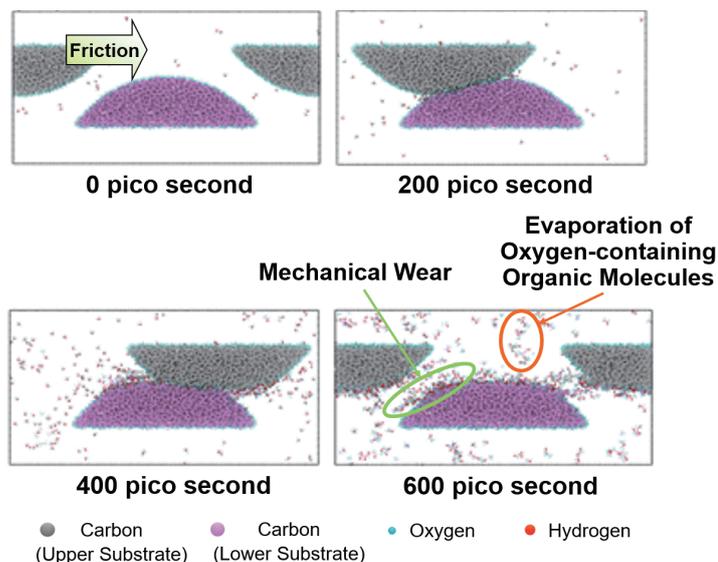


# 計算材料学センターだより



## CONTENTS

- ・ 共有キューの使用
- ・ 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- 式での実習付き GPU 講習会&ハンズオンの開催
- ・ MASAMUNE- 式がメディアに紹介
- ・ 新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE- 式 披露式の報告
- ・ きんけん一般公開 2025 に本センターが参加
- ・ SC25 に本センター職員が参加

## 表紙図

### Elucidation of Effect of Environments on Wear Phenomena of Diamond-like Carbon and Proposal of Design Principles towards Improving its Durability

Diamond-like carbon is an amorphous carbon material which has excellent properties such as ultra-low friction, wear resistance, and chemical stability and then it is expected to be used in space stations, airplane engines, drones, medical equipment, etc. However, the wear of diamond-like carbon can lead to reduced material lifespan, machine failure, and even unexpected accidents. Therefore, minimizing its wear to the utmost is a critical challenge for realizing a safe and secure society. Especially, its wear behavior varies significantly even with slight environmental differences such as partial pressures of water vapor, oxygen, nitrogen, and hydrogen, and then experimental research has not yet advanced our understanding of its underlying mechanism. Therefore, it is strongly demanded to utilize computational science simulations for clarifying the effects of environments and atmosphere on its wear mechanism and then for establishing the design guidelines to reduce its wear. However, unlike “material-intrinsic properties” such as hardness and electrical conductivity, the changes in wear phenomena due to the environments represent “material response characteristics”. Therefore, understanding multi-physics phenomena including chemical reactions, friction, impact, stress, fluids, and heat transfer by computational science simulations is essential, which is one of the challenging tasks in computational science simulations.

Therefore, by developing a reactive molecular dynamics simulator capable of elucidating complex multi-physics phenomena involving chemical reactions on the supercomputer “MASAMUNE-IMR,” for the first time in the world we discovered that wear occurs via two mechanisms, chemical wear and mechanical wear, on diamond-like carbon and revealed that the chemical reactions occurring on the surface of diamond-like carbon during friction vary depending on the environments such as water and oxygen, leading to differences in the form and amount of chemical wear and mechanical wear. This achievement contributes to extending the lifespan of mechanical systems as well as preventing failures and accidents.

Jing Zhang, Yang Wang, Qian Chen, Yixin Su, Shandan Bai, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, and Momoji Kubo, *Carbon*, **231** (2025) 119713. DOI: 10.1016/j.carbon.2024.119713

## 共有キューの使用

当センターでは、ノードを占有してジョブが実行できる占有キューの他に、ノードを他のユーザーのジョブと共用する共有キューを用意しています。以下に大規模並列計算サーバ HPE Cray XD220v 及びアクセラレータ搭載サーバ HPE Cray XD670 の共有キューと占有キューの情報を示します（括弧内はデフォルト値）。

大規模並列計算サーバ：HPE Cray XD220v

キュー名称	キュー種別	ノード数上限	メモリ上限 [GB]	経過時間上限 [H]	CPU 数上限
CP_001	共有キュー	1(1)	230(4)	72(24)	56(1)
P_030	占有キュー	30(1)	13,800(460)	72(24)	3,360(112)

アクセラレータ搭載サーバ：HPE Cray XD670

キュー名称	キュー種別	ノード数上限	メモリ上限 [GB]	経過時間上限 [H]	GPU 数上限	GPU 数上限
CA_001	共有キュー	1(1)	460(8)	72(24)	56(1)	4(1)
A_002	占有キュー	2(1)	1,840(920)	24(2)	224(112)	16(8)

アプリケーションの性質や計算内容、計算規模によっては占有キューで実行するよりも共有キューを使用したほうが効率良く実行できる場合があります。また、ジョブの投入状況にもよりますが、ジョブの待ち時間は共有キューのほうが短い傾向にあります。キューの状況（待ちジョブ数、実行ジョブ数）は `statq` コマンドでご確認いただけます。共有キューではデフォルトの資源量が最低限の値となっていますので、拡張したい場合はジョブスクリプトで指定してください。以下に CP\_001 キューで使用コア数を 56、メモリ容量を 230GB、経過時間を 72 時間に設定する例を示します。

```
#PBS -q CP_001
#PBS -l select=1:ncpus=56:mem=230gb
#PBS -l walltime=72:00:00
```

Web マニュアル「3.2. 実行スクリプトの書式」や「3.4. 共有キューへのジョブ投入方法」、「3.5.3. キュー状態を確認」、各アプリケーションの使用法のページもご覧ください。

以下に HPE Cray XD220v における VASP、LAMMPS、Gaussian16 でのテスト結果を示します。使用するコア数に比例してノード時間が消費されますので、適切なキューを使用することで、消費するノード時間の削減にもつながります。

### VASP

使用コア数	28 (共有キュー)	56 (共有キュー)	112 (占有キュー)
実行時間 [秒]	8,706	4,650	2,882
消費ノード時間	0.604	0.645	0.800

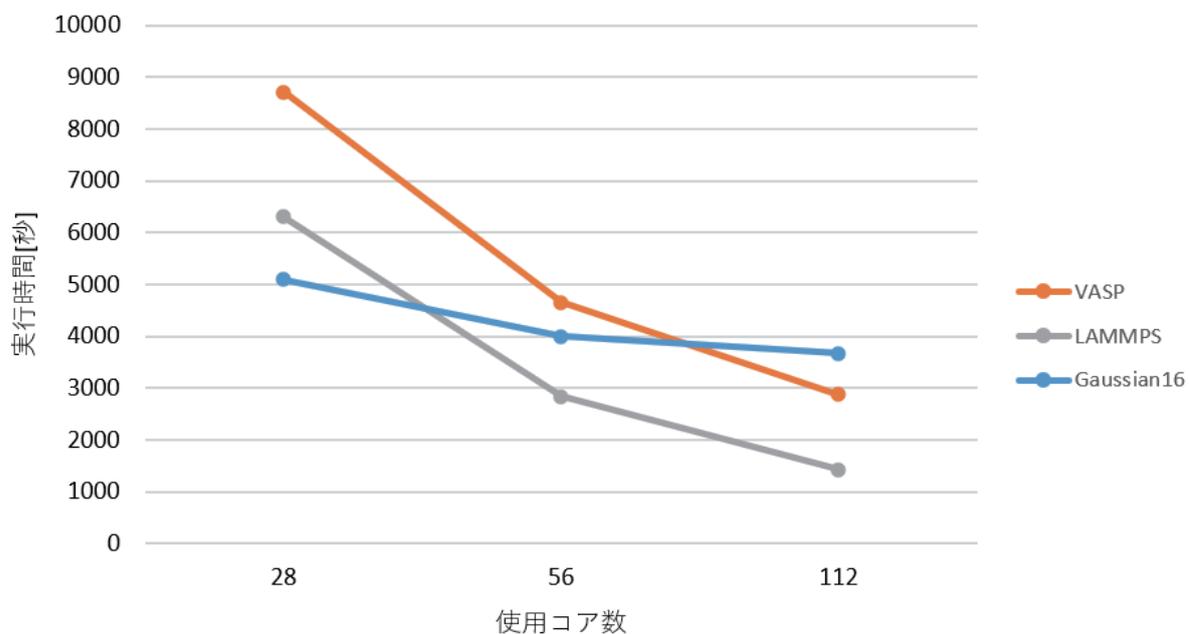
### LAMMPS

使用コア数	28 (共有キュー)	56 (共有キュー)	112 (占有キュー)
実行時間 [秒]	6,306	2,840	1,432
消費ノード時間	0.437	0.394	0.397

### Gaussian16

使用コア数	28 (共有キュー)	56 (共有キュー)	112 (占有キュー)
実行時間 [秒]	5,099	3,995	3,669
消費ノード時間	0.354	0.554	1.019

### 性能測定



## 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. OpenMPI 4.1.8

OpenMPI 4.1.8 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/masamune/manual/compiler\\_lib/GNU/openmpi.html](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/compiler_lib/GNU/openmpi.html)

### アクセラレータサーバ

#### 1. OpenMPI 4.1.8

OpenMPI 4.1.8 をインストールしました。CUDA Aware に対応しています。

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/masamune/manual/compiler\\_lib/GNU/openmpi.html](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/compiler_lib/GNU/openmpi.html)

## 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. 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 29Aug2024 のパッケージ追加版およびバージョン 22Jul2025 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/masamune/manual/app/LAMMPS.html>

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/>

#### 2. 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 2025.2 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/masamune/manual/app/CP2K.html>

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/>

### 3. CRYSTAL17

結晶性固体向けの第一原理計算プログラムであるCRYSTAL17をインストールしました。CRYSTAL17ではハートリー・フォック法、密度汎関数法および様々なハイブリッド近似を用いて周期系電子状態を計算します。また空間対称性を自動的に取り扱えます。

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/masamune/manual/app/CRYSTAL17.html>

CRYSTALの詳細については、以下のWebサイトをご覧ください。

<https://www.crystal.unito.it/>

## 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29Aug2024のパッケージ追加版および22Jul2025をインストールしました。KOKKOS版もそれぞれご用意しております。

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/masamune/manual/app/LAMMPS.html>

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/>

### 2. 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2025.2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/masamune/manual/app/CP2K.html>

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/>

## MASAMUNE-式での実習付き GPU 講習会&ハンズオンの開催

「DDCoMS-PCoMS-RISME-CCMS 計算物質科学セミナーシリーズ 2025 —計算科学によるデータ創出・活用に向けて— GPU 講習会&ハンズオン」と題し、近年ますます重要性を増している高速計算アクセラレーター「GPU (Graphics Processing Unit)」を活用した計算コード開発に関する初心者向け講習会を開催しました。

本講習会では、NVIDIA より講師 3 名をお招きし、運営教員（ハンズオン実習のアドバイザーを含む）4 名体制で実施しました。前半の講義はハイブリッド形式で開催され、現地会場は東北大学金属材料研究所 国際教育研究棟セミナー室 1 を使用しました。講義では、NVIDIA GPU のアーキテクチャおよび GPU コンピューティングの基礎に関する概説に加え、質疑応答が行われました。オンラインには国内の産学から約 60 名が参加し、現地では「MASAMUNE-式」アカウント保有者を対象に、12 名が参加しました。後半のハンズオンでは、OpenACC によるハンズオンコードのビルド・実行、およびプロファイリングを体験していただきました。

DDCoMS： スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム

「計算材料科学が主導するデータ駆動型研究手法の開発とマテリアル革新」

PCoMS： 計算物質科学人材育成コンソーシアム

RISME： データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT)

「極限環境対応構造材料研究拠点」

CCMS： 計算材料学センター



## MASAMUNE- 弐がメディアに紹介

2025年5月29日(木)に佐々木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- 弐」の記者発表を行いました。記者発表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スーパーコンピュータの撮影の他、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NHK全国ニュース、東日本放送、東北放送など複数のニュース番組で放映されました。

日本経済新聞や毎日新聞などのニュース紙面や共同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。



佐々木所長



久保センター長



## 報道（テレビ） 5 件

1. 東北大学 スーパーコンピューター新たに整備 材料・素材開発に期待  
NHK ニュース（全国版）、2025 年 5 月 29 日
2. スーパーコンピュータ 国内トップレベル 東北大学が整備 来月から運用へ  
NHK てれまさむね（地域版）、2025 年 5 月 29 日
3. 東北大 スパコン「MASAMUNE- 弐」導入 素材や材料の開発に特化  
東北放送 N スタみやぎ、2025 年 5 月 29 日
4. 東北大学で来月稼働 1 秒に 4 千兆回計算スパコン  
仙台放送 Live News イット!、2025 年 5 月 29 日
5. 東北大新スパコン 材料研究に特化 インフラの超寿命化も  
東日本放送 チャージ!、2025 年 5 月 30 日

## 報道（新聞、雑誌など紙面になったもの） 6 件

1. 新スパコン、来月 2 日稼働 東北大、1 秒で 4000 兆回計算  
日本経済新聞、2025 年 5 月 30 日
2. 材料・素材研究に特化 東北大、新スパコン来月稼働  
日刊工業新聞、2025 年 5 月 30 日
3. 東北大、新スパコン来月 2 日稼働 「マサムネ2」、材料研究 世界に発信  
河北新報、2025 年 5 月 30 日
4. 材料研究に新スパコン 東北大導入、「政宗」の名冠し  
デーリー東北、2025 年 5 月 30 日
5. 東北大「政宗」の名冠し新スパコン稼働へ 家庭用の 20 年を 1 日で計算  
毎日新聞、2025 年 6 月 2 日
6. 新スーパーコンピュータ稼働 国内初、新材料開発研究に特化  
鉄鋼新聞、2025 年 6 月 2 日

## 報道（電子版） 77 件

1. 東北大 スーパーコンピューター新たに整備 来月から運用へ  
NHK（全国版）  
2025 年 5 月 29 日
2. 東北大に高性能スーパーコンピューター新たに整備  
NHK（地域版）  
2025 年 5 月 29 日
3. 「世界の材料研究の拠点に」東北大に最新型スーパーコンピュータ導入 パソコンで 20 年かかる  
計算を 1 日で  
TBS ニュース、東北放送、Yahoo ニュース、goo ニュース、dmenu ニュース（5 社）  
2025 年 5 月 29 日

4. 最新スーパーコンピューター MASAMUNE 弐稼働へ 東北大学  
東日本放送  
2025年5月29日
5. 20年かかる計算が1日で完了! 日本で唯一材料研究に特化したスパコン 東北大学で6月稼働  
<仙台>  
仙台放送、FNNプライムオンライン、gooニュース、yahooニュース(4社)  
2025年5月29日
6. 東北大学の新型スパコン、1秒間に4000兆回計算 材料研究に特化  
日本経済新聞  
2025年5月29日
7. 東北大学の新スパコン公開、「政宗」の名で材料研究に 家庭用PCで20年かかる計算を1日  
産経新聞、Quick News(2社)  
2025年5月29日
8. 材料研究に新スパコン 東北大導入、「政宗」の名冠し  
共同通信、47ニュース、チバテレ、東京新聞、北日本新聞、西日本新聞、南日本新聞、神戸新聞、  
佐賀新聞、茨城新聞、琉球新報、奈良新聞、神奈川新聞、山陰中央新報、沖縄タイムス、高知新聞、  
新潟日報、福井新聞、秋田魁新報、北海道新聞、宮崎日日新聞、京都新聞、四国新聞、大分合同新聞、  
熊本日日新聞、千葉日報、岩手日報、福島民報、山陽新聞、中日新聞、山形新聞、信濃毎日新聞、  
静岡新聞、東奥日報、日本海新聞、下野新聞、福島民友新聞、埼玉新聞、愛媛新聞、中国新聞、  
デーリー東北、デイリースポーツ、Infoseek New、News from Japan、Japan News、exciteニュース、  
livedoor News、BIGLOBEニュース、MSNニュース、dmenuニュース、News picks、nippon.com  
(52社)  
2025年5月29日
9. 【東北大学】日本唯一“材料研究に特化”、新スーパーコンピュータ導入 20年かかる計算が1日で  
宮城テレビ、2チャンネルニュース(2社)  
2025年5月30日
10. 東北大、新スパコン6月2日稼働 材料・素材研究に特化  
日刊工業新聞  
2025年5月30日
11. すごいぞ1秒の計算能力4000兆回 東北大学が新スパコン「マサムネ2」公開  
河北新報  
2025年5月30日
12. 東北大「政宗」の名冠し 新スパコン稼働へ 家庭用の20年を1日で計算  
毎日新聞  
2025年6月2日
13. 新スパコン「MASAMUNE-弐」を公表 1秒で4000兆回計算可能 東北大  
官庁通信  
2025年6月2日

14. 新スーパーコンピュータ稼働 国内初、新材料開発研究に特化  
鉄鋼新聞  
2025年6月2日
15. 1秒間に約4000兆回の計算可能…東北大が稼働、新スパコンの実力  
ニュースイッチ、2チャンネルニュース（2社）  
2025年6月2日
16. 東北大学が誇る新世代スーパーコンピュータ「MASAMUNE-弐」が切り拓く次世代社会  
Good Job Journal  
2025年10月23日

## YouTube 2件

1. 最新スーパーコンピューター MASAMUNE 弐稼働へ 東北大学  
東日本放送  
2025年5月29日
2. 「世界の材料研究の拠点に」東北大に最新型スーパーコンピュータ導入 パソコンで20年かかる  
計算を1日で  
東北放送  
2025年5月29日  
(2025.12.18時点で27,842回視聴)

## ラジオ 1件

1. Date fm Morning Brush  
エフエム仙台  
2025年5月30日

## 新スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE- 弐 披露式の報告

計算材料学センターに新たに導入されたスーパーコンピューティングシステム MASAMUNE- 弐のシステム披露式が、2025年8月8日(金)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佐々木 孝彦 所長から式辞が述べられ、続いて、東北大学 杉本 亜砂子 理事・副学長(研究担当)、文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付 計算科学技術推進室長 栗原 潔 様、一般社団法人 HPCI コンソーシアム理事長 伊藤 聡 様より、新システムの導入についてご祝辞を頂戴しました。その後、今回のシステム更新に多大なご尽力をいただいた日立製作所様に対して、佐々木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寺田 弥生 特任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棟に移動し、新システムの披露が行われました。



金属材料研究所 佐々木 孝彦 所長



東北大学 杉本 亜砂子 理事・副学長(研究担当)



文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付  
計算科学技術推進室長 栗原 潔 様



HPCI コンソーシアム理事長 伊藤 聡 様



日立製作所様へ佐々木所長より感謝状贈呈



新システムの披露

## きんけん一般公開 2025 に本センターが参加

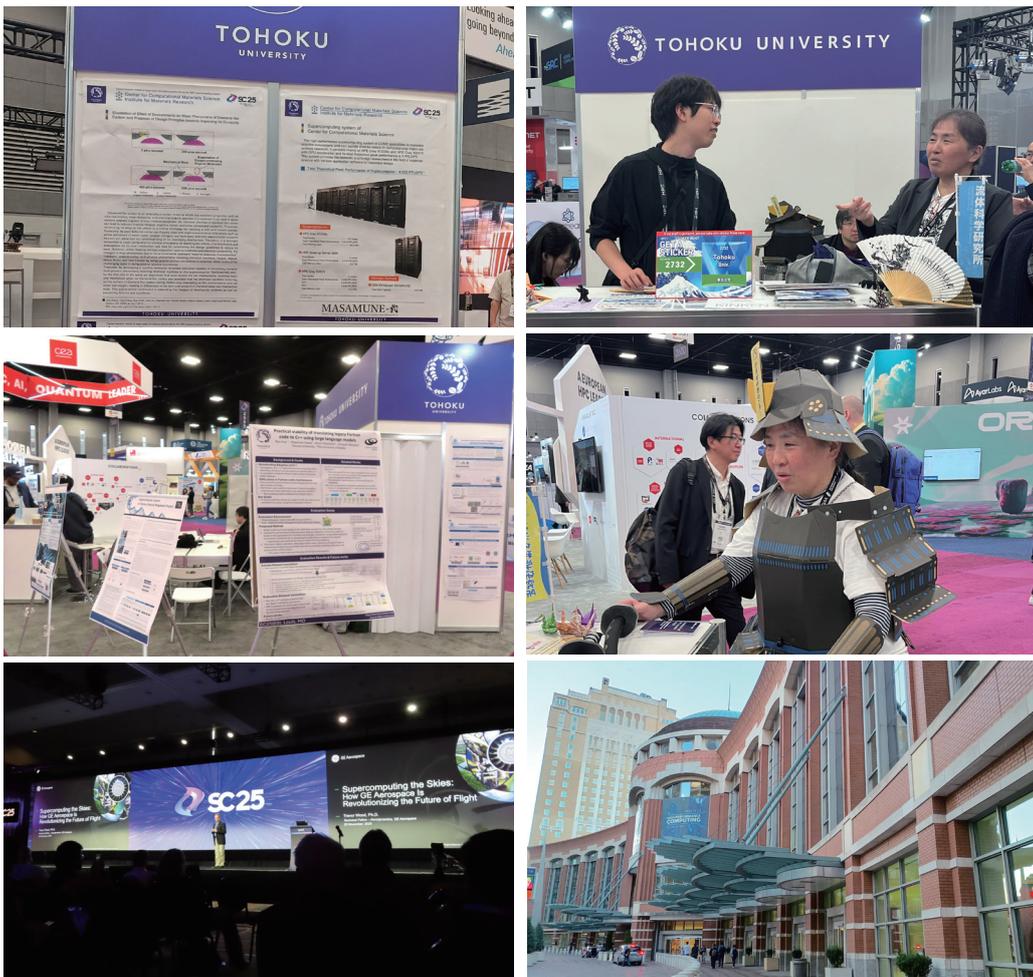
2025年10月11日(土)にきんけん一般公開が開催されました。あいにくの雨で足元の悪い中でしたが、金属材料研究所全体では1,000人以上、本センターだけでも120人以上の方々にご来場いただきました。

本センターでは新スーパーコンピュータ「MASAMUNE- 弐」の見学ツアーを開催し、来場者の方々にマシン室内を見学いただきながら、本センターのスーパーコンピュータやマシン室内の設備、研究成果などについて説明を行いました。ツアー終了後の自由見学時間にはご質問も数多く寄せられ、来場者の方々の高い関心がうかがえました。



## SC25 に本センター職員が参加

2025年11月16日(日)から21日(金)に開催されたSC25(Supercomputing Conference 2025)に、寺田特任准教授が現地参加しました。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(HPC)・ネットワークング・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。今年のSC25はセントルイスにてハイブリッド形式で開催されました。16,500人を超える参加者があり、過去最大の559のブース展示がありました。その一つとして、本センターを含む東北大学内のスーパーコンピュータを有する金属材料研究所、サイバーサイエンスセンター、流体科学研究所が合同でブース展示を行いました。展示ブースでは、本センターの広報活動のため、2025年6月に稼働を開始したばかりの新システム「MASAMUNE-式」の紹介や、前システムの「MASAMUNE-IMR」を用いた研究成果の展示、来訪者への対応などを行いました。来場者の方には「MASAMUNE-式」の材料設計シミュレーション専用のスーパーコンピューティングシステムとしての独自構成や、スーパーコンピュータを利用した最先端の材料研究成果に興味を持っていただくことができました。更に、他の研究機関や企業の展示ブースへの訪問、ワークショップ・チュートリアルへの参加、各種講演の聴講等により、スーパーコンピュータの運用、GPUの利用に関する課題、AIやLLM技術の応用の現状、量子コンピュータに関する最新動向、各種HPCに関する教育事例等、今後のセンターの活動に有益な多様な情報を得ることができました。

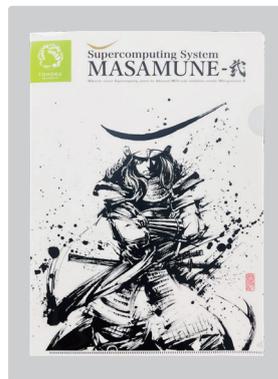


SC25での展示ブースと会場の様子

## MASAMUNE-弐ノベルティグッズ



■扇子



■クリアファイル



■プラスチックバッグ



■エコバッグ



■定規



■付箋



■Tシャツ

---

計算材料学センターだより No.44  
2025年12月25日 発行



**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)

---