

MATERIALS STUDIO COMPONENT COLLECTION

Pipeline Pilot の Materials Studio Collection は、新規材料開発に役立つ予測科学を、自動化されたワークフローに統合するソフトウェアソリューションです。Materials Studio に含まれる主要なシミュレーション・ツールが Pipeline Pilot に統合されます。

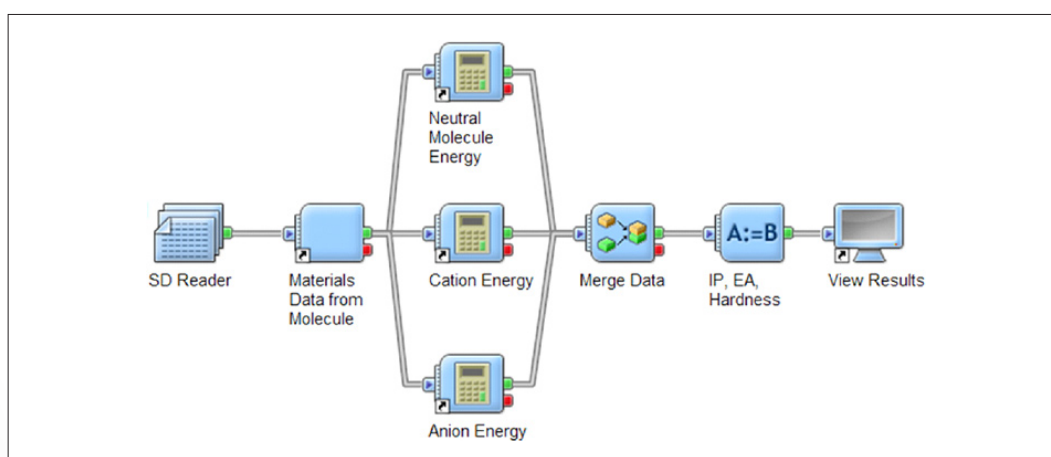
Materials Studio Collection は、Materials Studio の強力な材料特性予測機能と Pipeline Pilot の優れた科学ワークフローをキャプチャーし自動化や合理化を行う機能を組み合わせて、様々な分野で利用することができます。

従来の材料モデリングアプリケーションに比べて、自動化したい複雑なワークフローを迅速かつ簡単に作成し他の技術者と共有する事ができます。また、自動化したワークフローを多くの類似した系に対して簡単に実行できます。他の Pipeline Pilot コレクションと併用すれば、より強化したワークフローを全社規模で導入できます。

Materials Studio Collection を使用すると、作業量を軽減し、生産性を高めることができます。

- 使いやすいグラフィカルなプログラミングによりマルチステップのワークフローを作成

- 計算を自動化し、重要な機能を全社規模で利用できるように Web ベースのアプリケーションとして導入
- 新しい並列処理オプションを利用して計算を高速化



複数の操作や計算を必要とするワークフローをキャプチャーし自動化できます。この例では、Materials Studio DMol³ を使用して、一連の構造のイオン化ポテンシャル(IP)、電子親和力(EA)、化学的な硬さ (Chemical Hardness = $(IP-EA)/2$)、を算出しています。結果はグラフィカルに表示したり、並べ替えたり、後続のワークフローの入力データとして使用することができます。

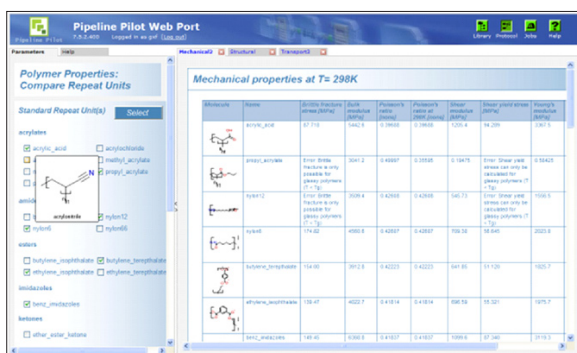
作業負担を軽減する MATERIALS STUDIO COLLECTION

マルチステップのワークフローを作成

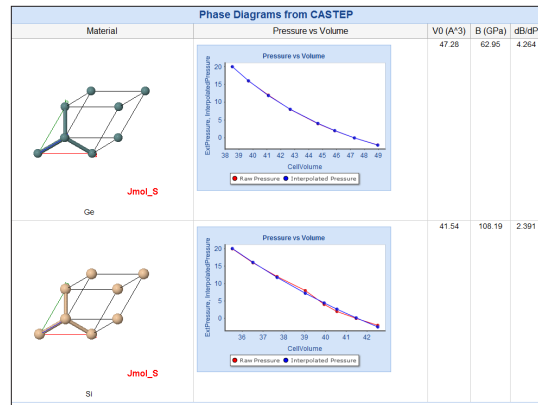
物性によっては、必要な結果を導き出すために、異なるプログラムを複数使用した計算が必要となる場合があります。たとえば、非晶質ポリマーの作成には、モノマーからポリマーの構築、単位格子のパッキング、MDを使った系の平衡化、アンサンブル平均の測定など、多くのステップを経る必要があります。このような処理を自動化することで、ユーザーは大きなメリットを得ることができます。Materials Studio Collection を使用すると、高度なワークフローを初心者でも簡単に作成できるため、時間を節約し、モデリング作業を簡略化することができます。

機能を自動化して全社規模で導入

多くの研究者が同じ物性計算を繰り返し行っています。Materials Studio Collection では、数多くの計算を自動化できます。代表的なものには、生成熱、バンドギャップ、弾性定数、振動スペクトル、溶解パラメーターがあります。処理を自動化することにより、人為ミスは減少し、単調な計算作業から開放されます。ボタンをクリックするだけで、膨大な化合物に対して必要な物性計算を行い、カスタマイズ可能なレポートとして結果を出力できます。Pipeline Pilot Web Port を併用すれば、シンプルな Web ベースのインターフェースを使用して社内の同僚にこうした計算を配布することもできます。



Materials Studio Collection では、主要な機能を全社規模で配布可能な Web ポータルを作成できます。この例では、ポリマー物性を予測するコンポーネントを使用して、幅広い層のユーザーが構造を選択または入力して物性をリクエストできるツールを提供しています。結果は、見やすく共有も容易な表形式で表示されます。



複数のデータソースから一連の化合物を集め、その化合物に対して物性予測計算を行うワークフローの構築と実行が簡単になりました。粗視化並列処理で各計算を異なるサーバーに送信し実行するなどの操作や計算結果を自動的に照合し、レポートを作成する事なども容易にできます。

新しい並列処理オプションを利用して計算を高速化

多くの場合、新規材料開発や材料特性の最適化には膨大な計算とその処理が必要になります。圧力などの入力パラメーターを段階的に変更し繰り返し計算したり、膨大な数の化合物や材料に対して同じ計算をしたり、同じ系に対して繰り返し同じ計算を実行して正確な統計平均を求める場合など、どのような場合でも、複数の計算を行うことになります。Pipeline Pilot の Materials Studio Collection を使用すると、粗視化並列処理と細粒度並列処理の双方を使用した計算ができます。Pipeline Pilot では、作業を計算用のサーバー、クラスター、コアに分配して計算リソースを最適な状態で使用できるようにし、結果を得るのにかかる時間を劇的に短縮します。

MATERIALS STUDIO COLLECTION 概要

Materials Studio Collection では、次のことを実現します。

- Materials Studio をドラッグアンドドロップでワークフローの構築や管理ができます
- さまざまな物性計算機能が提供されているため、複雑な物性予測計算ワークフローをキャプチャーできます
- 表示およびレポート作成機能が提供されており、Materials Studio との相互運用も簡単にできます
- Pipeline Pilot とのシームレスな統合によりハイスループット計算を実現し、材料の新規開発や最適化を合理化します

MATERIALS STUDIO COLLECTION のコンポーネント

Classical Simulations Components

Amorphous Cell のコンポーネントを使用して、低分子や高分子の非晶質モデルを構築、分子を既存の構造にパッキングや、階層構造を作成します。作成後は、Forcite Plus の構造最適化コンポーネントおよび分子動力学コンポーネントにより、系を平衡化や時間依存特性を引き出すことが可能となります。凝集エネルギー密度、溶解パラメーター、弾性定数などの主要な物性を計算できます。

Quantum Mechanics Components

密度汎関数量子力学モジュールの CASTEP や DMol³ を使用したエネルギー計算や構造最適化を分子や結晶に対して行います。反応性指数、バンド構造、状態密度、その他の電子物性など、さまざまな物性を予測します。高速の半経験的量子力学モジュールの VAMP より、無数の化合物をスクリーニングし、双極子モーメント、原子分極率、スペクトル、軌道エネルギー、溶媒効果などの物性を計算することができます。

Analysis Components

基本的な分析を実施し、角度、距離、ねじれ角などの分配といった幾何学的特性を検証します。動径分布関数、回転半径といった構造的特性を算出します。

Readers、Writers、Convertor Components

CIF、マルチフレームトラジェクトリ、スタディテーブルなどの一般的な構造形式を読み取ることができます。Materials Studio のネイティブの構造やスタディテーブルに書き込むことができます。また Materials データ形式から Chemistry データ形式に相互変換し、他のコレクションの機能を利用できるようにします。

Crystallization Components

Polymorph コンポーネントを使用して、カスタムの多形体予測ワークフローを作成できます。Pipeline Pilot 環境を使用して粗視化並列処理を実現することにより、空間群ごとに異なる CPU に送信できます。

Manipulator Components

一連の分子を読み込み、水素を自動的に付加や構造の初期的なクリーニングなどが実行できます。結晶や階層構造の構築、系の対称性を完全に操作できます。新しいトラジェクトリを作成したり、トラジェクトリを読み込んで分割できます。

Property Calculator Components

系の周期性、分子量や原子の電荷といった単純な物性を計算します。Chi や Kappa 指数などは、Data Modeling Collection の強力なモデル構築ツールで構造物性相関(QSAR)モデルを構築するための記述子となります。

MaterialsScript Components

別のワークフローにドラッグアンドドロップしたり顧客に配布したりできるカスタムのコンポーネントを作成することにより、MaterialsScript のすべての機能を利用できます。パイプラインに追加できるように物性計算機能を拡張します。

Polymer Property Components

Bicerano 氏による『Prediction of Polymer Properties』¹ の最新版に基づき、ポリマー物性をすばやく簡単に計算します。ガラス転移温度、熱伝導率、界面張力などの物性を推定します。

Viewer、Reporting Components

Jmol ビューアを使用して分子と結晶の構造をウェブブラウザで視覚化できます。静止画像としての表示や、インターアクティブに回転可能なモデル、アニメーション化可能なトラジェクトリを Web ページやさまざまなドキュメントに埋め込むことができます。

ABOUT PIPELINE PILOT

Pipeline Pilot は、さまざまな場所に保存されているデータから科学的価値を引き出し、科学的ワークフローを自動化して、より広範な科学コミュニティでのコラボレーションを促進することにより、研究開発組織の技術革新を支援する、拡張性に富んだ大規模サイエンティフィック・インフォマティクス・プラットフォームです。Pipeline Pilot のコンポーネントコレクションはプラットフォームの科学的な構成要素であり、科学的なカテゴリや機能でグループ化されています。コンポーネントをグラフィカルに組み合わせることで、データの取得、フィルタリング、分析、レポート作成のワークフローを作成できます。

Materials Studio¹に関する詳細については、下記URLを参照してください。

<http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/>

1. J. Bicerano, Prediction of Polymer Properties, Marcel Dekker, Inc., New York, 2002.