



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



MASAMUNE-流

MAterials science Supercomputing system for Advanced MUlti-scale simulations towards NExt-generation II

ごあいさつ

計算材料科学センター長 久保 百司

豊かで暮らしやすいWell-beingな社会の創造に加えて、地球温暖化や異常気象を抑制するためのカーボンニュートラルの実現、大規模災害時などに人命を守り迅速に回復するレジリエンス国家の構築、サイバー空間と現実空間を高度に融合したシステムにより経済発展と社会的課題の解決を両立するSociety 5.0の創成など、人類が目指す未来社会の実現に向けて、計算科学・データ科学への期待は益々大きくなってきています。

現在、文部科学省のもとで、日本のフラッグシップスーパーコンピュータ「富岳」を活用した計算科学・データ科学の推進を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムが進められており、本センターを運営機関とする「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)もその一つとして2023年度から、サブ課題A:構造材料、B:磁性材料、C:電気化学材料、D:エレクトロニクス材料、E:パイオ・高分子材料の5つのサブグループ、約120名もの大規模な組織体制で研究開発が進められています。特に、「富岳」でしか遂行できない大規模計算・長時間計算・大量計算に基づく革新的な計算科学手法・データ科学技術の開発が進められています。

本センターのスーパーコンピュータは、「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、「富岳」に直結する第2階層に位置しており、材料科学の発展に貢献することが強く求められています。本センターでは、2025年6月からHPE Cray XD220vとHPE Cray XD670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”MASAMUNE-弐”の稼働をスタートさせました。前システムと比較して、演算性能は4PFLOPSに増強されており、ユーザーの皆様のニーズにあわせた3つのシステムから構成されています。本センターでは、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日本のみならず海外の材料科学コミュニティへ提供するとともに、スーパーコンピュータ用のアプリケーションソフトの開発と材料科学への応用展開を推進する役割を担っており、独創性のあるセンターとして材料科学分野に資する研究を発展させていければと思っています。今後とも、皆様方からのご支援・ご協力を宜しくお願い申し上げます。



計算材料科学スーパーコンピューティングシステム

多様化する計算材料科学の研究ニーズに対応可能な本センターの高性能スーパーコンピューティングシステムは、HPE Cray XD220v とアクセラレータを搭載した HPE Cray XD670 を中心に構成されており、総計算ノード理論演算性能は4PFLOPSとなる材料設計シミュレーション専用のスーパーコンピューティングシステムです。

このシステムでは、理論的な材料設計シミュレーションに必要な各種ソフトウェアを導入し、国内外の材料研究分野の研究者に提供しています。

計算材料科学センターの役割

計算材料科学センターは、1994年の初代スーパーコンピューティングシステム導入以降、システム更新を重ね、金属材料研究所の共同利用施設として計算材料科学分野を中心に利用されてきました。2009年には、全国共同利用・共同研究施設の体制を確立し、材料科学分野の全国共同利用・共同研究拠点として、材料研究への計算資源の提供を通じ、数々の研究成果の輩出に貢献してきました。2018年には全国共同利用・共同研究施設から国際共同利用・共同研究施設に移行し、国際的にも計算材料科学研究の発展と分野振興を推進しています。

さらに2025年のシステム更新によって、これまでの計算材料科学研究における物理現象の予測や物質設計への応用といった要請に加え、マルチスケールシミュレーション、メニーコアサーバによる超大規模並列計算、GPUによるAI for Scienceなど多様化する新しい研究ニーズに応える計算資源の提供が可能となりました。これにより、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、Society 5.0の実現などに寄与することを目的としています。また、スーパーコンピュータを最大限に活用した新材料・新物質に関する最新の研究成果を配信していくことで計算材料科学分野の発展に貢献したいと思っています。

さらに、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業として、スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラムやデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)に参画している研究者への計算資源の提供、計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)の運営による若手人材の育成、さらには計算物質科学協議会(CMSF)の運営機関の一つとしての活動による計算材料科学分野の分野振興、計算材料科学コミュニティの育成など積極的な支援活動を推進しています。



スーパー コンピューティングシステム

スーパーコンピュータの総理論演算性能：4.052 PFLOPS^{*1}

スーパーコンピュータ

■ HPE Cray XD220v

総ノード数 127 nodes
総計算ノード理論演算性能 0.910 PFLOPS
総主記憶容量 74.0 TiB^{*2}

■ HPE Scale-up Server 3200

総ノード数 2 nodes
総計算ノード理論演算性能 0.116 PFLOPS
総主記憶容量 8.0 TiB

■ HPE Cray XD670

総ノード数 11 nodes
総計算ノード理論演算性能 3.026 PFLOPS
CPU 0.078 PFLOPS
GPU 2.948 PFLOPS
総主記憶容量 11.0 TiB



ストレージシステム

■ DDN EXAScaler ES400NVX2

総ディスク容量 5.07 PB

*1: FLOPSは1秒間に実行可能な演算回数を表す単位。1 PFLOPSは1秒間に1000兆回の演算が可能

*2: 1 TiB(テビバイト) = 2⁴⁰バイト

スーパーコンピューティングシステムの 愛称とデザイン

MASAMUNE-弐

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

仙台開府の父であるとともに、帆船サン・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す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名付けた前システムの愛称“MASAMUNE-IMR”を引き継ぎ、新システムの愛称を“MASAMUNE-弐”とさせていただきます。

スーパーコンピュータの筐体パネルには、墨絵師の御歌頭氏が描いた2代目を表す勇壮な「弐」の文字と2代目として材料科学のさらなる躍進を見据える政宗公のイメージがデザインされています。

01

環境がダイヤモンドライクカーボンの摩耗現象に与える影響の解明とそれに基づくダイヤモンドライクカーボンの耐久性向上のための設計指針の提案

ダイヤモンドライクカーボンは、ダイヤモンドに似た構造を有する材料であり、超低摩擦、超低摩耗、化学的安定性などの優れた特性を有することから、宇宙ステーション、航空機エンジン、ドローン等に加えて、医療用機械などへの応用も期待されています。しかし、ダイヤモンドライクカーボンの「摩耗」は、材料寿命の低下、機械の故障、さらには予期せぬ事故などを引き起こすため、安全・安心社会の実現に向けて、ダイヤモンドライクカーボンの摩耗を極限まで減らすことが重要な開発課題となっています。特に、水蒸気、酸素、窒素、水素の分圧などわずかな環境の違いによっても、ダイヤモンドライクカーボンの摩耗現象は大きく変化するため、実験研究によるメカニズムの理解は進んでいません。

そのため、計算科学シミュレーションを活用し、環境・雰囲気ダイヤモンドライクカーボンの摩耗メカニズムに与える影響を明らかにした上で、「摩耗を減らす」ための設計指針を策定することが求められています。しかし、硬さ、電気伝導度などの「材料固有の特性」とは異なり、環境による摩耗現象の変化は「材料の応答特性」であるため、「化学反応、摩擦、衝撃、応力、流体、伝熱」などのマルチフィジックス現象の理解が必須であり、計算科学シミュレーションにおいてもチャレンジングな課題の一つです。

そこで、スーパーコンピュータ“MASAMUNE-IMR”上で、化学反応を含む複雑なマルチフィジックス現象を解明可能な反応分子動力学シミュレータを開発することで、ダイヤモンドライクカーボン上で化学摩耗と機械摩耗の2つのメカニズムで摩耗が発生することを見出すとともに、摩擦時にダイヤモンドライクカーボンの表面上で起こる化学反応が水、酸素などの環境によって変化することで、化学摩耗と機械摩耗の形態や量が異なってくることを世界で初めて明らかにしました。これは、機械システムの超寿命化に加え、故障・事故の防止に貢献しうる成果です。

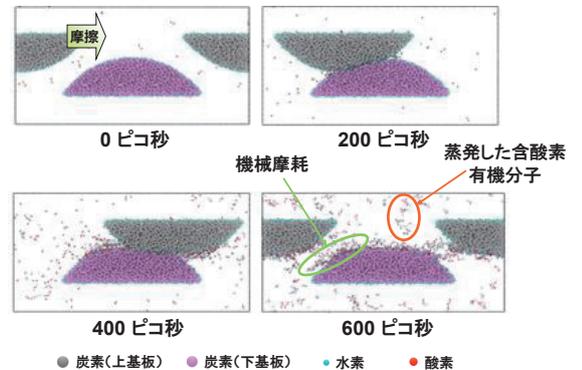


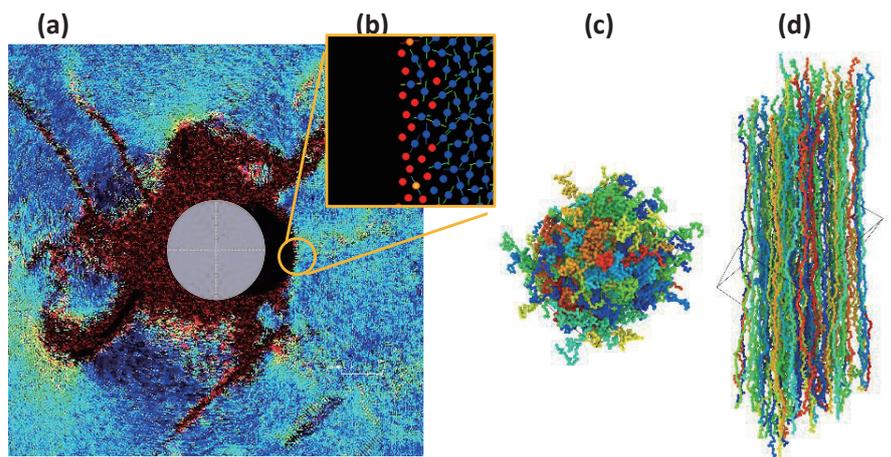
図 水環境でのダイヤモンドライクカーボンの摩耗シミュレーション(見やすさのために水は非表示)
—ダイヤモンドライクカーボン表面のダングリングボンドを持つ炭素原子上で水分子がH⁺とOHに解離し、ここが起点となってメタノール、エタノールなどの含酸素有機分子が蒸発する化学摩耗が起こることを明らかにしました。

Jing Zhang, Yang Wang, Qian Chen, Yixin Su, Shandan Bai, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi and Momoji Kubo
Carbon, 231 (2025) Art.No.119713, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119713>

02

粘弾性および弾塑性体のマルチスケール・シミュレーション技術の開発

粘弾性体や弾塑性体などの複雑な内部構造と記憶効果を持つ材料の設計においては、マルチスケール・シミュレーション手法が有効です。その1つの例として、マクロな流動/変形をマクロ粒子モデルで表現し、個々のマクロ粒子の内部にミクロな分子シミュレーション(MicS)を埋め込むという手法があります。図(a)(b)は、弾塑性体中を移動する障害物(灰色の円)による破壊のシミュレーションの例です。図(b)に示されるように、弾性体のマクロ変形は流体粒子(SPH)法で表現され、各SPH粒子の中に埋め込まれたMicSが局所的な応力場を計算します。このようにマクロな流体の中に埋め込まれるMicSが分子シミュレーションの場合には、その境界条件の設定は重要な問題となります。図(c)(d)は、従来の周期境界条件では困難であった一軸伸張による大変形を印加された高分子溶融体のシミュレーションの例です。LAMMPSと呼ばれる分子動力学ソフトウェアパッケージ上で、UEF(A LAMMPS package for molecular dynamics under extensional flow fields)とQR分解の方法を適用することで、粗視化分子動力学(CGMD)シミュレーションによる大規模伸張変形を実現しています(c)変形前と(d)変形後)。



[1] Yohei Morii and Toshihiro Kawakatsu
Phys. Fluids, 33[9] (2021) Art.No.093106,
DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0063059>
[2] Takahiro Murashima, Katsumi Hagita and
Toshihiro Kawakatsu
Macromolecules, 54[15] (2021) pp.7210-7225,
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c00267>

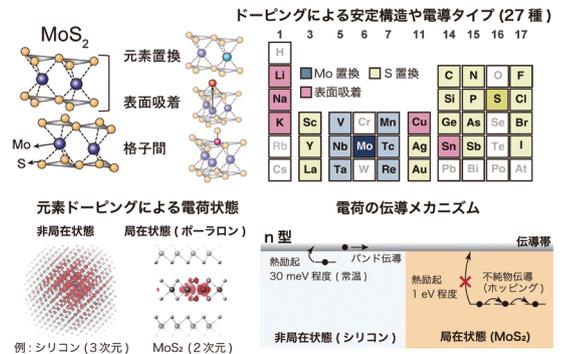
03

2次元半導体MoS₂に対する不純物ドーピングの第一原理設計

原子3層分の厚さで構成される二硫化モリブデン(MoS₂)は、優れた電気的および光学的特性を有し、次世代の2次元半導体材料として大きな注目を集めている。2次元物質の特徴として、単位体積あたりの表面積が大きく、従来の3次元半導体と比べて高濃度のドーピングが可能である。しかしながら、3次元構造に比べて表面構造の自由度が高いため(置換、吸着、格子間配置など)、安定構造や電気的性質を容易に予測することは困難である。

本研究では、第一原理計算に基づき、MoS₂に27種類の不純物元素を導入した場合に形成される安定な原子構造および電子特性を体系的に解析した。不純物の多様な配置に対するエネルギー安定性を、大規模計算によって網羅的に評価した。これらの計算は、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を用いて実施された。その結果、以下の主要な知見が得られた。

- (1) 27種類の元素添加によって形成される安定な原子構造を特定し、それぞれの不純物がもたらすキャリア伝導のタイプ(n型またはp型)を明らかにした。
- (2) MoS₂の代表的なドーパントであるRe(n型)およびNb(p型)を含むすべての元素において、局在した電子状態、すなわちポラロン状態が形成されることを確認した。さらに、計算によって予測されたこれらのポラロン状態は、近年の走査型トンネル分光(STM)実験によって実証されている。
- (3) 本研究の結果は、不純物導入における電気伝導の機構が、主に局在ポラロン状態間のホッピング伝導に依存することを示唆しており、MoS₂のデバイス特性の最適化や電子特性の理解に向けた重要な手がかりを提供するものである。



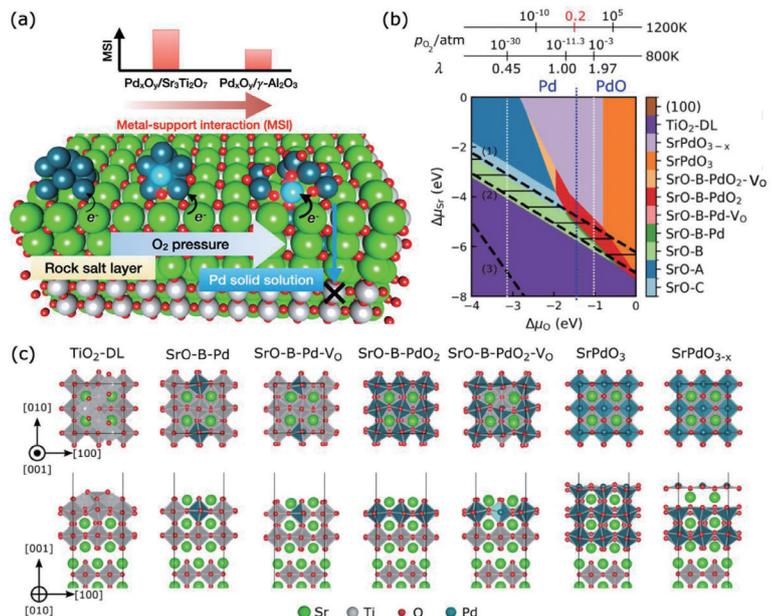
Soungmin Bae, Ibuki Miyamoto, Shin Kiyohara and Yu Kumagai
ACS Nano, 18[50] (2024) pp.33988-33997, DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.4c08366>

04

機械学習を活用したグローバル最適化によるPd/Sr₃Ti₂O₇触媒の熱安定性

自動車の三元触媒など、高温条件下で使用される不均一触媒では熱劣化が問題となる。熱劣化を抑制することは、安定的に使用するために極めて重要です。ペロブスカイト酸化物に担持された金属ナノ粒子は、この分野で大きな期待が寄せられています。しかしながら、熱安定性触媒の理解と開発に不可欠なこれらのシステムの原子レベルでの詳細は、依然としてほとんど未解明のままです。

本研究では、機械学習を活用した密度汎関数理論解析を用いて、Sr₃Ti₂O₇ (001)表面に担持された小さなPd_xO_yナノ粒子の熱安定性を解明しました。この担体上のPd_xO_y粒子が自己再生触媒の基準を満たすことを示しました。酸化条件下では、PdとSr₃Ti₂O₇間の固溶体反応が起こりやすくなりますが、表面近傍に限られます。さらに、Pd_xO_yナノ粒子の形成により担体への結合が強化され、ナノ粒子の凝集(焼結)が防止されることも明らかとなりました。詳細な熱力学および電子構造解析を通じて、酸化物担体、酸化金属クラスターのサイズ、および金属-担体相互作用が触媒の熱安定性に及ぼす役割を解明しました。本研究は、熱安定性触媒の合理的設計への道を開きました。



T. N. Pham, B. A. C. Tan, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada and Y. Morikawa
ACS Catal., 14[3] (2024) pp.1443-1458, DOI: <https://doi.org/10.1021/acscatal.3c05673>



JRを利用した場合

- >> 仙台駅より徒歩
仙台駅1階西口より 徒歩 約20分
- >> 仙台駅よりタクシー利用
仙台駅1階西口タクシー乗り場より 乗車 約10分
- >> 仙台駅より地下鉄利用
【仙台市地下鉄 東西線】「青葉通一番町」駅南1出口より 徒歩 約10分
- >> 仙台駅より仙台市営バス利用
仙台駅 西口バスプール「11」番より「霊屋橋(おたまやばし)」経由の
以下いずれかに乗車
 - [701系統] 八木山動物公園駅 行き
 - [704系統] 八木山動物公園駅・緑ヶ丘三丁目 行き
 - [706系統] 八木山動物公園駅・八木山南・西高校 行き
 乗車時間約10分 「東北大正門前」で下車し 徒歩 約5分

飛行機を利用した場合

- >> 仙台空港より
仙台空港から仙台空港アクセス線に乗車(25分)、仙台駅下車
※ 仙台駅下車後は、JRを利用した場合を参照下さい



東北大学金属材料研究所 詳細地図



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

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>
 E-mail: ccms-adm.imr@grp.tohoku.ac.jp
 〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平二丁目1番1号
 TEL: 022-215-2411 FAX: 022-215-2166

