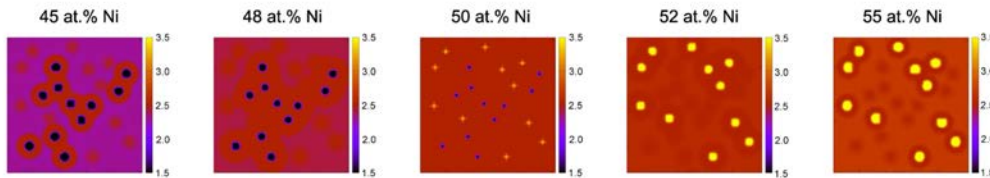
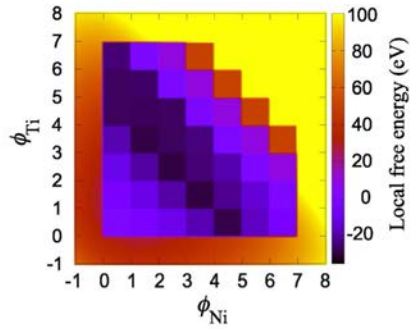


# 計算材料学センターだより



■ Microstructures of Ni-Ti alloys using the first-principles phase field method

## 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
- ・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
- ・令和4年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日
- ・超大規模 HPC チャレンジの成果
- ・スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果
- ・AVS/Express オンデマンドセミナーコンテンツ英語版を公開しました
- ・令和3年度の計算材料学センター見学者
- ・令和3年度の計算材料学センターの技術支援の実績

## ■表紙の図について

### ■ Microstructures of Ni-Ti alloys using the first-principles phase field method

The upper panel shows the 2D map of the local free energy of Ni-Ti alloys where at most two interstitial atoms are considered in the tetrahedron approximation. The values for the compositions  $\text{Ni}_n\text{Ti}_m$  with  $n+m \leq 6$  are determined by first-principles calculations. The Ni concentration,  $\phi_{\text{Ni}}$ , and the Ti concentration,  $\phi_{\text{Ti}}$ , are discretized as  $n \leq \phi_{\text{Ni}} < n+1$  and  $m \leq \phi_{\text{Ti}} < m+1$ , and each square box corresponds to one  $(n, m)$ .

The lower panel shows the steady spatial distributions of the Ni concentration,  $\phi_{\text{Ni}}$ , calculated by the first-principles phase field method only using the local free energy shown in the upper panel without any empirical parameter for Ti-45at%Ni, Ti-48at%Ni, Ti-50at%Ni, Ti-52at%Ni, and Ti-55at%Ni. The resulting patterns are almost the same as those without considering interstitial atoms, though some of the cuboidal or angular precipitations are rotated, and orange crosses appear around the yellow spots for Ti-50at%Ni. This rotation is reasonable, because no rotation along with the simulation cell axes is an artifact when we did not consider the interstitial atoms. The interstitial configurations do not appear in the final microstructure although they could influence the dynamics.

□ Kaoru Ohno, Monami Tsuchiya, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, Swastibrata Bhattacharyya and Thi Nu Pham

Comp. Mat. Sci., **191** (2021) Art. No.110284

## センター長あいさつ

計算材料学センター長 久保百司



令和2年8月から「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題の募集が開始され、令和3年度からスーパーコンピュータ「富岳」の本格的な共用が始まっております。また、毎年6月と11月に発表が行われるスーパーコンピュータTOP500のランキングにおいて、日本のフラッグシップスーパーコンピュータ「富岳」は、令和2年6月から4期連続で世界1位を獲得しています。

このような状況下において、「富岳」を頂点とする日本の計算資源のヒエラルキーの中で、本センターはその第2階層であるスーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」の運営機関として、同じく計算物質科学分野のスーパーコンピューティングシステムを運営する東京大学物性研究所計算物質科学研究センター、自然科学研究機構分子科学研究所・計算科学研究センターとの協力関係を強化するとともに、さらに計算物質科学分野の教育機関である大阪大学エマージングサイエンスデザインR<sup>3</sup>センター（令和4年4月にナノサイエンスデザイン教育研究センターから名称変更）とも連携を取りながら、計算物質科学分野におけるコンピュータ資源の提供に加えて、分野振興、コミュニティ形成、人材育成などの多彩な活動を積極的に続けております。

本センターを含む上記4センターを運営機関とする「計算物質科学協議会」において、令和3年度は本センターが代表運営機関のお役目の年度であり、関係各位のご協力を仰ぎながら全体運営の取りまとめをさせて頂きました。特に、計算物質科学協議会の令和3年度の主要な活動としては、若手研究者と企業研究者から構成されるワーキンググループが中心となって、マテリアルDXの将来展望に関する提言書を取りまとめ、令和4年3月に文部科学省研究振興局に提出させて頂きました。スーパーコンピュータ「富岳」を中核としたHPCI体制の強みがある今こそ、日本が計算データの活用で世界をリードする必要があるとの観点から、計算物質科学界における今後のDX研究の方向性とデータリポジトリのあるべき姿について、提言をさせて頂きました。具体的には、1) 計算物質科学界におけるデータリポジトリの世界情勢、2) 「富岳」成果創出加速プログラムでの研究データマネジメント状況、3) 計算、合成、計測のデータ融合と利活用を考慮したデータ同化技術、4) 産官学で活用される計算物質科学データリポジトリの在り方、5) 国産ソフトウェアパッケージ開発の重要性、6) 「富岳」を頂点とする大規模計算機に立脚した材料データの自動創出、7) 計算物質科学コンソーシアムの育成とそれを基盤とするデータリポジトリの構築、の7項目について提言をまとめさ

せて頂いております。本提言書は、計算物質科学協議会のホームページにアップロードさせて頂いておりますので、ご興味のある方は、是非、ご覧頂ければ有難く思います。また、計算物質科学協議会の今後の活動としては、「富岳」の次のフラッグシップスーパーコンピュータ「ポスト富岳」に関する提言書をまとめて行く予定になっております。計算物質科学協議会の活動にご興味がある方は、是非、計算物質科学協議会のホームページから会員申込みをして頂き、活動にご参加を頂ければ有難く思います。

本センターからのお知らせとしては、平成30年12月から本センターの助教として活躍して頂いた柳有起氏が、この4月に富山県立大学工学部の准教授として栄転されました。これまで、第一原理計算を中心とした材料研究とスーパーコンピューティングシステムの運営の両面において、本センターの発展に貢献頂きましたことに、ここに厚く感謝の意を表したいと思っております。また、平成30年9月から本センターの事務職員として活躍して頂いた吉田彩紀氏（旧姓：早坂）が、この3月をもって退職されました。本センターのセンターだよりやスーパーコンピューティングシステム利用研究成果報告書の作成、さらには本センターのセミナー「スパコンプロフェッショナル」の運営を始めとする多様な本センターの管理・運営業務に対して、貢献頂きましたことに厚く感謝の意を表したいと思っております。

また、本センターからの2つ目のお知らせとしては、令和5年7月末で現スーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」の運用が丸5年を迎えることから、令和5年8月からスーパーコンピューティングシステムの更新作業を開始する予定をしておりましたが、現システムの運用期間をさらに1年間延長させて頂くことに致しました。現スーパーコンピューティングシステムの更新による計算速度の向上、ジョブ待ち時間の短縮を期待されていたユーザーの皆様には誠に申し訳ございませんが、ご理解のほど宜しくお願い申し上げます。

令和4年度もセンター職員が一丸となって、国際共同利用・共同研究施設の使命を全うし、さらに計算材料科学分野の発展を加速するために、日本国内に加え世界における計算材料科学コミュニティの振興、計算材料科学分野の若手人材の育成、さらには世界の材料科学分野全体に貢献する新たなイノベーションの実現を果たしていきたいと考えております。今後とも、計算材料科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

### アクセラレータサーバ

#### 1. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 2021.5.0 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルをご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user\\_manual:acceleratorserver:compilers\\_libraries#intel](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:acceleratorserver:compilers_libraries#intel) コンパイラ

## 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. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.3.0 をインストールしました。VASP では様々な系に対して、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を高速で行うことができ、構造最適化・応答関数・化学反応などの計算も可能です。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

#### 2. 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 9.6.2 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:abinit>

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/>

### 3. 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 9.1 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:cp2k>

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/>

### 4. ALAMODE

格子振動の非調和性を考慮した格子熱伝導率の計算のためのプログラムパッケージである ALAMODE のバージョン 1.3.0 をインストールしました。VASP や Quantum ESPRESSO などの第一原理計算プログラムや LAMMPS の計算結果からフォノン由来の特性の計算が可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:alamode>

ALAMODE の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://alamode.readthedocs.io/>

### 5. 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 2021.106 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:adf>

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/>

### 6. 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 2021.06-SP2 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantumatk>

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>



## 7. OpenMX

原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラムである OpenMX のバージョン 3.9.9 をインストールしました。密度汎関数理論に基づき、高速かつ高精度な電子状態計算をすることが可能です。大規模系に対して分子動力学計算や構造最適化を速やかに実行することも可能です。実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:openmx>

OpenMX の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.openmx-square.org/>

## 8. SMASH

オープンソースの大規模並列量子化学計算ソフトウェアである SMASH のバージョン 3.0.0 をインストールしました。SMASH では Hartree-Fock、B3LYP、MP2 といった手法を用いた分子のエネルギー計算および構造最適化計算が可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:smash>

SMASH の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://smash-qc.sourceforge.io>

## 9. 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 6.8 および 7.0 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することが可能です。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をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum\\_espresso](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso)

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/>

## 10. 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 29Sep21 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org>

## アクセラレータサーバ

### 1. 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 6.8 および 7.0 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum\\_espresso](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantum_espresso)

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/>

### 2. 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 29Sep21 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:lammmps>

LAMMPS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.lammps.org>

### 3. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.3.0 をインストールしました。

OpenACC 版も利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:vasp>

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

## 並列計算・インフォマティクスサーバ

### 1. Mathematica

技術計算システム Mathematica を 12.3.1 にバージョンアップしました。Mathematica では幅広い分野の技術計算に加え、機械学習や画像処理などにも対応しており、計算結果の可視化も可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:mathematica>

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

<https://www.wolfram.com/mathematica/>



## 可視化サーバ

### 1. ANSYS Mechanical CFD

有限要素法による解析ツールである ANSYS Mechanical CFD を 2021R2 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をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:ansys\\_mechanical\\_cfd](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:ansys_mechanical_cfd)

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/>

### 2. ADF-GUI

ADF 用のグラフィカルユーザインターフェースである ADF-GUI を 2021.106 にバージョンアップしました。ADF-GUI では、エネルギー準位図や 3 次元データの等値面に加え、分子の振動モードなどのアニメーションを簡単に表示することができます。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:adf-gui>

ADF-GUI の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.molsis.co.jp/materialscience/ams/adf-gui/>

### 3. Mathematica

技術計算システム Mathematica を 12.3.1 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:mathematica>

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

<https://www.wolfram.com/mathematica/>

### 4. QuantumATK NanoLab

QuantumATK 専用グラフィカルユーザインターフェースである QuantumATK NanoLab を 2021.06-SP2 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をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantumatk\\_nanolab](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:quantumatk_nanolab)

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/resources/features.html#nanolab>

## 令和4年度のスーパーコンピューティングシステム定期保守予定日

スーパーコンピューティングシステムは、基本的に2か月に1度、定期保守を行っています。また、片平キャンパスの計画停電の際にも停止する予定です。保守時間はその時の保守内容によって異なりますので、詳細についてはそのつど、メールでお知らせいたします。皆様のご協力をどうぞよろしくお願いいたします。

### 令和4年度の定期保守予定：

- ・令和4年 5月30日（月）
- ・令和4年 8月 5日（金）
- ・令和4年 9月26日（月）
- ・令和4年11月28日（月）
- ・令和5年 1月30日（月）
- ・令和5年 3月20日（月）

### 片平キャンパスの計画停電の予定

- ・令和4年 8月 7日（日）

定期保守日については、センターのホームページでも案内しています。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/maintenance.html>

## 超大規模 HPC チャレンジの成果

計算材料学センターでは 2019 年度より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支援を行うため、「超大規模 HPC チャレンジ」のサービスを行っています。「超大規模 HPC チャレンジ」は、共同利用で採択された課題の利用者が独自に作成したプログラムを対象として、定期保守後に MASAMUNE-IMR において大規模並列および超長時間の計算を実行するための環境を利用できる公募型プロジェクトで、各定期保守後に大規模並列計算サーバ (Cray XC50-LC) およびアクセラレータサーバ (Cray CS-Storm 500GT) 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。

超大規模 HPC チャレンジでは、以下のキューを利用することができます。

### 大規模並列計算サーバ

キュー名	占有ノード数上限	メモリ確保上限 [GiB]	経過時間上限 [時間]	並列数上限*
SP_064	64	44,230	336	4,608
SP_128	128	88,460	168	9,216
SP_293	293	202,520	24	21,096

\*ハイパースレッドを利用し、ノードあたり 72 並列で実行した場合

### アクセラレータサーバ

キュー名	占有ノード数上限	メモリ確保上限 [GiB]	経過時間上限 [時間]	GPU 利用上限	並列数上限
SA_016	16	11,040	72	160	576

詳細につきましては、以下のサイトをご覧ください。

超大規模 HPC チャレンジ : <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/hpc.html>

2021 年度は同一利用者から大規模並列計算サーバの SP\_293 キューに対して 2 回の申請があり、いずれも採択しました。これらの申請では、ハイブリッド並列計算が可能な反応分子動力学シミュレータを用いて、平均重合度 1 万からなる約 100 億原子のラメラ構造を有する結晶性ポリエチレンの引張計算を行い、応力ひずみ線図における降伏過程までを解析して、実際の材料設計に資するための超大規模反応 MD シミュレーションを実現することを目的としています。ひずみ速度を  $10^{11}\text{sec}^{-1}$  及び  $3 \times 10^{11}\text{sec}^{-1}$  に設定し、約 2000 ステップ実行したところ、ひずみはそれぞれ約 0.05 及び約 0.15 まで計算することができましたが、いずれも降伏することなく計算が終了しました。実際の材料設計に資するためのさらなる解析に向けては、応力ひずみ線図における降伏過程までを計算し、タイ高分子鎖の本数などの分子レベルのミクロな構造が強度や靱性などマクロな物性に及ぼす影響を明らかにする必要があります。一方、これ以上ひずみ速度を増加させると応力が上昇してマクロな応力ひずみ線図との乖離が大きくなり、現実の系と対応させた解析が困難になると考えられ、ひずみ速度を増加させることなく限られた計算機資源と時間の中で降伏過程までをシミュレーションするためには、より高速に実行できるプログラムの開発が必要となると実施者は報告しています。

## スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果

東北大学金属材料研究所の久保百司教授、東北大学大学院工学研究科の足立幸志教授、上海海洋大学の許 競翔副教授の研究グループによる、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用した研究成果が、The Journal of Physical Chemistry C 誌の Supplementary Cover に選ばれました。

論文： Three Tribolayers Self-Generated from SiC Individually Work for Reducing Friction in Different Contact Pressures

J. Phys. Chem. C, **126** (5) 2728-2736, 2022.

Yusuke Ootani, Jingxiang Xu, Fumiya Nakamura, Masayuki Kawaura, Shuichi Uehara, Koki Kanda, Yang Wang, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, and Momoji Kubo

The Journal of Physical Chemistry C 誌の Web サイト： <https://pubs.acs.org/toc/jpcoc/126/5>

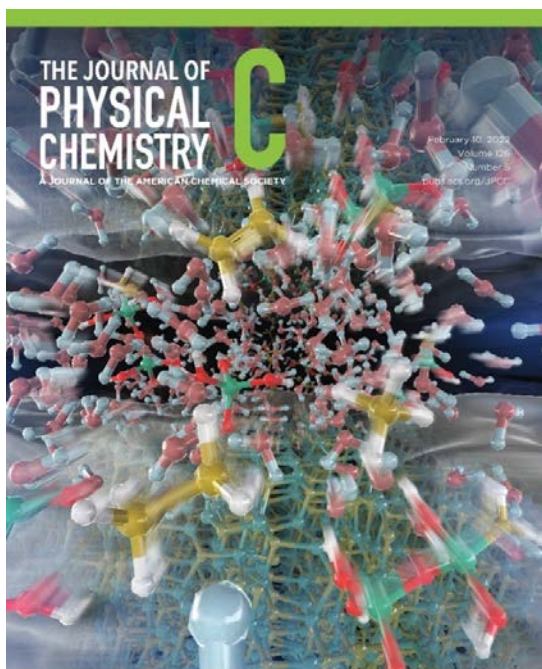
東北大学金属材料研究所の久保百司教授の研究グループによる、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用した研究成果が Macromolecules 誌の Supplementary Cover に選ばれました。

論文： Molecular-Level Elucidation of a Fracture Process in Slide-Ring Gels via Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations

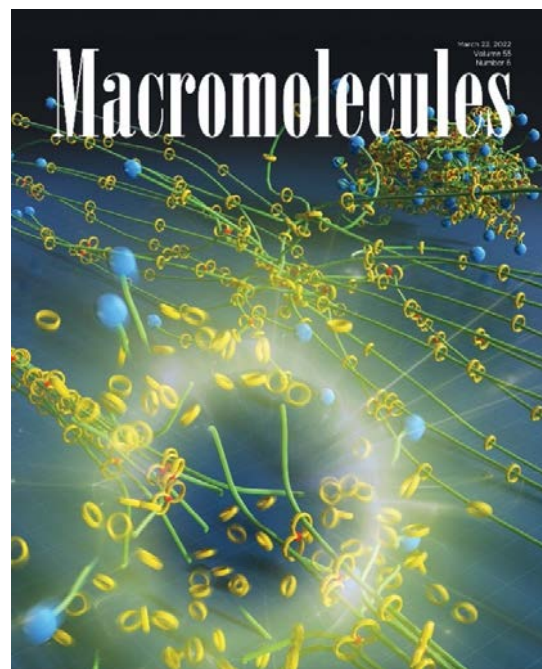
Macromolecules, **55** (6) 1946-1956, 2022.

Shuichi Uehara, Yang Wang, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo

Macromolecules 誌の Web サイト： <https://pubs.acs.org/toc/mamobx/55/6>



J. Phys. Chem. C, **126** (5) 2728-2736,  
2022 年 2 月 10 日



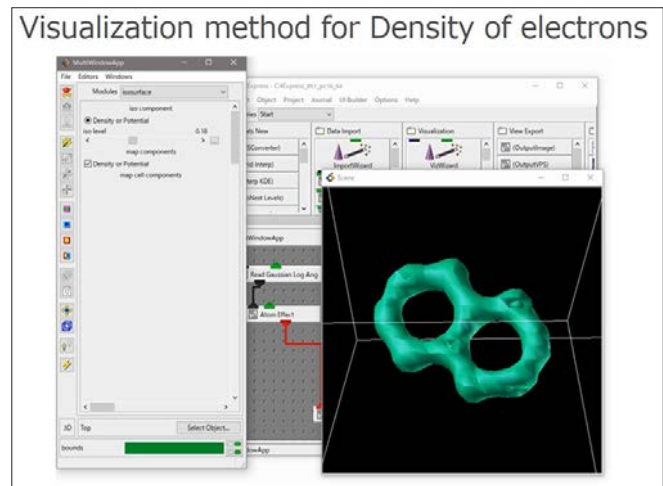
Macromolecules, **55** (6) 1946-1956,  
2022 年 3 月 22 日

## AVS/Express オンデマンドセミナーコンテンツ英語版を公開しました

計算材料学センターでは、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、汎用三次元可視化ソフトウェアである「AVS/Express」を提供しております。

AVS/Express を初めてお使い頂く初級者向けに、昨年度は日本語版のオンデマンドセミナーコンテンツを作成いたしました。今年度は英語版を作成して追加しました。無料で視聴し学習頂けるコンテンツですので、是非、外国人の方にご紹介頂きご活用下さい（ご視聴には、スーパーコンピューティングシステム ID が必要です）。

計算材料学センターのホームページ英語版の [home > Public Information > Seminars > AVS/Express On-demand Seminar](#) からご視聴頂けますので、是非、ご活用ください。



AVS/Express のオンデマンドセミナー コンテンツ表示例

学習コンテンツの内容は以下の通りです。

### AVS/Express On-demand Seminar Learning Contents

#### 1. Introduction to AVS/Express (approx. 10 min.)

This is an overview introduction to AVS/Express, including its features and basic operations from data loading to visualization.

#### 2. Basic operation exercises of module programming and object manipulation (approx. 20 min.)

This content includes explanations and exercises of basic operations from data loading to output, such as module operation, programming, and object manipulation.

#### 3. Basic network building exercises with some sample data (approx. 16 min.)

This content aims to deepen understanding of basic network building operations.

We use some sample data such as discrete points and fluid analysis. You will be able to build an appropriate network for the data such as lattice shapes, discrete points and elements.

#### 4. Introduction to data formats (approx. 12 min.)

This is an explanation of available data types and formats.

#### 5. Saving visualization results as image, movie, and 3D movie (approx. 20 min.)

This content explains the output formats and saving operations of AVS/Express visualization results as images, movies, and 3D movies.

#### 6. CCMS Library (approx. 28 min.)

This content describes modules developed and added by the Center for Computational Materials Science for AVS/Express that specialize in visualization of data from atomic and molecular analysis programs such as VASP, TOMBO, and Gaussian.

[AVS/Express は米国 Advanced Visual Systems 社の商標です]



## 令和3年度の計算材料学センター見学者

期間：令和3年4月～令和4年3月

令和3年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、一般の見学者の受け入れを行いませんでしたが、視察や大学内の授業での見学の受け入れを再開しました。

一般見学再開の目処がつかましたら、計算材料学センター Web ページにてお知らせします。

見学日	見学者	所属／会議など
令和4年3月 9日	林春男氏 他4名	防災科学技術研究所
令和4年3月14日	池田陽一氏 他3名	東北大学金属材料研究所

## 令和3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。令和3年度は所内14研究室および所外65研究機関へ合計478件の技術支援を行いました（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およびリモートアクセス等の接続支援など。

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	14 研究室	68
学内	6 研究機関	91
国内の研究機関	29 研究機関	209
国外の研究機関	30 研究機関 (15ヶ国)	110
合計	79	478





計算材料学センターだより No.37

2022年 6月 3日 発行

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



**CCMS**  
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター  
Center for Computational Materials Science

TEL (022) 215 - 2411

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

E-mail [ccms-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp](mailto:ccms-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp)