

物質・材料設計のための仮想実験システム — システムの機能および実装方法 —

1 G-7

Virtual Experiment System for Materials Design
- A Specification and an Implementation of a Virtual Experiment System -

小池 秀耀、西川 宜孝、永田 毅
株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター

1. はじめに

コンピュータを用いた物質・材料設計は、数値シミュレーションをはじめとして、データベース、知識情報処理、ヒューマン・インターフェース等の様々な要素技術を有機的に統合化して使用することが不可欠である。現在、開発されている物質・材料設計システムは、シミュレーション・ライブラリ、共通 GUI から構成されているものが多く、物質・材料設計における一連の設計手順を全面的に支援する実用的な物質・材料システムは存在していない。我々は、物質・材料設計の一連の設計手順をシステム上で実現し、物質・材料設計のための仮想実験が可能となる仮想実験システムのプロトタイプを開発している [1-2]。

仮想実験システムは、物質・材料設計に必要とされる一連の作業を支援するために、設計シナリオの記述、設計手順の蓄積、再利用を可能とする「タスクフロー」という新しい概念を導入している。仮想実験システムは、ネットワーク分散処理に対応するため、Web サーバを基に構築しており、ユーザ・インターフェースは、JAVA を用いて実装している。

2. 仮想実験システムの概要

仮想実験システムは、物質・材料設計のための要素技術である以下の各種ツール群およびユーザ・インターフェースから構成されている(図1)。

- 数値シミュレーション・ソフトウェアを中心とする解析ツール群
- データベース・マネージメント・システムおよび材料特性データベース、システム・データベース群
- 知識情報処理 (バーチャル・コンサルタント[4])
- 結果編集ツール群、可視化ツール群
- ステアリング・システム
- ヒューマン・インターフェース
(タスクフロー作成・編集、数値シミュレーションの入力データ作成、数値シミュレーションの実行、可視化、結果編集、データベース・アクセス)

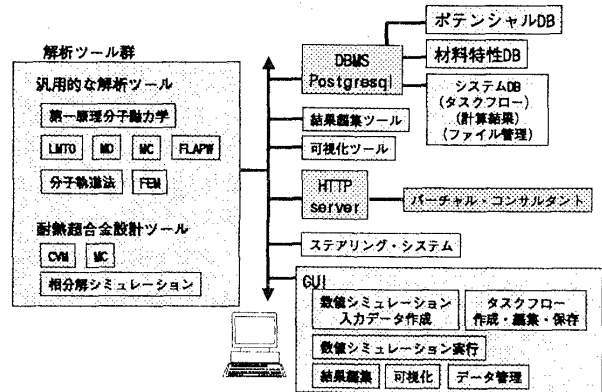


図1 仮想実験システムのシステム構成

2. 仮想実験システムの機能

2.1 タスクフロー作成、編集

物質・材料設計の一連の各作業をタスクと定義する。材料設計はタスクの連結で表現でき、このタスクの連結をタスクフローと呼ぶ。合金設計を例にとると、元素決定、組成予測、組織構造予測、機械的特性予測等が、それぞれ一つのタスクと考えられる。各タスクにおいて、求めたい材料特性に対し、様々な解析手法、解析ツールを関連づけることにより、多面的な材料特性予測が可能である。タスクフローは設計シナリオを記述したものである。タスクフローを保存することにより、設計シナリオ、設計ノウハウ、成功事例等を蓄積、再利用が可能になる。タスク制御機能として、タスクの作成、編集、保存が可能である。図2に、タスクフローの概念を示す。

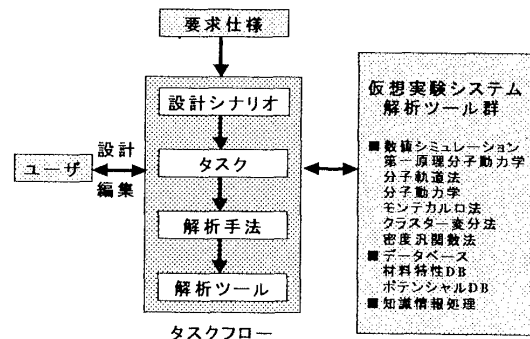


図2 タスクフローの概念

タスクフロー作成・編集画面は、図3に示すように、タスクフロー全体をフロー図で表示する。各タスクの

Property (図3) を表示させることにより、以下のタスクの定義、解析ツールの実行が可能である。

- タスクにおける様々の解析手法、手法に対応する解析ツールの解析ツール一覧からの選択、および登録
- 解析ツールの実行
- ノウハウの登録、各ツールの入出力データの登録

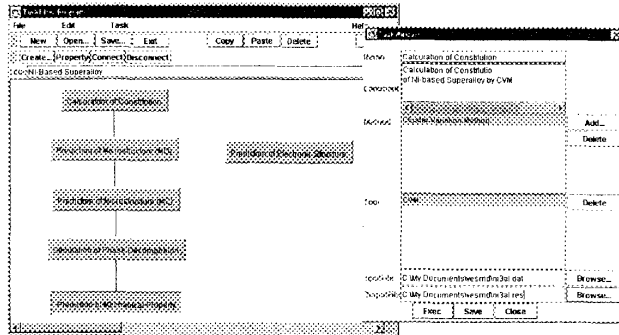


図3 タスクフロー作成、編集画面

2. 2 数値シミュレーション

総合的な物質・材料設計において、ミクロ・スケール、メゾ・スケール、マクロ・スケールの数値シミュレーション・ソフトウェアが必要である。合金設計、半導体設計に使用可能な数値シミュレーション・ソフトウェアを中心に、ミクロ・スケール、メゾ・スケール、マクロ・スケールの数値シミュレーション・ソフトウェアを仮想実験システムのプロトタイプに組み込んでいる。表1に、仮想実験システムに組み込まれているプログラムを示す。今後さらに、仮想実験システムのコンテンツの開発、収集、整備を行う計画である。

仮想実験システムでは、これらの数値シミュレーションの入力データ作成、実行のためのユーザインタフェースを提供している。

表1 数値シミュレーション・プログラム

数値シミュレーション・プログラム
第一原理的分子動力学プログラム
LMTO 法プログラム (バンド計算プログラム)
分子動力学プログラム
分子軌道法プログラム
CVM 法プログラム
相分解シミュレーション・プログラム
スパッタリング現象解析プログラム
量子輸送理論に基づいた第一原理的計算プログラム

2. 3 材料特性データベース

物質・材料設計において、物性データ、シミュレーション結果、実験結果等のデータベースを有効活用することが必要である。仮想実験システムでは、材料特性データベースの構築、およびデータの検索、登録、更新、削除が可能である。各解析ツールによる解析結果を、材料

特性データベースに登録し、他の解析ツールにおいて、材料特性を参照することにより、一連の材料設計の作業フローにおけるデータの受け渡しを支援する[5]。

2. 4 可視化、結果編集

シミュレーション結果、データベース検索結果の可視化として、3次元分子構造、結晶構造表示、2次元、3次元グラフ表示が可能である。3次元表示には、VRMLを用いている

2. 5 ステアリング機能

数値シミュレーションにおいて、プログラムの実行中に、リアルタイムにプログラムの制御、計算条件の変更、可視化等を行うステアリング機能を実装している[4]。

5. 仮想実験システムの実装方法

仮想実験システムは、ネットワーク分散処理に対応するため、Web サーバを基に構築しており、ユーザ・インタフェース部は、JAVA アプレットによって実装している(図4)。

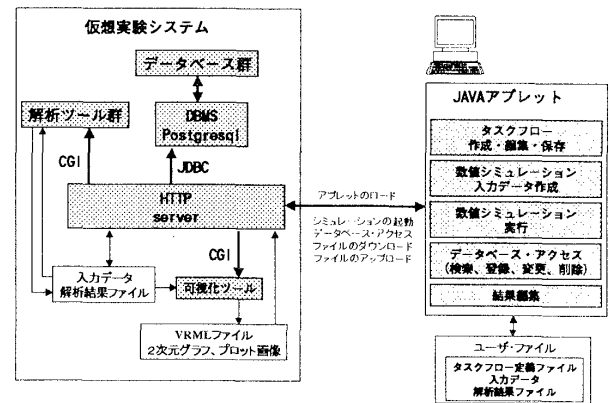


図4 システムの実装方法

参考文献

- [1] N. Nishikawa, C. Nagano and H. Koike: Integration of Virtual Experiment Technology for Materials Design, Computerization and Networking of Materials Databases, ATSM STP 1311, 1997
- [2] 西川, 小池: 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発, 計算工学講演会論文集 Vol.3, 1998
- [3] 星本: 合金開発支援のためのバーチャルコンサルタント, 第3回 物質・材料設計のための仮想実験技術シンポジウム, 1997
- [4] 西川, 鈴木, 永田, 小池: 物質・材料設計のための仮想実験システム - ステアリング機能 -, 情報処理学会 第58回 全国大会, 1999
- [5] 永田, 西川, 小池: 物質・材料設計のための仮想実験システム - 耐熱超合金を対象にしたシステムの検証 -, 情報処理学会 第58回 全国大会, 1999