



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-IMR

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



Supercomputing System



TOHOKU
UNIVERSITY

ごあいさつ

計算材料学センター長 久保 百司



豊かで暮らしやすい未来社会の創造に加えて、エネルギー問題・環境問題への対応、持続可能な安全・安心社会の構築など人類が直面している課題の解決に向けて、計算科学への期待は益々大きくなってきています。日本のフラッグシップスーパーコンピュータである「富岳」が、2020年6月発表の世界のスーパーコンピュータの性能ランキングTOP500において世界1位を獲得しました。さらに、「富岳」はHPCG(High Performance Conjugate Gradient)、HPL-AI、Graph500の3部門でも世界1位を獲得しました。このような状況下において、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、このミッションを果たすべく、国際共同利用・共同研究施設としてスーパーコンピュータの計算資源を世界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しています。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、「富岳」成果創出加速プログラムや計算物質科学人材育成コンソーシアム、元素戦略プロジェクト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との連携、アプリケーションソフトの並列化支援、アプリケーションソフト講習会の開催などの事業も推進しております。また、2020年5月に、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とともに計算物質科学協議会を設立し、将来必要となる計算物質科学に関するシミュレーション技術、データ利活用技術についての意見集約と国や関係諸機関への提言を行う活動も行っております。

2018年8月から、本センターではCray XC50-LCとCray CS-Storm 500GT を中心としたスーパーコンピューティングシステム“MASAMUNE-IMR”を稼働させています。演算性能も前システムの300TFLOPSから3PFLOPSへと大幅に増強されています。本センターが材料科学の分野で果たすべきミッションを明確にしなが、異分野との融合・協調も進めつつ、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おります。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、Cray XC50-LCとアクセラレータを搭載したCray CS-Storm 500GTを中心に構成されており、総計算ノード理論演算性能は3PFLOPS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本スーパーコンピューティングシステム専用チューニングし、国内外の材料研究分野の研究者に提供しています。

計算材料学センターの役割

計算材料学センターは、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、幾度かのシステム更新を行いながら金属材料研究所の共同利用施設として計算材料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学研究の発展と分野振興を推進しています。

さらに、2018年のシステム更新によって、これまでの計算材料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、GPUによる超並列計算やマルチスケールシミュレーション、インフォマティクス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、世界的に早急な対応が求められているエネルギー問題・環境問題を解決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学分野の発展に貢献します。

また、計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業として、「富岳」成果創出加速プログラムや計算物質科学人材育成コンソーシアム、元素戦略プロジェクト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との連携、アプリケーションソフトの並列化支援、アプリケーションソフト講習会の開催などを通じて、日本における計算物質科学の分野振興事業に対して積極的な支援活動を実施しています。

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Multi-scale simulations towards NExt-generation - Institute for Materials Research

スーパーコンピューティングシステム構成図

スーパーコンピュータの総計算ノード理論演算性能: 3.03 PFLOPS

ストレージエリアネットワーク
(InfiniBand EDR 100 Gbps)
スーパーコンピューティングシステムネットワーク
(Ethernet 10 Gbps, 1 Gbps)



1 スーパーコンピュータ (大規模並列計算サーバ)

Cray XC50-LC

▶ 総ノード数

320 nodes

(計算ノード 293 nodes
I/Oノード等 27 nodes

▶ 総計算ノード理論演算性能

0.91 PFLOPS

▶ 総主記憶容量

219.8 TiB

2 スーパーコンピュータ (アクセラレータサーバ)

Cray CS-Storm 500GT

▶ 総ノード数

29 nodes

▶ 総計算ノード理論演算性能

2.12 PFLOPS

(CPU 0.09 PFLOPS
GPU 2.03 PFLOPS

▶ 総主記憶容量

21.8 TiB

3 ストレージシステム

DDN EXAScaler ES14KX

▶ 総ディスク容量

4.0 PB

DDN GRIDScaler SFA7700X

▶ 総ディスク容量

435.0 TB

4 並列計算 & インフォマティクスサーバ

HPE ProLiant DL360 Gen10

▶ 総ノード数

29 nodes

▶ 総計算ノード理論演算性能

0.10 PFLOPS

▶ 総主記憶容量

16.3 TiB

5 可視化サーバ

HPE ProLiant DL380 Gen10

6 ネットワークシステム

HPE ProLiant DL360 Gen10



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-IMR

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

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わ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、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピューティングシステムの愛称を、“MASAMUNE-IMR”と致しました。

スーパーコンピュータの筐体パネルには、愛称の文字と墨絵師の御歌頭氏が描いた仙台の地から次世代の材料科学の世界を見据える政宗公のイメージがデザインされています。

※MASAMUNE-IMRは国立大学法人東北大学の登録商標です。

精密な微小機械システムにおける材料の摩耗量予測式を提案

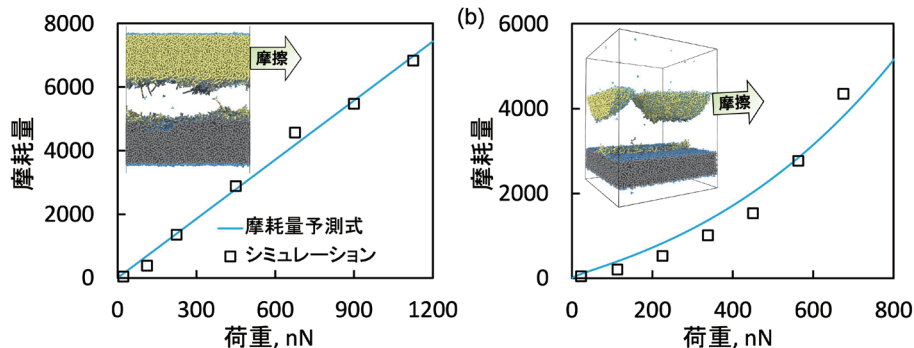


図. 摩耗量予測式とシミュレーションで得られたダイヤモンドライクカーボンの摩耗量の比較

一 (a) 粗い表面同士の摩擦プロセスと、(b) Ball と Disk の摩擦プロセスにおいて、摩耗量の荷重依存性が異なり、さらに (a) と (b) の両者の場合ともに本研究で構築した非常に簡便な摩耗量の予測式によって、スーパーコンピュータを活用した長時間の反応分子動力学シミュレーションで得られた摩耗量を定量的に予測できることを明らかにしました。

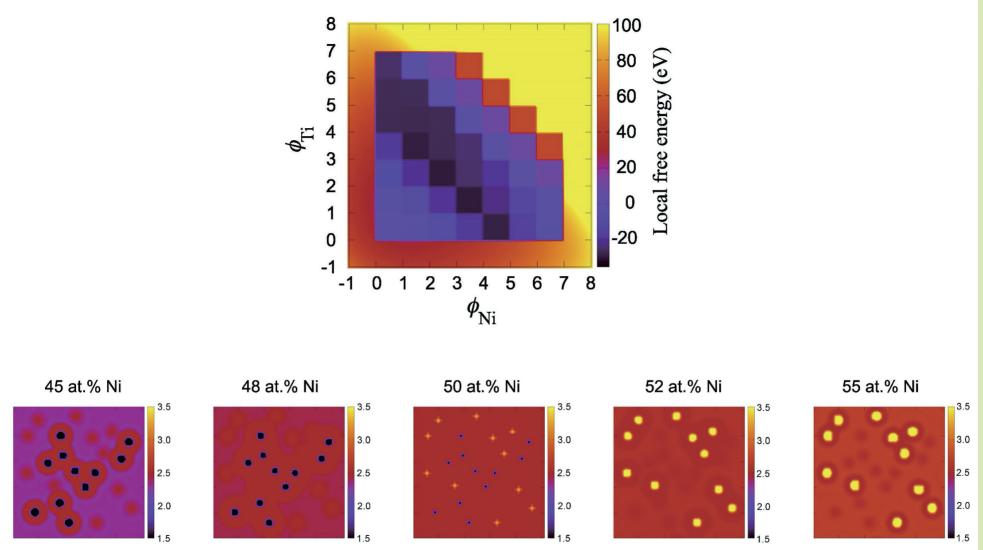
は、実験研究を行う以前に、材料や使用条件によって、どれだけの摩擦が発生するかを定量的に予測できる理論式の構築が求められます。しかし、微小な機械システムにおいては、この摩擦現象は数十ナノメートルの摩擦界面で起こることから、エンジン、モーター、トランスミッションなどの通常サイズの機械システムで起こる「肉眼で観察可能な摩擦」とは異なり、原子レベルの化学反応に支配された「肉眼では観察できないナノスケールの摩擦」が主要な要因となっています。そのため、通常サイズの機械システムに対する従来の摩耗量の予測式は、微小な機械システムには適用できない問題が古くから指摘されてきましたが、長い間、この問題は解決されていませんでした。

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、微小機械システムの摩擦界面で起こる「摩擦を誘発する化学反応メカニズム」を明らかにし、これに反応速度論を適用することで、微小機械システムにおける材料の摩耗量の予測式を提案しました。さらに、ダイヤモンドライクカーボンの摩耗量を反応分子動力学法によってスーパーコンピュータ上でシミュレーションしたところ、本研究で構築した非常に簡便な摩耗量の予測式によって、スーパーコンピュータを活用した長時間計算で得られた摩耗量を定量的に予測できることを明らかにしました。これは、微小機械システムの長寿命化に加え、故障・事故の防止に貢献しうる成果です。

Yang Wang, Jingxiang Xu, Yusuke Ootani, Nobuki Ozawa, Koshi Adachi, and Momoji Kubo
Adv. Sci., 8 (2021) Art.No.2002827, <https://doi.org/10.1002/advs.202002827>

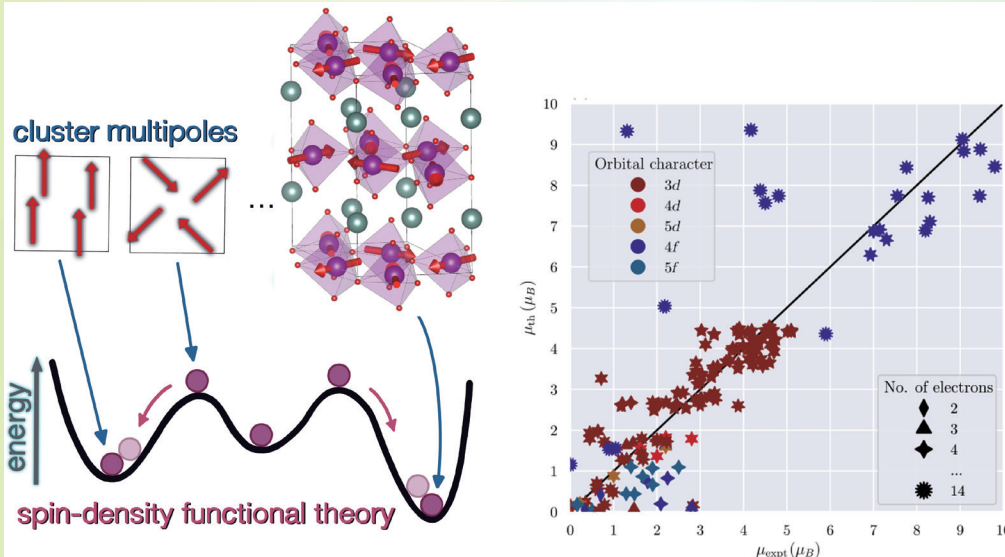
第一原理フェーズフィールド法によるNi-Ti合金の微細構造

上のパネルは四面体近似で最大2個の格子間原子を考慮したNi-Ti合金の局所自由エネルギーの2Dマップである。第一原理計算で $n+m \leq 6$ の Ni_nTi_m 組成に対する値を決めた。Ni濃度 ϕ_{Ni} とTi濃度 ϕ_{Ti} は $n \leq \phi_{\text{Ni}} < n+1$ と $m \leq \phi_{\text{Ti}} < m+1$ のように離散化されており、各正方形の箱が一つの (n, m) に相当する。下のパネルは、上のパネルで示された局所自由エネルギーのみを用いて一切の経験パラメータを用いない第一原理フェーズフィールド法で計算されたTi-45at%Ni, Ti-48at%Ni, Ti-50at%Ni, Ti-52at%Ni, Ti-55at%Niに対するNi濃度 ϕ_{Ni} の定常的空間分布である。結果のパターンは格子間原子を考慮しない場合と殆ど同じだが、幾つかの角ばった析出物は回転しており、Ti-50at%Niの黄色のスポットの周りにオレンジの十字が見える。シミュレーションセルの軸に沿って回転がないのは格子間原子を考慮しない場合の人為的効果と考えられ、この回転は妥当である。格子間配位は最終的な微視的構造には現れないが、ダイナミクスには影響する。



スーパーコンピュータを活用した研究成果

クラスター多極子理論による第一原理磁気構造予測



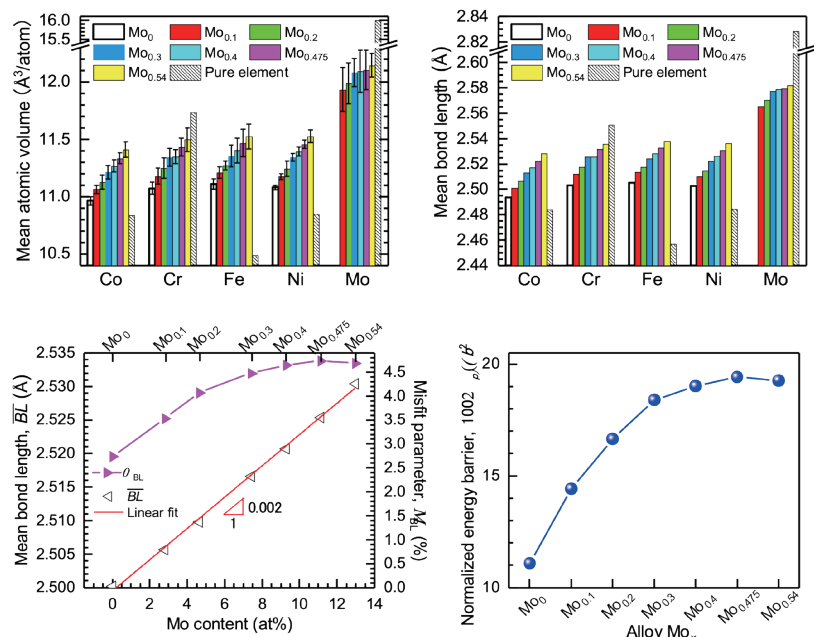
磁性体の中では、個々の磁気モーメントは隣接するモーメントと特別なパターンを形成する。磁性体の物性はこの磁気構造の対称性によって規定されるため、磁気構造を正しく予測することは磁性体の第一原理計算において非常に重要である。しかしながら、磁気構造の予測は今日の物性物理学において最も挑戦的な課題の一つとされるほど難しい問題である。これは磁気構造が複雑になるとスピンの自由度の数が膨大なものとなるためである。この問題について、我々はクラスター多極子理論 (Cluster Multipole Theory, CMP) に基づき、与えられた結晶構造において実現する可能性が高い磁気構造の系

統的生成を行った。得られた磁気構造に対し、局所スピン密度近似(Local Spin Density Approximation, LSDA)に基づく第一原理計算を行い、非共線の磁気構造の決定を行なった。合計で3,000に及ぶ磁気構造に対する計算の結果、CMP+LSDAによる磁気構造予測について、以下の結果を得た。(1) 磁気構造をCMPによって展開すると与えられた物質において実現する可能性の高い磁気構造を系統的に生成できる。(2) 多くの場合においてCMP+LSDAによってエネルギーを計算すると候補構造を数個に絞ることができる。(3) LSDAは3d遷移金属化合物を中心に正確に磁気構造を再現し、磁気モーメントのサイズの誤差はたかだか0.5 μ_B 程度である。

Kaoru Ohno, Monami Tsuchiya, Riichi Kuwahara, Ryoji Sahara, Swastibrata Bhattacharyya, and Thi Nu Pham
Comp. Mat. Sci., 191 (2021) Art.No.110284, DOI:https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110284

Mo添加したNiCoCrFe系ハイレントロピー合金における固溶強化

本研究では、第一原理計算を用いてMo添加量の異なるNiCoCrFe系ハイレントロピー合金 (Mo_x , $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.475, 0.54$ [1]) の格子ひずみを評価した。各構成元素の原子体積と結合長はいずれもMo添加量の増加に対して増加した。しかしながら、平均結合長 ($\overline{BL}$) のMo濃度に対する変化量は小さいのに対し、結合長の標準偏差 (σ_{BL}) に対応するミスフィット・パラメータはMo添加量の増加とともに著しく増加し、 $\text{Mo}_{0.475}$ ($\text{Ni}_{1.8}\text{Co}_{0.95}\text{Cr}_{0.8}\text{Fe}_{0.25}\text{Mo}_{0.475}$) において最も高い値を示した。以上は、固溶強化に及ぼす格子膨張の影響は限定的であるが、Mo原子により局所的な格子ひずみが導入されることを示唆している。さらに、転位すべりに対するエネルギー障壁は格子ひずみが最も大きい $\text{Mo}_{0.475}$ 合金において最も大きな値を示し、実験により得られた降伏応力のMo濃度依存性とよく対応していた。



J. Li, K. Yamanaka, and A. Chiba
Mater. Sci. Eng. A, 817 (2021) Art.No.141359, DOI:https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141359

