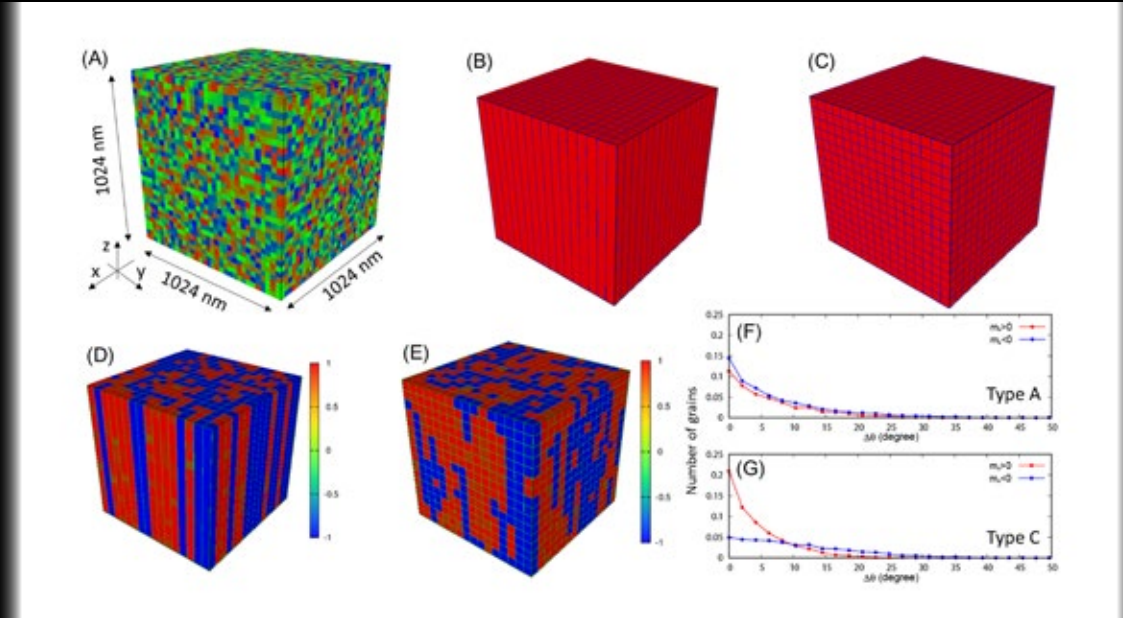


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・新サービスの開始
- ・リアルタイムジョブ参照システム
- ・アプリケーションの性能測定
- ・コンパイラ、ライブラリのインストール
- ・アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・「MASAMUNE-IMR」の利用成果
- ・新聞に MASAMUNE-IMR を利用した研究成果が掲載
- ・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
- ・東北大学技術職員研修 ポスター発表で本センター職員が優秀発表賞を受賞
- ・SC19 に本センター技術職員が参加
- ・片平まつり 2019 きんけん一般公開顛末記
- ・新職員あいさつ

表紙の図について

■ Effects of grain boundary phases on magnetization reversal inside nanocrystalline permanent magnets

We have studied the mechanism of magnetization reversal within nanocrystalline permanent magnets using micromagnetic simulations. We simulate magnetization dynamics inside the simulation model which consists of cubic grains and grain boundary phases, as shown in (A). We consider two types of grain boundary phases as shown in (B) and (C). When the grain boundary phases are inserted only along the z-direction (Type A), the magnetization reversal regions construct the pillar shape structure as shown in (D). In contrast, the magnetization reversal region is placed randomly inside the permanent magnet having the grain boundary phases in the all-direction (Type C) as shown in (E). The magnetization reversal regions consist of different grains between Type A and C. Figure (F) and (G) show number of the grains having (red) positive and (blue) negative magnetization along the z-direction. In the case of Type A, magnetization reversal does not depend on the easy-axis orientation inside the grain. In contrast, the magnetization reversal occurs preferentially in the grains having the large tilt-angle of the easy axis from the z-direction inside the permanent magnet with Type C grain boundary phase.

□ Hiroshi Tsukahara, Kaoru Iwano, Chiharu Mitsumata, Tadashi Ishikawa and Kanta Ono
Joint MMM-Intermag conference 2019.

新サービスの開始

超大規模 HPC チャレンジ

2019年8月より、スーパーコンピュータを使用した「超大規模 HPC チャレンジ」の募集を開始しました。これは、当センターのスーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-IMR において、大規模並列計算サーバの 293 ノードを用いた全ノード大規模並列計算を中心とした大規模・超長時間の計算を実行するための環境を占有利用できる公募型プロジェクトです。定期保守後に大規模並列計算サーバおよびアクセラレータサーバのそれぞれについて大規模計算を 1 ジョブ実行できます。随時、募集しておりますので詳細は Web ページをご確認ください。

詳細情報：<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/hpc.html>

利用可能な計算資源

大規模並列計算サーバ (Cray XC50-LC)

キュー名	占有ノード数上限	メモリ量上限 [GiB]	計算時間上限 [h]
SP_064	64	44,230	336
SP_128	128	88,460	168
SP_293	293	202,520	24

アクセラレータサーバ (Cray CS-Storm 500GT)

キュー名	占有ノード数上限	メモリ量上限 [GiB]	計算時間上限 [h]	GPU 数上限
SA_016	16	11,040	72	160

並列化支援および GPGPU 移植サービス

1. 「プログラム並列化・高速化支援サービス」

大規模並列計算サーバ (Cray XC50-LC) の利用効率化のため、「プログラム並列化・高速化支援サービス」を開始しました。ユーザーが独自に開発しているプログラムを対象に、チューニング（並列化、対応ライブラリへの接続など）を行います。申請は公募制で、計算材料学センターで審査を行い、性能向上が見込めるプログラムを年間最大 2 件まで採択予定です。来年度の公募は 5 月頃に予定しています。プログラムの大規模化や性能向上を検討されている方は是非本サービスをご利用ください。サービスの詳細は Web ページをご確認ください。

詳細情報：<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/xc50.html>

2. 「GPGPU 移植・高速化支援サービス」

計算材料学センターでは、2018年8月にGPGPUを備えたアクセラレータサーバ（Cray CS-Storm）を導入しました。これまでMPIおよびSMP並列を中心としたシステムでしたが、この新しいGPGPU並列システムの利用促進のため、ユーザーが独自に開発しているプログラムを対象としたGPGPUへの移植およびチューニング（OpenACC/CUDA化、CUDA対応ライブラリへの接続など）のサービスを開始しました。申請は公募制で、計算材料学センターで審査を行い、性能向上が見込めるプログラムを年間最大2件まで採択予定です。本年度採択となった1件のプログラムのGPGPU移植がすでに実施され、約9倍の計算速度向上が見込まれています。来年度の公募は5月頃に予定しています。アクセラレータサーバの利用を検討されている方は是非本サービスをご利用ください。サービスの詳細はWebページをご確認ください。

詳細情報：<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/gpgpu.html>

リアルタイムジョブ参照システム

2019年9月より大規模並列計算サーバ、アクセラレータサーバのノードステータス、ジョブステータス、CPU情報、プロセス情報を取得し、グラフ表示するリアルタイムジョブ参照システムが利用可能になりました。利用者は自分のジョブに関連する情報および使用ノード時間に関する情報をWebブラウザ上で確認することができます。

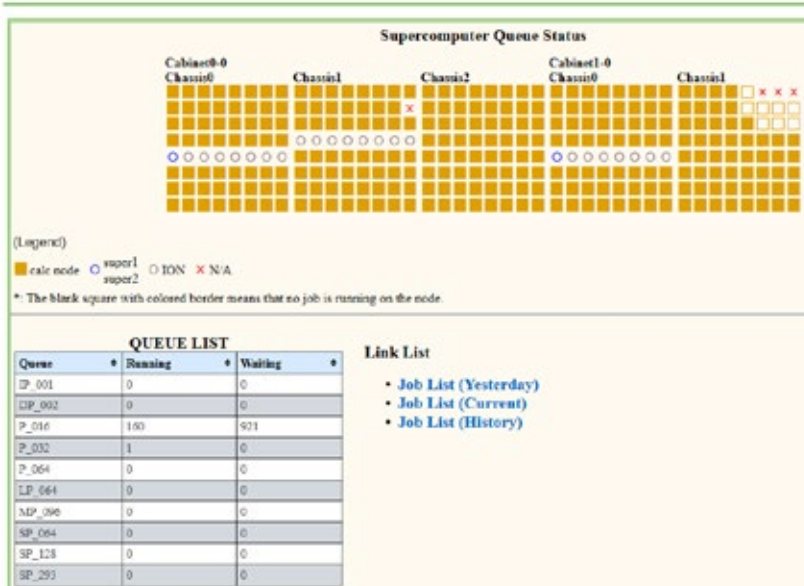
詳細は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/RealtimeJobReferenceSystem.pdf>

・ノード状況画面

各サーバのノードの使用状況、キューの使用状況を示します。上部のQueue Statusではサーバの使用状況を表示しています。□が1つの計算ノードを表し、ジョブが実行されていれば、■で表示されます。下部のQUEUE LISTでは各キューの実行および待ちジョブ数を示しています。

Supercomputer Queue Status (XC50)



・ 実行済みジョブ一覧画面

自分の実行済みジョブを日単位で一覧表示します。各ジョブについてのジョブ ID、実行時間、CPU 利用率、使用メモリ量、実行ノード名などの情報を確認することができます。

Job List (XC50)

Job List (2019/10/31)										
<<Prev Day					Next Day>>					
Job ID	Job Name	Qsub	Start	End	Queue	Elapsed Time(h)	CPU Time(h)	CPU Usage(%)	MEM(GB)	Running On
259128.sdb	ZGNR	2019-10-31 18:03:23	2019-10-31 18:15:56	2019-10-31 19:47:57	P_016	1.53	110.18	49.89	14.19	xc_118 xc_122

・ 実行中/未実行ジョブ一覧画面

自分の実行中/未実行のジョブを一覧表示します。各ジョブについてのジョブ ID、実行状態、実行ノード名などの情報を確認することができます。

Current Job List (XC50)

Current Job List (2019/11/01 19:00)							
<<Prev				Next>>			
Job ID	Job Name	Qsub	Start	End(Estimated)	Status	Queue	Running On
259784.sdb	vasp	2019/11/01 17:37:09	2019/11/01 17:49:31	2019/11/04 17:49:31	R	P_016	xc_304
259833.sdb	g16	2019/11/01 18:52:27	-	-	Q	P_016	-

・ ジョブ履歴画面

自分のジョブ履歴（直近に終了したジョブ 100 件）を一覧表示します。各ジョブについてのジョブ ID、開始/終了時刻、実行時間、実行ノード名などの情報を確認することができます。

User Job List (XC50)

User () Job List (last 100 jobs)								
Job ID	Qsub	Start	End	Queue	Elapsed Time(h)	MEM(GB)	Running On	
212884.sdb	2019/09/20 10:58:23	2019/09/20 10:58:24	2019/09/20 14:11:17	P_016	3.21	120.80	xc_40	
212886.sdb	2019/09/20 11:07:02	2019/09/20 11:07:05	2019/09/20 12:02:08	P_016	0.92	57.37	xc_20	
212887.sdb	2019/09/20 11:07:07	2019/09/20 11:07:07	2019/09/20 11:07:29	P_016	0.01	N/A	xc_24	

- ・ ジョブ詳細画面

指定されたジョブの詳細情報を示します。各ジョブについてのジョブ ID、開始/終了時刻、実行時間、実行ノード名などの情報を確認することができます。

Job Information (XC50)

Job Information	
Job ID	212884.sdb
User ID	
Qsub	2019-09-20 10:58:23
Start	2019-09-20 10:58:24
End	2019-09-20 14:11:17
Queue	P_016
Elapsed Time(h)	3.21
MEM(GB)	120.80
Qsub Options	qsub submit.sh
Script	submit.sh
Working Dir	
Running On	xc_40

- ・ ジョブ投入スクリプト表示画面

指定されたジョブ ID の投入したスクリプト名およびスクリプトの内容を表示します。

Execution Script Contents (XC50)

Execution Script Contents	
filename	submit.sh
contents	<pre>#!/bin/sh #PBS -l select=1 #PBS -l walltime=72:00:00 #PBS -q P_016 #PBS -N vasp DIRNAME=`basename \$PBS_O_WORKDIR` WORKDIR=/work/\$USER/\$PBS_JOBID mkdir -p \$WORKDIR cp -raf \$PBS_O_WORKDIR \$WORKDIR cd \$WORKDIR/\$DIRNAME aprun -n 36 -N 36 -j 1 /work/app/VASPS/current/bin/vasp_std cd; if cp -raf \$WORKDIR/\$DIRNAME \$PBS_O_WORKDIR/.. ; then rm -rf \$WORKDIR; fi</pre>

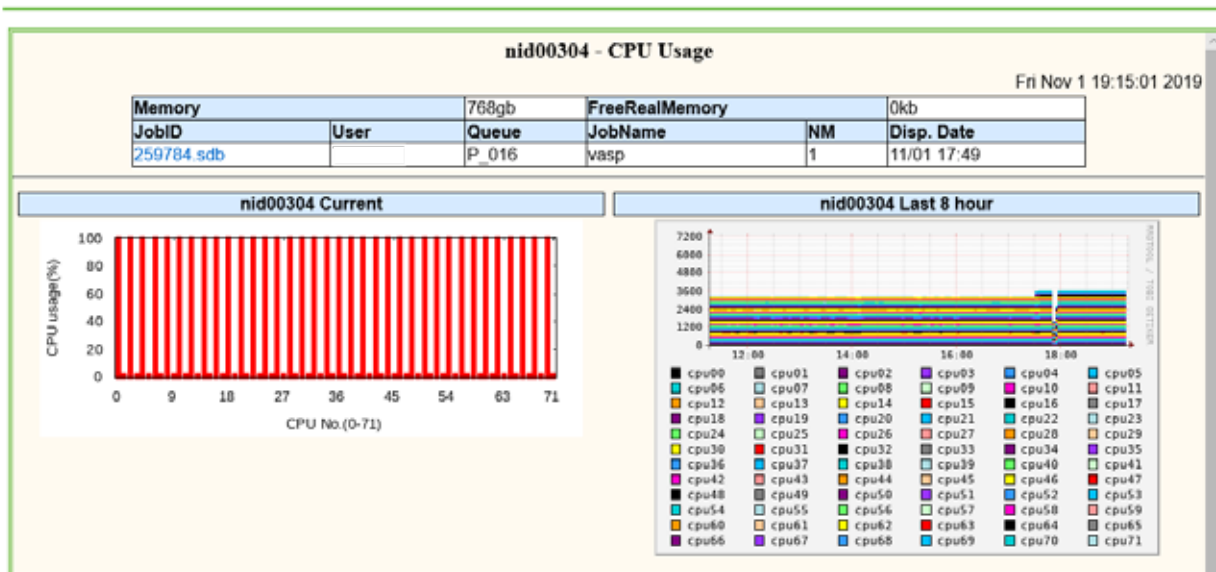
・ CPU 利用状況画面

指定されたノードの CPU 利用状況をグラフ表示します。この画面を見ることで、自分のジョブが効率よく CPU を使用しているかを確認することができます。

MASAMUNE-IMR で導入している計算ノードには 18 個の CPU コアを有する CPU が 2 個搭載されており、ハイパースレッディングを使用することで 1 ノードあたり 72 個の処理をすることができます。VASP などの MPI でコンパイルされたプログラムはハイパースレッディングを無効化してノードあたり 36 コアで実行したほうが性能が良くなる場合があります。

以下のグラフではハイパースレッディングを無効化してジョブを実行しており、2 個の CPU で 36 個の CPU コア全てが 100% 使用されていることがわかります。CPU No.0 から 35 が 1 つ目の CPU で、CPU No.36 から 71 が 2 つ目の CPU を示しています。

CPU Usage (XC50)



・ プロセス一覧画面

CPU 利用状況画面で Current のグラフをクリックすることで、そのノードにおけるプロセス一覧を表示します。

Process List (XC50)

The screenshot shows the 'nid00304 process list (2019/11/01 19:07)' interface. It contains a table with the following columns: USER, PID, %CPU, %MEM, VSZ, RSS, STAT, START, TIME, and COMMAND. The table lists 15 processes, all with a %CPU of 99.9 and a COMMAND of '/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std'.

USER	PID	%CPU	%MEM	VSZ	RSS	STAT	START	TIME	COMMAND
	32229	0.0	0.0	230364	2944	Ss	17:49	0:00	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32265	99.9	0.1	16373916	1307708	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32266	99.9	0.1	16734688	1195512	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32267	99.9	0.1	16924740	1195840	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32268	99.9	0.1	16986180	1195172	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32269	99.9	0.1	16795716	1196040	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32270	99.9	0.1	17016900	1195160	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32271	99.9	0.1	16765016	1197160	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32272	99.9	0.1	17084916	1197360	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32273	99.9	0.1	16924760	1195860	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32274	99.9	0.1	17201240	1195424	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std
	32275	99.9	0.1	16894040	1195956	R	17:49	80:11	/work/app/VASP5/current/bin/vasp_std

アプリケーションの性能測定

大規模並列計算サーバおよびアクセラレータサーバに導入されている VASP 5.4.4、QUANTUM ESPRESSO 6.4.1、LAMMPS 5Jun19、Gaussian16 Rev C.01 について、ユーザーのデータあるいは公開されているベンチマークデータを用いて性能測定を行いました。アクセラレータサーバにはノードあたり 10 基の GPU (NVIDIA Tesla V100 for PCIe) が搭載されており、GPU に対応しているアプリケーションであれば大規模並列計算サーバよりも高速に実行できる場合があります。

表 1 および図 1 から図 4 に結果を示します。アクセラレータサーバにはノードあたり 36 個の CPU コアがありますが、VASP ではノードあたり 10 コア、LAMMPS ではノードあたり 30 コアを使用するのが最も性能が良かったため、その結果を用いています。

なお、今回の測定結果はあくまで一例であり、データの規模や計算内容等により傾向が変わる可能性がありますので、ご了承下さい。

表 1. 大規模計算サーバとアクセラレータサーバの性能比較

	測定結果	注意事項
VASP	<ul style="list-style-type: none"> ・1 ノード使用の場合はアクセラレータサーバのほうが性能が良い。 ・複数ノード使用の場合、アクセラレータサーバでは効率はあまり良くない。 	GPU 未対応の計算の場合はエラーになる。
LAMMPS	<ul style="list-style-type: none"> ・1 ノード使用の場合はアクセラレータサーバのほうが性能が良い。 ・複数ノード使用の場合、アクセラレータサーバでは効率はあまり良くない。 	
QUANTUM ESPRESSO	<ul style="list-style-type: none"> ・1 ノード使用の場合はアクセラレータサーバのほうが 5 倍以上性能が良い。 ・複数ノード使用の場合、アクセラレータサーバでは効率はあまり良くない。 	GPU 未対応の計算の場合はエラーになる。
Gaussian	<ul style="list-style-type: none"> ・アクセラレータサーバの方が性能が良いデータもあるが、大幅な性能向上は得られなかった。 	大規模な分子系における DFT でのエネルギー計算、勾配計算、振動計算に有効で、小規模の計算や post-SCF 計算では GPU は効果的ではない。 (参考： http://gaussian.com/gpu/)



MASAMUNE-IMR 公式ロゴ

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Multi-scale simulations towards Next-generation - Institute for Materials Research

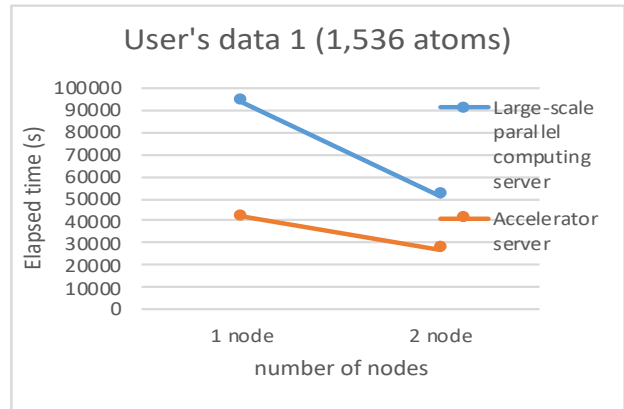
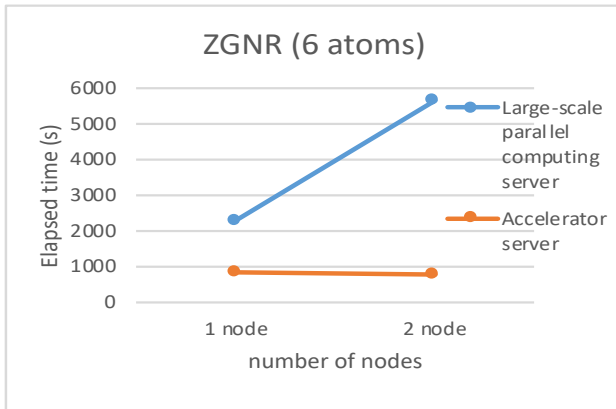
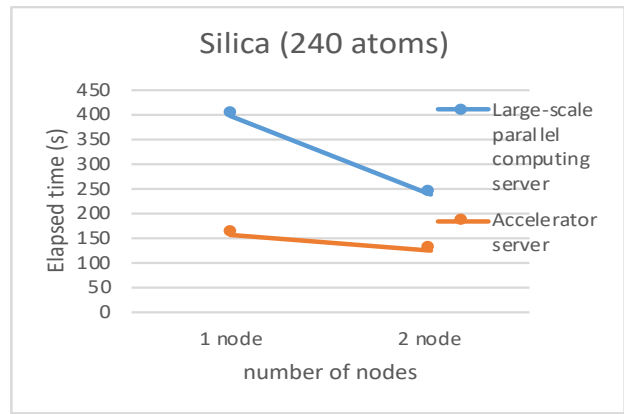
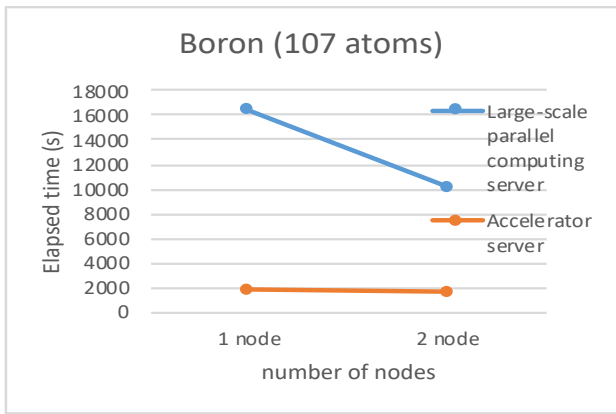


図1. VASP の測定結果

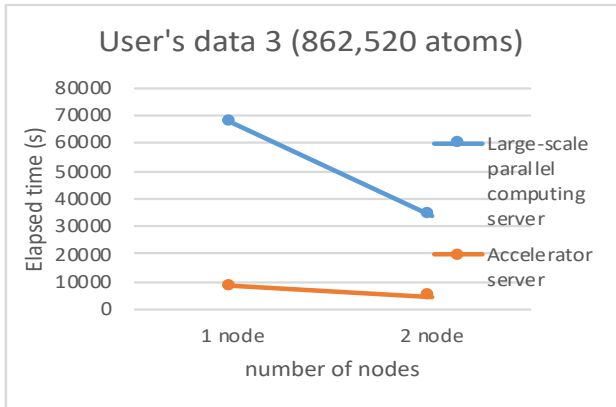
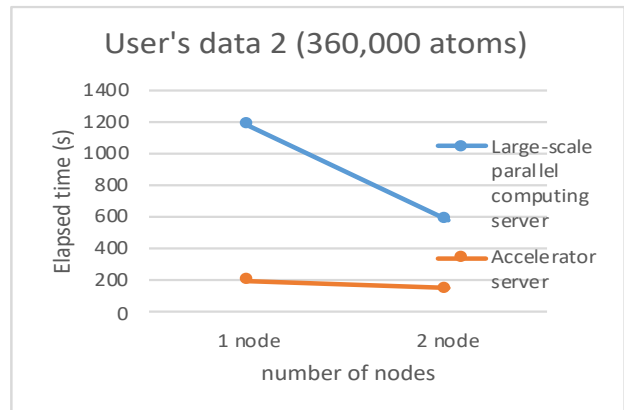
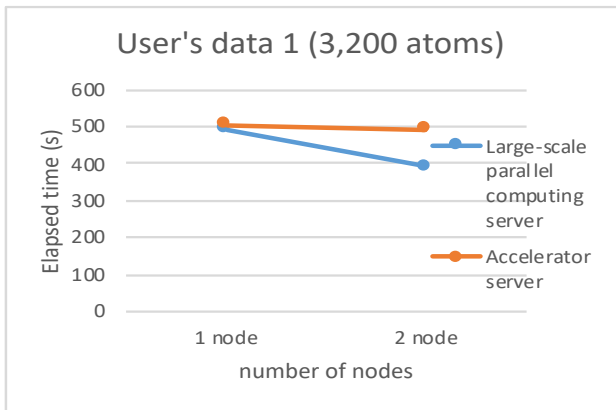


図2. LAMMPS の測定結果

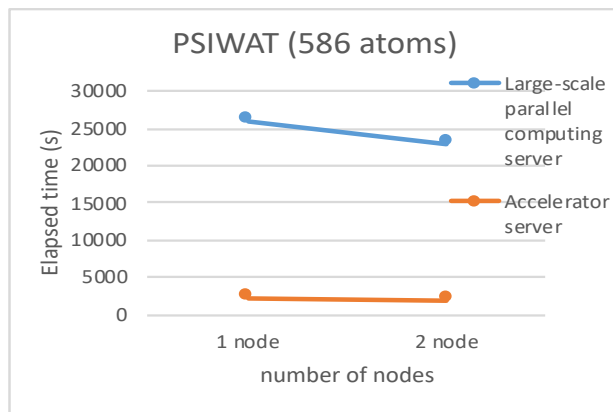
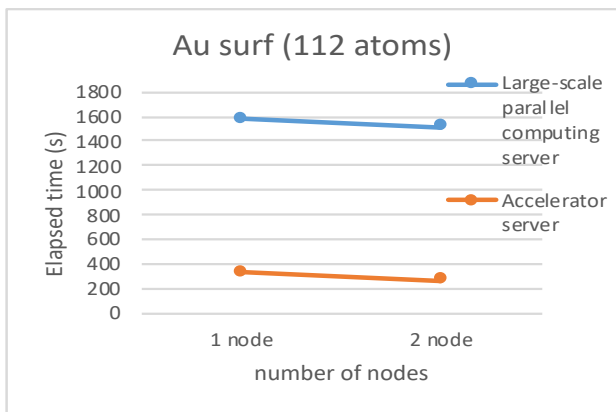


図3. QUANTUM ESPRESSO の測定結果

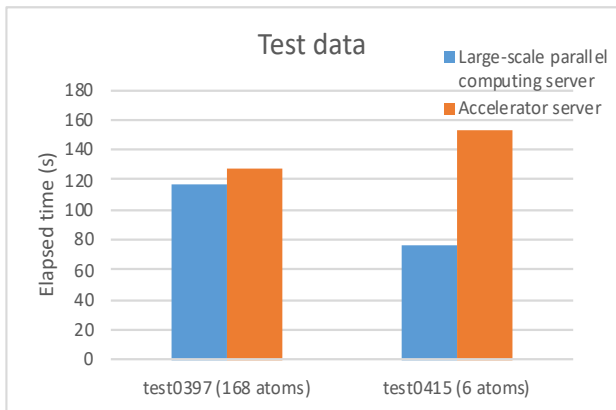
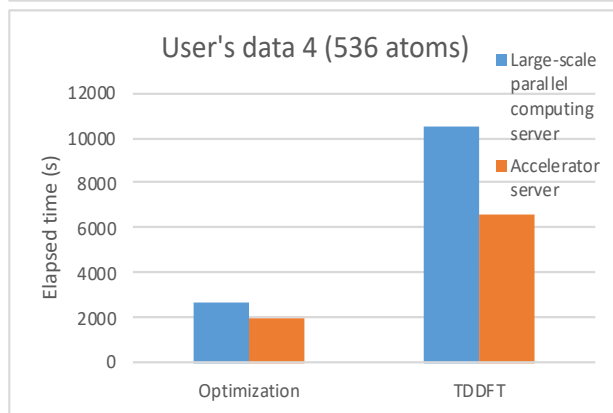
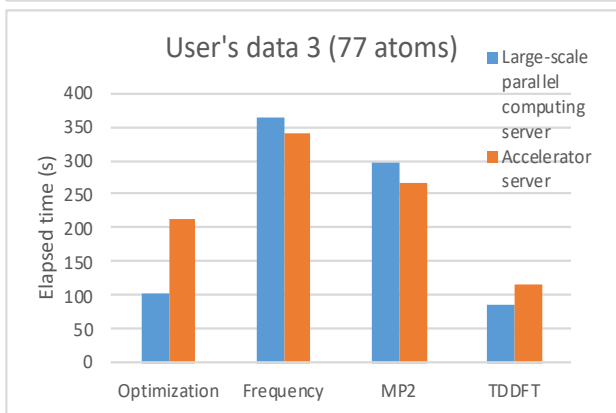
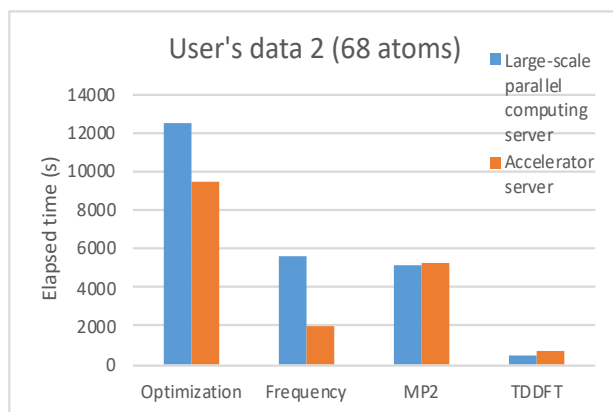
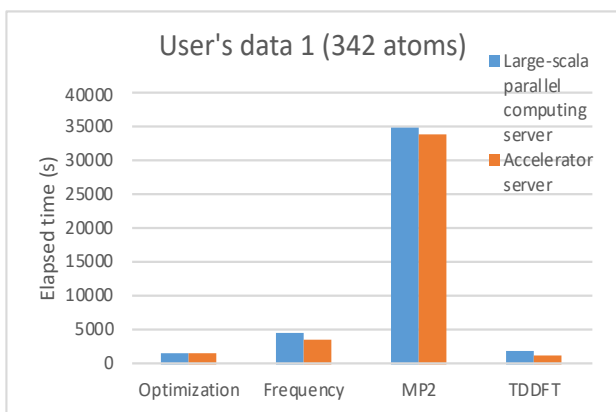


図4. Gaussian16 の測定結果

コンパイラ、ライブラリのインストール

大規模並列計算サーバ

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 방법은以下のマニュアルの 5.1.3 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_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 방법은以下のマニュアルの 5.2.2 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. CUDA Toolkit, CuDNN

CUDA Toolkit 10、CuDNN 7 をインストールしました。

使用 방법은以下のマニュアルの 5.1.4、5.2.2 および 5.2.3 章をご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_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. Gaussian16

量子化学計算ソフトウェア Gaussian16 の Rev C.01 をインストールしました。Gaussian16 では、ハートリー-フォック理論、密度汎関数理論、配位間相互作用理論などに基づき、分子の構造最適化や遷移状態計算などを高速で行えます。また、IR スペクトルや紫外・可視吸光スペクトル、NMR スペクトルなどの分光学的特性を計算することも可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.2 章をご覧ください。

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

Gaussian16 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://gaussian.com/gaussian16/>

2. ADF

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである ADF を 2019.102 にバージョンアップしました。ADF は相対論効果を含めることができ、遷移金属や重元素を取り扱うことが可能です。また、構造最適化や遷移状態計算、IR スペクトルや紫外・可視吸光スペクトル、NMRなどを求めることも可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 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/>

3. QuantumATK

非平衡グリーン関数法による電子輸送計算アプリケーションである QuantumATK を 2019.03 にバージョンアップしました。QuantumATK では半経験的もしくは第一原理的手法により、材料の電気伝導特性を計算することが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.5 章をご覧ください。

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

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

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk.html>

4. 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 19.1 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することが可能です。また、相対論効果を考慮した全電子計算をすることが可能です。

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/>

5. 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 8.10.3 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、電子状態などを計算することが可能です。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/>

6. CPMD

カー・パリネ口法に基づく非経験的分子動力学計算アプリケーションである CPMD のバージョン 4.3 をインストールしました。CPMD では、平面波基底および擬ポテンシャル法を用いた密度汎関数法に基づく第一原理分子動力学計算が行えるほか、構造最適化、励起状態計算などを行うことが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.11 章をご覧ください。

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

CPMD の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.cpmid.org/wordpress/>

7. 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 6.4.1 をインストールしました。QUANTUM ESPRESSO では全エネルギーや構造最適化計算を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/>

8. 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 5Jun19 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/>

アクセラレータサーバ

1. LAMMPS

LAMMPS のバージョン 5Jun19 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 6.4 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/>

2. Gaussian16

Gaussian16 の Rev C.01 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 6.5 章をご覧ください。

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

Gaussian16 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://gaussian.com/gaussian16/>

並列計算・インフォマティクスサーバ

1. GaussView

Gaussian 専用グラフィカルユーザーインターフェースである GaussView のバージョン 6.1.1 をインストールしました。GaussView では、Gaussian の入力ファイルの作成および出力結果の表示をグラフィカルに行えます。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.1 章をご覧ください。

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

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

<http://gaussian.com/gaussview6/>

2. QuantumATK NanoLab

QuantumATK 専用グラフィカルユーザーインターフェースである QuantumATK NanoLab を 2019.03 にバージョンアップしました。QuantumATK NanoLab では、分子や材料のモデルをグラフィカルに作成できるほか、3次元データの可視化なども可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.5 章をご覧ください。

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

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

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

3. Gaussian16

Gaussian16 の Rev C.01 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 4.2.1 章をご覧ください。

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

Gaussian16 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://gaussian.com/gaussian16/>

4. MATLAB

数値解析アプリケーション MATLAB のバージョン R2019a をインストールしました。MATLAB では数値線形代数の計算が対話的に行えるほか、データの前処理や可視化、モデリングなど、データ解析のための様々な機能を利用できます。

実行方法は以下のマニュアルの 4.2.5 章をご覧ください。

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

MATLAB の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://jp.mathworks.com/products/matlab.html>

5. WIEN2k

WIEN2k のバージョン 19.1 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 4.2.8 章をご覧ください。

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

6. ABINIT

ABINIT のバージョン 8.10.3 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 4.2.10 章をご覧ください。

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

7. CPMD

CPMD のバージョン 4.3 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 4.2.11 章をご覧ください。

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

CPMD の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.cpmid.org/wordpress/>

8. QUANTUM ESPRESSO

QUANTUM ESPRESSO のバージョン 6.4.1 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 4.2.12 章をご覧ください。

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

9. LAMMPS

LAMMPS のバージョン 5Jun19 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 4.2.13 章をご覧ください。

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

「MASAMUNE-IMR」の利用成果

東北大学金属材料研究所の久保百司教授、王楊助教（現：東北大学大学院工学研究科）、東北大学大学院工学研究科の足立幸志教授、岩手大学の森誠之教授、およびフランス Ecole Centrale de Lyon の Jean Michel Martin 教授らのグループは、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用し、ダイヤモンドライクカーボンの摩耗を誘発する原因となるトライボエミッション現象メカニズムを世界で初めて明らかにすることによって、高耐久性ダイヤモンドライクカーボンの設計指針を提案することに成功しました。

また、その研究成果を「高耐久性ダイヤモンドライクカーボンの設計指針を提案 —スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果—」とのタイトルで、令和元年 11 月 16 日にプレスリリースを行いました。プレスリリースの詳細は、下記の東北大学のウェブサイトまたは金研のウェブサイトをご参照ください。

東北大学ウェブサイト

<https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2019/11/press20191114-02-masamune-imr.html>

金研ウェブサイト

<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1176.html>

このプレスリリースを受けて、令和元年 12 月 2 日の日経産業新聞に「硬質炭素材の摩耗原因を解明」、令和元年 12 月 10 日の日刊工業新聞に「DLC 摩耗減らす 東北大 スパコンで設計指針」とのタイトルで、上記の研究成果が紹介されました。

また、上記のプレスリリースは、令和元年 11 月 15 日に上記の研究成果に関する論文が、Science Advances 誌に掲載されたことに基づき行われたものです。

Science Advances 誌のウェブサイト

<https://advances.sciencemag.org/content/5/11/eaax9301>

新聞に MASAMUNE-IMR を利用した研究成果が掲載

日刊工業新聞への掲載記事

令和元年 12 月 10 日付日刊工業新聞に「DLC 摩耗減らす 東北大 スパコンで設計指針」とのタイトルで、MASAMUNE-IMR による研究成果が掲載されました。

日刊工業新聞 掲載日：2019 年 12 月 10 日 25 ページ

日経産業新聞への掲載記事

令和元年12月2日付、日経産業新聞に「硬質炭素材の摩耗原因を解明」とのタイトルで、MASAMUNE-IMRによる研究成果が掲載されました。

日経産業新聞 掲載日：2019年12月2日 8ページ

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

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2019年7月17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9名が受講しました。



Cray XC50-LC および Cray CS-StormCS-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。

6, 7月、そして10, 11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.22 2019年 6月 25日 (火)「第一原理計算に基づく磁性体物性予測」
東北大学 大学院理学研究科 物理学専攻 是常 隆 准教授
- ・ No.23 2019年 7月 4日 (木)「有機強誘電体・反強誘電体研究のための計算科学的アプローチ」
産業技術総合研究所機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター上級主任研究員 石橋 章司先生
- ・ No.24 2019年 10月 29日 (火)「複雑流動のマルチスケールシミュレーション」
東北大学 大学院理学研究科 物理学専攻 川勝 年洋 教授
- ・ No.25 2019年 11月 26日 (火)「磁性体の結晶磁気異方性に関する理論研究」
東北大学 大学院工学研究科・応用物理学専攻 佐久間 昭正 教授

今後のセミナーの予定

- ・ No.26 2019年 12月 24日 (火) 13:20～14:50 東北大学 金属材料研究所 鈴木 通人 准教授
- ・ No.27 2019年 1月 24日 (金) 14:30～16:00 日本原子力研究開発機構 都留 智仁 先生
- ・ No.28 2020年 2月 19日 (水) 14:00～15:30 早稲田大学 理工学術院 中井 浩巳 教授

※詳細は計算材料学センターまでお問合せください。



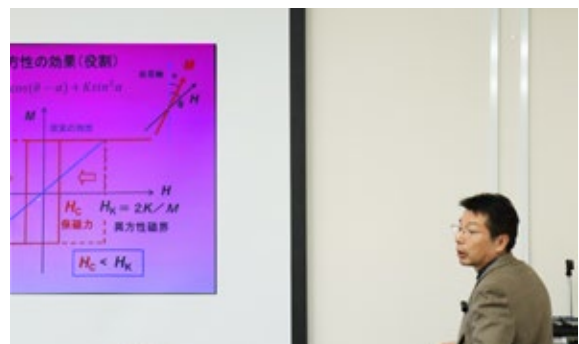
是常先生の講演の様子 (2019年6月25日)



石橋先生の講演の様子 (2019年7月4日)



川勝先生の講演の様子 (2019年10月29日)



佐久間先生の講演の様子 (2019年11月26日)

東北大学技術職員研修 ポスター発表で本センター職員が優秀発表賞を受賞

2019年11月14日に開催された「令和元年度東北大学総合技術部技術職員研修」で、丹野航太技術職員が「スーパーコンピューティングシステムのユーザー登録申請システムの開発」に関するポスター発表を行い「優秀発表賞」を受賞しました。

このユーザー登録申請システムは、現在計算材料学センターのWebページで運用しているユーザー登録フォームです。以前はPDFおよび紙媒体による申請でしたが、ユーザーの申請作業および管理者の登録業務の効率化のため、2017年に丹野がWebシステムを開発しました。この開発では、業者に委託せず、全体設計から実際のサーバ構築まで、すべての工程を計算材料学センターで行っており、この内容を本研修で発表しました。

発表では、技術面に関する詳細よりは、この開発によるユーザーと業務に対するメリットや実際に運用開始した際の効果を中心に説明し、聴講者からは、開発で苦労した点や業者委託と比べた際の費用対効果に関する質問をいただきました。専門外の方にもこの取り組みは、何を目的としていて、どのような効果があったかわかりやすく説明することを心がけ、このような賞をいただきました。

「スーパーコンピューティングシステムのユーザー登録申請システムの開発」

○丹野 航太

概要：

計算材料学センターでは、これまでPDFおよび紙媒体のユーザー登録申請書を使用して利用申請を受け付けていた。しかしながら、印刷して記入したものを郵送するかスキャンしてメール添付するなど、手間がかかる方法であり、期限までに提出されないことや修正による差し戻しが多かった。そこで、HTML, PHP, PostgreSQL を組み合わせてWebブラウザから申請できるシステムを開発し、サービスを開始した。



優秀発表賞を受賞した丹野航太技術職員



表彰式

SC19 に本センター技術職員が参加

2019年11月17日（日）から22日（金）に、米国コロラド州デンバーのColorado Convention Center で行われた SC19（Supercomputing Conference 2019）に、久保百司センター長、佐藤和弘技術職員、中野倅太技術職員が参加しました。

SC は毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワーキング・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 374 のブース出展と約 14,000 名の参加者がありました。

本センターは、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、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きました。

今年は、GPU や FPGA といったアクセラレータを複数搭載した、機械学習に特化した HPC システムや、画像認識などの AI アプリケーションの実演の展示が多く、近年の機械学習ブームを反映した内容となっていました。



SC19 での展示と久保百司センター長（右）、佐藤和弘技術職員（左）、中野倅太技術職員（中）



コロラドコンベンションセンター（SC19 の会場）



コロラド州会議事堂



<https://sc19.supercomputing.org/>

片平まつり2019きんけん一般公開顛末記

2019年10月12日(土)、13日(日)に開催を予定していたきんけん一般公開は、大型の台風19号の接近のため中止となりました。

計算物質科学人材育成コンソーシアムとの協力の下、いよいよ準備も大詰めを迎えようとしていた矢先の出来事でした。

今回は、スーパーコンピュータのシステム入れ替え以降では初めてのきんけん一般公開ということもあり、新スパコン「MASAMUNE-IMR」の展示をメインイベントとして準備を進めておりました。きんけん一般公開にご来場くださる方々の多くは小学生のお子様連れのご家族であり、科学の面白さや当センターの役割をわかりやすく伝えるために何ができるかを考えた結果、ただスパコンを見ていただくだけでなく、小さなお子様にも興味を持っていただけるよう、センター職員による説明を交えたスパコン見学ツアーや、展示の内容に絡めたクイズを企画することとしました。

しかし、スパコンやその役割について、小学生にもわかるように説明するには、できるだけ親しみやすい表現を使うなど、様々な工夫が必要です。

なおかつ、科学的に間違った内容を含んでいてはなりません。科学やコンピュータに詳しくない方々にも説明を理解していただけるよう、本センターの技術職員全員で原稿を何度も確認し、修正を行いました。

クイズについては、計算物質科学人材育成コンソーシアムの先生方のご協力のもと、説明用の展示パネルとクイズを作成しました。小学生でも展示パネルの内容を理解し、クイズに回答しながら楽しく学習できるよう、確認と修正を重ねました。

その他にも、子供たちに元素を楽しく理解してもらう目的で配布するマテリアルmonsterカードや、デザインにこだわった宣伝用の垂れ幕なども用意しておりました。また当日に向けた打ち合わせなども行い、準備はいよいよ最終局面を迎えておりました。

しかし、そのころ不運にも未曾有の大型台風19号が本州に接近しており、片平まつり開催週の週末という、まさに最悪のタイミングで東北に接近するとの予報が発表されておりました。

この予報を受け、今回のきんけん一般公開はあえなく中止となってしまいました。

多くの方々に楽しんでいただけるよう、何か月もの間準備を進めていただけたのに、センター職員一同、非常に残念に思っております。

次回のきんけん一般公開では、今回準備した内容をブラッシュアップしたものをお見せできればと思いますので、ぜひご家族で足を運んでいただければ幸いです。



配布を予定していたマテリアルmonsterカード

(文責 中野倅太)

新職員あいさつ

7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
松田 幸（まつだ みゆき）と申します。

登山やスキーなど、アウトドアアクティビティが趣味で、一年を通して週末は、ほぼ、山にいます。自分の足で一歩一歩歩いて行く、簡単には見られない景色が大好きです。山にいて、色々な判断が必要な場面を乗り越えていくことは、仕事にも通じるものがあると感じております。

センターの仕事にはまだ慣れないことも多く、至らない部分も多いかと思いますが日々精進していく所存です。どうぞよろしくお願いいたします。



スーパーコンピュータ
(大規模並列計算サーバ)
Cray XC50-LC

- ▶ 総ノード数 320 nodes
 - 計算ノード 293 nodes
 - I/O ノード等 27 nodes
- ▶ 総計算ノード理論演算性能 0.91 PFLOPS
- ▶ 総主記憶容量 219.8 TiB

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced MD/3D scale simulations towards NEAT generation - Institute for Materials Research

計算材料学センターだより No.32

2019年12月23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