

計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・スーパーコンピューティングシステムの愛称
- ・新スーパーコンピューティングシステムの概要
- ・セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催
- ・平成 29 年度 計算材料学センター見学者
- ・平成 29 年度 計算材料学センターの技術支援の実績
- ・日本金属学会で本センター職員が日本金属学会研究技術功労賞を受賞
- ・スーパーコンピューター SR16000 稼働終了
- ・新スーパーコンピューティングシステムの更新作業状況について
- ・新任教員あいさつ
- ・新職員あいさつ

センター長あいさつ

計算材料学センター長 久保百司

本センターでは、今年度の8月からCray XC50-LCを中心とした新しいスーパーコンピューティングシステムの稼働をスタートさせます。本システムは、3ペタ FLOPS の計算速度を有し、先代のスーパーコンピュータと比較すると、約10倍高速演算が可能なシステムとなっております。神戸の「京」コンピュータの計算速度が約10ペタ FLOPS であることから、当センターの新しいスーパーコンピュータは、「京」の約30%の演算性能を有することになります。「京」コンピュータは、材料研究のみならず、気象、防災、宇宙、創薬、エネルギー、デバイスなど、ありとあらゆる広範な研究分野を対象としたスーパーコンピュータですが、当センターのスーパーコンピュータは、材料研究に特化したシステムであることを考えると、本システムの導入によって、日本全体の計算材料学の大きな発展と進歩が期待できるものと夢を膨らませております。是非、皆様方にご活用を頂ければ有り難く思います。

また、当センターの初の試みとして、新しいスーパーコンピューティングシステムの愛称の募集を行いました。具体的には、平成30年2月から約1ヶ月間一般公募を実施しました。これは、複数ある東北大学のスーパーコンピュータにとっても、初の試みです。その結果、総数486件という非常に多くのご応募を頂きました。ご応募を頂きました方々に厚く御礼を申し上げます。厳正な審査の結果、青森県十和田市の会社員の方の作品を採用させて頂き、新しいスーパーコンピューティングシステムの愛称を「MASAMUNE-IMR」に決定致しました。「**M**aterials science **S**upercomputing system for **A**dvanced **MU**lti-scale simulations towards **N**Ext-generation - **I**nstitute for **M**aterials **R**esearch」の太字の文字をとって、上記の愛称とさせて頂いております。また、これも初の試みとして、スーパーコンピュータの筐体パネルのデザインを、本センターだより表紙に掲載しましたように、この愛称をもとに墨絵師の御歌頭氏に依頼して、作成して頂きました。決定しました愛称と筐体パネルのデザインについては、平成30年5月17日(木)にプレスリリースを行っております。当センターのスーパーコンピューティングシステムの愛称「MASAMUNE-IMR」が、世界的にも広く浸透し、皆様に末永く親しんで頂ければ大変嬉しく思います。

一方、今年の4月13日(金)に、平成24年4月から6年間にわたって当センターにて運用を行ってこられた日立スーパーコンピューティングシステム SR16000 モデル M1 の稼働を停止致しました。この6年間の間に、東日本大震災による電気代の高騰という予測不可能な問題が当センターの運営を困窮させましたが、このような問題も乗り越え、無事に6年間の運用を終了させることができましたことは、前センター長の毛利先生、前スーパーコンピュータの導入にご尽力された川添先生をはじめ、センター職員、関係各位のたゆまぬ努力と貢献によるものであり、現センター長としてここに厚く御礼申し上げます。また、この6年間、ユーザーとして当センターのスーパーコンピュータをご活用して頂きました皆様にも、計算材料学に関する多大かつ重要な研究成果、研究業績をあげて頂き、世界に向けて広くその成果を発信して頂きましたことに厚く感謝申し上げます。

また、今年度の4月から、新しくセンター職員として、鈴木通人准教授、齋藤香菜子事務補佐員、

三浦重幸技術職員をお迎え致しました。鈴木通人准教授には、新しいスーパーコンピューティングシステムを活用して、超大規模計算、GPU コンピューティング、マテリアルインフォマティクスなどの分野においてご活躍頂けることを期待しております。また、昨年度までポスト「京」プロジェクトの事務局をしておられた齋藤香菜子さんに加入して頂いたことで、引き続き事務手続きの円滑な運営が可能となり、大変嬉しく思っております。また、6年ぶりに再雇用職員として戻って来て頂いた三浦重幸氏の加入は、新しいスーパーコンピューティングシステムの運用を開始するこの時期に、大きな力と安心感を与えてもらっています。新しく加入して頂いた3名を加え、この4月から新体制となったセンター職員が一丸となって、新しいスーパーコンピュータの運用を通して、日本の計算材料科学コミュニティの発展、さらには材料科学全体の発展に貢献していきたいと考えております。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。

最後になりましたが、新しいスーパーコンピューティングシステムのお披露目式を、本年10月1日（月）に東北大学金属材料研究所にて開催予定としておりますので、ご興味がありましたら、是非、ご参加頂ければ有り難く思います。

スーパーコンピューティングシステムの愛称

愛称： ”MASAMUNE-IMR”

MAaterials science **S**upercomputing system for **A**dvanced **MU**lti-scale simulations towards **NE**xt-generation - Institute for **M**aterials **R**esearch

仙台開府の父であるとともに、サン・ファン・パウティスタ号によって仙台から世界を目指した伊達政宗公にちなみ、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピュータで得られた材料科学に関わるマルチスケールシミュレーションの研究成果を、次世代に向けて仙台から世界へ広くアピールできるようにと、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピューティングシステムの愛称を、”MASAMUNE-IMR” に決定致しました。

また、スーパーコンピュータの筐体パネルには、日本、世界の皆様にスーパーコンピュータに関心を持って頂きたいという思いから、インパクトのあるデザインを施そうと考え、愛称の文字と仙台の地から次世代の材料科学の世界を見据える伊達政宗公のイメージが描かれています（図1）。

スーパーコンピュータが、日本さらには世界の科学技術や実際の社会生活に対して、どのように貢献してきたか、さらには今後どのような貢献を目標としているのかについて、研究者はもとより研究者以外の一般の方々にも関心を持って頂ければ、大変嬉しく思っております。広く多くの方々からの見学のご希望をお待ちしております。



図1. 新スーパーコンピューティングシステム完成イメージ

新スーパーコンピューティングシステムの概要

新スーパーコンピューティングシステムは、「世界的に早急な対応が求められているエネルギー問題の解決を実現する材料技術の創製、豊かで暮らしやすい未来社会を創造するとともに我が国の国際競争力を強化するデバイス・エレクトロニクス材料の開発、さらには、持続可能な安全・安心社会を実現するための社会基盤を支える新材料の創出」を目的としております。

図2に新スーパーコンピューティングシステムのシステム構成図を示します。新スーパーコンピューティングシステムは2018年8月1日より運用開始予定となっており、利用者の方には長期間の停止でご不便をおかけしますが、ご理解、ご協力を何卒お願い申し上げます。

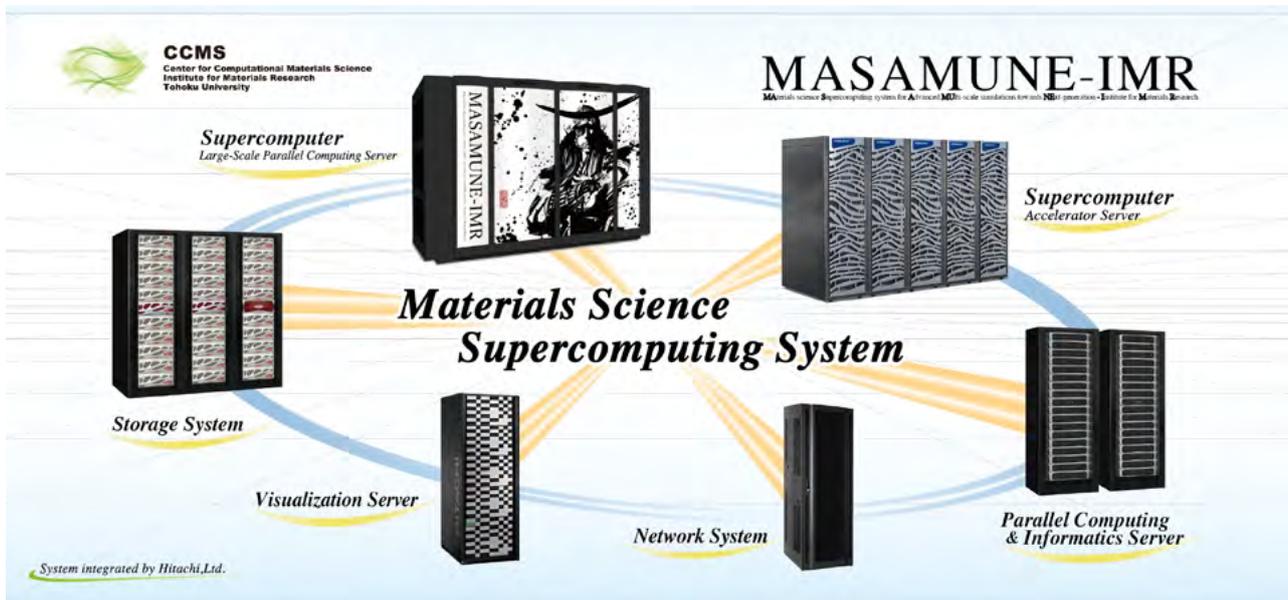


図2. 新スーパーコンピューティングのシステム構成図

表1. スーパーコンピュータのハードウェア構成

| システム名 | スーパーコンピュータ | |
|---------|---|---|
| 機種名 | Cray XC50-LC | Cray CS-Storm GT500 |
| サーバ台数 | 計算ノード : 293 I/O ノード等 : 27 合計 : 320 | 29 |
| CPU | Intel Xeon Gold 6150 ・演算性能 : 1.55 TFLOPS ・周波数 : 2.7 GHz ・CPU コア数 : 18 コア ・搭載数 : 2 基 / サーバ | Intel Xeon Gold 6150 ・演算性能 : 1.55 TFLOPS ・周波数 : 2.7 GHz ・CPU コア数 : 18 コア ・搭載数 : 2 基 / サーバ |
| アクセラレータ | — | NVIDIA Tesla V100 for PCIe ・演算性能 : 7.0 TFLOPS |

| | | |
|---------------|---|--|
| | — | ・ GPU コア数 : 5,120 コア ・ 搭載数 : 10 基 / サーバ |
| 主記憶容量 | 768 GiB/ サーバ | 768 GiB/ サーバ |
| インターコネクト | Aries (片方向 15.75 GB/s) | InfiniBand EDR(片方向 12.5 GB/s) |
| システム総演算性能 | 3.03 PFLOPS (CPU性能: 1.00 PFLOPS, GPU性能: 2.03 PFLOPS) | |
| システム総 CPU コア数 | 11,592 コア | |
| システム総 GPU コア数 | 1,484,800 コア (290 基) | |
| システム総主記憶容量 | 243.7 TiB | |

表 2. 並列計算・インフォマティクスサーバのハードウェア構成

| | | |
|---------------|---|--|
| システム名 | 並列計算・インフォマティクスサーバ | |
| 機種名 | HPE ProLiant DL360 Gen10 | |
| サーバ台数 | 29 | |
| CPU | Intel Xeon Gold 6154 ・ 周波数 : 3.0 GHz ・ CPU コア数 : 18 コア ・ 搭載数 : 2 基 / サーバ | |
| 主記憶容量 | 576 GiB/ サーバ | |
| システム総演算性能 | 100.22 TFLOPS | |
| システム総 CPU コア数 | 1,044 コア | |
| システム総主記憶容量 | 16.3 TiB | |

表 3. ストレージシステムのハードウェア構成

| | | |
|-------|------------------------|---------------------------|
| システム名 | ストレージシステム | |
| 機種名 | DDN EXAScaler (ES14KX) | DDN GRIDScaler (SFA7700X) |
| 実効容量 | 4.0 PB | 435TB |

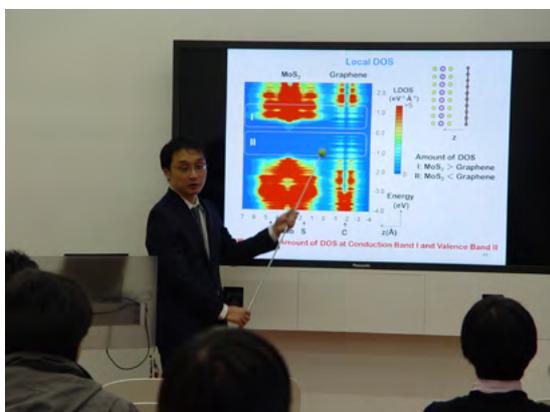
セミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」の開催

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。1, 2月、そして4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.10 2018年1月19日(金) 分子科学研究所 飯田 健二助教 (信定 克幸准教授代理)
「光励起電子ダイナミクスの第一原理計算と
光・電子融合デバイス設計への展開」
- ・ No.11 2018年2月23日(金) 北海道大学大学院理学研究院 武次 徹也教授
「理論計算による未知触媒開発と未知反応機構解明」
- ・ No.12 2018年4月25日(水) 核融合科学研究所 伊藤 篤史准教授
「マルチハイブリッドシミュレーションによる
プラズマ - 物質相互作用現象への挑戦」

今後のセミナーの予定

- ・ No.13 2018年5月29日(火) 14:00～15:30
横浜国立大学大学院工学研究院 大野 かおる教授 「第一原理フェーズ・フィールド法の提案」
 - ・ No.14 2018年6月18日(月) 15:00～16:30 東京大学大学院工学系研究科 山下 晃一教授
 - ・ No.15 2018年7月31日(火) 14:00～15:30 東京大学大学院工学系研究科 有田 亮太郎教授
- ※詳細は計算材料学センターまでお問合せください。



1月19日 飯田助教の講演の様子



2月23日 武次教授の講演の様子



4月25日 伊藤准教授の講演の様子

平成 29 年度の計算材料学センター見学者

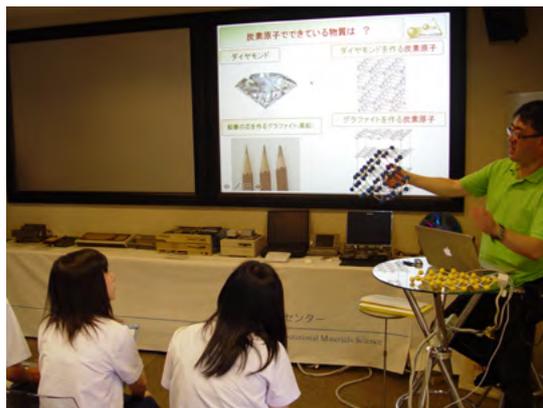
期間 :2017 年 4 月～ 2018 年 3 月

| 見学日 | 見学者 | 所属 / 会議など |
|------------------|-------------------|-----------------------------------|
| 2017 年 5 月 8 日 | 久保 百司 氏 他 7 名 | 東北大学金属材料研究所 |
| 2017 年 5 月 29 日 | 久保 百司 氏 他 13 名 | CREST |
| 2017 年 6 月 16 日 | 丸山 伸吾 氏 | 東北大学工学研究科松本研究室 |
| 2017 年 6 月 30 日 | 菊地 亮太 氏 他 2 名 | 富士通研究所 |
| 2017 年 7 月 21 日 | 青森県高校生 34 名 | 青森県立八戸北高校 |
| 2017 年 8 月 7 日 | 青森県高校生 29 名 | 青森県立三本木高校 |
| 2017 年 9 月 29 日 | 仙台市高校生 41 名 | 宮城県立仙台向山高校 |
| 2017 年 10 月 3 日 | 名古屋大学院生 2 名 | 名古屋大学 |
| 2017 年 10 月 17 日 | 星 勝徳 氏 | 岩手大学 |
| 2017 年 10 月 27 日 | 小泉 雄一郎 氏 他 6 名 | 東北大学金属材料研究所千葉研究室 マレーシア大学 |
| 2017 年 11 月 10 日 | 伊藤 賢 氏 他 2 名 | 文科省科学技術学術政策局 人材政策課人材政策推進室 |
| 2017 年 11 月 10 日 | 岩橋 建輔 氏 | 分子科学研究所 |
| 2018 年 2 月 1 日 | SIP 8 名 | SIP 科学技術振興機構 |
| 2018 年 2 月 23 日 | 武次 徹也 氏 | 北海道大学大学院理学研究院 |
| 2018 年 3 月 12 日 | アイシン・エイ・ダブリュウ 5 名 | アイシン・エイ・ダブリュウ株式会社 |
| 2018 年 3 月 26 日 | 陳 迎 氏 他 8 名 | 東北大学工学研究科陳研究室 東北大学金属材料研究所毛利研究室 |

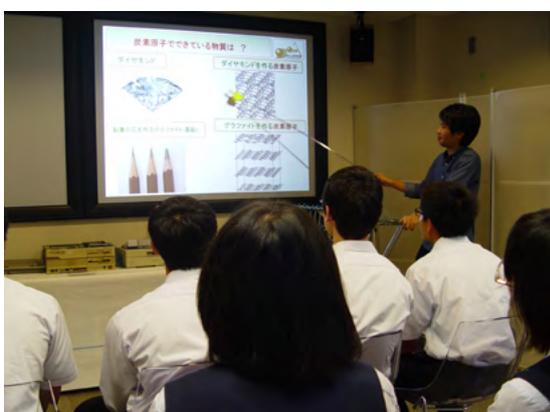
見学者総数 167 名



2017年5月29日 CREST 13名



2017年7月21日 八戸北高校 34名



2017年8月7日 三本木高校 29名



2017年9月29日 仙台南山高校 41名

平成 29 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。

平成 29 年度の技術支援内容と件数について、所内 11 研究室および、所外 47 研究機関へ合計 261 件の支援を行いました（表 4）。

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 4. 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 | 11 研究室 | 101 |
| 学内 | 6 研究機関 | 39 |
| 国内の研究機関 | 14 研究機関 | 50 |
| 国外の研究機関 | 27 研究機関 (13 ヶ国) | 71 |
| 合 計 | 58 | 261 |

日本金属学会で本センター職員が日本金属学会研究技術功労賞を受賞

2018年3月19日に開催されました(社)日本金属学会2018年春期(第162回)大会において、三浦重幸技術職員が「第49回日本金属学会研究技術功労賞」を受賞しました。本受賞は以下の功績によるものです。

受賞者は1992年7月に金属材料研究所に入所して以降、原子力材料の開発研究及び放射性物質を利用した材料物性研究並びに材料科学研究に特化した大型計算機を利用した計算材料科学の研究支援業務に従事し、コバルト-57等の密封放射性同位元素を使用したメスバウア分光による材料物性の測定・解析、アジア計算材料学コンソーシアムへの国際的なスーパーコンピュータ利用環境提供等、材料科学分野において放射線及び計算機技術者として幅広い研究支援を行い、数多くの研究開発等に大きく貢献しました。

スーパーコンピューター SR16000 稼働終了

2012年4月から2018年4月まで活躍したスーパーコンピューティングシステムのサービスが終了しました。2018年4月16日から7月31日まで旧システム撤去と新システム導入、構築を行い、8月1日から新システムのサービスを開始予定です。



「スパコン」と記念撮影

新スーパーコンピューティングシステムの更新作業状況について

前スパコンシステムの撤去が4月16日から行われ、その後、冷却設備工事や空調機およびUPSの更新作業を行いました。5月のGW以降にスーパーコンピュータ棟に、スーパーコンピュータやサーバ、ストレージなどが搬入され、現在は、それらハードウェアの調整を行っている最中です。これと並行して、ネットワーク機器とネットワークの配線なども整備されています。システムの構築にあたっては納入業者決定後、直ぐにプロジェクトチームを立ち上げ、昨年度12月より設計内容の検討を開始しました。現在、設計内容に沿って構築作業を進めているところであり、8月1日の稼働に向け、納入のベンダーチームと計算材料学センターのチームで構築と運用について鋭意進めています。

新スーパーコンピューティングシステムの利用開始まで、もうしばらくお待ちくださいますようお願いいたします。



撤去され積み込まれるSR16000 (4月18日)



新スパコンの搬入 (5月12～14日)



スパコンの調整 (5月18日)



ストレージサーバの調整 (5月18日)

新任教員あいさつ

今年度4月に計算材料学センターの准教授として着任いたしました、鈴木通人と申します。これまで、強相関電子系物質と呼ばれる物質群に対する第一原理計算手法の開発や、物性理論手法を活用した物性の研究などに取り組んできました。こちらではスーパーコンピュータの全国共同利用施設としての利用支援と管理・運営に加え、計算材料学センター所属の教員として、大規模計算を活用した研究成果を積極的に発信していくことで、計算材料学コミュニティの発展に貢献することができればと思っております。また、スーパーコンピュータが身近となるこれまでとは異なる環境の中、久保先生や技術職員の方たちの力をお借りしながら、研究分野の面でも計算技術の面でも、次々と新しいことに挑戦して行きたいと思っております。

センター職員として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、精一杯努力していく所存ですので、皆様のご支援・ご指導の程、よろしくお願い申し上げます。



准教授 鈴木 通人

新職員あいさつ

この春より計算材料学センターに勤務しております齋藤香菜子と申します。

普段センターでは主に事務手続きなどを担当していますが、先日、スーパーコンピュータの入替の場面を目の当たりにし、それまで遠い存在だったスーパーコンピュータを身近な存在として感じるようになり、少しずつでもスーパーコンピュータに関する知識を深めて行ければと思っているこの頃です。

また、センター内の私のデスクの脇には小窓があり、現在はその窓から見える新緑がとてもきれいで、これからの四季折々の風景が業務の合間のひと時の楽しみになりそうです。

慣れないうちは皆さまにご迷惑をおかけすることもあるかもしれませんが、日々努力してまいりますので、よろしくお願い致します。



事務補佐員 齋藤香菜子

新職員あいさつ

このたび、6年ぶりに計算材料学センターに戻ってきました技術職員の三浦重幸です。どうぞ、よろしくお願いいたします。

私は1998年7月から2012年3月まで約14年間、計算材料学センターで仕事をさせていただいておりましたが、2012年4月から金研の技術職員組織であるテクニカルセンターの組織運営に関する仕事を担当することになったため、計算材料学センターから企画調整室に異動し、技術棟の住人となりました。その後、1年間、テクニカルセンターの副センター長兼企画調整室長としてセンター長を補佐しつつ、同センター全体の組織運営に関わる各種業務を担当させていただきました。続いて、翌年の2013年4月から5年間、テクニカルセンター長として同センターの組織運営業務を務めさせていただき、本年2018年3月末日に定年退職いたしました。そして、本年4月1日より金研テクニカルセンターの再雇用職員として採用していただき、再び、計算材料学センターで仕事をさせていただくことになりました。



技術職員 三浦 重幸

今年度は計算材料学センターのスーパーコンピュータの更新時期となっており、4月から7月にかけて現行システムの撤去、新システムの搬入・設置等といろいろと忙しい時期が続きますが、8月からまた最新のスパコンシステムによる研究環境が提供できるようになるということを考えますと、とてもやりがいのある仕事に関わらせていただくことを大変嬉しく思っております。振り返ってみますと、私は計算材料学センターのスパコンシステム更新に縁があるようでして、以前に在籍しておりました約14年の間に実施された三度のスパコン更新に関わらせていただきましたし、そしてまた偶然にも今年度のこの更新時期に再び計算材料学センターで仕事をさせていただくことになり、結果として計算材料学センターの全てのスパコン更新に関わらせていただくこととなります。

こうして6年ぶりに技術業務の現場に戻ってきましたので、早めに以前の勘を取り戻し、さらに最新のコンピュータ・情報関連の知識・技術等も習得しまして、計算材料学センターの利用者のみなさまの研究支援に貢献していけますよう、頑張っまいますので、どうぞよろしくお願いいたします。

計算材料学センターだより No.29

2018年5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



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 <http://www.ccms.imr.tohoku.ac.jp/>

E-mail ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp