

数値物性科学研究施設

Numerical Materials Research Laboratory (NML)

計算手法と高性能計算機の継続的な進展により、近年の物性科学シミュレーションは、量子臨界現象の解明といった基礎科学への貢献に加え、産業応用に資する現実物質の精緻な記述も可能としている。さらに、機械学習をはじめとするデータ駆動型手法の導入により、シミュレーションおよびデータ科学から創出される数値データの応用領域は飛躍的に拡大している。本施設では、こうした計算機・シミュレーション両面の革新を背景に、数値物性科学の方法論的基盤を深化させるとともに、物質設計・機能探索に資する先端的な計算手法およびソフトウェアの研究開発を推進する。とりわけ、大規模シミュレーションおよびデータ駆動科学における革新的方法論の構築とその応用研究を進め、数値物性科学の精緻化と応用可能性の拡張を目指す。さらに、本施設は、これらの基盤を支える物性研究所スーパーコンピュータの導入・運用および分野の発展に貢献する次世代の研究を担う高度専門人材の育成を通じて、全国計算物質科学コミュニティのハブとして、計算物質科学分野の中核的拠点の役割を担う。

Owing to the continuous advances in computational methods and high-performance computing resources, simulations in computational materials science have not only contributed to fundamental science, such as elucidating quantum critical phenomena, but also have enabled highly accurate descriptions of real materials relevant to industrial applications. Furthermore, with the introduction of data-driven approaches, including machine learning, the scope of applications for numerical data generated through simulation and data science has expanded dramatically. Against this backdrop of innovation in both computing and simulation, our institute will deepen the methodological foundations of computational condensed-matter science and promote research and development of advanced computational methods and software that contribute to materials design and functional exploration. In particular, we will develop and apply innovative methodologies for large-scale simulations and data-driven science, with the aim of enhancing the precision of computational condensed-matter science and expanding its applicability. In addition, by introducing and operating the Institute for Solid State Physics supercomputer that underpins these foundations, and by cultivating highly specialized human resources who will lead the next generation of research and contribute to the advancement of the field, our institute will serve as a hub for the national computational materials science community and play a central role as a core center in computational materials science.

施設長 尾崎 泰助
Leader OZAKI, Taisuke

尾崎研究室 Ozaki Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 第一原理電子状態計算における高精度・高速計算手法の開発
Development of efficient and accurate methods for first-principles electronic structure calculations
- 2 OpenMX の開発と公開
Development of the OpenMX software package
- 3 X線分光スペクトル計算手法の開発
Development of first-principles methods for X-ray spectroscopies
- 4 物質表面・2次元物質の第一原理電子状態計算
First-principles calculations of surfaces and two-dimensional structures



教授 尾崎 泰助
Professor OZAKI, Taisuke

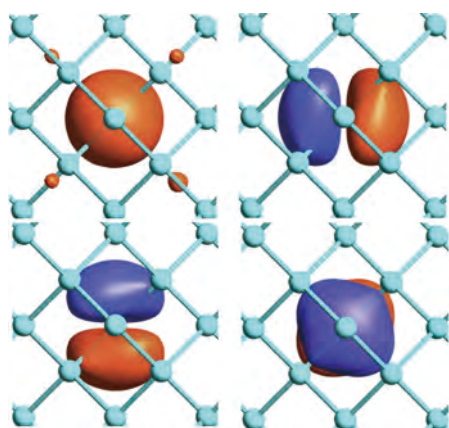
専攻 Course
理学系物理学
Phys., Sci.



助教 福田 将大
Research Associate
FUKUDA, Masahiro

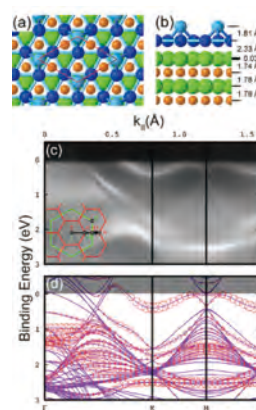
超並列計算機の発展と物質科学の精密化に伴い、第一原理電子状態計算の重要性が増している。我々は密度汎関数理論に基づき、現実に近い系をより精密に取り扱うための新しい計算手法・ソフトウェアパッケージ OpenMX の開発に取り組んでいる。汎用性の高い原子様基底関数法を基盤として、局在自然軌道に基づくオーダー N 分割統治法、修正再帰二分法による領域分割法、最小通信量を持つ高速フーリエ変換並列化法など、様々な高速計算手法を開発し、実験と直接比較できるシミュレーションを可能とした。近年は内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算手法、最近接ワニエ関数法、機械学習ポテンシャル法、交換相関汎関数の開発に取り組み、第一原理計算のさらなる進展を目指している。また物質表面や二次元構造の第一原理シミュレーションにも取り組み、実験グループとの共同研究を行っている。

With the development of supercomputers and the refinement of materials science, the importance of first-principles electronic structure calculations has been increasing. We are engaged in developing a new computational method and software package, OpenMX, based on density functional theory, to precisely handle systems close to reality. Based on the versatile atomic-like basis function method, we have developed various efficient computational methods, such as the order-N divide-and-conquer method based on localized natural orbitals, the atom decomposition method by modified recursive bisection, and the Fast Fourier Transform parallelization method with minimal communication volume, enabling simulations that can be directly compared to experiments. Recently, we have been working on the development of calculation methods for the absolute binding energy of core electrons, the closest Wannier function method, machine learning potential methods, and the development of exchange-correlation functionals, aiming for further advances in first-principles calculations. We are also engaged in first-principles simulations of material surfaces and two-dimensional structures, conducting joint research with experimental groups.



最近接ワニエ関数法で得られた Si 固体のワニエ関数。原子基底の形状を保持している。

Wannier functions of Si bulk calculated by the closest Wannier function method, almost keeping the shape of atomic orbitals.



(a) 及び (b) 第一原理計算により求められた ZrB_2 上 Ge 層の二重三角格子構造。(c) 角度分解光電子分光の結果と、(d) バンド構造の計算結果が良く一致することから、構造モデルの妥当性が認められる。

(a), (b) Bitriangular structure of Ge determined by DFT calculations. (c) Angle-resolved photoemission spectrum (ARPES) of the bitriangular structure. (d) Unfolded band structure of the bitriangular structure which well reproduces the ARPES measurement.



川島研究室

Kawashima Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 統計力学モデルの諸性質の解明
Statistical mechanical models
- 2 多体問題の数値解法の研究
Numerical methods for many-body physics
- 3 臨界現象の一般論
General theory of critical phenomena
- 4 物性理論における計算量の理論
Computational complexity in condensed matter physics



教授 川島 直輝
Professor KAWASHIMA, Naoki

専攻 Course

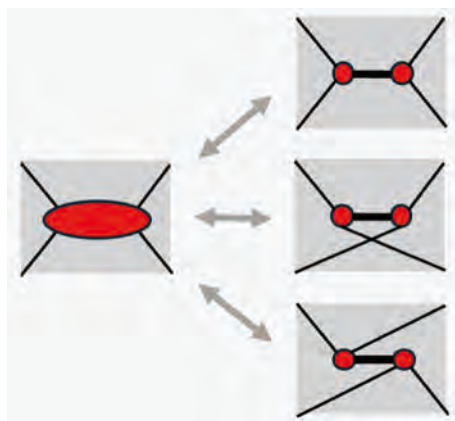
理学系物理学

Phys., Sci.



助教 高橋 惇
Research Associate
TAKAHASHI, Jun

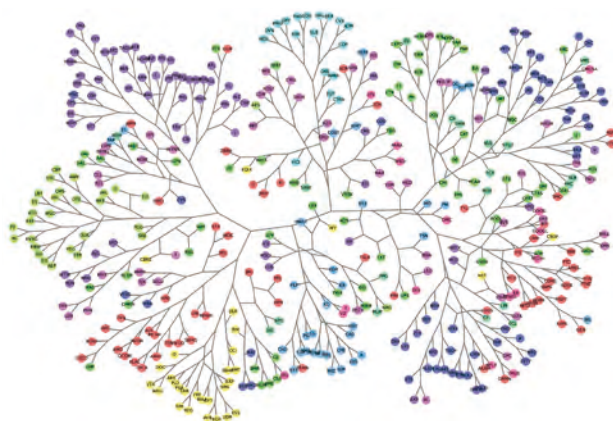
最近、人工知能／機械学習／量子計算などの流行で社会的にも計算機に注目が集まっているが、我々の研究グループでは計算統計力学の方法に含まれる数理的コアを明らかにし、新しい手法を開発することを基本に研究を進めている。その応用として、統計力学の未解決問題の解明や強相関量子系における実験研究との比較計算などを行っている。そこで用いられる量子モンテカルロ法やテンソルネットワーク法はボルツマンマシンやデータ圧縮を通じてデータ科学とも接点を持っている。とくにテンソルネットワーク法は近年急速に発展してきているが、我々は、この手法の一般的なデータ解析への応用の可能性を探求している。例えば、ツリー型テンソルネットワークによって、与えられた多変数サンプル集合からそれを実現する確率分布関数を獲得する生成モデルを構築することに成功した。この生成モデルは、ネットワーク構造を自動最適化するところに特徴があり、新しいタイプの機械学習の可能性を拓くものと期待している。



ツリーの基本変形。3通りの可能性から中央の枝が担う情報流を最小にするものを選ぶ。このような枝のつながり換えをツリーの各部分に巡回的に繰り返し適用することで、ツリーの構造を最適化してゆく。

A basic transformation of a tree. From the three possibilities, choose the one that minimizes the information flow carried by the central branch. By repeatedly applying this type of branch reconnection to each part of the tree, the tree structure is optimized.

Recently, the popularity of artificial intelligence, machine learning, and quantum computing has drawn a lot of attention to computers in society. Our research group is conducting research to clarify the mathematical core of computational statistical mechanics and developing new methods. As applications of these methods, we are trying to solve various problems in statistical mechanics and strongly correlated electron systems to compare with experimental research. The quantum Monte Carlo method and tensor network method used there also have connections with data science through Boltzmann machines and data compression. In particular, the tensor network method has been developing rapidly in recent years, and we are exploring the possibility of applying this method to general data analysis. For example, we have succeeded in constructing a generative model using a tree-type tensor network that acquires a probability distribution function that realizes a given multivariate sample set. This generative model is characterized by its automatic optimization of the network structure, and we hope that it will open up new possibilities for machine learning.



米国株価指標 S&P500 に含まれる銘柄の騰落パターンの学習から生成されたツリー構造。業種ごとに色分けされている。同じ業種がツリー上でも近くに来ている様子が分かる。(©2025 Kenji Harada)

A tree structure generated by learning the rise and fall patterns of stocks included in the US stock index S&P 500. They are color-coded by industry category. We can see that stocks in the same category are close to each other on the tree. (©2025 Kenji Harada)



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/kawashima_group.html

杉野研究室

Sugino Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 非平衡統計力学的アプローチによる物質中の電子移動反応の理解
Understanding electron transfer reactions in materials using a non-equilibrium statistical mechanics approach
- 2 物質中の水素・ミュオンの量子状態
Quantum states of hydrogen and muon in a material
- 3 電子格子相互作用の第一原理計算
Electron-phonon couplings from first principles
- 4 超伝導体の第一原理計算
First-principles simulation of superconductors



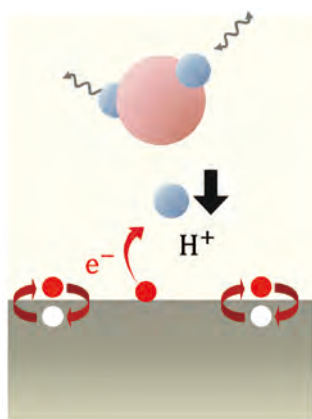
教授 杉野 修
Professor SUGINO, Osamu

専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.

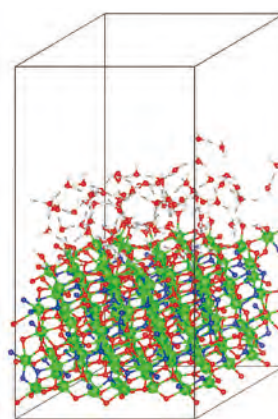
電子とイオンが連動して起こる化学反応によるエネルギー変換過程を、非平衡運動論の枠組みで捉えるための研究を行っている。今回は、プロトンが電極水溶液界面において電子およびフォノンを励起しながら運動エネルギーを失って表面に吸着する Volmer 過程を、非平衡グリーン関数法の枠組みで探った。本計算は、先行研究を拡張してプロトンの運動をあらわに考慮したものになっている。従来格子摩擦が支配的だと考えられてきたが、電極での電子正孔対を励起することで起こる電子摩擦が同様に重要であることが分かった。燃料電池等で起こるエネルギー変換を捉え直す必要性を示唆する結果である。目下、第一原理計算に基づいて現実系により忠実に反映したモデルを用いた研究を行っている。



電極水溶液界面での電子移動反応の非平衡ダイナミクス。格子振動励起と同様に電子励起（電子摩擦効果）が重要であることを示唆している。

Non-equilibrium dynamics of electron transfer reactions at the electrode-aqueous solution interface. It suggests that electron excitation (electron friction effect) is as important as vibrational excitations.

This study explores energy conversion processes driven by chemical reactions involving electrons and ions within the framework of non-equilibrium kinetics. Specifically, the Volmer process, where protons lose kinetic energy and adsorb onto the surface while exciting electrons and phonons at the electrode-solution interface, was examined using the non-equilibrium Green's function method. This calculation extends previous research by explicitly considering proton motion. Traditionally, lattice friction has been considered dominant, but our findings reveal that electron friction, caused by the excitation of electron-hole pairs at the electrode, is equally significant. These results suggest the need to reconsider energy conversion processes occurring in fuel cells. Currently, research is being conducted using models that more faithfully reflect real systems based on first-principles calculations. This approach aims to provide a more accurate understanding of the mechanisms involved in energy conversion processes, potentially leading to more efficient fuel cell designs and other applications in the field of energy technology.



ドーパされたジルコニア上の水のシミュレーション。第一原理計算と機械学習の組み合わせにより長時間シミュレーションが可能になった。

Simulation of liquid water interfaced with a doped zirconia surface. The first-principles calculation was extended to long-term simulation owing to the machine learning technique.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/sugino_group.html

野口研究室

Noguchi Group

研究テーマ Research Subjects

- 1 生体膜の非平衡ダイナミクス
Non-equilibrium dynamics of biomembrane
- 2 細胞、脂質ベシクルの形態形成
Shape transformation of cells and lipid vesicles
- 3 複雑流体のダイナミクス
Dynamics of complex fluids
- 4 アクティブマターの協同現象
Self-organization of active matter



准教授 野口 博司
Associate Professor NOGUCHI, Hiroshi

専攻 Course

理学系物理学

Phys., Sci.



助教 中野 裕義
Research Associate
NAKANO, Hiroyoshi

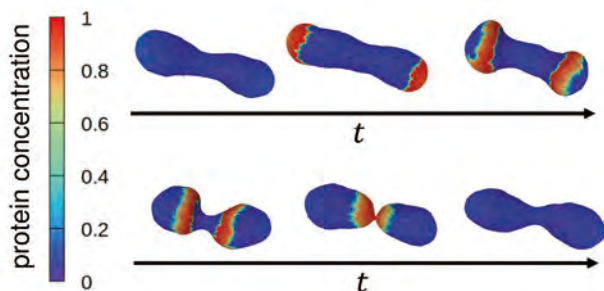
ソフトマター、生物物理を理論、計算機を駆使して研究している。特に、生体膜や細胞の構造形成、複雑流体、アクティブマターのダイナミクスの解明に力を入れている。そのためシミュレーション手法の開発、改良も行っている。

例えば、赤血球や脂質膜からなる小胞のさまざまな環境下での形態変化を調べている。これまで、流れによる赤血球のパラシュート状やスリッパ状への変形や、曲率誘導タンパク質の吸着、化学反応による生体膜の形態変化などを明らかにしている。特に非平衡下でのダイナミクスを研究している。

また、アクティブマターにおける相転移や時空間パターン、高分子溶液や気泡形成を伴う流れなど通常のナビエーストックス方程式に従わない流体のダイナミクスをスパコンを用いた大規模シミュレーションを駆使して研究している。

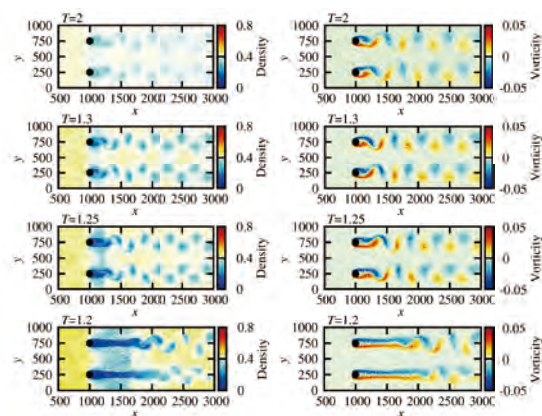
We study soft-matter physics and biophysics using theory and simulations. Our main targets are the structure formation of biomembrane and the dynamics of complex fluids and active matter under various conditions. We develop coarse-grained membrane models, hydrodynamics simulation methods, and the calculation method of material properties.

We found the shape transitions and dynamic modes of red blood cells and lipid vesicles in shear and capillary flows using mesoscale hydrodynamic simulations: discocyte-to-parachute transition, tank-treading, and swinging, etc. We also clarified the shape transformation of membrane induced by curvature-inducing proteins using coarse-grained membrane simulations: membrane tubulation by banana-shaped proteins (BAR superfamily proteins, etc.), budding by laterally isotropic proteins, and the coupling of membrane deformation, chemical reaction, and protein diffusion in membrane (traveling wave and Turing pattern). Membranes exhibit characteristic patterns and fluctuations out of equilibrium. Moreover, we investigated phase transitions of active matter and fluid dynamics of polymer solution and cavitation in the Karman vortex and sound-wave propagation using massively parallel simulations.



曲率誘導タンパク質の反応拡散波に伴うベシクルの形態の時間変化。くびれ形成を周期的に繰り返す。赤色の領域は曲率誘導タンパク質の濃度が高い。

Sequential snapshots of a shape-oscillation vesicle. Budding repeatedly occurs, accompanied by the traveling wave of bound proteins. Color indicates the concentration of the curvature-inducing protein.



周期的に並んだ円筒後方のカルマン渦は上図のように隣り同士で逆位相に同期する。温度 T を下げると、キャビテーションが起こり、気体の層が形成されている。左図は密度、右図は渦度を示す。

Cavitation in Karman vortex behind cylinder arrays.



https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/labs/noguchi_group.html

三澤研究室

Misawa Group

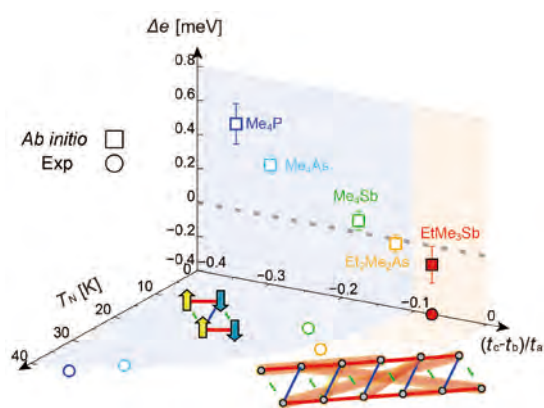
研究テーマ Research Subjects

- 1 量子多体系を取り扱う数値計算手法の開発
Development of numerical methods for quantum many-body systems
- 2 トポロジカル物質における量子輸送現象
Quantum transport phenomena in topological materials
- 3 量子スピン液体・高温超伝導
Quantum spin liquid・High-Tc superconductivity
- 4 強相関電子系に対するデータ駆動型研究
Data-driven research for strongly correlated electron systems



特任准教授 三澤 貴宏
Project Associate Professor MISAWA, Takahiro

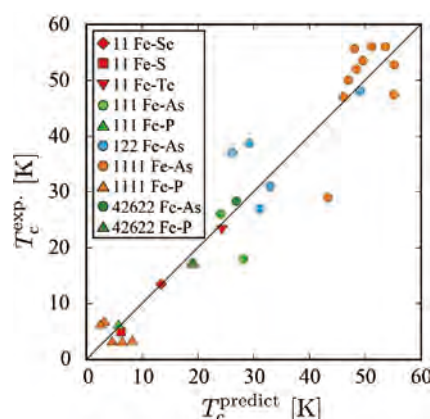
量子多体系の典型例である固体中の強相関電子系では、高温超伝導・量子スピン液体に代表される新奇量子相が数多く発現する。これらの現象を支配している基礎学理を解明して、新現象・新機能を創出することは凝縮系物理学の大きな目標である。本研究室では、この挑戦的な課題に対して、最先端の理論手法とスーパーコンピュータを用いた大規模数値計算を駆使することで取り組んでいる。特に、第一原理計算と高精度量子格子模型解析を組み合わせた第一原理強相関計算手法の開発を行っており、この手法を用いることで、高温超伝導・量子スピン液体・相関トポロジカル相などの新奇量子相の研究を行っている。最近の研究例としては鉄系高温超伝導体の第一原理有効ハミルトニアンデータの科学的解析、分子性固体における量子スピン液体の研究などがある。さらに、第一原理強相関計算手法を用いたデータ創出及びデータを利活用したデータ駆動型の研究も進めている。



β' -X[Pd(dmit)₂]₂ (Xはカチオン) の第一原理有効模型の解析を行った結果、第一原理計算で求めた反強磁性相 (AF) と量子スピン液体相 (QSL) のエネルギー差 $\Delta e = E_{\text{QSL}} - E_{\text{AF}}$ (壁面)、は X = EtMe₃Sb での量子スピン液体発現を含む実験相図 (底面) をよく再現している。

Results of the ab initio effective model analysis of β' -X[Pd(dmit)₂]₂ (X represents a cation). From the ab initio calculations, we obtain the energy difference between the antiferromagnetic (AF) and quantum spin liquid (QSL) phases, $\Delta e = E_{\text{QSL}} - E_{\text{AF}}$ (shown at wall surface). We find that the theoretical results well reproduce the experimental phase diagram (shown at bottom surface) including the quantum spin liquid phase at X = EtMe₃Sb.

In strongly correlated electron systems in solids, which are typical examples of quantum many-body systems, many exotic quantum phases, such as high-temperature superconductivity and quantum spin liquids, emerge. It is a grand challenge of condensed matter physics to elucidate a deep understanding of the physics behind these exotic phenomena and to predict new phenomena and functions based on the understanding. In our laboratory, we tackle this challenging issue by combining state-of-the-art theoretical methods with large-scale numerical calculations using powerful supercomputers. In particular, we have developed an ab initio method for treating strongly correlated electron systems, which combines ab initio calculations with highly-accurate methods for solving quantum lattice models. By using this method, we have studied exotic quantum phases such as high-temperature superconductivity, quantum spin liquids and correlated topological phases. Recent examples of our work include the data analysis of ab initio effective Hamiltonians for iron-based superconductors and the study of quantum spin liquids in molecular solids. In addition, we are now conducting data-driven research using the ab initio method for strongly correlated electron systems.



鉄系超伝導体の第一原理ハミルトニアンの微視的パラメータから構築された回帰モデルから得られた実験で得られた転移温度 (T_c^{exp}) と理論予測した転移温度 (T_c^{predict}) の比較。回帰モデルが実験結果をよく再現できていることがわかる。

Experimental T_c (T_c^{exp}) vs. predicted T_c (T_c^{predict}) obtained from the regression model, which is constructed from the microscopic parameters of ab initio Hamiltonians for iron-based superconductors. We can see the regression model reproduce the experimental results well.



大型計算機室

Supercomputer Center

担当所員 川島 直輝

Chairperson
KAWASHIMA, Naoki

担当所員 尾崎 泰助

Contact Person
OZAKI, Taisuke

担当所員 杉野 修

Contact Person
SUGINO, Osamu

担当所員 野口 博司

Contact Person
NOGUCHI, Hiroshi

高度学術員 吉見 一慶

Advanced Academic Support Staff
YOSHIMI, Kazuyoshi

技術専門員 矢田 裕行

Senior Technical Specialist
YATA, Hiroyuki

技術専門職員 福田 毅哉

Technical Specialist
FUKUDA, Takaki

技術専門職員 本山 裕一

Technical Specialist
MOTOYAMA, Yuichi

学術専門職員 荒木 繁行

Project Academic Specialist
ARAKI, Shigeyuki

特任研究員 青山 龍美

Project Researcher
AOYAMA, Tatsumi



助教 福田 将大

Research Associate
FUKUDA, Masahiro

大型計算機室では計算物性物理学専用のスーパーコンピュータシステムを、スーパーコンピュータ共同利用委員会の審議に基づき全国の物性研究者の共同利用に供している。現有システムは、2020年10月に運用開始した主システム(システムB(ohtaka))、および2022年6月に運用開始した副システム(システムC(kugui))からなる複合システムである。システムのベンダーとの密な連絡によって高度なシステム性能を維持するとともに、全国ユーザからの相談にきめ細かく応じながら、システムの管理運用を行っている。スーパーコンピュータの利用申請については、ホームページ(<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>)を参照されたい。また、2015年度から上記スーパーコンピュータシステムのより高度な利用を促進するためソフトウェア開発・高度化支援プログラム(PASUMS)を実施し、ユーザからの提案に基づき毎年2、3件のソフトウェア開発を行っている。

主要設備

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) 総理論演算性能 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) 総理論演算性能 0.973 PFLOPS)

The Supercomputer Center (SCC) operates a supercomputer system available to all researchers of condensed matter physics in Japan. One can submit a proposal for a User Program to the Supercomputer Steering Committee, and once granted he/she can use the facility with no charge. The supercomputer system consists of two systems: The main system (System B (ohtaka)), which started operation in Oct. 2020, and the sub-system (System C (kugui)), which started operation in June 2022. Information about project proposals can be found in the center's web page (<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/>). In addition to maintaining high performance of the hardware in cooperation with the vendors, the SCC also responds to questions and inquiries from users on a daily basis. In 2015, aiming at more efficient usage of the supercomputer systems, we started a new program PASUMS for developing a few applications annually based on proposals from the ISSP supercomputer users.

Main Facilities

System B (ohtaka): Dell PowerEdge C6525/R940 (1680 CPU nodes of AMD EPYC 7702 (64 cores) and 8 FAT nodes of Intel Xeon Platinum 8280 (28 cores) with total theoretical performance of 6.881 PFLOPS)

System C (kugui): HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus (128 CPU nodes of AMD EPYC 7763 (128 cores) and 8 ACC nodes of AMD EPYC 7763 (64 cores) with total theoretical performance of 0.973 PFLOPS)



物性研究所共同スーパーコンピュータシステム構成図

The Supercomputer System at the SCC-ISSP.



Software developed by "Project for Advancement of Software Usability in Materials Science" (PASUMS)



<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/organization/computer.html>

