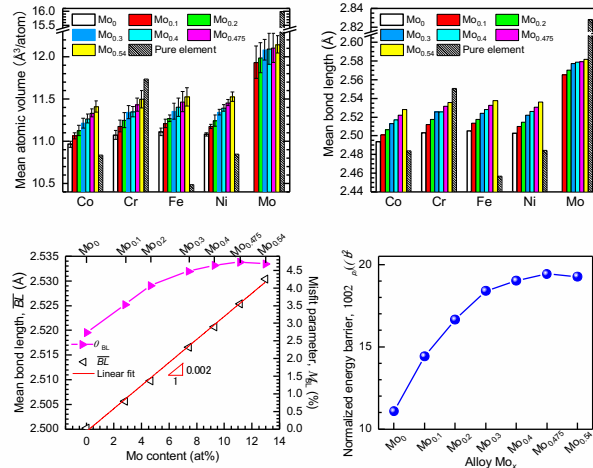


計算材料学センターだより



■ Solid-solution strengthening enhanced by Mo addition into NiCoCrFe-based high-entropy alloys

CONTENTS

- ・ 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
- ・ アクセラレータサーバにおける共有キューサービスの追加
- ・ SC21 に本センター技術職員が参加
- ・ 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を公開しました
- ・ MASAMUNE-IMR の講習会（初級）を開催しました
- ・ 計算材料学センターパンフレットが新しくなりました
- ・ 見学の受け入れ・新型コロナウイルス感染症対策

表紙の図について

■ Solid-solution strengthening enhanced by Mo addition into NiCoCrFe-based high-entropy alloys

By *ab initio* simulations, the degree of lattice distortion for Mo-added NiCoCrFe-based high-entropy alloys (HEAs) was precisely evaluated. The atomic volumes and bond lengths (BL) of the constituent elements in the off-equiatomic Mo_x HEAs ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.475, \text{ and } 0.54$) ascended with increasing the Mo content. However, the increase in the mean BL (\overline{BL}) was not significant (0.2% per at%Mo), indicating that the effect of lattice expansion on the solid-solution strengthening was minimal. In contrast, the misfit parameter σ_{BL} , which corresponds to the standard deviation of BL, increased significantly at first, changed slowly after the $\text{Mo}_{0.3}$ HEA, and peaked at the $\text{Mo}_{0.475}$ ($\text{Ni}_{1.8}\text{Co}_{0.95}\text{Cr}_{0.8}\text{Fe}_{0.25}\text{Mo}_{0.475}$) HEA. This indicates that Mo atoms induce large lattice distortion locally in the NiCoCrFe-based solid-solution HEAs. The most severe lattice distortion in the $\text{Mo}_{0.475}$ HEA resulted in the highest energy barrier for the dislocation glide. The experiment validated the highest yield stress in the homogenized $\text{Mo}_{0.475}$ HEA.

□ [1] J. Li, K. Yamanaka, and A. Chiba, Mater. Sci. Eng. A, **817** (2021), 141359.

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. NVIDIA HPC SDK

NVIDIA HPC SDK 20.9 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#nvidia_hpc 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 6.2.0 および 6.2.1 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。

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. 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 7.2.42 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をご覧ください。

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

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/>

3. 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 21.1 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をご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=application:wien2k>

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/>

4. 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 9.4.2 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/>

5. 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 8.2 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/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/>

6. 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 2021.102 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/>

7. 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 のバージョン 2021.06 をインストールしました。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>

アクセラレータサーバ

1. Materials Studio

分子構造や結晶構造の持つ特性と挙動の関係を予測するための総合的なモデリング・シミュレーション環境である Materials Studio のバージョン 2021HF1 をインストールしました。NEB に基づく遷移状態検索ツールである FlexTS モジュールが新たに利用可能となりました。

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:materials_studio

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

<https://www.3ds.com/ja/products-services/biovia/products/molecular-modeling-simulation/biovia-materials-studio/>

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 6.2.0 および 6.2.1 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. 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 6.2.1 をインストールしました。

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. ANSYS Mechanical CFD

有限要素法による解析ツールである ANSYS Mechanical CFD を 2021R1 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

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/>

3. SIESTA

擬ポテンシャル法と原子局在基底を用いた第一原理計算アプリケーションである SIESTA のバージョン 4.1.5 をインストールしました。SIESTA は密度汎関数理論に基づき、広範な系の電子状態計算や構造最適化、分子動力学シミュレーションなどを高速に行うことが可能です。また、原子局在基底の採用により高速化を実現し、一部の系に対して線形スケーリングの性能を示します。非平衡グリーン関数法による電子伝導特性の評価も可能です。

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:siesta>

SIESTA の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://departments.icmab.es/leem/siesta/>

4. 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/>

5. MATLAB

数値解析アプリケーション MATLAB を R2021a にバージョンアップしました。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をご覧ください。

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

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>

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 2021R1 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

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 2021.102 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。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/>

4. 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 2021.06 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

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>

アクセラレータサーバにおける共有キューサービスの追加

アクセラレータサーバでは GPU なしのキュー C_002・C_004 をサービスしておりましたが、ノードを共有するキュー CC_001 を追加いたしました。このキューは、Python による解析や OpenMP のみの並列プログラムなど、1 ノードの CPU やメモリなどリソースを使い切らないようなジョブを実行する際に使用します。また、要求リソースの少ないジョブについては待ち時間が減少し、実行されやすくなることが期待できます。

ジョブはデフォルトでは 1CPU が割り当てられます。qsub コマンドのオプションで最大 18CPU まで使用可能です。またインタラクティブモードでの利用も可能です。

詳細な利用方法については、アクセラレータサーバの利用マニュアル「共有キュー CA_001・CA_001g・CC_001 へのジョブ投入方法」をご覧ください。

アクセラレータサーバマニュアル URL

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:acceleratorserver:job_submission_management

SC21 に本センター技術職員が参加

2021年11月14日（日）から19日（金）に開催されたSC21（Supercomputing Conference 2021）に、佐藤和弘技術職員、五十嵐伸昭技術職員、丹野航太技術職員、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。昨年のSC20は新型コロナウイルス感染拡大の影響により完全オンラインでの開催でしたが、今年はオンラインに加え、米国セントルイスでの現地開催も再開され、ハイブリッド形式での開催となりました。

今回、本センターは展示を行いませんでしたが、企業や他大学のオンライン展示をチェックし、各メーカーの最新のプロセッサやストレージ、通信技術およびそれらを採用したHPC向けサーバなどの情報収集を行いました。特にプロセッサについては、近年の製造プロセスの微細化に伴いCPUコア数をめぐる各社の競争が激化しており、今後の展開が注目されます。



SC21Web サイト TOP (左) とオンライン展示ページ (上)

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王楊助教、足立幸志教授、エコール・セントラル・リヨン（フランス）の Jean Michel Martin 教授ら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、Langmuir 誌のフロントカバーに選ばれました。

論文：Role of OH Termination in Mitigating Friction of Diamond-like Carbon under High Load: A Joint Simulation and Experimental Study
Langmuir, **37** (20) 6292-6300, 2021.

Yang Wang, Kentaro Hayashi, Yusuke Ootani, Shandan Bai, Tomomi Shimazaki, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, Maria-Isabel De Barros Bouchet, Jean Michel Martin, and Momoji Kubo

Langmuir 誌の Web サイト：

<https://pubs.acs.org/toc/langd5/37/20>

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王楊助教、足立幸志教授ら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：Selective Wear Behaviors of a Water-Lubricating SiC Surface under Rotating-Contact Conditions Revealed by Large-Scale Reactive Molecular Dynamics Simulations
The Journal of Physical Chemistry C, **125** (27) 14957-14964, 2021.

Yang Wang, Keita Yukinori, Ryo Koike, Yusuke Ootani, Koshi Adachi, and Momoji Kubo

The Journal of Physical Chemistry C 誌の Web サイト：

<https://pubs.acs.org/toc/jpccck/125/27>

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王楊助教、中国上海海洋大学の許競翔副教授ら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 ACS Applied Materials & Interfaces 誌の Supplementary Cover に選ばれました。

論文：Atom-by-Atom and Sheet-by-Sheet Chemical Mechanical Polishing of Diamond Assisted by OH Radicals: A Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulation Study
ACS Applied Materials & Interfaces, **13** (34) 41231-41237, 2021.

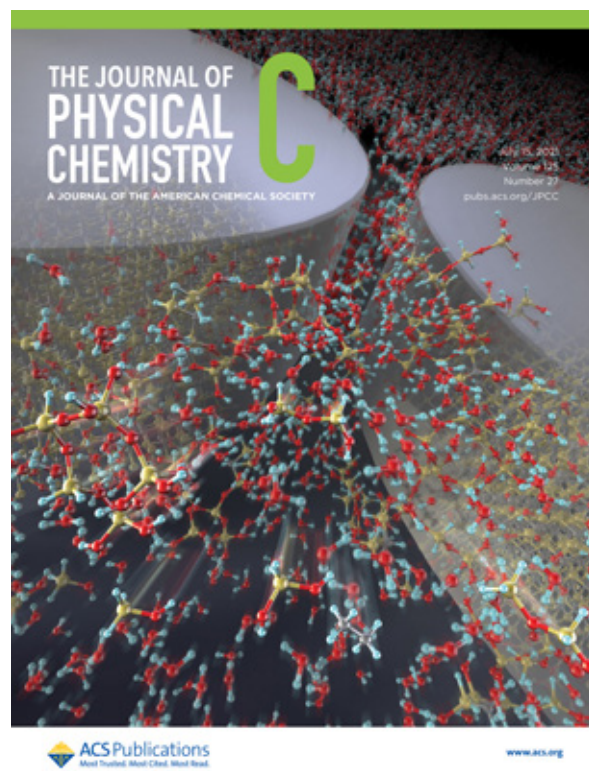
Kentaro Kawaguchi, Yang Wang, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, and Momoji Kubo

ACS Applied Materials & Interfaces 誌の Web サイト：

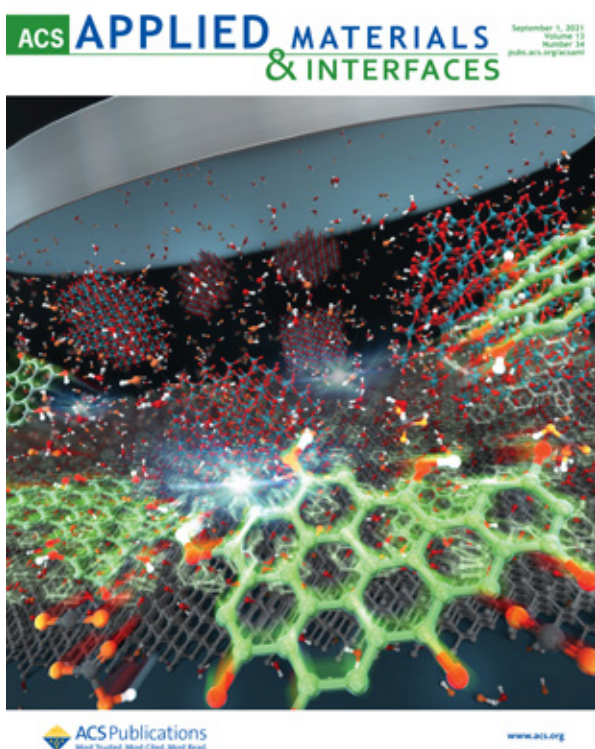
<https://pubs.acs.org/toc/aamick/13/34>



Langmuir, **37** (20) 6292-6300,
2021 年 5 月 25 日



The Journal of Physical Chemistry C,
125 (27) 14957-14964,
2021 年 7 月 15 日



ACS Applied Materials & Interfaces,
13 (34) 41231-41237,
2021 年 9 月 1 日

AVS/Express オンデマンドセミナーコンテンツを公開しました

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、無料で視聴し学習頂けるオンデマンドセミナーコンテンツを作成いたしましたので、ご活用下さい。今回は日本語版のみの提供ですが、英語版コンテンツも作成中です。

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。



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。

1. AVS/Express の概要紹介 (約 10 分)

AVS/Express の特徴やデータ読み込みから可視化まで流れなどの概要紹介のコンテンツです。

2. 基本操作演習 _ モジュールプログラミング、物体操作 (約 20 分)

実際のモジュールの操作、プログラミング、物体操作などデータ読み込みから出力までの基本操作の説明と演習のコンテンツです。

3. 利用データに合わせた基本ネットワーク作成演習 (約 16 分)

格子状、離散点、要素などデータにあわせた操作を格子形状、流体解析などのサンプルデータを使い理解を深める演習を行うコンテンツです。

4. データフォーマット紹介 (約 12 分)

利用可能なデータのデータタイプと書式などについての説明コンテンツです。

5. 可視化結果の保存 _ 画像 _ 動画 _ 3D 動画 (約 20 分)

AVS/Express の可視化結果の画像、動画、3D 動画への出力形式と保存操作について説明したコンテンツです。

6. CCMS ライブラリ (約 28 分)

AVS/Express 用に計算材料学センターで開発し追加した、VASP、TOMBO、Gaussian などの原子、分子解析プログラムのデータの可視化に特化したモジュールについて説明したコンテンツです。

計算材料学センターのホームページ、講習会・セミナー情報のオンデマンドセミナーコンテンツのリンクからご視聴頂けますので、是非、ご活用ください。

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

MASAMUNE-IMR の講習会（初級）を開催しました

これからスーパーコンピューティングシステムを使用したい方、初めて本センターのスーパーコンピューティングシステムを使用される方を対象とした講習会を7月16日に開催しました。新型コロナウイルスの感染状況を考慮して Zoom を使用したオンラインで開催し、スーパーコンピューティングシステムの概要、システムを使用するために必要な GIMRT 課題の申請方法、システムへのログイン方法、スーパーコンピュータでのプログラムのコンパイル方法およびジョブの実行方法について説明を行いました。金研の所内外から26名に参加いただきました。

講習会のアーカイブは以下よりご覧いただけます。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/seminar.html

計算材料学センターパンフレットが新しくなりました

計算材料学センターパンフレット（日本語版・英語版）を 2021 年版に更新いたしました。MASAMUNE-IMR を利用して得られた、最新の研究成果 4 件を掲載しています。

<掲載された研究成果>

- 精密な微小機械システムにおける材料の摩耗量予測式を提案
- クラスタ多極子理論による第一原理磁気構造予測
- 第一原理フェーズフィールド法による Ni-Ti 合金の微細構造
- Mo 添加した NiCoCrFe 系ハイエントロピー合金における固溶強化

タブレットやスマートフォンでもご覧いただけるオンラインパンフレットと、ダウンロード版（PDF 版）の 2 種類があります。

計算材料学センターホームページのトップ、または、下記の URL からご覧いただけます。

日本語版

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/

英語版

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/eng/public_info/

スマートフォンやタブレットの方は、右の QR コードからも、オンラインパンフレットをご覧いただけます。



日本語版



英語版

スーパーコンピューティングシステム "MASAMUNE-IMR" をご紹介いただけると幸いです。

見学の受け入れ・新型コロナウイルス感染症対策

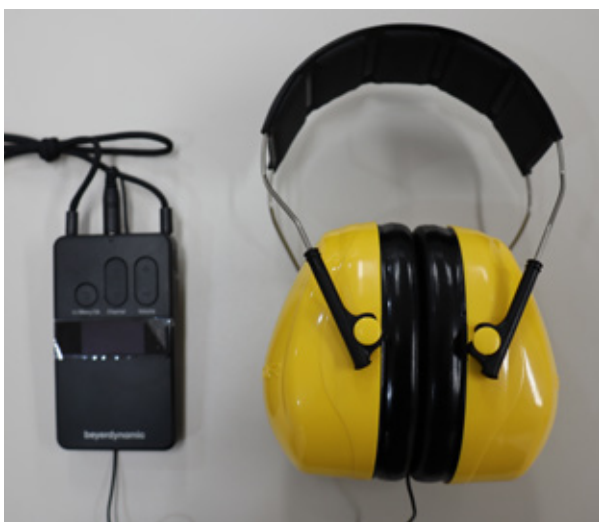
10月1日より「新型コロナウイルス感染拡大防止のための東北大学の行動指針（BCP）」レベルが1に下がり、ガイドラインに基づいて催事やイベント等を実施できることとなりました。

しかし、いつ新型コロナウイルスの再拡大が起きるかや、クラスター発生の不安が拭えないこともあり、現段階では見学の受け入れ再開やセミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」等の開催の目途は立っておりません。

着々と見学再開に向けて準備を進めている段階ですので、今しばらくお待ちください。再開の目途が立ちましたら、計算材料学センター Web ページにてお知らせします。

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

■見学の受け入れ再開に向けて準備中です！



見学時に着用していただくイヤホンとイヤマフ（騒音対策）を購入しました！



玄関に非接触のアルコール消毒と検温システムを設置しました！

計算材料学センターだより No.36

2021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