

計算材料学センターだより

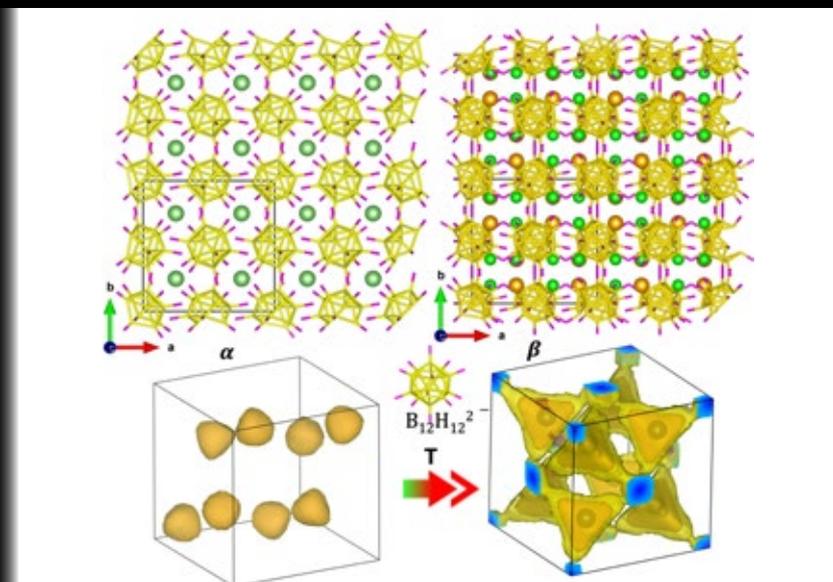


Figure1. The upper panel is for low (α) and high conducting (β) crystallographic structure (interstitial sites are the Li-sites). The occupancy of Li (green), B, and H is 1 for α -phase, whereas occupancy is 0.5 for β -phase (Li-sites are indicated by green and orange). The lower panel is of Li^+ ion density of the corresponding phases.

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2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
- ・ ノード時間管理機能の追加
- ・ AVS/Express 講習会の開催
- ・ スーパーコンピュータ棟玄関がバリアフリーになりました
- ・ セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催
- ・ 令和元年度の計算材料学センター見学者
- ・ 令和元年度の計算材料学センターの技術支援の実績
- ・ 新職員あいさつ

CCMS
NEWS
33

■ 図表説明

■ Reorientational motion and Li⁺-ion transport in Li₂B₁₂H₁₂ system: Molecular dynamics study.

Employing Force-field based molecular dynamics (MD) study, we investigated Li⁺ ion transport in Li₂B₁₂H₁₂-system, a potential candidate for all-solid-state battery electrolytes. Despite several first-principles MD studies, we developed a force field in this material to carry out MD simulation as it produces longer simulation. Longer simulation is necessary to understand the anionic reorientational mechanism, as it is relatively slower than Li⁺ ions. The proposed potential model successfully reproduces the low (α) to high (β) conducting phase transition. Our study finds anionic reorientation generates plenty of Li-sites, which is responsible for Li⁺ ion diffusion in the high conducting phase. The present potential model may also be transferable to other materials of this promising class of solids due to their similar local environments, and that also helps to investigate the substitutional effect on fast ion transport, such that the high conducting phase can be stabilized near room temperature for practical application.

□ Kartik Sau, Tamio Ikeshoji, Sangryun Kim, Shigeyuki Takagi, Kazuto Akagi, and Shin-ichi Orimo, Phys. Rev. Materials **3**, 075402 (2019)

センター長あいさつ

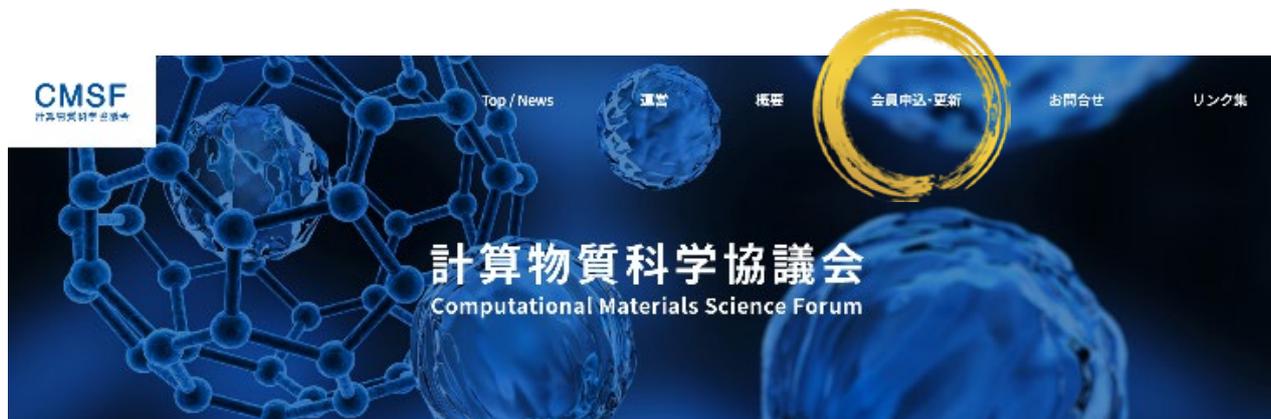
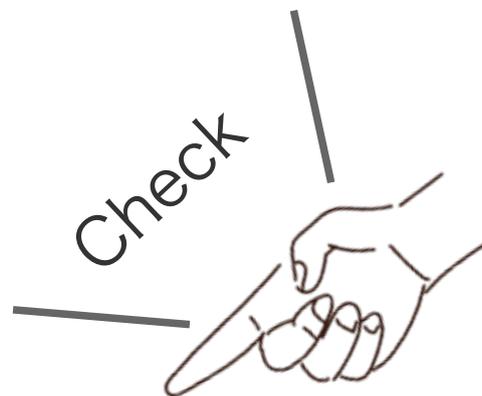
計算材料学センター 久保百司



本年5月から、本センターは、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、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターと共同で、上記4センターを運営機関とする「計算物質科学協議会」を設立致しました。2011年から始まった文部科学省「HPCI戦略プログラム」にともなって組織された計算物質科学イニシアティブ(CMSI)による計算物質科学分野における分野振興、コミュニティ形成などの活動、その後その活動を引き継いだ2015年からのポスト「京」重点課題・萌芽的課題の活動が2020年3月に終了したことにとともに、さらにそれらの活動を発展・進化させるために本「計算物質科学協議会」を組織致しました。本「計算物質科学協議会」では、学界や産業界のニーズと計算物質科学界のシーズを常に対比しながら、国際動向を含めた情報交換を行うとともに、ソフトウェアやツールの新たな研究開発の方向性を導き、それらを駆使したシミュレーション技術、データ解析技術の開発と活用を促進することを目的としています。さらに、将来必要となる技術についての意見集約と国や関係諸機関への提言を行うことなども活動予定としています。また、運営機関および会員の所属する機関が実施する研究会やシンポジウム、ソフトウェアやツールの講習会、人事育成教育活動等を周知するネットワークを構築し、全国の計算物質科学に関連した成果やツールの開発者と利用者のコミュニティを効率的につなぐ仕組みも整える予定です。詳細は、ホームページ<https://cms-forum.jp/>に掲載されていますので、是非、一度、ご覧頂ければ有難く思います。また、本「計算物質科学協議会」では個人会員の募集を行っておりますので、ご興味がある方は、是非、上記のホームページから会員申し込みをして頂き、「計算物質科学協議会」の活動にご参加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、2013年4月～2017年3月の4年間に渡って本センターのセンター長を務められました毛利哲夫教授(2017年4月からは特任教授)が、この3月に本学金属材料研究所を退職されました。東日本大震災後の電気代高騰により、スーパーコンピュータの運営において難しい舵取りが求められた時代において、計算材料学センターの発展・運営に多大なるご貢献を頂きましたことに、ここに厚く感謝の意を表したいと思います。また、本年4月からのセンターの体制の変化としては、計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)の寺田弥生特任准教授が、本計算材料学センターの准教授になりました。引き続きPCoMSの運営にご活躍頂くとともに、本センターの准教授として、スーパーコンピューティングシステムを活用した超大規模計算の

分野において活躍して頂くことを期待しております。さらに、新しいセンター職員として、Vu Thi Ngoc Huyen 博士を迎えました。また産休・育休をとっておられた技術補佐員の山田麻美氏がこの4月から復帰されました。このように、4月から新体制となったセンター職員が一丸となって、昨年度から始まりました国際共同利用・共同研究施設という新しい使命を全うし、さらに計算材料学センター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、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。また、with コロナ、after コロナの時代において、テレワークの拡大により、計算材料学の需要と重要性が急速に増大していくことは必至であり、with コロナ、after コロナの時代に本センターがどのような役割を果たすべきかについても議論を深めていくことが重要であると考えています。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。



計算物質科学協議会ホームページ
URL: <https://cms-forum.jp/>

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 19.1.0.166 をインストールしました。

使用方法は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 19.1.0.166 をインストールしました。

使用方法は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. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 19.1.0.166 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルの 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 19.1.0.166 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルの 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 18.10、19.10 をインストールしました。

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

4. CUDA Toolkit

CUDA Toolkit 9.2.148、10.2.89 をインストールしました。

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/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. 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 2019.12 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 6.4 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>

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 7Aug19、3Mar20 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 6.12 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/>

3. Elk

全電子計算法に基づく第一原理計算アプリケーションである Elk のバージョン 6.3.2 をインストールしました。Elk ではバルク・表面・磁性体などの系の高精度な密度汎関数計算が可能であり、LDA+U 法、スピン軌道相互作用・ノンコリニア磁性の評価、フォノン計算などに対応しています。

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

Elk の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://elk.sourceforge.net/>

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 1.1.0 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の 6.21 章をご覧ください。

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

ALAMODE の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

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

5. SALMON

時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間グリッド法を用いた光励起電子ダイナミクスシミュレータである SALMON のバージョン 1.2.1 をインストールしました。線形光応答、パルス光による非線形光応答を計算可能であり、数千原子からなる超並列大規模計算も可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.22 章をご覧ください。

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

SALMON の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://salmon-tddft.jp/>

6. OCTOPUS

擬ポテンシャル法と実空間基底を用いた第一原理計算アプリケーションである OCTOPUS のバージョン 9.1 をインストールしました。時間依存密度汎関数法 (TDDFT) による化学反応や外場応答などの電子状態変化を伴う実時間シミュレーションが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.23 章をご覧ください。

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

OCTOPUS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

https://octopus-code.org/wiki/Main_Page

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 6.5 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の 6.11 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. 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 3.9.1 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の 6.13 章をご覧ください。

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

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/>

9. 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 6.1 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。

実行方法は以下のマニュアルの 6.6 章をご覧ください。

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

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/>

アクセラレータサーバ

1. QUANTUM ESPRESSO

QUANTUM ESPRESSO のバージョン 6.4.1、6.5 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 6.3 章をご覧ください。

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

2. LAMMPS

LAMMPS のバージョン 7Aug19、3Mar20 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/>

3. Chainer

ディープラーニング向けフレームワークである Chainer 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 7.2 章をご覧ください。

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

Chainer の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://chainer.org/>

4. Keras

ディープラーニング向けライブラリである Keras 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 7.3 章をご覧ください。

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

Keras の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://keras.io/ja/>

5. Caffe

ディープラーニング向けフレームワークである Caffe 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 7.4 章をご覧ください。

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

Caffe の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://caffe.berkeleyvision.org/>

6. DIGITS

画像認識に特化したディープラーニングシステムである DIGITS 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 7.6 章をご覧ください。

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

DIGITS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://developer.nvidia.com/digits>

7. Jupyter Notebook

Python などのプログラミング言語を用いた対話的な計算や図表作成などがグラフィカルに行える
アプリケーションである Jupyter Notebook 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 7.5 章をご覧ください。

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

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

<https://jupyter.org/>

8. 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 6.1 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 6.2 章をご覧ください。

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

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. 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 2019.12 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>

2. 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 6.1 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 4.2.7 章をご覧ください。

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

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/>

令和 2 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申し上げます。

片平キャンパスの計画停電の予定

2020 年 8 月 9 日 (日) 7:30 ~ 18:00

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>

ノード時間管理機能の追加

計算材料学センターは国際共同利用・共同研究施設として研究者の方へ計算機資源を提供しています。計算機資源は有限のため、利用者が平等に使用できるように審査時の採点結果や前年度の使用率を考慮し、各課題に対して利用できる上限のノード時間を割り当てています。各課題には複数の分担者がいる場合があり、課題代表者が各分担者にノード時間を配分する際や各分担者の使用ノード時間を確認する際には、これまでは計算材料学センターへ依頼していただいております。センター職員は手動で使用ノード時間の確認や配分時間の変更を行っていたため、土日祝日や勤務時間外は対応できず、依頼を受けてから対応までに時間がかかる場合がありました。

そこで、課題ごとにノード時間を管理する課題管理者を研究代表者に選出していただき、課題管理者は随時 Web 上から各分担者の使用ノード時間の確認及び配分時間の変更を行えるようにいたしました。課題管理者はリアルタイムジョブ参照システムへログインし、Subject メニューを選択することで、各分担者の使用ノード時間の確認及び配分時間の変更を行えます。課題管理者は複数名設定することができますので、追加されたい場合はご連絡ください。

リアルタイムジョブ参照システム URL :

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/job_reference.html



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 をインストールしてユーザーにサービスしていますが、AVS/Express を活用していただくために、概要、基本的なモジュール結線、便利なモジュールの紹介と操作と応用操作の他、計算材料学センターで開発した利用頻度の高い VASP 等の可視化用のモジュールの紹介という内容で、2 月 26 日にスーパーコンピュータ棟を会場として AVS/Express 講習会を開催し、金研所内より 4 名が参加し受講していただきました。



AVS/Express 講習会の様子

スーパーコンピュータ棟玄関がバリアフリーになりました

計算材料学センターでは、本年 2 月にスーパーコンピュータ棟玄関周辺のバリアフリー改修工事を実施しました。この改修により、車椅子ご利用の方々も、本所のスーパーコンピュータ“MASAMUNE-IMR”の見学等の際にご不便をおかけすることなくお迎えができるようになりました。

玄関外側は、手すり付きスロープ（写真1）を設置することにより、スーパーコンピュータ棟北側より安全にアクセスできるようになりました。さらに玄関ドアは、両開きタイプドアから2段階スライド式自動ドア（写真2）に変更することで開口部を広くとることができ、車椅子等が楽に通れるようになりました。

玄関内側は、上がり框（あがりかまち）（写真3）にスロープを設けて段差をなくすことで車椅子が容易にアクセスできるようにし、スーパーコンピュータ“MASAMUNE-IMR”を設置している1階のスーパーコンピュータ室の入口ドアも、以前はドアの下部に段差があり車椅子等での入退室が不便でしたが、ドア周り一式を交換（写真4）して段差をなくし車椅子等でも安全に入退室できるようになりました。

このたびのスーパーコンピュータ棟の玄関周辺のバリアフリー化により、スーパーコンピュータ棟およびスーパーコンピュータ室への車椅子等でのアクセスが容易になりました。今後とも多くの方々へスーパーコンピュータ“MASAMUNE-IMR”のご見学等にお越しただけますよう、所内の皆さまのご協力をよろしくお願いいたします。

写真1：手すり付きスロープ

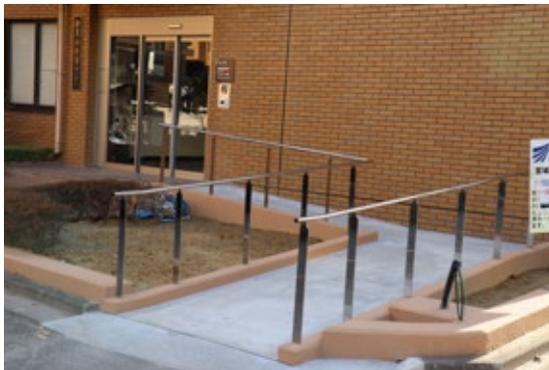


写真2：玄関ドア



写真3：上り框



写真4：入口ドア・ドア周り一式



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。12月、1月、そして2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.26 2019年12月24日(火) 「磁気構造の多極子展開法と第一原理計算による反強磁性体の系統的研究」
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
鈴木 通人 准教授
- ・ No.27 2020年1月24日(金) 「原子・電子シミュレーションを用いた欠陥挙動に基づく力学特性」
日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター
都留 智仁 先生
- ・ No.28 2020年2月19日(水) 「分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) 法～ユビキタス(遍在的)なプロトンを理解する～」
早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科
中井 浩巳 教授

今後のセミナーの予定

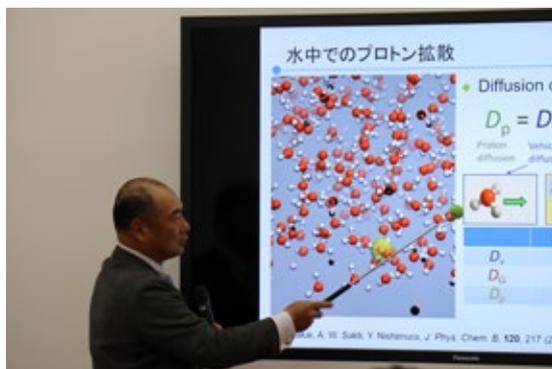
新型コロナウイルスの影響により、次回開催は未定です。



鈴木准教授の講演の様子(2019年12月24日)



都留先生の講演の様子(2020年1月24日)



中井教授の講演の様子(2020年2月19日)

令和元年度の計算材料学センター見学者

期間 :2019年4月～2020年3月

見学日	見学者	所属 / 会議など
2019年 5月22日	大学1年生 30名	東北大学金属材料研究所
2019年 5月23日	西川町中学生 8名	山形県西川町立西川中学校
2019年 7月17日	小野 寛太氏 他1名	高エネルギー加速器研究機構
2019年 7月23日	伊東氏 他3名	東北大学総合技術情報群
2019年 7月31日	大津 直文氏 他3名	北見工業大学
2019年 8月 1日	AKEPOP VEARASILP氏 他8名	Department of Foreign Trade
2019年 8月 2日	寺田 弥生氏 他2名	東北大学金属材料研究所夏期講習会
2019年 8月23日	池田 陽一氏 他12名	東北大金研 -CROSS ワークショップ
2019年 8月29日	田中 学氏 他6名	大阪大学接合科学研究所
2019年 9月18日	王 楊氏 他4名	東北大学金属材料研究所
2019年 9月25日	仙台市高校生 42名	仙台向山高等学校
2019年10月 1日	猪狩 佳幸氏 他6名	東北大学総合技術部
2019年10月 4日	八鍬 友一氏 他8名	株式会社日立ソリューションズ東日本
2019年10月11日	陳 茜氏 他3名	東北大学金属材料研究所
2019年10月18日	仙台市高校生 23名	宮城第一高等学校
2019年10月24日	岩橋 建輔氏	分子科学研究所
2019年10月27日	淡路 智氏 他8名	東北大学金属材料研究所
2019年12月 6日	藤川 源一氏 他3名	株式会社日立製作所
2020年 1月30日	佐藤 楽爾氏 他1名	東京工業大学
2020年 2月18日	池田 陽一氏 他4名	東北大学金属材料研究所

見学者総数 のべ191名



■ 山形県西川町立西川中学校 8名
2019年5月23日



■ 宮城第一高等学校 23名
2019年10月18日

令和元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。令和元年度の技術支援内容と件数について、所内8研究室および、所外62研究機関へ合計501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	8 研究室	115
学内	7 研究機関	96
国内の研究機関	28 研究機関	168
国外の研究機関	27 研究機関 (13 ヶ国)	122
合 計	70	501

新職員あいさつ

My name is Vu Thi Ngoc Huyen. I originally come from Vietnam. It is lucky for me to work as an assistant technician at the Center for Computational Materials Science from April 2020 after I graduated from a doctoral program at Osaka University. I have been working on Material Science based on theoretical calculations. Like other researchers who use data performing by the supercomputer system, I understand the important role of the computer system in the progress of the science of technology. I will try the best to give my contribution to the development of the center. I hope to continue receiving your support in the future.

My hobby is enjoying the beauty of nature. I am happy to be able to visit many sight-seeing spots as well as to have a peaceful life in Japan.



技術補佐員
Vu Thi Ngoc Huyen

計算材料学センターだより No.33

2020年 6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



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.tohoku.ac.jp