

2011  
1/27



## 2次電池CADシステム(ABaS)・ 材料設計統合システム(AMDS)紹介セミナー

### 新製品 材料設計統合システム(AMDS)の概要

アドバンスソフト株式会社  
奥野 好成

### 発表内容

- 1. 材料設計統合システムの全体像
- 2. 計算ソルバー
- 3. 材料設計統合プラットフォームの概要
- 4. 今後の開発予定



# 1. 材料設計統合システムの全体像

## 材料設計統合システムの狙い

### 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。

次世代材料設計支援システム開発が望まれる。

### 次世代材料設計支援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

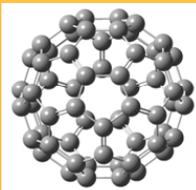


3

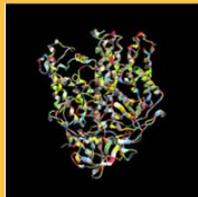
## 材料設計統合システムの思想

### 多様な研究対象

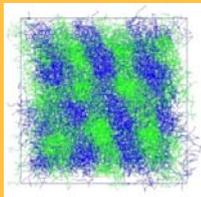
分子



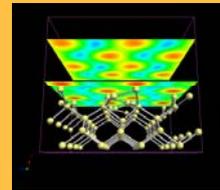
タンパク質



ポリマー



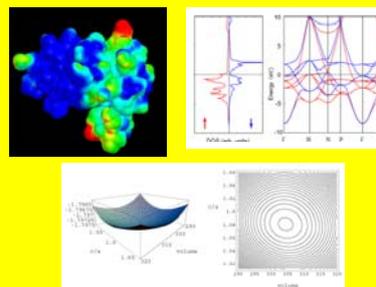
結晶



### 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
- ・ 粗視化動力学

### 数多くの解析結果

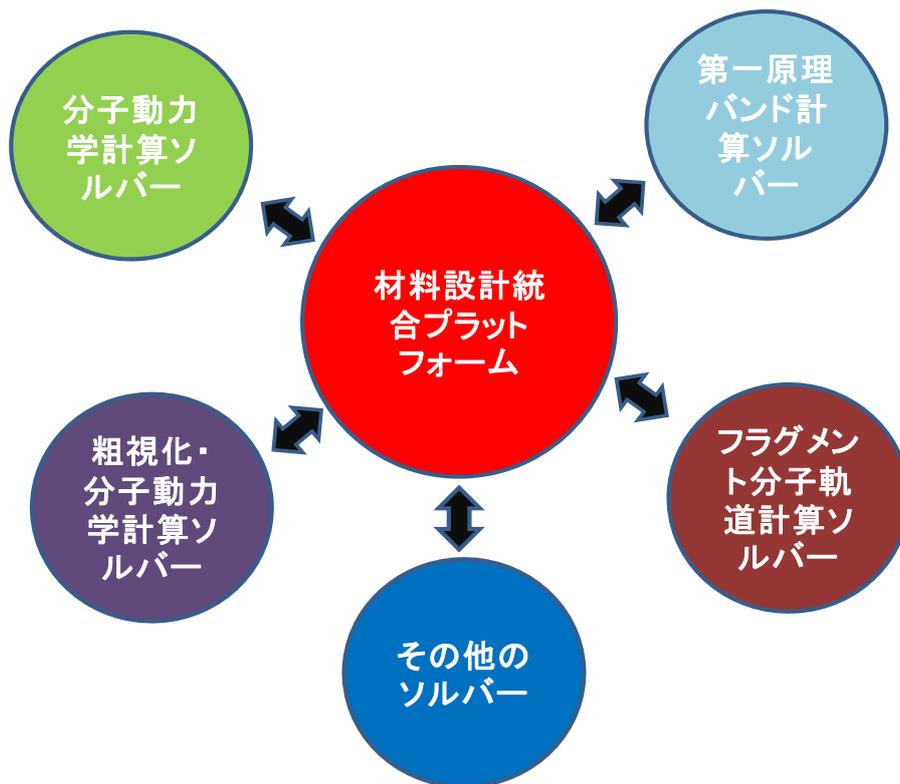


一つの統合システムであらゆる解析を容易かつ高速に行う

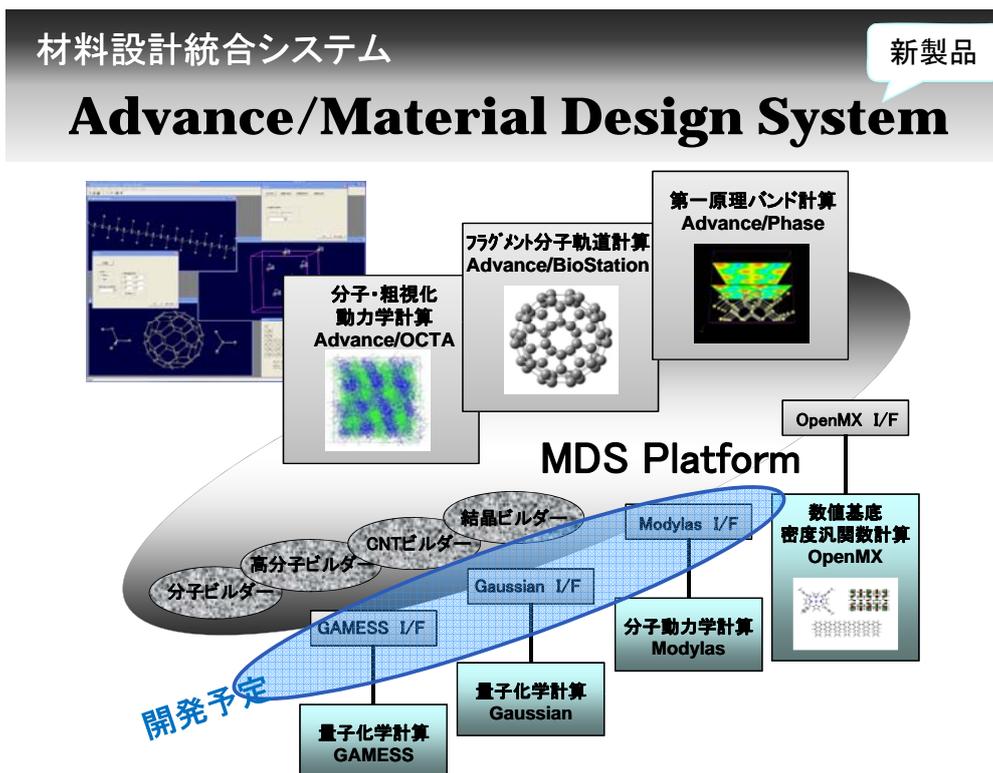


4

# 材料設計統合システムの模式図



# 材料設計統合システムの全体像



## 材料設計統合システムの特長

- 種々の手法による計算を1つのプラットフォームで全て実施可能
- 局在数値基底密度汎関数法OpenMXとの入出力インターフェースによる高速な材料設計計算が可能(オーダーN法による高速計算、グラフェンやナノチューブも計算可能、分子の電気伝導計算)
- 高分子フラグメント分割機能によるフラグメント分子軌道法(FMO)の高分子への適用
- 高分子に対するFMO計算とその結果を利用した分子力学計算による、高分子材料のトータル解析



7

## 材料設計統合システムのメリット

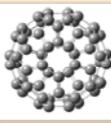
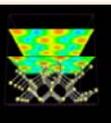
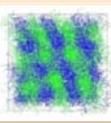
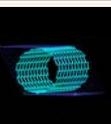
- 異なるシミュレーションソルバー間でモデリングのやりとりが容易になり、統合プラットフォームの利用法のみマスターすれば多数のシミュレーションソルバーが容易に利用できるようになる。⇒多様な解析を容易かつ高速に行えるため、材料設計分野での研究開発効率を飛躍的に高めることが期待できる。
- 主要計算ソルバーは、当社が開発に深く関わってきた。⇒計算ソルバー・統合プラットフォームのいずれも開発に関わった人材がサービスを提供することができる。
- 開発者の大半は日本人。⇒サポートサービスに意思疎通容易のメリット。
- 当社のソフトウェアは、欧米のソフトウェアに比べて安価。⇒欧米ソフトウェアに対して価格的に優位。



8

## 2. 計算ソルバー

### 現時点で、インターフェイス可能な計算ソルバー

計算手法	イメージ図	ソフトウェア名【開発元】	概要
フラグメント分子軌道計算		ADBS【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」及び「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> <li>・フラグメント分子軌道法を実装したソフトウェア</li> <li>・低分子のみならず高分子や生体分子等の巨大分子系も対象</li> <li>・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。</li> </ul>
第一原理バンド計算		Advance/PHASE【文科省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」及び「革新的ソフトウェアの開発」プロジェクト】	<ul style="list-style-type: none"> <li>・平面波-擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラム</li> <li>・CASTEPやVASPと同等の機能</li> <li>・電子状態計算・構造最適化等が可能</li> <li>・高い並列化率とベクトル化率を実現している。</li> </ul>
粗視化・分子動力学シミュレーション		Advance/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"> <li>・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</li> <li>・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。</li> </ul>
局在数値基底密度汎関数計算		OpenMX【北陸先端大学尾崎先生】	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ナノスケール物質群の局在数値基底による密度汎関数計算</li> <li>・オーダーN法による高速計算可能</li> <li>・グラフェンやナノチューブも計算可能</li> <li>・分子の電気伝導計算可能(IV特性等)</li> </ul>



9

## 計算ソルバーの特徴

計算ソルバー	手法	主な解析対象	メリット
ADBS	フラグメント分子軌道法 量子化学計算手法	低分子、高分子、 タンパク質	フラグメント分割による高速計算 極めて高い並列化効率
Advance/PHASE	密度汎関数法 擬ポテンシャル 平面波基底	金属、絶縁体、半 導体、磁性体、誘 電体、圧電体、 ハーフメタル	精度の高い結果 ハンド計算での信頼性 高い並列化効率
OpenMX	密度汎関数法 擬ポテンシャル 局在数値基底 オーダーN法を装備	低分子、高分子、 タンパク質、結晶、 グラフェン、CNT	局在数値基底による高速化 オーダーN法による高速計算 電流-電圧特性の計算 並列計算可能
Advance/OCTA	分子・粗視化動力学法 原子間ポテンシャル 粗視化ポテンシャル	高分子、液体、樹 脂、プラスチック、 液晶	応力-歪み、ガス拡散、相分離構造、光学特性、体積弾性率、ガラス転移温度等の動的性質に関する解析可能



10

### 3. 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の機能

分子ビルダー	マウスクリック操作による3次元分子構造の構築機能、水素を付加した原子やフラグメント単位での分子構築機能、結合距離や原子位置のクリック操作での容易な変更機能、3次元分子構造の拡大・縮小・並進・回転による容易な構造確認機能
結晶ビルダー	格子定数や座標入力による結晶構造構築機能、構造データベースから入手できるCIFファイル形式の読込によるブラベー格子での結晶構造表示機能、ブラベー格子から基本格子への自動変換機能、SuperCell の容易な構築機能
高分子ビルダー	モノマーからポリマーの構築機能(ホモポリマー等に対応)、高分子のフラグメント分子軌道計算に必要なフラグメント分割機能
CNTビルダー	カイラル指数入力によるカーボンナノチューブ構造の自動構築機能(アームチェア型、ジグザグ型以外にも対応)
計算ソルバーインターフェイス	分子・結晶・高分子ビルダーで構築した分子構造で計算条件を指定する機能、計算入力ファイルの構築機能、計算入力ファイルによる計算の実行機能、計算の出力ファイルから構造を読み取り3D構造を表示させる機能、Dreidingポテンシャル等の分子動力学パラメータ自動設定

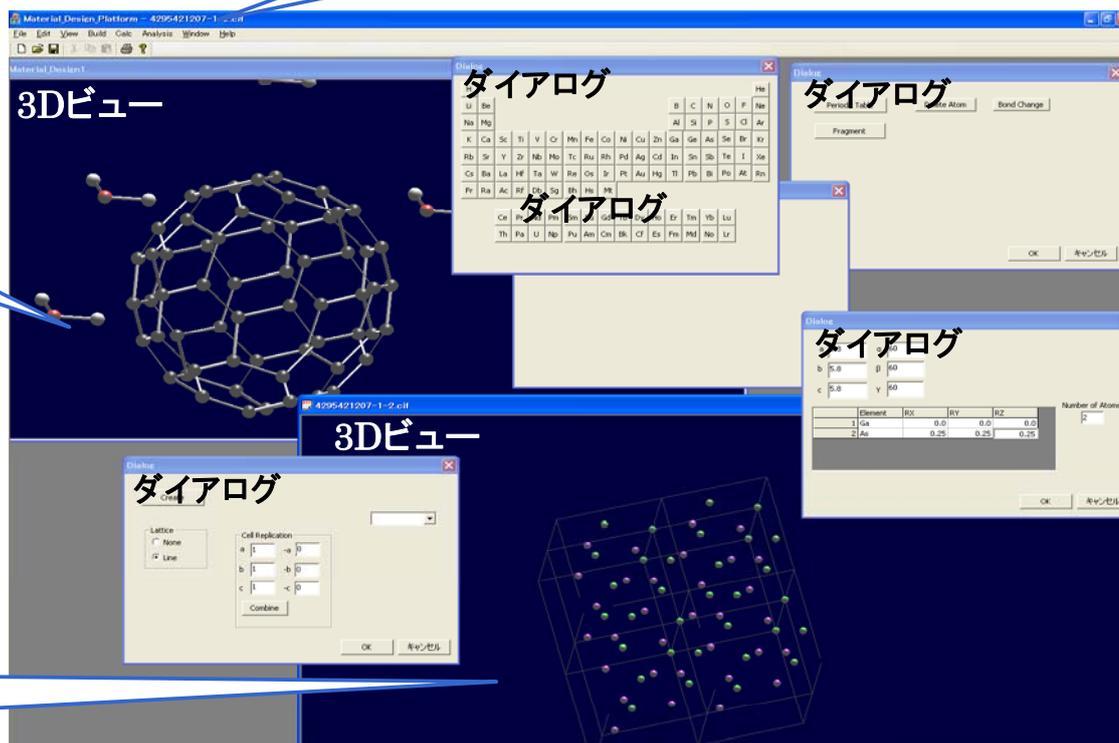


#### 画面構成

設定項目の選択

回転・拡大・移動・分子描画

回転・拡大・移動・分子描画



# 分子ビルダー

分子描画ビューウインドウ

Material Design Platform - Material\_Design1

Dialog

Periodic Table Delete Atom Bond Change

Fragment

分子ビルダーダイアログ

各原子の結合情報ダイアログ

結合次数・距離操作ダイアログ

置換基・官能基ダイアログ

周期律表ダイアログ

NUM



# 結晶ビルダー

Material Design Platform - Material\_Design1

CIFファイルを読み込、結晶構造を表示

結晶情報入力ダイアログ: 格子定数等の入力

Element	RX	RY	RZ
1 Si	0	0	0
2 O	0.5	0.5	0.5

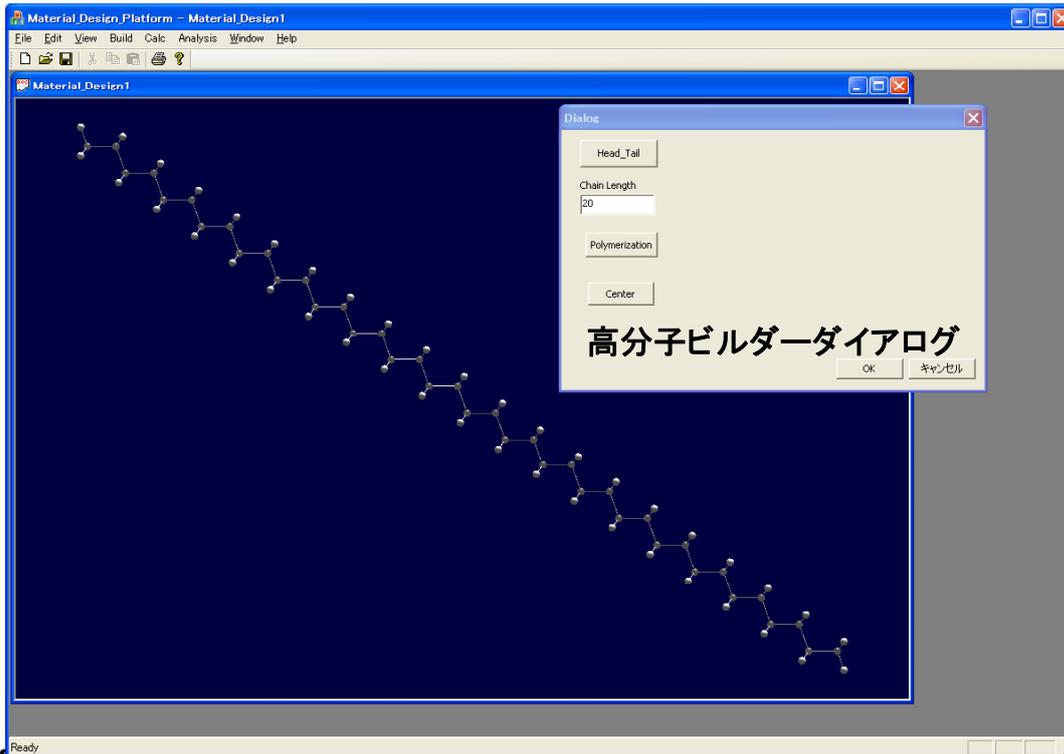
Number of Atoms: 2

結晶ビルダーダイアログ

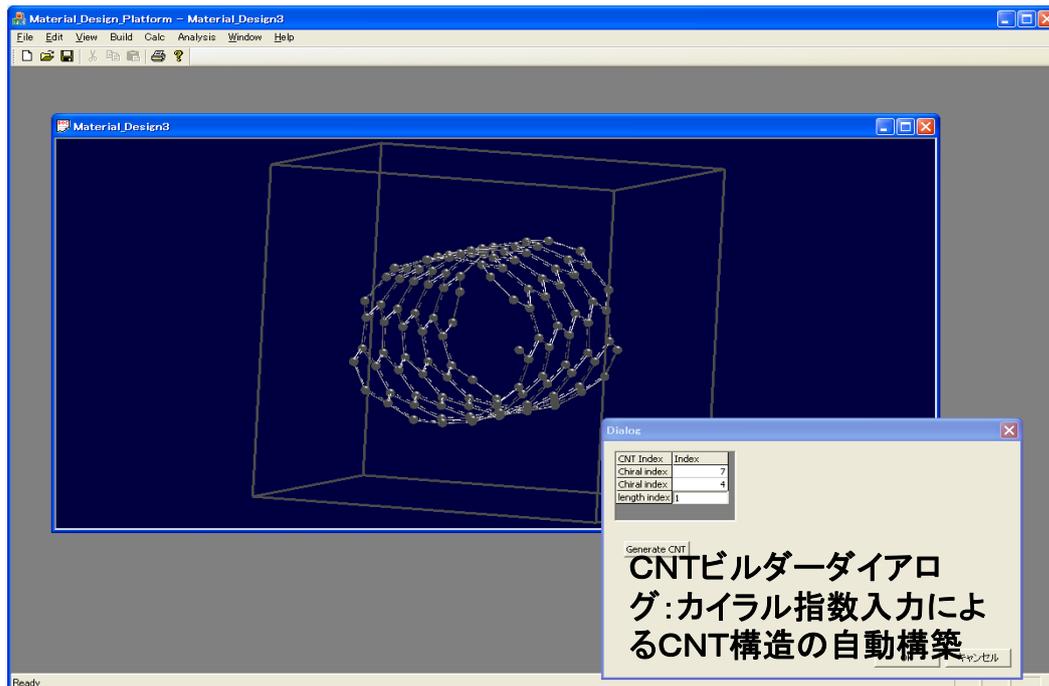
NUM



# 高分子ビルダー

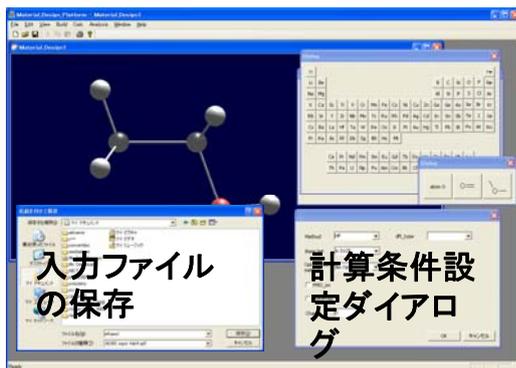


# CNTビルダー

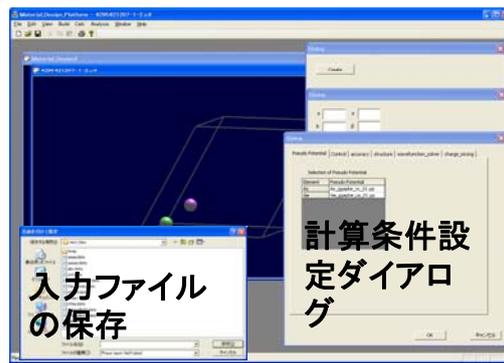


# インターフェイス: 計算条件設定

ADBS



Advance/PHASE



Advance/OCTA



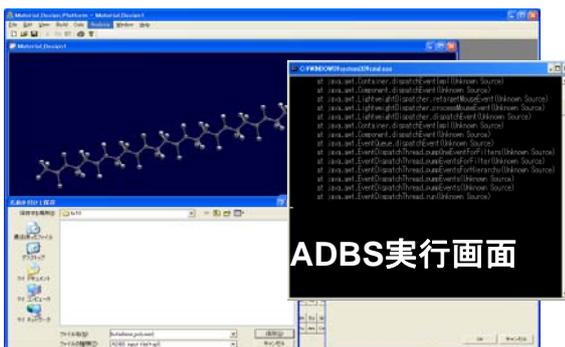
OpenMX



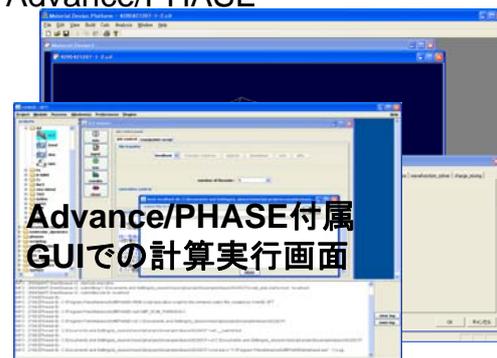
17

# インターフェイス: 計算の実行

ADBS



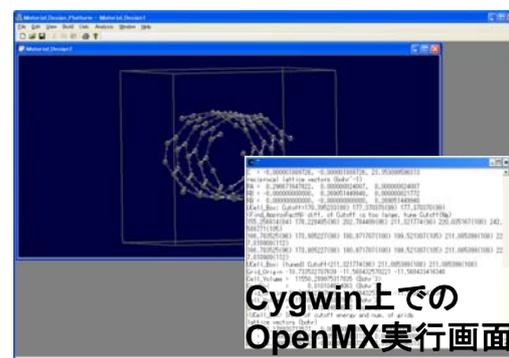
Advance/PHASE



Advance/OCTA



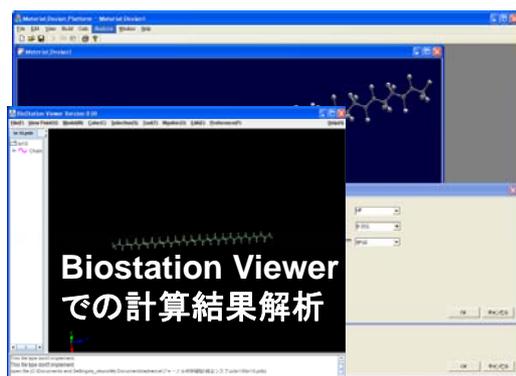
OpenMX



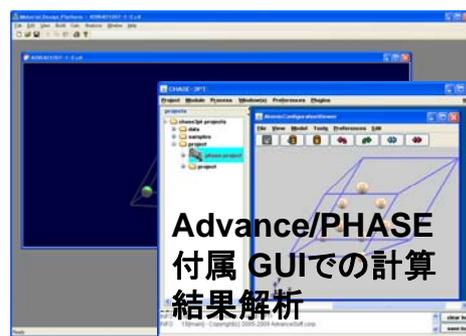
18

# インターフェイス: 計算結果解析

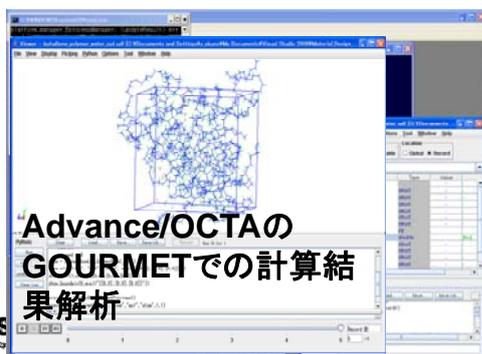
ADBS



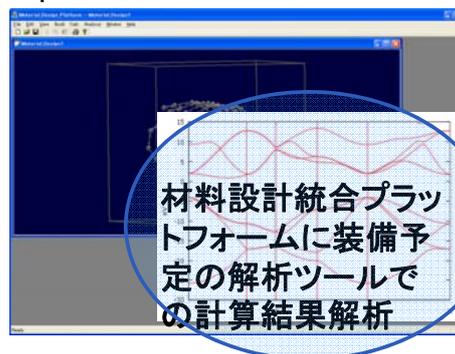
Advance/PHASE



Advance/OCTA



OpenMX



開発中



19

## 4. 今後の開発予定

- 高分子フラグメント分割の手動設定機能
- 結晶表面構築と表面上への分子の配置機能の整備
- Amber、UFF、粗視化ポテンシャルの整備
- OpenMXの解析機能の整備
- Modylas、Gaussian09、GAMESSとのインターフェイスの整備



20