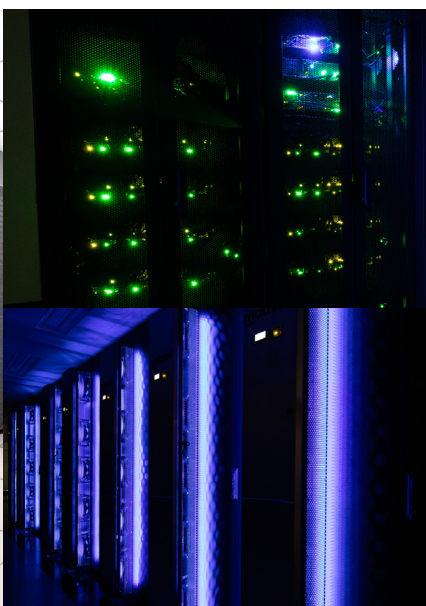


計算材料学センターだより

MASAMUNE-
Materials science Supercomputing system for Advanced Multi-scale simulations towards Next-generation IT



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更新
- ・ 新スーパーコンピューティングシステムで提供するアプリケーション
- ・ 2025 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
- ・ 2024 年度の計算材料学センター見学者
- ・ 2024 年度の計算材料学センターの技術支援の実績

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、2025 年 6 月 2 日（月）から新しいスーパーコンピューティングシステム “MASAMUNE-弐” (MAterials science Supercomputing system for Advanced MULTI-scale simulations towards NExt-generation II) の運用を開始致しました。ユーザーの皆様には、総理論演算性能 4PFLOPS と、より高速になった “MASAMUNE-弐” を活用して、計算材料科学分野における新たなイノベーションを創出していただければと思います。2024 年 9 月 19 日（木）から、スーパーコンピューティングシステムの更新作業のために、約 8 ヶ月もの間、ユーザーの皆様には計算資源をご提供できずにご不便をおかけしましたことを深くお詫び申し上げます。また、新システムの稼働に向けて、多大なご尽力をいただきましたセンター職員、および関係各位に厚く御礼申し上げます。

新しいスーパーコンピューティングシステム “MASAMUNE-弐” の筐体には、17 世紀に仙台を開府した伊達政宗公の勇壮な姿が描かれております。作画をしていただいた御歌頭氏によると、前システムの伊達政宗公の姿は、「仙台藩を開き、これから良い国を創ろうと思案している様子」を描いたのに対し、新システムの伊達政宗公の姿は「構築した考えを実行するという意味で、前を見据えている様子」を表現したとのことです。

新しいスーパーコンピュータは、

- 1) Intel 社製の Xeon Platinum 8480+ を搭載した HPE Cray XD220v (127 ノード)
- 2) Intel 社製の Xeon Platinum 8490H を搭載した HPE Scale-up Server 3200 (2 ノード)
- 3) NVIDIA 社製の GPU H100 と Intel 社製の Xeon Platinum 8480+ を搭載した HPE Cray XD670 (11 ノード)

の 3 つのシステムから構成されています。

- 1) の HPE Cray XD220v は、汎用ノードと大メモリノードに分かれており、大メモリノードではその名の通り 2.0 TiB/ ノードの大メモリを使用可能です。
- 2) の HPE Scale-up Server 3200 は、60 Core の CPU が 16 基 / ノード搭載されており、メニーコアサーバにより 960 並列までの大規模並列計算を単一ノードで実行可能です。
- 3) の HPE Cray XD670 は、GPU を活用した高速計算を志向されるユーザーのためのシステムです。

ユーザーの皆様には、個々のニーズにあわせて、3 つのシステムを有効にご活用いただければと思っています。

一方、2023 年 4 月から 3 年間のプロジェクトとしてスタートした文部科学省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 (DDCoMS)」(課題責任者：久保百司) は、現在、代表機関：東北大学 11 名、協力機関：14 機関 85 名、連携機関：9 機関 22 名が参画する総勢 118 名の組織体制で運営しており、100 名を超える方々のご尽力・ご協力を得ながら精力的な活動を進めております。本プロジェクトは、2022 年 7 月に文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) 事業」に採択された A) 東北大学拠点 (構造材料)、B) 物質・材料研究機構拠点 (磁性材料)、C) 東京大学拠点 (電気化学材料)、D) 東京科学大学拠点 (エレクトロニクス材料)、E) 京都大学拠点 (バイオ・高分子材料) の 5 拠点の計算科学グループが共同で、スーパーコンピュータ「富岳」によってのみ実現可能な超大規模計算、超長時間計算、超大量計算に関するシミュレーション技術の開発をベースに、DxMT 事業の 5 拠点間の横串連携の役割も果たしながら、新たなデータ駆動型研究手法を創出することを目指としています。2025 年 3 月 7 日 (金) には東北大学金属材料研究所の講堂にて、「2024 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 DDCoMS 公開シンポジウム / 計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS 次世代研究者セミナー」の名称で、本 DDCoMS プロジェクトの成果報告会を対面にて開催させていただきました。シンポジウムの冒頭には、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムを所管する文部科学省研究振興局計算科学技術推進室の栗原潔室長と DxMT 事業の栗原和枝 PD (東北大学教授) から、対面にてご挨拶をいただくとともに、シンポジウムの最後には、京セラ株式会社の執行役員 / 研究開発本部長仲川彰一氏に企業からの DDCoMS プロジェクトへの期待についてお話をいただきました。2025 年度はプロジェクトの最終年度となることから少し趣向を変えて、本 DDCoMS プロジェクトの成果報告会を、2025 年 12 月 8 日 (月) ~ 13 日 (土) にパシフィコ横浜で開催される Materials Research Meeting (MRM) 2025 国際会議における「Impact of Supercomputer “Fugaku” to Computational and Data-Driven Materials Science」シンポジウムとして開催させていただきます。海外からも数多くの招待講演者をお呼びするとともに、若手の研究者にも多数発表していただくことで、異分野連携に加えて、若手研究者の活発な人材交流の場にもしたいと思っています。ご興味がありましたら、是非、ご参加いただければ有難く思います。

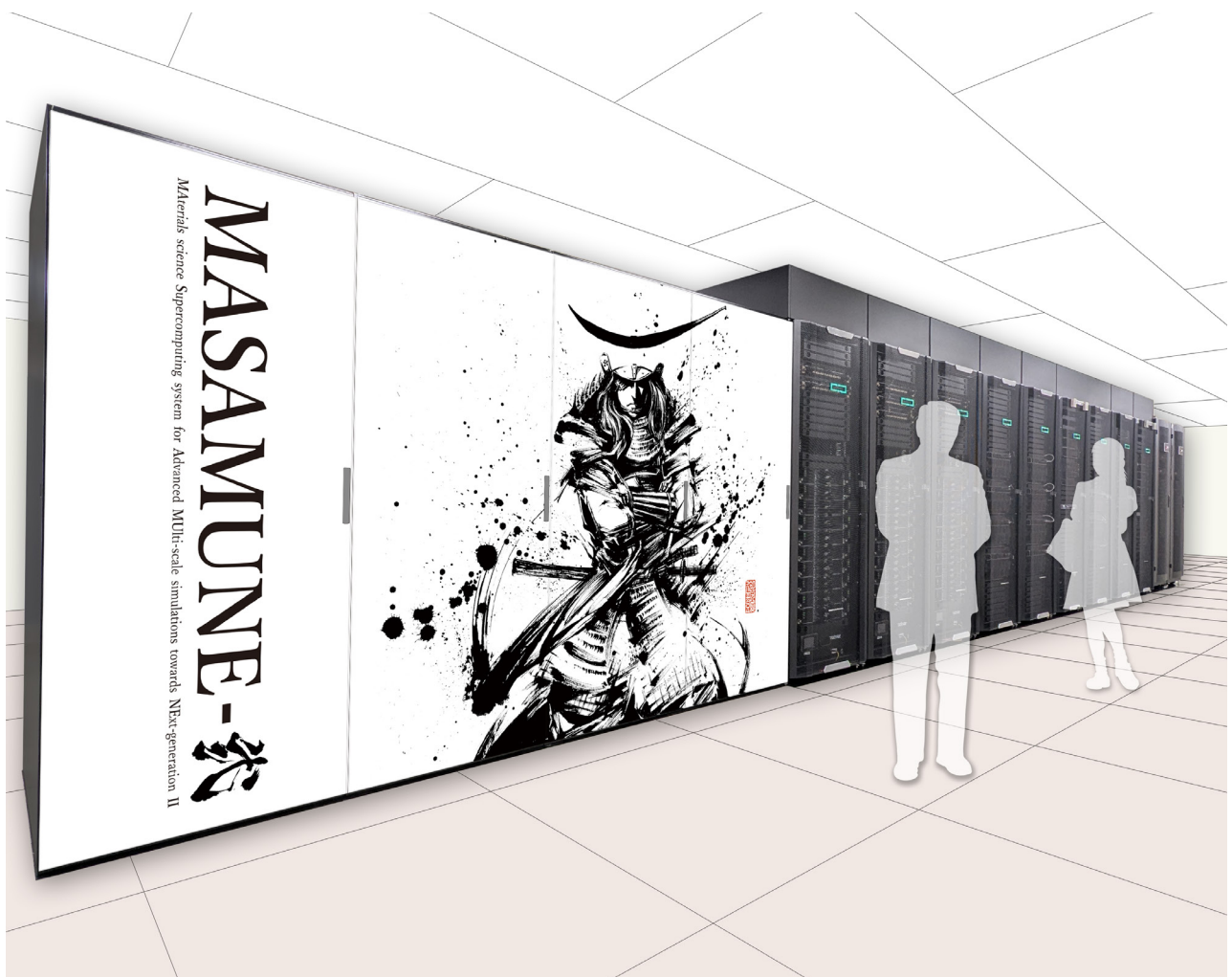
また、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、分子科学研究所、大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³ センターの 4 機関で運営している計算物質科学協議会 (CMSF) は、2025 年度は東北大学金属材料研究所が代表運営機関となることから、本センターが中心となって文部科学省への提言書をまとめていく予定です。今後の計算物質科学の将来動向を見据えた実行力のある提言書を、皆様のご協力のもとに、作成して行きたいと考えております。

本センターでは、2025 年度もセンター職員が一丸となって、DDCoMS、DxMT などの国家プロジェクトと連携・協力を進めながら、計算材料科学コミュニティの分野振興、コミュニティ形成、若手人材の育成などの活動を進めるとともに、新スーパーコンピューティングシステム “MASAMUNE-弐” をユーザーの皆様へ安定かつ効果的にご使用いただけるように努力して行きたいと思っています。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。

スーパーコンピューティングシステム更新

旧スーパーコンピューティングシステムは2024年9月19日に運用を停止し、2025年6月2日より新スーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-弐」(Materials science Supercomputing system for Advanced Multi-scale simulations towards NExt-generation II)の運用を開始致しました。長期間の停止となり、利用者の皆様には大変ご不便をおかけしました。本システムは「人類が目指す未来像として Well-being 社会の創造に加えて、カーボンニュートラル、レジリエンス国家、Society5.0の実現などに寄与すること」を目的としています。また、国際共同利用・共同研究拠点としてスーパーコンピュータの計算資源を最大限に活用した新材料・新物質に関する研究成果を創出し、計算材料科学研究の発展と分野振興を推進していきます。

MASAMUNE-弐は大規模並列計算サーバ及びアクセラレータ搭載サーバを中心として構成され、4.052 PFLOPSの総理論演算性能を有します。旧システムの利用実績と多様化する研究ニーズに応えるべく、スーパーコンピュータとしてHPE Cray XD220v、HPE Scale-up Server 3200及びHPE Cray XD670の3つのシステムを導入しました。前システムと比較してノード当たりのコア数が大幅に増加し、性能も向上しています。



イメージ図

(1) スーパーコンピュータ

・大規模並列計算サーバ：HPE Cray XD220v

HPE Cray XD220v は汎用の CPU サーバで、材料設計用のアプリケーションが多数導入されています。また、ノード当たりの主記憶容量が 512 GiB の汎用ノードと 2.0 TiB の大容量主記憶ノードの構成となっており、メモリを多く使用する計算を実行することが可能です。

機種名	HPE Cray XD220v	
	汎用ノード	大容量主記憶ノード
CPU	Intel Xeon Platinum 8480+ ・ 周波数: 2.0 GHz ・ CPUコア数: 56コア ・ 搭載数: 2基 / ノード ・ 演算性能: 7.168 TFLOPS/ノード	Intel Xeon Platinum 8480+ ・ 周波数: 2.0 GHz ・ CPUコア数: 56コア ・ 搭載数: 2基 / ノード ・ 演算性能: 7.168 TFLOPS/ノード
主記憶容量	512 GiB/ノード	2.0 TiB/ノード
ノード数	120	7
ノード間接続	InfiniBand NDR400 (400 Gbps)	
総理論演算性能	0.910 PFLOPS	

・大規模並列計算サーバ：HPE Scale-up Server 3200

HPE Scale-up Server 3200 は 60 コアの CPU がノード当たり 16 基搭載されたメニーコアサーバで、単一ノードで大規模な並列計算を実行することが可能です。

機種名	HPE Scale-up Server 3200
CPU	Intel Xeon Platinum 8490H ・ 周波数: 1.9 GHz ・ CPUコア数: 60コア ・ 搭載数: 16基 / ノード ・ 演算性能: 58.363 TFLOPS/ノード
主記憶容量	4.0 TiB/ノード
ノード数	2
ノード間接続	InfiniBand HDR200 (200 Gbps)
総理論演算性能	0.116 PFLOPS

- ・アクセラレータ搭載サーバ：HPE Cray XD670

HPE Cray XD670 には高速な GPU が搭載されており、GPU に対応した材料設計用アプリケーションが導入されています。また、AI やデータ科学分野の用途にも適しています。

機種名	HPE Cray XD670
CPU	Intel Xeon Platinum 8480+ ・周波数：2.0 GHz ・CPUコア数：56コア ・搭載数：2基 / ノード ・演算性能：7.168 TFLOPS/ノード
主記憶容量	1.0 TiB/ノード
アクセラレータ	NVIDIA H100 SXM5 ・GPUメモリ容量：80 GB ・メモリ帯域：3,352 GB/s ・搭載数：8基 / ノード ・演算性能：268 TFLOPS/ノード
ノード数	11
ノード間接続	InfiniBand NDR200 (200 Gbps)
総理論演算性能	3.026 PFLOPS

(2) ストレージシステム：DDN EXAScaler

ストレージシステムは利用者のデータを保持・管理します。総ディスク容量は5.07 PBです。利用者のデータのバックアップは行いませんので、必要なデータは各自定期的に退避していただくようお願いします。

機種名	DDN EXAScaler ES400NVX2
実効容量	5.07 PB

新スーパーコンピューティングシステムで提供するアプリケーション

新スーパーコンピューティングシステムで提供するアプリケーションは下表のとおりです。

表 1. 新スーパーコンピューティングシステムで提供するアプリケーション一覧

アプリケーション	大規模並列計算 サーバ	アクセラレータ 搭載サーバ	フロントエンド サーバ 1 (GPU なし)	フロントエンド サーバ 2 (GPU 搭載)
Gaussian 16	○	○		
GaussView 6			○	○
AVS/Express Developer			○	○
Materials Studio	○			
CRYSTAL17	○			
VASP 5	○	○		
VASP 6	○	○		
WIEN2k	○			
SIESTA	○			
ABINIT	○	○		
CPMD	○			
QUANTUM ESPRESSO	○	○		
LAMMPS	○	○		
XCrySDen			○	○
Keras		○		○
TensorFlow		○		○
PyTorch		○		○
日本語対応 TeX			○	○

(○印：当該サーバ上で実行可能)

2025 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

新スーパーコンピューティングシステムは、3 か月に 1 度、定期保守を行う予定です。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都度、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します。

片平キャンパスの計画停電の予定

2025 年 8 月 3 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/masamune/maintenance.html>

2024 年度の計算材料学センター見学者

期間：2024 年4月～9月（旧システムが9月をもって運用終了したため）

見学日	見学者	
2024 年 4月18日	東北大学金属材料研究所材料分析研究コア技術職員	2名
2024 年 5月 6日	東北大学材料科学総合学科学部 1 年生および引率者	31名
2024 年 8月23日	NEDO プロジェクト報告会出席者	16名
2024 年 9月13日	三菱重工株式会社	2名

2024 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。2024 年度は所内 9 研究室および所外 61 研究機関へ合計 334 件の技術支援を行いました（表 2）。

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 2. 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	9 研究室	51
学内	5 研究機関	80
国内の研究機関	30 研究機関	143
国外の研究機関	26 研究機関（13 ヶ国）	60
合計	70	334

表紙

■スーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-弐

墨絵作者コメント

「MASAMUNE-弐」の制作するにあたり意識したことは、伊達政宗の目線の違い。

初代「MASAMUNE-IMR」の絵の伊達政宗は、仙台藩を開き、これから良い国を創ろうと思案してる様子。

「MASAMUNE-弐」の伊達政宗は、構築した考えを実行するという意思で、前を見据えています。

初代のスーパーコンピュータの意思を 2 代目のスーパーコンピュータに受け継がれることを願い、制作いたしました。

墨絵師御歌頭



計算材料学センターだより No.43

2025 年 6 月 4 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