

2009
7/22



アドバンスソフト技術セミナー 材料設計支援システムの現状と開発計画

材料設計支援システムに関する当社の取組みと今後の展開

アドバンスソフト株式会社
技術第1部 主任研究員
奥野 好成

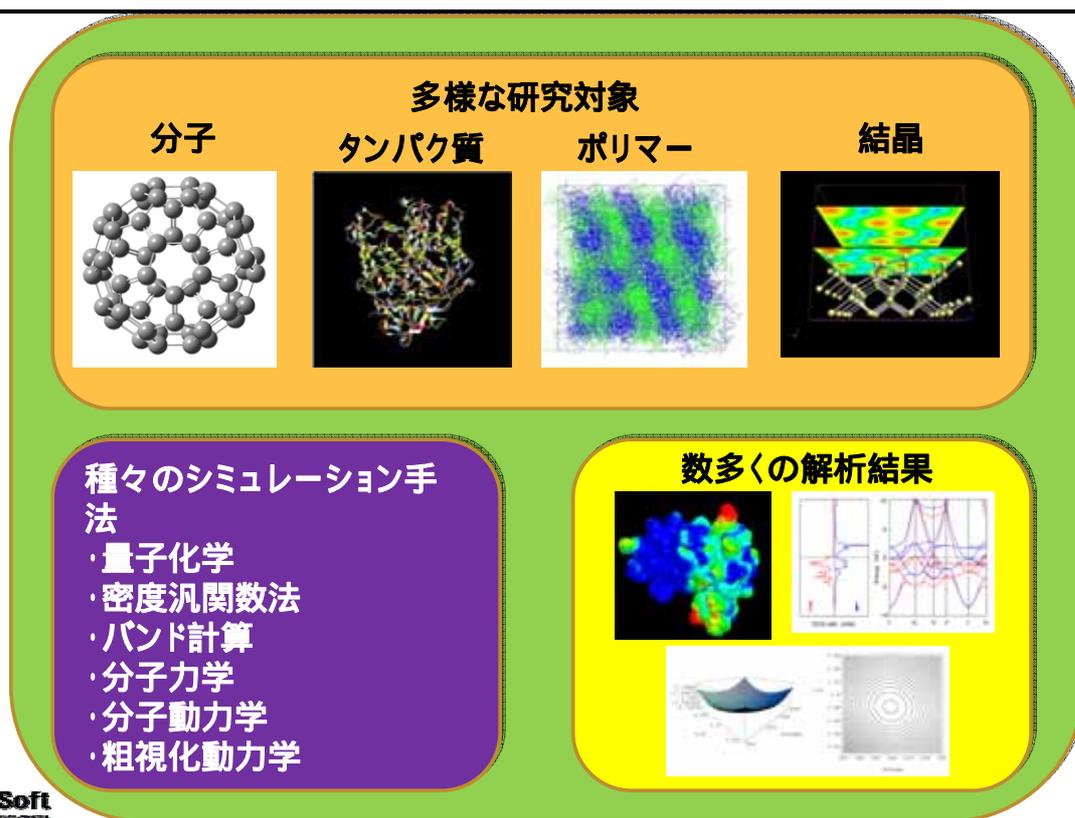
1.

セミナーの主な内容

- 材料設計支援システムの概要
- 関連する既存ソフトウェア
- 既存ソフトウェアの現状 市場動向
- 材料設計支援システム開発の狙い
- 開発する材料設計支援システム
- 開発ロードマップ
- まとめ



材料設計支援システムの概要



3

関連する既存ソフトウェア: 主な機能

- Accelrys: Materials Studio
機能: 分子、結晶材料、ポリマーなどの三次元構造の作成、グラフ、表、テキストデータの扱い可能、Materials Studio - MS Modeling全製品をサポートするソフトウェア基盤と解析ツール(出典: <http://accelrys.co.jp/products/accelrys/ms/ms.html>)
- 富士通: SCIGRESS
機能: 分子描画/解析結果表示、自動バッチ計算GUI、外部プログラムインタフェース、入出力ファイル形式変換(出典: <http://software.fujitsu.com/jp/scigress/function/>)
- Scinomics: SciMaps
機能: グラフィカルユーザインターフェース、表示、データの管理、分子、結晶モデルの構築、可視化機能、測定と解析(出典: <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/scinomics/feature.html>)
- Chemical Computing Group Inc.: MOE(Molecular Operating Environment)
機能: レンダリング機能、分子構築、分子データベース、Scientific Vector Language(出典: <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/ccg/products/basic.html>)

<主要機能> 分子・結晶・高分子ビルダー、結果を解析するツール、実行ジョブの管理



4

関連する既存ソフトウェア: 主なソルバー

- Accelrys: Materials Studio
ソルバー: Mesocite, Mesotek, Synthia, Adsorption Locator, CASTEP, Conformers, DMol3, GULP, User Interface to Gaussian®, NMR CASTEP, ONETEP, QMERA, Sorption, VAMP, QSAR, QSAR Plus (出典: <http://accelrys.co.jp/products/accelrys/ms/ms.html>)
- 富士通: SCIGRESS
ソルバー: Mechanics, Dynamics, Extended Huckel, ZINDO, MO-G, MO-S, CONFLEX3, MD-ME (出典: <http://software.fujitsu.com/jp/scigress/function/>)
- Scienomics: SciMaps
ソルバー: ABINIT, LAMMPS, Towhee, TURBOMOLE, QmPot, SciDPD, FHMixing, MNDO, NAMD (出典: <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/scienomics/feature.html>)
- Chemical Computing Group Inc.: MOE (Molecular Operating Environment)
ソルバー: Pharmacophore Discovery, Structure-Based Design, Protein Modeling & Bioinformatics, Cheminformatics & QSAR, Medicinal Chemistry Applications, High Throughput Discovery, Molecular Modeling & Simulations, Methods Development & Deployment (出典: <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/ccg/products/basic.html>)

<主要ソルバー> 量子化学計算、第一原理計算、分子動力学計算



5

既存ソフトウェアの現状 市場動向

- Accelrys社の売上 (出典: Accelrys社ホームページ <http://accelrys.co.jp/about/overview.html>)
69.6百万US\$(2005年3月末)
81.0百万US\$ (2009年3月末)
- Accelrys社の主要製品はMaterial Studioであり、売上の大半はMaterial Studioによるものと思われる。
- 大きな市場が見込まれる。
- 市場は急拡大とは言えないものの、順調に拡大している模様
- 既存ソフトウェアの問題点は、ソフトウェアが高価なことと、欧米のソフトウェアが圧倒的優位にあること



6

材料設計支援システム開発の狙い

材料設計シミュレーションの現状

- ・ 我が国での個別のシミュレーションソフトは世界トップレベル
- ・ しかし、統合システム構築で出遅れている。
- ・ よって、材料科学技術分野での競争力低下の危機にある。

次世代材料設計統合システム開発が望まれる。

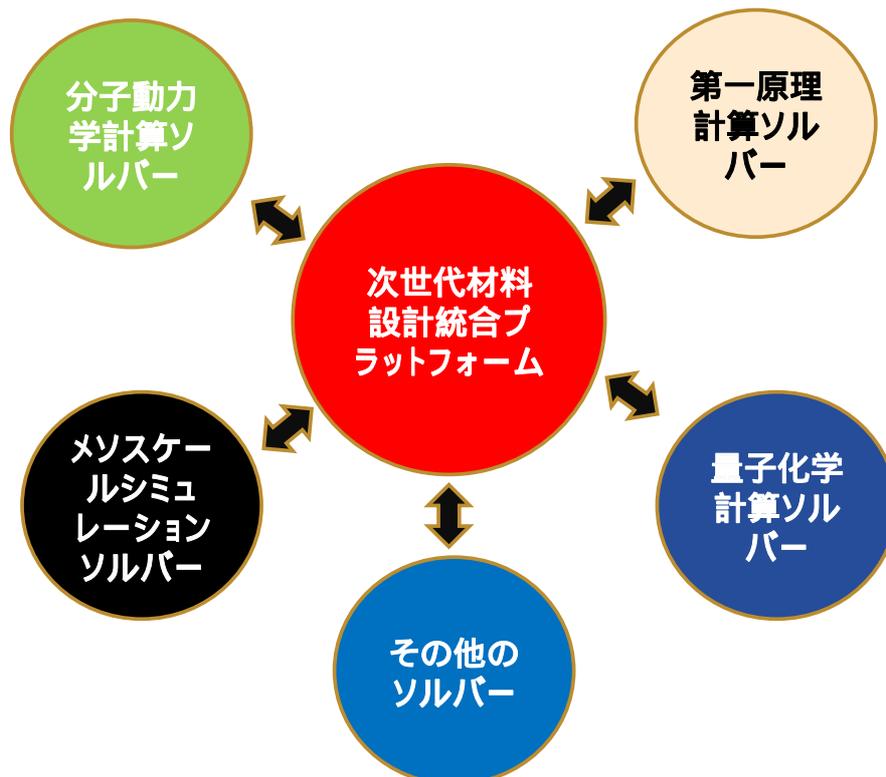
次世代材料設計統合システム開発の狙い

- ・ 種々のシミュレーションソフトを統合的に利用可能に！
- ・ 純国産の統合システム構築
- ・ 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



7

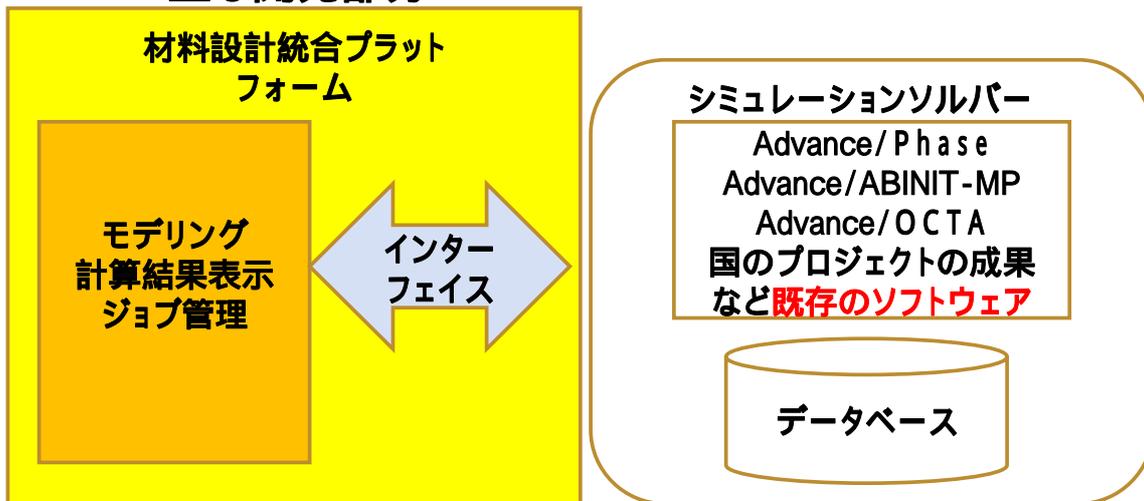
開発する材料設計支援システム：全体像



8

開発する材料設計支援システム：開発部分

主な開発部分



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、全て一つの統合システムで行うことを可能にする、次世代材料設計統合プラットフォームを開発する。ソルバーは既存のものを利用する。



開発する材料設計支援システム：開発部分詳細

次世代材料設計統合プラットフォーム

●ビジュアライザの機能
 >分子軌道図、電子密度分布等の表示

>ダイナミックスの動画表示

>グラフ・チャート等の表示(スペクトル表示等)

●ビルダーの機能
 >分子構造作成、ポリマー構造作成、アモルファス構造作成

>結晶構造作成、表面・層・スラブ構造の作成

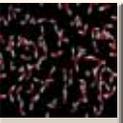
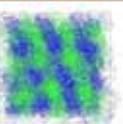
●インターフェースの機能
 >実行中の計算の管理

>一括計算を多数サーバで同時処理

>ソルバー群への入出力インターフェース



開発する材料設計支援システム: 想定ソルバー

計算手法	イメージ図	ソフトウェア名【開発元】	概要
量子化学計算		ABINIT-MP 【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、文科省ITプログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・フラグメント分子軌道法を実装したソフトウェア。 ・低分子のみならず生体高分子等の巨大分子系も対象。 ・分子をフラグメントと呼ばれる小さな原子団に分割して分子軌道計算を行い、結果を加え合わせ、巨大分子の計算を行える。
分子動力学計算		ソルバー候補を検討中	<ul style="list-style-type: none"> ・分子、溶液、アモルファス等の分子動力学計算
第一原理計算		PHASE 【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクト、文科省ITプログラム「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・電子材料・触媒等の密度汎関数法を用いた平面波-擬ポテンシャル第一原理計算プログラム。CASTEPやVASPと同等の機能。 ・電子状態計算・構造最適化等が可能。 ・高い並列化率とベクトル化率を実現している。
メソスケールシミュレーション		OCTA 【経産省・NEDO「高機能材料設計プラットフォームの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> ・ポリマー等のソフトマテリアルの計算を行うソフトウェア。 ・空間スケールごとに異なる計算理論に基づいた複数プログラムで構成され、一つのプラットフォームで統合化されている。
大規模密度汎関数計算		ソルバー候補を検討中	<ul style="list-style-type: none"> ・ナノスケールの物質群の物性計算のための大規模密度汎関数計算



開発する材料設計支援システム: まとめ

統合プラットフォームの機能: ソルバー群への入出力インターフェース、分子構造・ポリマー構造・結晶構造作成、表面・層・スラブ構造の作成、分子軌道図、電子密度分布等の表示、ダイナミックスの動画表示、グラフ・チャート等の表示(スペクトル表示等)、実行中の計算の管理と計算結果の表示

ソルバーの機能: ソルバー間の直接連携、整備された必須パラメータ、汎用計算手法を全て搭載(量子化学計算・第一原理計算・分子力学計算・分子動力学計算・統計力学計算・粗視化動力学計算等)

次世代材料設計支援システムの特徴のまとめ

シミュレーションの対象: 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、触媒、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

ソルバー: Advance/PHASE(第一原理バンド計算)、Advance/ABINIT-MP(量子化学計算)、Advance/OCTA(ポリマー等の計算)

その他のソルバー: 分子動力学計算エンジン、第一原理計算エンジン、新たに開発する計算エンジン等も検討



開発する材料設計支援システム:メリット

- 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る。 **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期待できる。**
- 主要計算ソルバーは、当社が開発に深く関わってきた。 **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。**
- 開発者の大半は日本人。 **サポートサービスに意思疎通容易のメリット。**
- 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。 **欧米ソフトウェアに対して价格的に優位。**



13

開発ロードマップ

開発フェーズ	期間	開発内容	備考
第1フェーズ	2009年4月～9月	要求仕様書、プログラム基本設計書、マニュアルの作成、ソルバーの選定	セミナーにて報告
第2フェーズ	2009年10月～未定	分子構造・結晶構造・高分子構造・液体構造等のビルダー、分子構造・結晶構造・高分子構造・液体構造等のグラフィック表示、ソルバーとの入出カインターフェース	モデルをプラットフォームで作成し、ソルバーでの計算を可能にする。
第3フェーズ	未定	ソルバーで計算した結果を解析するためのグラフィック表示部(グラフ、チャート、分子軌道図、ダイナミクス動画表示等)の開発、ジョブの実行状況表示・実行管理	統合プラットフォームの試行的提供・販売を開始
第4フェーズ	未定	インターフェースをとるソルバーの拡充、各種機能の改良・改善	統合プラットフォームの本格的販売を開始



14

まとめ

- 当社は、今後、材料設計支援システムの開発に取り組む。
- サポートサービスの充実と安価なソフトウェア供給により、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したい。
- 国産ソフトウェアの普及促進に貢献したい。

