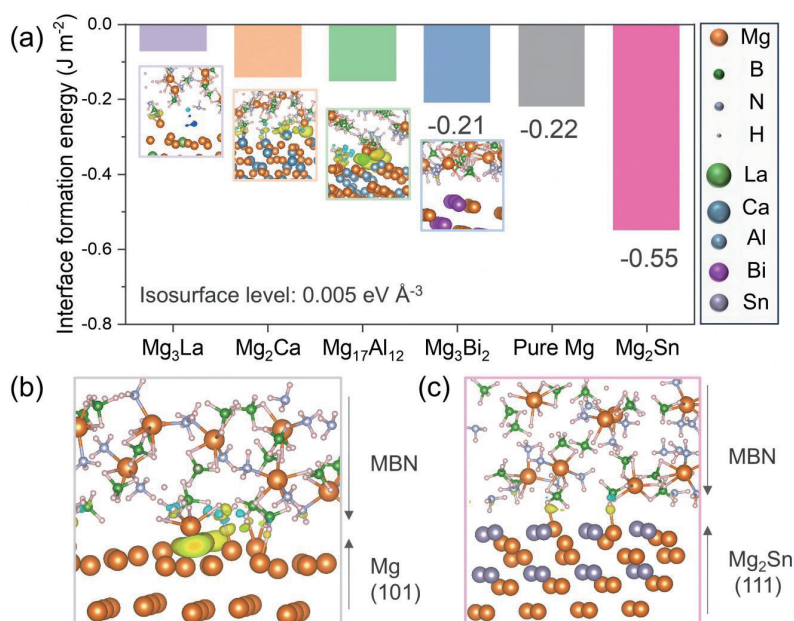


計算材料学センターだより



CONTENTS

- ・センター長あいさつ
- ・アクセラレータサーバのノード増設について
- ・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
- ・2026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
- ・2025年度の計算材料学センター見学者
- ・2025年度の計算材料学センターの技術支援の実績
- ・MASAMUNE- 氏が『KINKEN plus』に掲載

表紙図

Balancing Reactivity and Ion Transport in Mg Alloy Anodes via Secondary-Phase Engineering

Solid-state Mg metal batteries are promising for safe and high-energy storage, yet their performance is limited by unstable anode/electrolyte interfaces. The key challenge is to regulate, rather than eliminate, interfacial reactions: moderate reactions generate Mg^{2+} transport pathways, whereas excessive reactions cause passivation and polarization. This work shows that secondary-phase engineering can balance interfacial reactivity and transport in Mg alloy anodes. Density functional theory calculations establish a descriptor-guided framework for alloy/electrolyte interface design. Interfacial formation energies quantify the reaction tendency between Mg-alloy secondary phases and a $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ -based solid electrolyte, while charge density difference analysis reveals electron redistribution and bonding interactions. These calculations identify Mg_2Sn as a favorable secondary phase with controlled reactivity and reduced passivation risk. The resulting percolated Mg_2Sn network with continuous α -Mg pathways supports interfacial stability and Mg^{2+} transport. This work connects atomic-scale interface chemistry with alloy anode design and highlights controlled reactivity as a key principle for stable Mg alloy anodes.

Q. Wang, X. Jia, T. Xu, J. Li, Y. Chen, H. Li and Y. Yan, *ACS Energy Lett.*, (2026)
DOI: 10.1021/acseenergylett.6c00909.

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) を運用しております。2026年3月時点において

- 1) CPU をベースとする HPE Cray XD220v (127 ノード) のノード使用率は 99.4%
- 2) CPU をベースとして大規模計算を志向する HPE Scale-up Server 3200 (2 ノード) のノード使用率は 94.0%
- 3) GPU をベースとする HPE Cray XD670 (11 ノード) のノード使用率は 88.1%

と数多くのユーザー様に“MASAMUNE - 弐”をフル活用して頂くことができました。稼働当初から現在まで、新システムの運用状況に大きな問題は発生しておらず、安定的な稼働の実現に向けて多大なご尽力を頂いたセンター職員、および関係各位の皆様には厚く御礼を申し上げます。

さて、皆様ご存じのように、近年の AI の急速な進展と社会への浸透を背景に、近年、AI を科学研究に組み込む「AI for Science」が、文部科学省の中で大きな国家戦略として位置づけられています。2026年4月17日から「AI for Science 萌芽的挑戦研究創出事業 (SPReAD)」の公募が開始され、1件につき最大500万円の予算配分で約1,000課題が採択されるとのこともあり、大きな注目を集めています。さらに、2026年5月12日からは1課題あたり10～30億円規模の大型プロジェクトが10件程度、2億円規模のプロジェクトが20件程度採択される「AI for Science 革新的研究推進事業 (ARiSE)」の公募が開始されました。一方で、「AI for Science」に対応するための十分な計算資源が日本国内には不足していることも指摘されています。本センターでは、先代のスーパーコンピューティングシステム“MASAMUNE-IMR”の時代からGPUをベースとするスーパーコンピュータを導入し、AIを活用した材料研究の推進を先駆的に後押ししてきました。さらに、今年度はユーザーの皆様へ「AI for Science」に向けた研究を加速して頂くために、2026年10月1日からHPE Cray XD670に新たにNVIDIA H200を搭載した2ノードを追加提供させて頂く予定です。H200はGPUメモリ容量が141GBとH100のGPUメモリ容量80GBよりも増強されているため、GPUを活用したより大規模な計算を実行して頂くことが可能となります。この拡張により、“MASAMUNE - 弐”の総理論演算性能は0.55 PFLOPS上昇し、総計4.6 PFLOPSに拡充される予定です。

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、2026年3月をもって、代表機関：東北大学 10名、

協力機関：14 機関 88 名、連携機関：9 機関 22 名の総勢 120 名という多数の研究者の参画のもと、多くの研究成果の創出とともに無事に終了致しました。ここに DDCoMS プロジェクトに参画して頂き、貴重な研究成果を創出して頂きました研究者の皆様へ厚く御礼を申し上げます。最終年度である 2025 年度は、本プロジェクトの最終報告会として、2025 年 12 月 8 日～13 日にパシフィコ横浜で開催された Materials Research Meeting (MRM) 2025 国際会議において、「Impact of Supercomputer “Fugaku” to Computational and Data-Driven Materials Science」シンポジウムを開催させて頂きました。本シンポジウムは、上記 DDCoMS の課題責任者である久保が代表オーガナイザーを務めさせて頂き、物質・材料研究機構の館山佳尚先生が代表をされている「富岳」課題と関西大学の藤本和士先生が代表をされている「富岳」課題と合同で、3 つの「富岳」課題の合同最終報告会として開催させて頂きました。海外からの招待講演 5 件、国内の招待講演 1 件、一般口頭発表 41 件、ポスター発表 29 件の合計 76 件の発表が 3 日間に渡って行われ、活発な議論が交わされました。本 DDCoMS プロジェクトを構成する 5 つのサブ課題 A) 東北大学グループ（構造材料）、B) 物質・材料研究機構グループ（磁性材料）、C) 東京大学グループ（電気化学材料）、D) 東京科学大学グループ（エレクトロニクス材料）、E) 京都大学グループ（バイオ・高分子材料）の 5 グループの新たな異分野連携の創成に加え、若手研究者の活発な人材交流にも繋がったのではないかと考えております。また、文部科学省の方で 2025 年 12 月 25 日に開催を企画された「第 5 回スーパーコンピュータ「富岳」シンポジウム 富岳百景」にて、DDCoMS の研究成果を報告させて頂く機会を頂くとともに、「富岳」の最前線と未来予想図—研究者と語る 1 時間—のパネルディスカッションにもパネリストとして参加させて頂き、教育系 YouTuber のヨビノリたくみ氏のコーディネートのもと、日本における計算材料科学の重要性と今後の展望についてお話をさせて頂きました。20 歳代の若い方々に知名度の高いヨビノリたくみ氏のコーディネートとのこともあり若い世代の聴講者も多く、将来の日本を背負っていく若い世代の方々に計算材料科学の魅力と意義を知って頂く非常に良い機会になったのではないかと考えております。

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 度は東北大学金属材料研究所が幹事校であったことから、本センターの寺田弥生特任准教授と東北大学未来科学技術共同研究センターの尾澤伸樹特任准教授が中心となって数多くのワーキンググループメンバーの方々のご協力を頂きながら文部科学省への提言書をまとめさせて頂くことができました。提言書の作成にご協力を頂きました方々に厚く御礼を申し上げます。作成しました提言書は、今後、文部科学省参事官（情報担当）と文部科学省参事官（ナノテクノロジー・材料担当）への手交を予定しております。

本センターでは、2026 年度もセンター職員が一丸となって、計算材料科学分野の発展に加え、データ科学との連携の推進、さらには国家戦略と位置付けられている「AI for Science」への貢献にむけて、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頂けるように努力してまいりたいと考えております。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。

アクセラレータサーバのノード増設について

MASAMUNE- 弐のアクセラレータサーバ HPE Cray XD670 に、新たに NVIDIA H200 を搭載した 2 ノードを追加し、2026 年 10 月 1 日から提供予定です。H200 は GPU メモリ容量が 141GB と H100 よりも大きいため、より大規模な計算に利用いただけます。1 ノード占有利用での提供を予定しています。

表 1. 構成

機種名	HPE Cray XD670
CPU	Intel Xeon Platinum 8570+ ・周波数：2.1 GHz ・CPU コア数：56 コア ・搭載数：2 基 / ノード ・演算性能：7.526 TFLOPS/ ノード
主記憶容量	1.0 TiB/ ノード
アクセラレータ	NVIDIA H200 SXM5 ・GPU メモリ容量：141 GB ・メモリ帯域：4,800 GB/s ・搭載数：8 基 / ノード ・演算性能：268 TFLOPS/ ノード
ノード数	2
ノード間接続	InfiniBand NDR200 (200 Gbps)
総理論演算性能	0.551 PFLOPS

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 OneAPI 2025.3

Intel OneAPI 2025.3 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/compiler_lib/intel/intel_compiler.html

アクセラレータサーバ

1. Intel OneAPI 2025.3

Intel OneAPI 2025.3 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルをご覧ください。

https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/compiler_lib/intel/intel_compiler.html

アプリケーションのインストール

大規模並列計算サーバ

1. GROMACS

古典分子動力学パッケージ GROMACS のバージョン 2025.4 をインストールしました。GROMACS は主にタンパク質や脂質、核酸といった生体分子向けに設計されており、また並列処理に最適化されているため高速なシミュレーションが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/app/GROMACS.html>

GROMACS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.gromacs.org/>

2. TOMBO

全電子混合基底法を用いた第一原理計算プログラム TOMBO のバージョン 2025 をインストールしました。TOMBO では周期系と孤立分子系の両方を扱うことができ、また時間依存 GW 法による高精度な電子励起状態のシミュレーションが可能です。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/app/TOMBO.html>

TOMBO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://tombo.page/>

アクセラレータサーバ

1. GROMACS

分子動力学パッケージ GROMACS のバージョン 2025.4 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルをご覧ください。

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/manual/app/GROMACS.html>

GROMACS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.gromacs.org/>

2026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いたします。

定期保守日程：

- ・ 2026年5月25日（月）9：00～5月26日（火）17：00
- ・ 2026年8月上旬
- ・ 2026年11月下旬
- ・ 2027年2月下旬

片平キャンパスの計画停電の予定

- ・ 2026年8月2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。

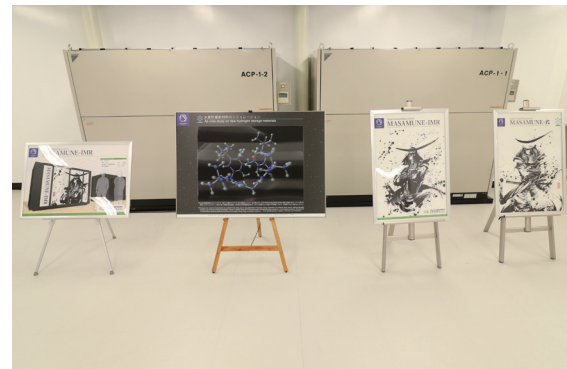
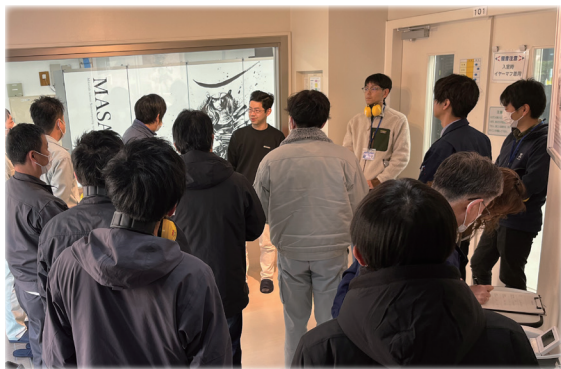
<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/masamune/maintenance.html>

2025年度の計算材料学センター見学者

期間：2025年4月～2026年3月

見学日	見学者	
2025年 5月29日	新システム記者発表見学会 報道関係者	20名
2025年 5月30日	株式会社鉄鋼新聞社	1名
2025年 5月30日	東北大学未来科学技術共同研究センター (NICHe) 川添名誉教授	1名
2025年 6月18日	東北大学材料科学総合学科学部1年生および引率者	30名
2025年 7月15日	Korea Institute of Materials Science (KIMS) Prof. Eun-Ae Choi	1名
2025年 7月22日	株式会社創童舎	2名
2025年 8月 6日	東北大学大学院工学研究科 久保教授他	13名
2025年 8月 8日	新スパコン披露式出席者	36名
2025年 8月 8日	The University of Manchester	1名
2025年 8月25日	東北大学理学部・理学研究科 根本氏	1名
2025年 8月29日	自動車用内燃機関技術研究組合 (AICE)	7名
2025年 9月26日	宮城第一高等学校理数探究科生徒および引率教員	52名
2025年10月22日	Mingdao High School 生徒および教員、 工学部インターナショナルオフィススタッフ他	44名
2025年10月31日	宮城県仙台向山高等学校理数科1年生	28名
2025年11月 7日	GP-MS シンポジウム参加者	5名
2025年12月 9日	総合技術部新任者研修	15名
2025年12月17日	テクニカルセンター職員研修（専門研修）	35名
2026年 3月10日	ECL(Ecole Centrale de Lyon) Prof. Maria Isabel de Barros Bouchet, Prof. Jean-Michel Martin	2名
2026年 3月19日	川勝年洋教授・今井正幸教授最終講義・退職記念研究会	6名
2026年 3月23日	東北大学工学研究科 丸山准教授	1名

その他、多くの方々にご来場いただき、合計328名の皆さまにご見学いただきました。



見学の様子と展示物

2025 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。2025 年度は所内 14 研究室および所外 65 研究機関へ合計 543 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	14 研究室	100
学内	9 研究機関	111
国内の研究機関	26 研究機関	239
国外の研究機関	30 研究機関（11 ヶ国）	93
合計	79	543

MASAMUNE-弐が『KINKEN plus』に掲載

金属材料研究所が取り組む幅広い研究分野の中から、毎回1つのテーマを特集する広報誌『KINKEN plus Vol.04』にて計算材料学の特集が生まれ、本センターが運用するスーパーコンピューティングシステム MASAMUNE-弐が掲載されました。また、表紙には MASAMUNE-弐の筐体に描かれている墨絵が採用されました。金属材料研究所ホームページよりご覧いただけます。

金属材料研究所ホームページの刊行物一覧ページ

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/public/publications/plus/>



KINKEN plus 表紙

計算材料学センターだより No.45
2026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
