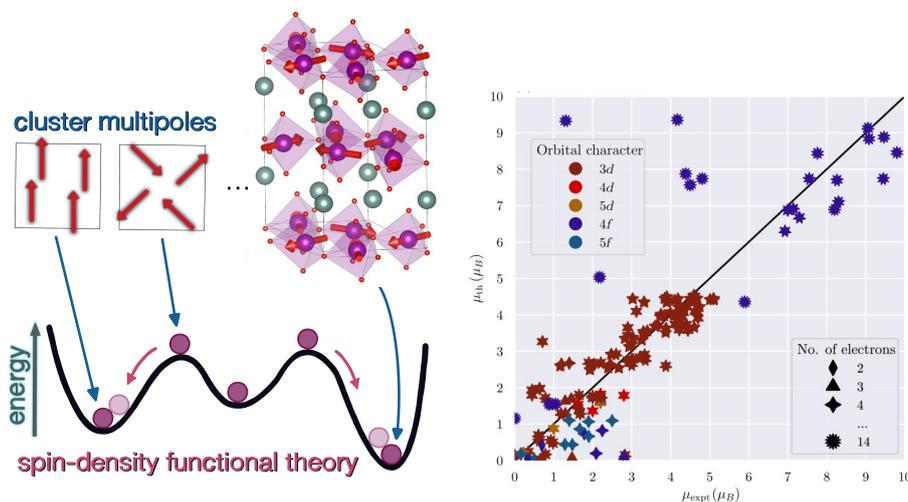


# 計算材料学センターだより



■ *Ab Initio* Prediction of Magnetic Structures Based on Cluster-Multipole Theory

## 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3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
- ・ 高速化支援サービスの成果
- ・ 研究成果の紹介
- ・ AVS/Express 講習会の開催
- ・ マニュアルをリニューアルしました
- ・ 展示用ディスプレイをリニューアルしました
- ・ 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2年度 計算材料学センター見学者
- ・ 令和2年度 計算材料学センター技術支援の実績

CCMS  
NEWS  
35

表紙の図について

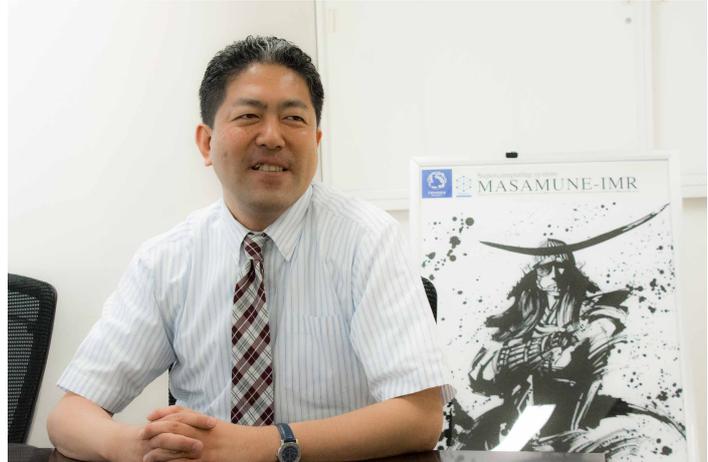
### ■ *Ab Initio* Prediction of Magnetic Structures Based on Cluster-Multipole Theory

In a magnetic material, magnetic moments align themselves with their neighbors in very specific formations. While the magnetic structure determines the physical properties of magnets, accurate prediction of the spin configuration is one of the grand challenges in solid state physics. This is due to the presence of many degrees of freedom in the system. In this study, we devise the cluster multipole (CMP) theory to treat the degrees of freedom in a physically meaningful way, and create an exhaustive list of candidate magnetic structures for which we performed a high-throughput calculation with ~3,000 possible magnetic structures. With the combination of the CMP theory and the local spin-density approximation (LSDA) for noncollinear magnetism, our study lays a solid foundation for the *ab initio* predictions of various magnetic properties by showing that (1) the CMP expansion administers an exhaustive list of candidate magnetic structures, (2) CMP+LSDA can narrow down the possible magnetic configurations to a handful of computed configurations, and (3) LSDA reproduces the experimental magnetic configurations with an accuracy of  $\sim 0.5\mu\text{B}$ .

□ M.-T. Huebsch, T. Nomoto, M.-T. Suzuki, R. Arita, Phys. Rev. X **11**, 011031 (2021).

## センター長あいさつ

計算材料学センター 久保百司



令和2年7月から令和2年度のスーパーコンピュータ「富岳」の試行的利用課題の募集が開始され、令和2年8月からは令和3年度の「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、さらに令和3年5月13日締切で令和3年度の2回目の「富岳」利用研究課題の募集が行われるなど、本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りました。また、令和3年度スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムの公募が、令和3年6月9日締切で開始されており、スーパーコンピュータ「富岳」を活用した多様な研究分野での成果創出への期待が高まっています。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、本センターのスーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」はその第2階層として、計算材料科学分野におけるコンピュータ資源の提供とともに、分野振興、コミュニティ形成、人材育成などの活動を行うミッションを有しており、その使命を果たすべく多彩な活動を積極的に続けております。特に令和2年度から始まったスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムは、成果創出に注力したプロジェクトであり、これまでのHPCI戦略プログラムやポスト「京」プロジェクトのように、分野振興、コミュニティ形成、人材育成などの活動予算が十分に組み込まれていないことから、計算材料科学分野においては、本センターを中心として、分野振興、コミュニティ形成、人材育成を推進していく必要性和その使命を強く感じております。

そのような状況下において、本センター、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の4センターを運営機関とする「計算物質科学協議会」では、令和2年8月に計算物質科学関連の科学技術政策に関する提言書を取りまとめ、文部科学省研究振興局に提出致しました。提言書の中では、「HPCI関連事業」、「マテリアル革新力強化戦略事業」の実施課題に対して、(1) 計算データのリポジトリと利活用促進事業、(2) 戦略的データ利活用のためのソフトウェア開発事業、(3) 実験研究者のスパコン利活用促進事業の推進と展開に関する提言を行いました。さらに、「計算物質科学分野の動向と今後のありかた」として、(1) 基礎・基盤科学技術としての計算物質科学、(2) 合成・計測・計算の連携、(3) マテリアルズインフォマティクス、(4) 計算物質科学の産業応用・展開、(5) コミュニティソフトウェアの開発・普及、(6) 若手人材の育成、(7) 計算物質科学の裾野を拡げる計

算機環境の7つの観点から提言書をまとめております。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、提言書の詳細をご覧頂ければと思います。さらに、令和3年度の計算物質科学協議会の活動として、マテリアル DX の将来展望に関する提言書の作成を、現在進めているところです。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、本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し込みをして頂き、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、昨年度に引き続きコロナ禍の状況のため、本センターの見学と対面を基本とするセミナーシリーズ「スパコンプロフェッショナル」は、現在お休みをさせて頂いております。ご理解を頂ければ有難く思います。その一方で、私がコンソーシアム長を仰せつかっております計算物質科学人材育成コンソーシアム（PCoMS）が共催させて頂いた第7回実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー「計算材料科学&マテリアルズ・インフォマティクス入門」（令和2年9月7日開催）には140名の方がご参加頂き、さらに令和3年2月15～16日に開催させて頂いたPCoMS シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会2020には84名の方がご参加頂きました。このように、全国的に見ても計算材料科学関連のオンラインセミナーへの参加者数は、対面の場合とは比較にならないほどの多くの方々の参加を頂いております。これは、オンラインという参加しやすい形態のために参加者数が増えているのみならず、with コロナ、after コロナの時代における、スーパーコンピュータ活用への関心の急速な広がり、さらには計算材料科学分野への大きな期待の表れであると考えております。本センターでは、世界的なマテリアル DX の潮流の中で、本センターが果たすべき役割を明確にしながら、計算材料科学分野のさらなる発展のために本センターが取るべき方策を具体化して行きたいと思っております。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

### 大規模並列計算サーバ

#### 1. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 19.1.3.304 をインストールしました。

使用法は以下のマニュアルの「コンパイラ・ライブラリの使用方法」をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user\\_manual:supercomputer:compilers\\_libraries](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:supercomputer:compilers_libraries)

#### 2. Intel MKL

Intel MKL 19.1.3.304 をインストールしました。

使用法は以下のマニュアルの「コンパイラ・ライブラリの使用方法」をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user\\_manual:supercomputer:compilers\\_libraries](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/doku.php?id=user_manual:supercomputer:compilers_libraries)

### アクセラレータサーバ

#### 1. Intel コンパイラ

Intel コンパイラ 19.1.3.304 をインストールしました。

使用法は以下のマニュアルの「コンパイラ・ライブラリの使用方法」をご覧ください。

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

#### 2. Intel MKL

Intel MKL 19.1.3.304 をインストールしました。

使用法は以下のマニュアルの「コンパイラ・ライブラリの使用方法」をご覧ください。

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

# 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 29Oct20 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「LAMMPS」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://lammmps.sandia.gov/>

### 2. 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 6.6、6.7 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「QUANTUM ESPRESSO」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/>

### 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 6.1.2 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「VASP」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/>

#### 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 9.2.2 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の「ABINIT」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. 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の「SIESTA」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/>

#### 6. 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 8.1.0 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の「CP2K」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>

#### 7. 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 2020.101 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の「ADF」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/>

## 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 29Oct20 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「LAMMPS」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://lammmps.sandia.gov/>

### 2. 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 6.6、6.7 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「QUANTUM ESPRESSO」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/>

### 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 6.1.2 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「VASP」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/>

### 4. 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ル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の「SIESTA」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/>

## 可視化サーバ

### 1. ADF-GUI

ADF用のグラフィカルユーザーインターフェースである ADF-GUI を 2020.10.1 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の「ADF-GUI」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.scm.com/>

## 令和 3 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。

2021 年度の定期保守予定：

- ・ 2021 年 5 月 31 日 (月)
- ・ 2021 年 8 月 6 日 (金)
- ・ 2021 年 9 月 27 日 (月)
- ・ 2021 年 11 月 29 日 (月)
- ・ 2022 年 1 月 31 日 (月)
- ・ 2022 年 3 月 22 日 (火)

### 片平キャンパスの計画停電の予定

2021 年 8 月 8 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>

## 高速化支援サービスの成果

計算材料学センターでは 2019 年度より大規模並列計算サーバおよびアクセラレータサーバの有効利用を目的として、以下の高速化支援サービスを実施しています。

### (1) プログラム並列化・高速化支援サービス

申請者が独自に開発したプログラムで、性能が見込まれるものに対して、大規模並列計算サーバでのチューニング（並列化、対応ライブラリへの接続など）を行います。

### (2) GPGPU 移植・高速化支援サービス

申請者が独自に開発した並列化済みのプログラムで、GPGPU への対応による性能向上が見込まれるものに対して、GPGPU への移植・チューニング（OpenACC/CUDA 化、CUDA 対応ライブラリへの接続など）を行います。

申請は公募制となっており、計算材料学センターで審査を行って採択の可否を判断させていただき、それぞれ年間最大 2 件を採択しています。2020 年度はプログラム並列化・高速化支援サービスに 1 件、GPGPU 移植・高速化支援サービスに 2 件の申請があり、いずれも採択しました。

プログラム並列化・高速化支援サービスで採択した全電子混合基底法のプログラムでは、SIMD 拡張命令を含んだコンパイルオプションの見直し、OpenMP によるスレッド並列の最適化を実施し、約 13% の性能向上が得られました。

GPGPU 移植・高速化支援サービスで採択した汎関数線り込み群計算を行うプログラムでは、OpenACC 化を実施し、CPU での実行と比較して約 3 倍の性能向上が得られました。また、連続時間モンテカル口法のプログラムでは、行列の演算部分の CUDA 化を実施しました。

2021 年度の募集は終了いたしました。申請状況によっては追加募集する可能性もございますので、その際はご連絡差し上げます。詳細につきましては、以下のサイトをご覧ください。

プログラム並列化・高速化支援サービス：

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/xc50.html>

GPGPU 移植・高速化支援サービス：

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

## 研究成果の紹介

東京大学大学院新領域創成科学研究科の Marie-Therese Huebsch 氏、同大学大学院工学系研究科の野本拓也助教、有田亮太郎教授、東北大学金属材料研究所の鈴木通人准教授らは、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」上でさまざまな磁性体を示す複雑な磁気構造を高精度に効率よく予測できる理論計算システムを開発し、実験による磁気構造データベースの解析を通して磁気構造の予測性能に関するベンチマーク計算を実施しました。

この研究成果は学術誌 Physical Review X に掲載され、「理論計算による高効率な磁気構造予測手法の開発に成功」として令和 3 年 2 月 18 日に東大・理研・東北大・阪大などが共同でプレスリリースしています。プレスリリースの詳細は、下記の東北大学、または金研の Web サイトをご参照ください。

東北大学 Web サイト

<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2021/02/press20210218-01-theory.html>

金研 Web サイト

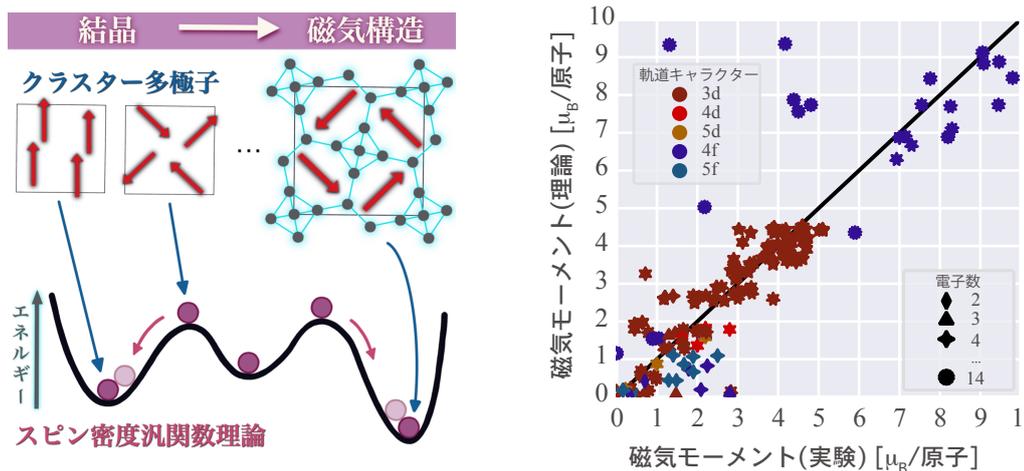
<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1303.html>

このプレスリリースを受けて、日本経済新聞電子版などのメディアで本研究成果が紹介されました。

[https://www.nikkei.com/article/DGXLRSP605368\\_Y1A210C2000000/](https://www.nikkei.com/article/DGXLRSP605368_Y1A210C2000000/)

本研究に関する解説動画をセンターの Web 上で公開しておりますので、研究内容にご興味をお持ちの方はご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/researcher/research\\_video0416.html](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/researcher/research_video0416.html)



磁気構造予測の概念図 (左図、共同プレスリリースより引用)。クラスター多極子法と呼ばれる群論の手法を使って結晶対称性に適合した磁気構造をスクリーニングし、スピン汎関数理論に基づく第一原理計算による安定性評価から磁気構造を予測する。この理論システムによって実験による磁気構造のデータベースを解析し、理論的に予測された磁気モーメントが多くの場合に実験と良く一致することなどを示している (右図)。

センターだより第 34 号「スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果」でご紹介しました東北大学金属材料研究所の久保百司教授、王楊助教（現：東北大学大学院工学研究科）、東北大学大学院工学研究科の足立幸志教授、および中国上海海洋大学の許競翔副教授のグループによる、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用した成果が、令和 2 年 12 月 22 日付日刊工業新聞に「東北大、スパコンで微小機械システム材料の摩耗予測式」とのタイトルで掲載されました。

また、同研究成果の論文が Advanced Science 誌の裏表紙に選ばれました。

Advanced Science 誌の Web サイト

<https://doi.org/10.1002/advs.202170010>

この他にも、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の論文が Physical Chemistry Chemical Physics 誌の裏表紙に選ばれました。

Physical Chemistry Chemical Physics 誌の Web サイト

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2021/cp/d1cp90041b>

日刊工業新聞 掲載日：2020 年 12 月 22 日 25 ページ

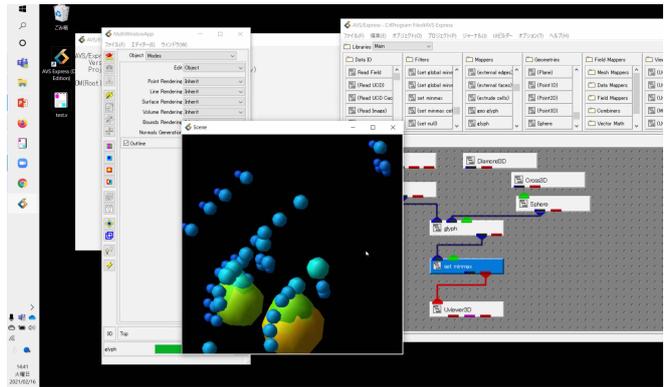
## AVS/Express 講習会の開催

計算材料学センターでは、「スパコンで得られたデータを簡単に可視化したい」というニーズに対応するため、汎用3次元可視化ソフトウェアであるAVS/Expressを導入しております。AVS/Expressでは、モジュールと呼ばれる様々な機能を持つパーツをマウス操作で組み合わせるだけで簡単に可視化を行うことができます。

また、当センターではAVS/Expressを活用していただくために無料の講習会を毎年開催しております。

今年度は2月16日に開催し、AVS/Expressの概要、実習形式での基本的な操作やモジュール使用方法の解説、そして計算材料学センターで開発したモジュールの紹介を行いました。

例年はスーパーコンピュータ棟を会場として開催しておりましたが、今年度は新型コロナウイルスの感染状況を考慮し、Zoomを使用したWEB会議での開催となりました。初のオンライン開催でしたが、金研の所内外より4名に参加していただきました。



AVS/Express 講習画面

## マニュアルをリニューアルしました

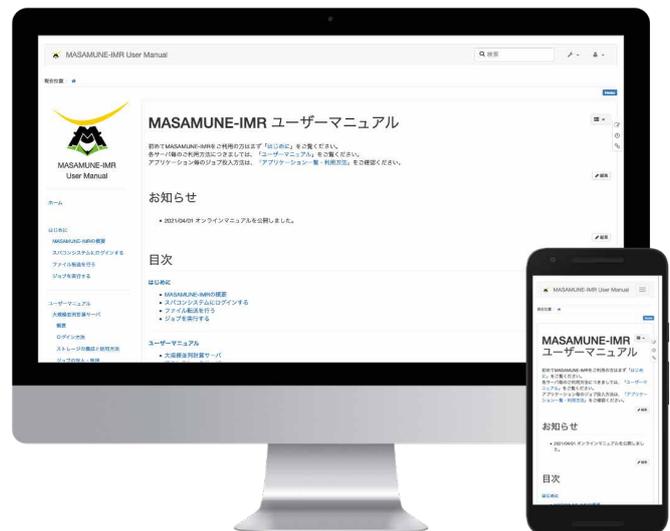
この度、計算材料学センターでは、スーパーコンピューティングシステムのマニュアルを従来のpdf版からWeb版にリニューアルしました。

新しいWebマニュアルではセクション毎にページが分かれており、従来のマニュアルよりも必要な情報を見つけやすくなっています。検索機能を使用することで、特定の文字列が含まれるページを探すことも可能です。

また、便利な機能として、コードブロック右上のアイコンをクリックするだけでコマンドやスクリプトをコピーできるようになりました。

さらに、新たに「はじめに」の章を設け、スーパーコンピューティングシステムを初めて利用するユーザー向けのチュートリアルを提供しています。このチュートリアルを通して、システムへのログインからジョブの実行までの一連の操作を習得できます。

マニュアルのリニューアルに伴い、旧マニュアルページのリンクが変更となりましたが、こちらも今まで通りアクセス可能ですので、必要に応じてご利用ください。



## 展示用ディスプレイをリニューアルしました

1994年(平成6年)に計算材料学センター棟に金属材料研究初のスーパーコンピューティングシステム(HITACHI HITAC S-3800)が導入されてから27年。当時の世界最速CPU搭載の水冷基板をはじめ、この27年間の4度のシステム更新毎に普段は見ることのできないスーパーコンピュータの基板やその当時の模型等を加えて展示し、最新テクノロジーと計算材料学センターの歴史を見学者に伝えてきました。最近ではディスプレイ内の展示スペースが手狭になり次のシステム更新時には新しいものを展示することができなくなってしまったため展示用ディスプレイをリニューアルしました。



展示用ディスプレイ2台を導入しました

興味を持って実際に見たり聞いたりする見学は大事なことと思います。コロナ禍で見学再開にはまだ道のりは厳しいですが、見学再開の折には計算材料学センターにお気軽に見学に来て頂ければと思います。

## 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。

令和2年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、開催していません。

開催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。

## 令和 2 年度 計算材料学センター見学者

期間：2020 年 4 月～2021 年 3 月

令和 2 年度は新型コロナウイルス感染拡大防止のため、見学者の受け入れを行っていません。

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。

## 令和 2 年度 計算材料学センター技術支援の実績

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 2 年度は所内 7 研究室および所外 67 研究機関へ合計 462 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	7 研究室	81
学内	6 研究機関	90
国内の研究機関	31 研究機関	220
国外の研究機関	30 研究機関 (16 ヶ国)	71
合 計	74	462

計算材料学センターだより No.35

2021年 6月 4日 発行



**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](mailto:ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp)