

シミュレーションを用いた材料設計システムにおける ケモインフォマティクスの応用可能性

林 亮子[†]

[†]: 金沢工業大学 工学部 情報工学科 〒924-0838 石川県白山市八東穂 3-1

近年の計算機の急速な発展にともない、机上でもマルチコア計算機が利用でき、さらにグリッド／クラウドコンピューティング環境が整備されてきたため大量の計算資源が利用できる。また、計算化学や計算物理のシミュレーションプログラムも成熟してきており、容易に大量のシミュレーションを行うことができる。しかし、シミュレーション結果の実体は大量の数値データであり、近年様々な分野でビッグデータが注目されているように、シミュレーションにおいてもデータの利用技術はまだ開発の余地がある。本ポスターでは、計算化学や計算物理のシミュレーションを用いた材料設計を目標とし、材料設計のうちでも特に分子レベルで構成する材料を想定する。分子に関する数値的な取り扱いやデータ処理では、ケモインフォマティクス^[1]と呼ばれる分野がすでに確立されており、その成果がシミュレーション結果のデータ処理に応用できる可能性がある。そこで本ポスターでは、シミュレーション結果データの自動処理を目標としてケモインフォマティクスの応用可能性を検討した結果を報告する。

本ポスターで想定する材料設計シミュレーションは、GAMESS や Gaussian などの量子化学パッケージプログラムを使用し、構造の最適化を行う。そのようなプログラムでは、すでに知られた構造を参考にして原子を仮配置し、計算の条件を設定して、安定構造を表す終了条件を満たすまで計算を繰り返す。結果データは、おおむね計算に用いた原子の原子番号と原子の相対的な位置を含むが、原子がつくる構造の認識までは行わないことが多い。分子内では分子式すなわち原子の種類と個数が同じであっても構造が異なる異性体が存在し、構造が異なると分子の機能が変化するため、構造をどう扱うかが問題であってケモインフォマティクスで研究されている。さらに、複数の分子が結合した材料では、複数分子の位置関係がつくる構造をどう数値的に扱うかが問題となる。

当日は材料設計シミュレーションの結果得られる構造に関して、ケモインフォマティクスのアプローチの応用可能性を検討し、話題提供を行う予定である。専門の方々や経験のある方々にご教示戴けると幸いである。

References

- [1] 「ケモインフォマティクス」、Gasteiger and Engel edit, 船津 公人監訳, 丸善, (2005).

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金 基盤 (C) 課題番号 23500138 による。関係各位に感謝する。