- ・セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催
- ・MASAMUNE-IMR がメディアに紹介
- ・新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の一般公開の開催
- ・新スーパーコンピューティングシステム披露式の報告
- ・SC18 に本センターの職員が参加
- ・新職員あいさつ

表紙の図について

■ Adsorption and Diffusion of H and O on an Ni(111) Surface Containing Different Amounts of Cr

The adsorption and activation energy of atomic hydrogen and oxygen on Ni(111) and Ni-Cr(111) surfaces is calculated using density functional theory (DFT). The calculated adsorption energy (E_{ad}) of H and O gradually decreases with increasing their coverage on the surface, but the effect is not so significant for H. H in the interstitial site prefers to stay at octahedral site and slightly increases the E_{ad} with increasing coverage in the subsurface region. However, H in interstitial sites significantly modifies the geometrical structure of the surface. For example, at 1.0ML, the Ni-Ni bond elongation is 7.0% for Ni(111), and the elongation is 7.3% for Ni-Ni and 9.5% for Ni-Cr for Ni-Cr(111) surface, indicating that Cr atoms are preferentially moved outward by H. Additionally, the activation energy (E_a) of H is increased by Cr. Doping of Cr modifies the surface electronic structures, which can increase the energy barrier. This study suggests that Cr atoms pulled away from the surface by H results in a cation vacancy on the surface. For O, E_{ad} increases with increasing Cr content on top of the surface. The highest energy is attained by the surface with the most Cr on top, means that localized Cr forms a strong binding with O. The E_a of O over the Ni-Cr bridge is 0.41 eV, which is 0.26 eV less than that of the pristine Ni(111) surface. Increasing Cr content on the surface increases the overall E_a of oxygen. Thus, Cr on top of nickel surface increases the E_{ad} and E_a of O resulting in the formation of protective film in the Cr-rich region, which may increase the material's resistivity.

□ Nishith K. Das and Tetsuo Shoji Appl. Surf. Sci., **445**, 217(2018).

スーパーコンピューティングシステム更新

旧スーパーコンピューティングシステムは2018年4月12日をもって運用を停止し、8月1日より新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 for NExt-generation – Institute for Materials Research) の稼働を開始しました。長期間の停止となり、利用者の皆様には大変ご不便をおかけしました。本システムは、世界的に早急な対応が求められているエネルギー問題・環境問題を解決する材料技術の創製、豊かで暮らしやすい未来社会を創造するとともに我が国の国際競争力を強化するデバイス・エレクトロニクス材料の開発、さらには持続可能な安全・安心な社会を実現するための社会基盤を支える新材料の創出に寄与することを目的としています。

MASAMUNE-IMR は大規模並列計算サーバ Cray XC50-LC 及びアクセラレータサーバ Cray CS-Storm 500GT を中心に構成されており、総計算ノード理論演算性能は旧システムの10倍となる3PFLOPSとなっています。また、旧システムの約半分の消費電力での運用が可能です。図1にシステム構成図を示します。

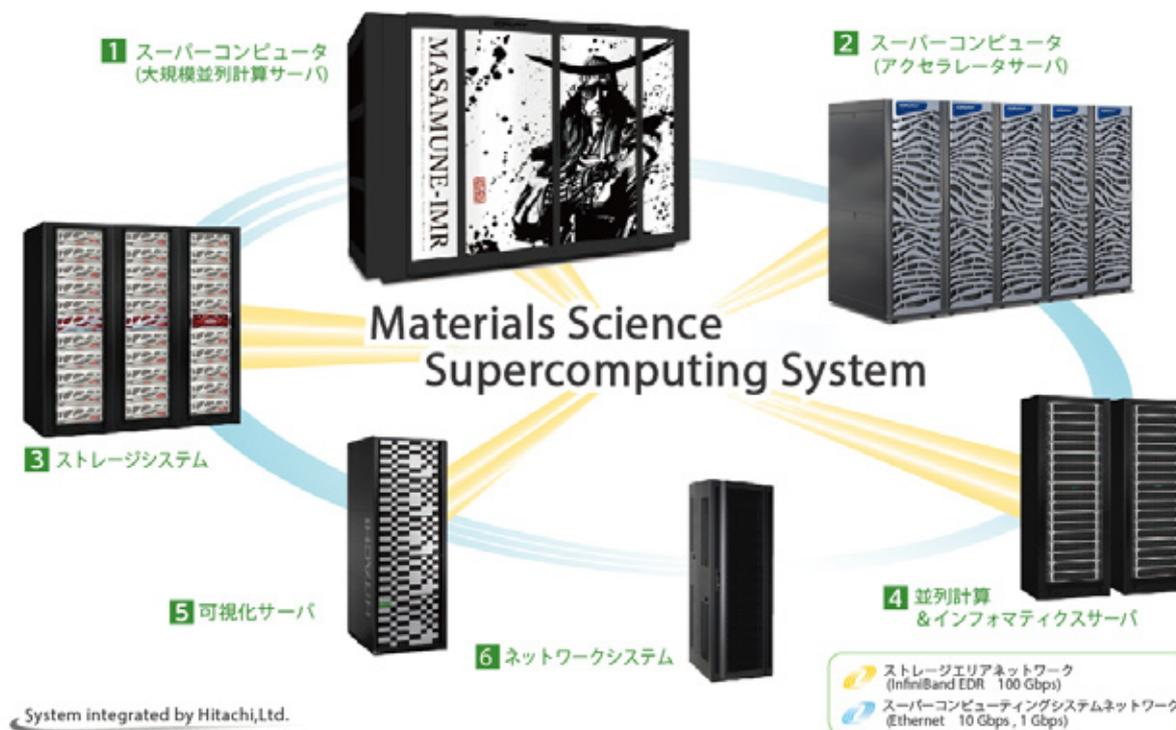


図1. スーパーコンピューティングシステム構成図

(1) スーパーコンピュータ (大規模並列計算サーバ) : Cray XC50-LC

大規模並列計算サーバはCPUで計算を行うスーパーコンピュータで、18コアのCPUを2基搭載した計算ノードが320台で構成されており、ノード間はAriesと呼ばれる高速なネットワークで結合されています。コンパイラや数値演算ライブラリなどのプログラム開発環境を備えており、システムにチューニングされた材料設計用のアプリケーションが多数導入されているため、複雑な材料の

設計を高速に行うことができます。以下にハードウェア構成を示します。

CPU : Intel Xeon Gold 6150

ノード理論演算性能 : 3.11 TFLOPS

ノード主記憶容量 : 768 GiB

総ノード数 : 320 (計算ノード : 293、I/O ノード等 : 27)

総計算ノード理論演算性能 : 911.3 TFLOPS

総主記憶容量 : 219.8 TiB

(2) スーパーコンピュータ (アクセラレータサーバ) : Cray CS-Storm 500GT

アクセラレータサーバは GPU アクセラレータを利用して計算を行うスーパーコンピュータで、ノードあたり 10 基の NVIDIA Tesla V100 が搭載されており、多数の GPU コアを利用した超並列計算により大幅な性能向上を実現します。また、GPU アクセラレータに対応した材料設計用のアプリケーションが導入されており、機械学習の実行環境も備えています。以下にハードウェア構成を示します。

CPU : Intel Xeon Gold 6150

GPU : NVIDIA Tesla V100 for PCIe

ノード理論演算性能 : 73.11 TFLOPS (CPU: 3.11 TFLOPS、GPU: 70 TFLOPS)

ノード主記憶容量 : 768 GiB

総ノード数 : 29

総計算ノード理論演算性能 : 2,120.2 TFLOPS (CPU: 90.2 TFLOPS、GPU: 2,030 TFLOPS)

総主記憶容量 : 21.8 TiB

(3) 並列計算&インフォマティクスサーバ : HPE ProLiant DL360

並列計算&インフォマティクスサーバはマテリアルズ・インフォマティクスによる研究を推進するため、実験やシミュレーションで得られた膨大なデータを解析するためのソフトウェアを利用可能な環境を備えています。また、申請することにより、一定の期間を利用者自身が自由に利用することができる仮想サーバを提供することもできます。さらに、一部のノードはスーパーコンピュータと同様に計算資源としても利用できます。以下にハードウェア構成を示します。

CPU : Intel Xeon Gold 6154

ノード理論演算性能 : 3.46 TFLOPS

ノード主記憶容量 : 576 GiB

総ノード数 : 29

総計算ノード理論演算性能 : 100.22 TFLOPS

総主記憶容量 : 16.3 TiB

(4) 可視化サーバ：HPE ProLiant DL380

計算結果を可視化するためのアプリケーションが多数導入されており、複数のグラフィックボードを搭載することで高速な描画環境を提供します。以下にハードウェア構成を示します。

CPU：Intel Xeon Gold 6140

ノード主記憶容量：576 GiB

総ノード数：5

(5) ストレージシステム：DDN EXAScalar ES14KX

ストレージシステムは利用者のデータを保持・管理します。総ディスク容量は 4.0 PB で、各利用者のディスククォータの初期値は 500 GB です。ディスククォータの拡張をご希望の方はご相談ください。



コンパイラ、ライブラリ、アプリケーション情報

スーパーコンピューティングシステムの各計算機環境で利用できるコンパイラ、ライブラリを表 1 に示します。

表 1. 各計算機のコンパイラ、ライブラリ情報

コンパイラ ライブラリ名	スーパーコンピュータ		並列計算・インフォ マティクスサーバ
	大規模並列計算 サーバ	アクセラレータ サーバ	計算サーバ
Cray Compiling Environment	○		
Intel Parallel Studio XE	○	○	○
PGI Professional Edition	○	○	○
GNU Compiler Collection	○	○	○
NVIDIA CUDA Compiler		○	
Cray Scientific and Math Library	○		
Intel Math Kernel Library	○	○	○
GPU-Accelerated CUDA Libraries		○	

スーパーコンピューティングシステムの各計算機環境で利用できるアプリケーションを表 2 に示します。

表 2. 各計算機のアプリケーション情報

アプリケーション名	スーパーコンピュータ		並列計算・インフォマティクスサーバ		可視化サーバ
	大規模並列計算サーバ	アクセラレータサーバ	計算サーバ	仮想サーバ	可視化サーバ
Gaussian 16	○		○	○	
GaussView				○	○
ADF	○				
ADF-GUI					○
CRYSTAL	○		○	○	
QuantumATK	○				
QuantumATK NanoLab					○
Materials Studio	○				
ANSYS Mechanical CFD				○	○
Mathematica				○	○
MATLAB				○	
AVS/Express					○
VASP	○	○※ 1	○	○	
WIEN2k	○		○	○	
CPMD	○		○	○	
ABINIT	○		○	○	
LAMMPS	○	○	○	○	
SIESTA	○		○	○	
QUANTUM ESPRESSO	○	○	○	○	
OpenMX	○				
SMASH	○				
TOMBO	○				
Molekel					○
MOLDEN					○
XCrySDen					○

※ 1：アクセラレータサーバの VASP は、GPU 対応版のため一部機能が制限されています。

Cray XC50-LC および Cray CS-Storm プログラミング講習会の開催

8月より新スーパーコンピューティングシステムの稼働を開始するにあたり、スーパーコンピュータ Cray XC50-LC および Cray CS-Storm 500GT におけるプログラミング講習会を 2018 年 7 月 18 日(水)に 1 号館 7 階セミナー室 1 で開催しました。Cray プログラミング環境の概要や GPU を利用するためのアプローチ、Cray 数値演算ライブラリ、Cray 性能分析ツール、プログラムの並列化・高速化などについて、Cray 社の Luiz DeRose 氏および Heidi Poxon 氏より説明して頂き、学内外より 14 名が受講しました。



Cray XC50-LC および Cray CS-Storm
プログラミング講習会の様子



セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催

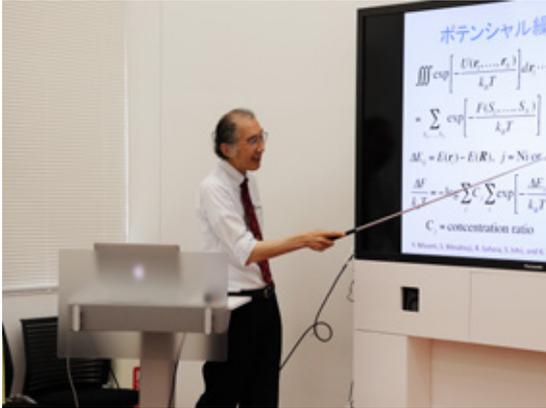
セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」は、スパコンの応用事例を紹介するべく、金研で行われている研究テーマに近い話題を選び、シリーズで開催しているセミナーです。前回発行号以降、下記6回のセミナーを開催し、いずれも多くの方にご参加頂きました。

- ・ No.13 2018年5月29日(火) 横浜国立大学 大学院工学研究院 大野 かおる 教授
「第一原理フェーズ・フィールド法の提案」
- ・ No.14 2018年6月18日(月) 東京大学 大学院工学系研究科 特任研究員 山下 晃一 先生
「光エネルギー変換の理論・計算化学」
- ・ No.15 2018年7月31日(火) 東京大学 大学院工学系研究科 有田 亮太郎 教授
「超伝導転移温度の第一原理計算」
- ・ No.16 2018年10月19日(金) 大分大学 理工学部 岩下 拓哉 准教授
「計算機シミュレーションによる液体・ガラスの物性研究」
- ・ No.17 2018年11月13日(火) Department of Inorganic Chemistry, Fritz-Haber Institute of the Max-Planck-Society Klaus E. Hermann 教授
「Fragment Motion in Motor Molecules: Basic Concepts and Application to Intra-Molecular Rotations」
- ・ No.18 2018年12月10日(月) 名古屋大学 大学院工学研究科 小山 敏幸 教授
「計算熱力学・計算組織学・材料情報学の連携による材料開発の加速」

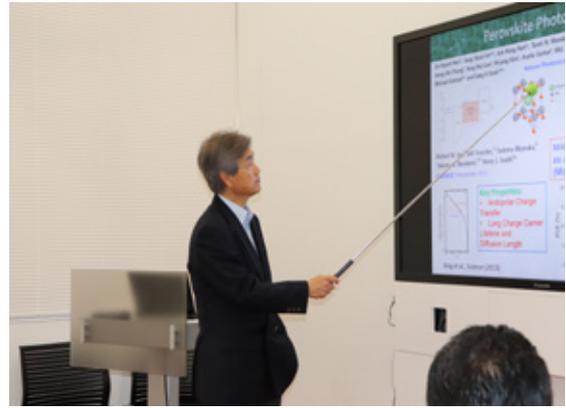
今後のセミナーの予定

- ・ No.19 2019年1月28日(月) 14:00～15:30 東北大学 金属材料研究所 2号館 1階ラウンジ
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) 14:00～15:30 東北大学 金属材料研究所 2号館 1階ラウンジ
東北大学 大学院工学研究科・工学部 川添 良幸 教授

※詳細は計算材料学センターまでお問合せください。



大野教授の講演の様子 (2018年5月29日)



山下先生の講演の様子 (2018年6月18日)



有田教授の講演の様子 (2018年7月31日)



岩下准教授の講演の様子 (2018年10月19日)



Hermann 教授の講演の様子 (2018年11月13日)



小山教授の講演の様子 (2018年12月10日)

MASAMUNE-IMR がメディアに紹介

2018年7月12日に高梨所長と久保センター長が主となり、新スーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」の記者会見発表を行いました。会見後に行われたスーパーコンピューティングシステムの現地撮影では実際の計算機の撮影の他、センター長がスーパーコンピュータについてのインタビューなどの取材を受け、その内容は仙台放送プライムニュース、NHKてれまさむねで放映されました。また、9月13日にも東日本放送の取材を受け、9月20日のスーパーJチャンネルで放映されました。

日刊工業新聞や毎日新聞などのニュース紙面や時事通信などのインターネット上のニュースなど、多数のメディアで話題として取り上げていただきました。



記者会見と新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の撮影

新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR の一般公開の開催

2018年8月18日と19日に一般の方々を対象とした一般公開を行いました。両日で59名の市民の方々に見学に来て頂きました。ご家族連れから老若男女の方々が、スーパーコンピュータの筐体に描かれた次世代を見据える政宗の迫力ある墨絵イラストの前で記念撮影をされたり、説明スタッフに熱心にスーパーコンピュータについて尋ねていました。一般の方々に広くスーパーコンピュータがどのようなことに役立っているか興味を持って頂くことができました。



新スーパーコンピューティングシステムの見学の様子



見学していただいた方にプレゼントしているノベルティグッズの一例

新スーパーコンピューティングシステム披露式の報告

計算材料学センターに新しく導入された新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR のシステム披露式が、10月1日に金属材料研究所で開催されました。はじめに金属材料研究所の高梨弘毅所長から式辞が述べられ、続いて、東北大学の野英男総長、文部科学省研究振興局計算科学技術推進室長の坂下鈴鹿様、理化学研究所の松岡聡センター長より、新システムの導入についてご祝辞を頂きました。その後、今回の新スーパーコンピューティングシステムの更新にご尽力頂いた日立製作所様に対して、高梨所長より感謝状が贈呈されました。最後に計算材料学センターの鈴木通人准教授から新システムの紹介が行われ、披露式が閉式となりました。式の終了後、計算材料学センター長の久保百司教授より今後の計算材料学センターの展開について説明があり、スーパーコンピューター棟に移動し、新システムの披露が行われました。



高梨所長のあいさつ



高梨所長（左）から日立製作所様（右）へ感謝状贈呈



計算材料学センター長の久保教授



新スーパーコンピューティングシステム披露の様子

SC18 に本センターの職員が参加

2018年11月11日(日)から16日(金)に、米国テキサス州ダラスのKAY BAILEY HUTCHISON CONVENTION CENTER DALLASで行われたSC18(Supercomputing Conference 2018)に、鈴木通人准教授と丹野航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・ネットワーキング・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。今回は364のブース出展と約13,000名の参加者がありました。センターの展示内容は、スーパーコンピューティングシステムおよび本センターの共同利用施設としての役割の紹介、そして、スーパーコンピューティングシステム

を利用して得られた研究成果のポスター展示を行い、来場者への説明とパンフレットの提供などを行いました。また、テクニカルプログラムの聴講、企業や他大学の展示ブースへ来訪して最新システムの情報収集などを行って来ました。今年は、従来のコンピュータに加えて量子コンピュータや機械学習のセッションや展示が増えており、計算科学分野の過渡期の雰囲気を感じる内容となっていました。



SC18での展示と鈴木通人准教授(中央)、丹野航太技術職員(右)



ダラス市内の風景

新職員あいさつ

9月から計算材料学センターの事務補佐員として勤務しております澤田あかねと申します。私は生まれも育ちも兵庫県で、この歳になるまで他県へ出たことがなかったのですが、この度ご縁があり仙台にやって参りました。生活の端々で文化の違いを感じることもあり、毎日とても楽しく過ごしております。

着任して間もない10月に、新スーパーコンピューティングシステム披露式が挙行され、私も微力ながら披露式に携わらせていただきました。当日は大変多くの関係者の方たちにご参列いただき、MASAMUNE-IMRに多くの期待と注目が集まっていることを知りました。この度はとても貴重な経験が出来たことをありがたく思っております。

不慣れなところがありご迷惑をおかけすることもあるかと思いますが、スーパーコンピューティングシステムを日々作り上げている職員の皆様に、事務面からお力添えが出来るよう日々頑張っております。どうぞよろしくお願い申し上げます。



事務補佐員 澤田 あかね

9月1日より技術補佐員として勤務しております早坂彩紀と申します。主にスパコン成果報告書の編集やスパコンプロフェッショナルなどの広報準備を担当しています。スパコンの存在を皆様により身近に感じていただけるよう少しでもサポートできたらと思います。

宮城に6年ぶりに戻ってきたこともあり週末はよく実家に帰って畑仕事の手伝いをしているのですが、最近白菜や春菊が採れるようになり冬の到来を感じています。一年の早さを痛感するとともに、ただ日々に流されるのではなくいろいろなことを吸収して成長していけたらと強く思います。まだまだ勉強不足なことばかりですので、何卒ご指導ご鞭撻のほどよろしくお願いいたします。



技術補佐員 早坂 彩紀

計算材料学センターだより No.30

2018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



TEL (022) 215 - 2411

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

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