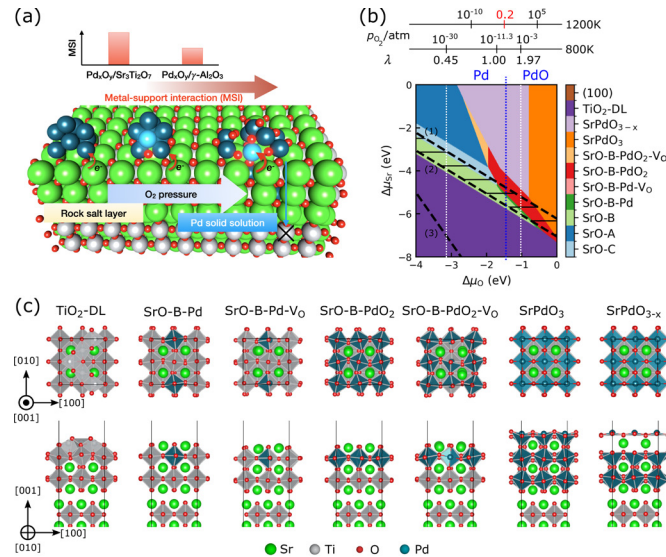


計算材料学センターだより



■ Thermal stability of Pd/Sr₃Ti₂O₇ catalyst unveiled by machine learning enhanced global optimization

CONTENTS

- ・新スーパーコンピューティングシステムの概要
- ・スーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」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
- ・SC24 に本センター職員が参加

表紙の図について

■ Thermal stability of Pd/Sr₃Ti₂O₇ catalyst unveiled by machine learning enhanced global optimization

Self-regenerative materials are keys to the development of stable heterogeneous catalysts used under high-temperature conditions, such as those in three-way catalytic converters in automobiles. Metal nanoparticles supported on perovskite oxides show great promise in this area. However, the atomistic details of these systems, which are vital for understanding and developing thermally stable catalysts, remain largely unexplored.

Herein, we employ a machine-learning-enhanced density functional theory analysis to elucidate the thermal stability of small Pd_xO_y nanoparticles supported on a Sr₃Ti₂O₇ (001) surface. We demonstrate that the Pd_xO_y particles on this support meet the criteria for self-regenerative catalysts. Under oxidative conditions, the solid-solution reaction between Pd and Sr₃Ti₂O₇ is favorable but is limited to the vicinity of the surface. Additionally, the formation of PdO-like clusters strengthens their binding to the support, preventing the agglomeration (sintering) of the Pd_xO_y nanoparticles. Through detailed thermodynamic and electronic structure analyses, we elucidate the roles of the oxide support, the size of the oxidized metal clusters, and the metal-support interaction in the thermal stability of the catalysts. This work paved the way for the rational design of thermally stable catalysts.

T. N. Pham, B. A. C. Tan, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, Y. Morikawa
ACS. Catal., **14** (2024) pp.1443-1458

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。

新スーパーコンピューティングシステムは大規模並列計算サーバ、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。以下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を示します。運用開始は 2025 年度前半の予定となっており、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、何卒ご理解、ご協力のほどよろしくお願い申し上げます。

・スーパーコンピュータ

大規模並列計算サーバ：HPE Cray XD220v 及び HPE Scale-up Server 3200

HPE Cray XD220v

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	

HPE Scale-up Server 3200

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

機種名	HPE Cray XD670
CPU	Intel Xeon Platinum 8480+ <ul style="list-style-type: none"> ・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 <ul style="list-style-type: none"> ・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

ストレージシステム：DDN EXAScaler

機種名	DDN EXAScaler ES400NVX2
実効容量	5.07 PB

スーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」稼働終了

2018年8月に稼働開始したスーパーコンピューティングシステム「MASAMUNE-IMR」のサービスが2024年9月をもって終了しました。2024年10月1日からシステム撤去と新システム導入、構築を行い、2025年度前半から新システムのサービスを開始予定です。



「MASAMUNE-IMR」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

旧スパコンシステムの撤去が10月1日から開始され、スパコン本体、サーバ機器、水冷設備、空調機およびUPSの解体搬出作業を行いました。11月7日にこれらのすべての機器撤去が完了し、12月初旬から新システム構築に向けた水冷配管や電源工事が開始されました。スーパーコンピュータやサーバ、ストレージは来年2月頃から搬入を行い、設置やハードウェア調整を行う予定です。また、これと並行して、プロジェクトチームを立ち上げ、10月より設計内容の検討を開始しました。11月までに基本設計を完了し、現在、詳細設計を進めているところであり、2025年度前半の稼働に向け、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サービス開始まで、もうしばらくお待ちいただきますようお願いいたします。



水冷配管の撤去作業（10月1日）



切断された電源ケーブル（10月1日）



CS-Stormの解体作業（10月23日）



XC50の搬出作業（10月31日）

SC24 に本センター職員が参加

2024年11月17日(日)から22日(金)に開催されたSC24(Supercomputing Conference 2024)に、寺田特任准教授が現地参加しました。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(HPC)・ネットワークング・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。今年のSC24は米国アトランタにてハイブリッド形式で開催されました。18,000人を超える参加者があり、過去最大の展示面積にて494のブース展示がありました。本センターを含む東北大学内のスーパーコンピュータを有する金属材料研究所、サイバーサイエンスセンター、流体科学研究所が合同でブース展示を行いました。ブース展示では、本センターの活動の広報のためMASAMUNE-IMRの紹介やMASAMUNE-IMRを用いた研究成果の展示、来訪者への対応などを行いました。更に今後のセンターの活動のために、各メーカーのブースを訪問し最新のスーパーコンピュータに関わるハードウェア、ソフトウェア、周辺技術に関する最新情報を収集しました。また各種講演の聴講や研究機関のブース訪問によってHPC技術、AI技術、量子コンピュータ技術の進捗や応用等のスーパーコンピュータに関わる最新の研究動向やHPC技術に関わる教育動向等の情報収集も行いました。



SC24での展示ブースと会場の様子

計算材料学センターだより No.42

2024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



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@grp.tohoku.ac.jp