

物質・材料設計のための仮想実験システムの開発

7S-11

小池 秀耀 永野 千恵美 西川 宜孝

株式会社 富士総合研究所 計算科学・小池クラスター

1 はじめに

近年、コンピュータを用いた物質・材料設計に関する期待が高まっている。すでに、いくつかのシステムが市販されており、その有効性が立証されつつある。しかしながら、汎用性があり、かつ、物質・材料設計に必要とされる一連の作業を全面的に支援する本格的な物質・材料設計システムは、いまだ、存在しない。このような、システムを開発するためには、新しい概念が必要となる。

我々は、「作業フロー」という概念に基づく、本格的な物質・材料設計システムについて提案し、そのプロトタイプを試作した [1][2]。このシステムを「物質・材料設計のための仮想実験システム」（以下、仮想実験システム）と呼ぶこととする。本報告では仮想実験システム概念とプロトタイプの動作例について紹介する。

2 仮想実験システムの概要

物質・材料設計は、一連の作業の流れとなる。ここで提案する仮想実験システムは、対象とする設計毎に作業フローを定義し、各々の作業単位毎に必要なデータ、マップ、シミュレーション・プログラム等を用意する。これらをツールと呼ぶ。ツールを用いて設計者は様々な数値実験や検討を行うことが可能となる。ツールおよび作業間のデータの受け渡しはシステムがサポートする。図1に、仮想実験システムのソフトウェア構成図を示す。

3 仮想実験システムの特徴

- 作業フローとして設計手順を登録でき、様々な種類の材料設計に対応できる汎用性がある。

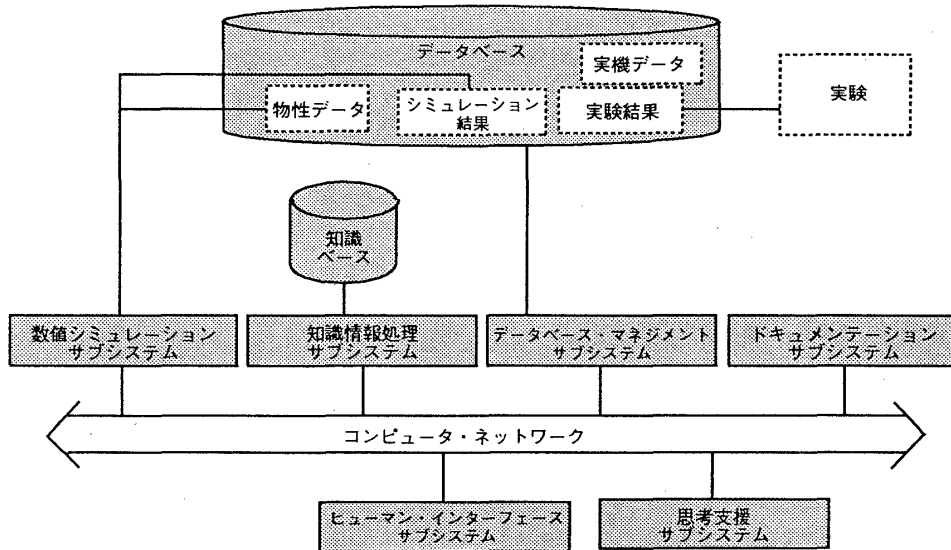


図1: 仮想実験システムのソフトウェア構成

Development of Virtual Experiment System for Materials Design

Hideaki Koike, Chiemi Nagano, Nobutaka Nishikawa

Koike Cluster : Computational Science Engineering

Fuji Research Institute Corporation

3-18-1 Kaigan, Minato-ku, Tokyo 108, Japan

koike@crab.fuji-ric.co.jp

- 作業毎にシミュレーション・プログラムやマップなどをツールとして定義できる。
- ツールやデータは、容易にシステムに組み込んだり、削除することができる。
- 材料設計のノウハウ、例えば作業手順、データの設定などを、仮想実験システムに知識として登録・蓄積する仕組みが用意されている。
- 作業間およびツール間のデータの受け渡しは、仮想実験システムがサポートする。
- ソフトウェアは階層構造としてあり、汎用性のあるアプリケーション・ソフトウェアと、特定の材料設計に固有のアプリケーション・ソフトウェアを区別して取り扱っている。

さまざまな手法、ツールを用いて物理量を求め、それらと比較検討することにより、最適な物理量を決定することも可能である。ツールをクリックすると、ツールであるソフトウェアが実行に入り、まず、入力画面が現れる。以降の操作は通常のプログラムの実行と同じである。

謝辞

本研究は平成7年度科学技術振興調整費による総合研究「物質・材料設計のための仮想実験技術に関する研究」の一環として、(株)富士総合研究所が科学技術庁より委託を受けて実施したものである。

4 プロトタイプ・システム

合金設計を対象とした、仮想実験システムのプロトタイプを試作した。図2は作業フローに各々の作業を実行するために必要な手法およびツールを加えたものの一部である。仮想実験システムでは、まず対象とする材料設計、例えば合金設計、を選択すると図2に対応した作業フローの図が現れる。ある「作業」をクリックすると、手法とツールのウィンドウが開く。設計者は画面を見ながら、適切な手法、ツールを選択し、ツールを用いて計算や推論を行い、そのタスクで決定すべき物理量を求める。

参考文献

[1] N. Nishikawa, C. Nagano, and H. Koike. Development of virtual experiment system for material design. In *International Workshop on Computer Modelling and Simulation for Materials Design*, 1996.

[2] 小池, 永野, 西川. 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発. 第2回 物質・材料設計のための仮想実験技術シンポジウム, 1996.

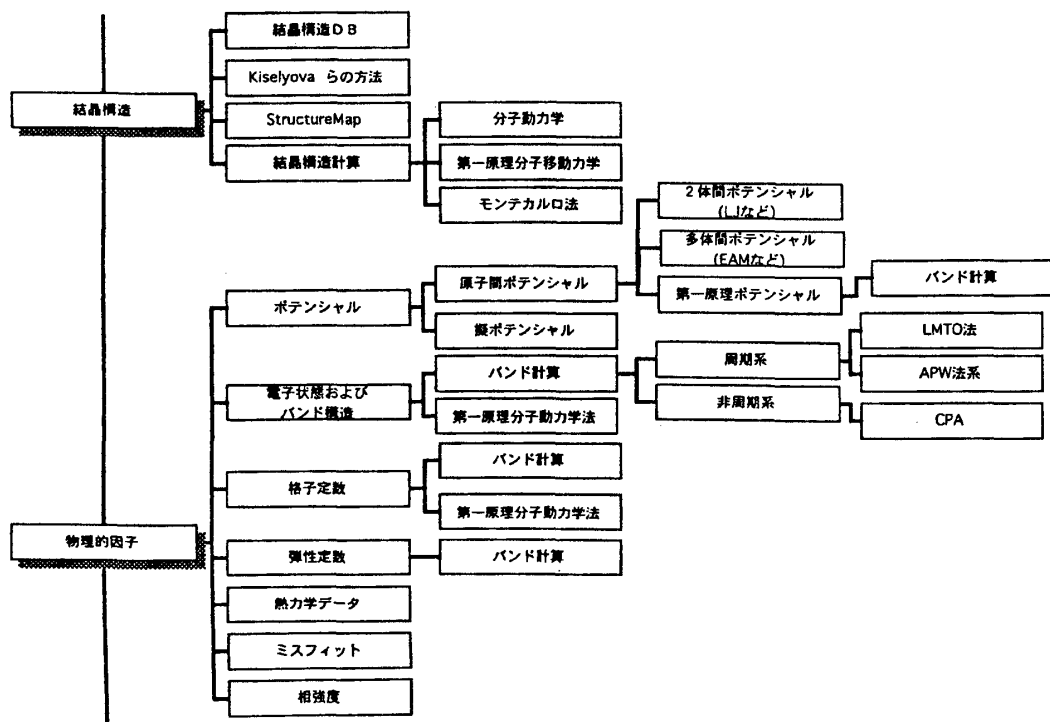


図2: 合金設計の作業フロー図 (一部)