

## 材料設計統合システム（Advance/Material Design System）の概略

奥野 好成\*

### Outline of Advance/Material Design System

Yoshishige Okuno\*

当社では、材料設計統合システムの開発を進め、プロトタイプを完成した。材料設計統合システムでは、材料設計統合プラットフォームを中心として、種々のシミュレーション手法に基づくソフトウェアを計算ソルバーとして位置づけ有機的に統合して、全体として高度で複雑なシミュレーションを自由自在に実行できるようなものとした。材料設計統合プラットフォームは、分子・結晶・高分子等の構造の構築、計算条件の設定、計算ソルバーへのインターフェイスを担う。計算ソルバーとしては、量子化学計算手法、密度汎関数法、バンド計算手法、分子力学法、分子動力学法、粗視化動力学法等のシミュレーションが可能なものをそろえた。これらのシミュレーション手法を目的に応じて使い分け、または組み合わせた解析を行うことができるようとした。それにより、分子、タンパク質、ポリマー、結晶、固体、液体、気体等、多岐にわたる材料をトータルに解析することが可能となった。ここでは、材料設計統合システムの概略について説明する。

Key word: Material Design, Ab initio calculation, density functional, molecular dynamics, first principle calculation

### 1. 背景

機能材料開発研究における解析対象は、分子、タンパク質、ポリマー、結晶、固体、液体、気体等、多岐にわたる。例えば、電池の開発研究1つとっても、電極を構成する結晶・固体、電解質を構成する溶媒分子や電解質分子、セパレータを構成する高分子等、さまざまな材料についての解析が必要となる。

このように解析対象が多岐にわたると、シミュレーション解析の手法も1つで対応できるものではない。量子化学計算手法、密度汎関数法、バンド計算手法、分子力学法、分子動力学法、粗視化動力学法等の多くのシミュレーション手法を目的に応じて使い分ける必要がある。さらには、これらを組み合わせたシミュレーションを行う必要もある。また、シミュレーション計算結果の解析方法も多様であり、ケースバイケースでいろんな解析手法を組み合わせて行う必要がある。

しかし、個別のシミュレーションソフトを用いて、

\*アドバンスソフト株式会社 技術第2部

2<sup>nd</sup> Technical Division, AdvanceSoft Corporation

別々にシミュレーション解析するのは、効率が悪い。その理由は、まず、解析対象が異なる度にユーザーは別のシミュレーションソフトウェアを使う必要が生じ、その度に新しいソフトウェアの操作法を1からマスターしなければならない。第2に、異なるシミュレーション間の連携を取るのが困難である。例えば、量子化学計算で得られたデータを利用して分子動力学計算を行うような場合、データのやりとりをユーザー自身が行わなければならず、大変な労力を要してしまう。

そして、このことが、わが国には優れたシミュレーションソフトウェアがあるにも関わらず、欧米のソフトウェアが圧倒的優位にある状況に陥らせているのではないかと考えられる。すなわち、わが国では統合システム構築で出遅れていて、個別のシミュレーションソフトウェアにはいいものがあるにも関わらず、使い難いことが普及の障害になっているのではないかと思われる。実際、欧米において、統合システム開発は盛んで、アクセルリス社のマテリアルスタジオ[1]、サイノミクス社のサイマップス

[2]、ケミカルコンピューティンググループ社のMOE [3]等があり、これら欧米産統合システムが欧米産シミュレーションソフトウェアの普及を活性化している。

そこで、当社では、1つのシステムで、多様な解析対象に対して、種々のシミュレーション手法を利用し、数多くの解析を行える材料設計統合システム[4]の開発を行うことにした（図1）。それにより、わが国での個別のシミュレーションソフトの普及を推進して、材料科学技術分野での競争力低下の危機を克服し、機能材料、生体物質、エネルギー利用材料の研究開発に貢献しようと考えている（図2）。

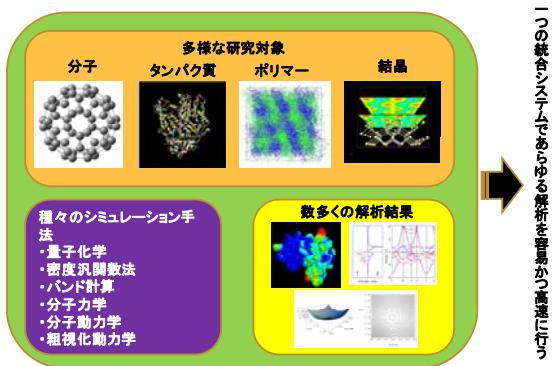


図1 材料設計統合システムの概念図

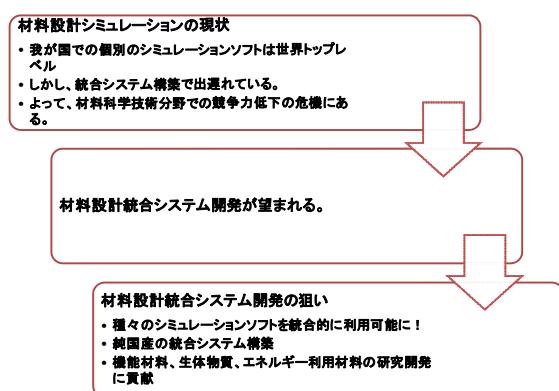


図2 材料設計統合システム開発の狙い

## 2. 材料設計統合システムの概要

### 2.1. 材料設計統合システムの構成

材料設計統合システムの全体像を図3に示す。量子化学計算ソルバー、密度汎関数法等の第一原理計

算ソルバー、分子動力学計算ソルバー、メソスケールシミュレーションソルバーを中心とし、それに他のソルバーも組み込み、すべて材料設計統合プラットフォームから利用できるようなシステムを開発した。

ただし、これらをすべて最初から開発するとなると、開発部分が膨大となり現実的でないことから、現時点で、実際に開発を行った部分は、モデリングや計算結果表示と、計算エンジンとのインターフェイス部分のみとし、計算エンジン部分は既に開発されたものをそのまま用いるようにした（図4）。それにより、開発投資を抑えつつ、多様な研究対象（分子、ポリマー、結晶等）に対する種々のシミュレーション手法（量子化学・密度汎関数法・バンド計算・分子力学・分子動力学法・粗視化動力学法等）による計算と数多くの解析を、すべて1つの統合システムで行うことを可能にすることができた。

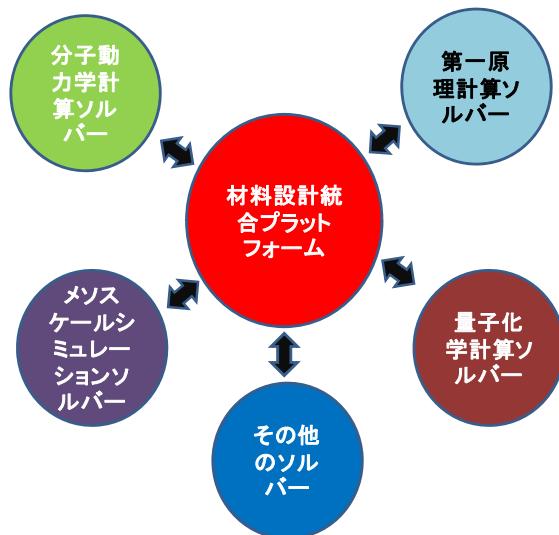


図3 材料設計統合システム

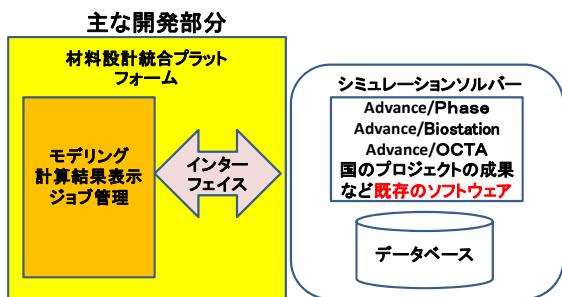


図 4 開発した部分の説明図。主に左側の材料設計統合プラットフォームを開発し、右側のソルバー部分は既存のソフトウェアを利用。

## 2.2. 材料設計統合プラットフォームの概要

材料設計統合プラットフォームは、分子・溶液・固体・ポリマー・タンパク質等の3次元構造の作成を担うビルダー、結果解析を担うビジュアライザ、シミュレーションソルバーへの入出力を担うインターフェイスから構成される。ただし、開発コストを抑えるため、現時点でのビジュアライザ部分は、構造表示機能のみとし、各種解析はソルバー側で行えるようにした。そのため、ソルバーとしては、元々、各種解析機能が充実しているものを選択している。

ビルダーの機能として、分子構造作成、ポリマー構造作成、結晶構造作成を可能にした。図5に、材料設計統合プラットフォームの画面を示す。図に示すように、3Dビュー上でマウス操作等で分子・結晶・高分子等の構造を構築することができる。

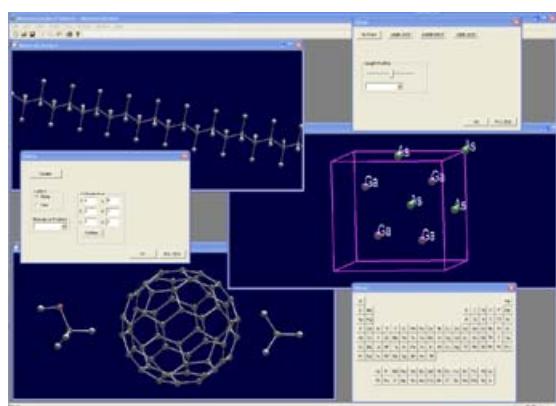


図 5 材料設計統合プラットフォーム

また、ソルバーとのインターフェイスの機能としては、計算条件のダイアログ形式での作成、計算入力ファイルの作成、計算の実行、計算結果からの構造の読み込みを可能にした。

なお、材料設計統合プラットフォームの詳細については、本雑誌の【材料設計統合プラットフォーム】にて説明する。

## 2.3. 計算ソルバーの概要

材料設計統合システムに組み込むソルバーとしては、当社の製品を中心とした、それに大学等で作られたシミュレーションソフトを加えることとした。現時点では、量子化学計算を行う

Advance/Biostation[5]、密度汎関数法による第一原理バンド計算を行う Advance/PHASE[6]、メソスケールシミュレーションを行う Advance/OCTA[7]へのインターフェイスを組み込んだ。さらに、今後の開発で、数値基底密度汎関数法シミュレータ OpenMX[8]、分子動力学法シミュレータ Modylas[9]、量子化学計算プログラム Gaussian09[10]及びGamess[11]へのインターフェイスを組み込む予定である。

## 2.4. 材料設計統合システムの解析対象

材料設計統合システムでのシミュレーションの対象は、エンジニアリングポリマー、燃料電池、リチウム電池、太陽電池、ナノ複合材料、界面活性剤、ドラッグデリバリーシステム、透過膜、鉱物、酸化物、金属、合金、触媒、溶媒、セラミック、半導体、医農薬、化学反応、吸着、分離、拡散等である。

## 2.5. 材料設計統合システムのメリットと特徴

開発した材料設計統合システムの特徴を図6に示しておく。

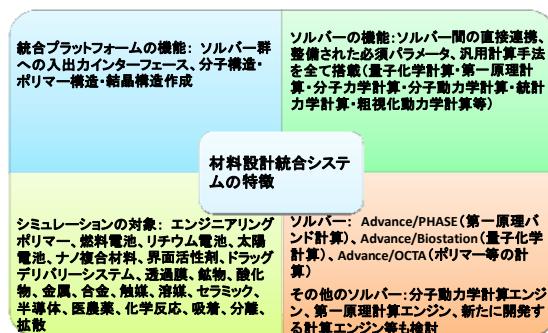


図 6 材料設計統合システムの特徴

また、開発した材料設計統合システムのメリットは以下の点にある。

- ① 異なるシミュレーションソルバー間でモデリングのやりとりが容易になり、統合プラットフォームの利用法のみマスターすれば多数のシミュレーションソルバーが容易に利用できるようになった。すなわち、多様な解析を容易かつ高速に行えるため、材料設計分野での研究開発効率を飛躍的に高めることができると期待できる。
- ② サポートサービスに優位性がある。主要計算ソルバーは、当社自身が開発に深く関わってきた。従って、計算ソルバー・統合プラットフォームのいずれも開発に関わった人材がサービスを提供することができる。また、開発者の大半は日本人であり、サポートサービスに意思疎通容易のメリットもある。
- ③ 当社のソフトウェアは、欧米のソフトウェアに比べて安価である。材料設計統合プラットフォームの価格が安価であるのに加え、ソルバーの価格も安価であり、欧米ソフトウェアに対して圧倒的にコスト面で優位である。

### 3. まとめ

材料設計統合システムの開発を行い、プロトタイプを完成し、さらに、機能拡張を進めている。本開発により、サポートサービスの充実と安価なソフトウェア供給が可能となり、欧米ソフトウェアに比べて劣っている材料設計ソフトウェア分野での優位性を確保する土台ができたと考えている。そして、欧米に比べて出遅れている国産シミュレーション

ソフトウェアの普及促進に貢献したい。

### 参考文献

- [1] アクセルリス社ホームページ、  
<http://accelrys.co.jp/>
- [2] Scinomics home page  
<http://www.scienomics.com/>
- [3] Chemical computing group home page,  
<http://www.chemcomp.com/>
- [4] 特願 2009-249482 【発明者】 奥野 好成、原田 広史、横川 忠晴【特許出願人】 アドバンスソフト株式会社、独立行政法人物質・材料研究機構
- [5] Advance/Biostation,  
[http://www.advancesoft.jp/product/advance\\_biotation/](http://www.advancesoft.jp/product/advance_biotation/)
- [6] Advance/Phase,  
[http://www.advancesoft.jp/product/advance\\_phase/](http://www.advancesoft.jp/product/advance_phase/)
- [7] Advance/OCTA,  
[http://www.advancesoft.jp/product/advance\\_octa/](http://www.advancesoft.jp/product/advance_octa/)
- [8] OpenMX, <http://www.openmx-square.org/>
- [9] Modylas, <http://nanogc.ims.ac.jp/nanogc/>
- [10] Gaussian  
<http://www.gaussian.com/index.htm>: Gaussian 09, Revision A.1, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J.

Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M.  
Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C.  
Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E.  
Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R.  
Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L.  
Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G.  
A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S.  
Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B.  
Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J.  
Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

[11] Gamess;

<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMES.html>