

SciMAPS -新バージョン2.0リリース-

SciMAPSは、量子化学計算から分子力学・動力学計算まで、さまざまな計算化学手法に対応した材料設計支援プラットフォームです。その適用分野は、高分子の物性推算をはじめ、低分子や高分子の凝集状態や挙動の解析、分子反応の解析、固体、表面、界面の電子状態の解析等、多岐にわたります。

先日、8月下旬にSciMAPSの最新版であるバージョン2.0がリリースされました。ここでは、2.0で新たに加わったSciDPDおよびFHMixingについてご紹介します。

SciDPD

SciDPDは散逸粒子動力学(Dissipative Particle Dynamics)計算のプログラムです。散逸粒子動力学では、系にある分子を粒子の集合体に近似します。この粒子は同じ質量からなると仮定します。高分子はバネでつながった複数の粒子と近似します。低分子では、それ自体を一粒子とみなすこともできますが、水分子のように他の分子を構成する粒子より小さい場合は、複数分子を一粒子として近似します。

散逸粒子動力学は、分子動力学と同様に分子運動の時間発展を古典力学に従って計算します。しかし、粒子間に働く力を静電力、VDW力で近似している分子動力学とは異なり、粒子間に働く力を散逸力、ランダム力、保存力の3つからなると仮定しています。特に、距離が0に近づくにしたがって急速に大きくなり、0では無限大をとるレナード・ジョーンズ型のポテンシャルの斥力と比べ、保存力中に現れる斥力はある有限の値で最大値をとります。この性質は粒子の重なりをある程度許容することになるため、流体の挙動をあらわすのに適しているといわれています。この保存力の性質に加え、時間スケール、距離のスケールが分子動力学計算のそれよりずっと大きくなるため、散逸粒子動力学は、混合液体の相変化、ミセルの生成、高分子バルクの多形予測、薬物の放出現象等、分子動力学計算では扱いが難しいさまざまな流体の

シミュレーションに適しています。

Mesoscale Builder

SciMAPSでは、メソスケール系を構築するためにMesoscale Builderを用意しています。ここでは、系を構成するビーズ(粒子)の定義、ビーズにより構成される分子の定義、分子をどのように配置するかを指定します。ビーズによる分子の定義には、専用のスケッチ機能(図1)が用意されており、分子構築をより視覚的に行えるようになっています。

SciDPD Interface

SciDPD Interfaceでは、Mesoscale Builderで構築された構造に対し、計算の設定を行います。ビーズ間の相互作用などビーズに関する定義から、ミセル、二分子膜、界面など解析するモデルのタイプまで指定することができます(図2)。

Trajectory Analysis

SciDPDの計算によって得られた結果はグラフとして表示することができます。グラフ化できる物理量としては以下のものがあります。

- ・各ビーズの拡散定数
- ・分子の末端間距離
- ・温度、圧力
- ・界面の密度分布
- ・二分子膜の厚み
- ・ミセルの平均半径
- ・ミセルの表面積
- ・ミセルの拡散定数 等

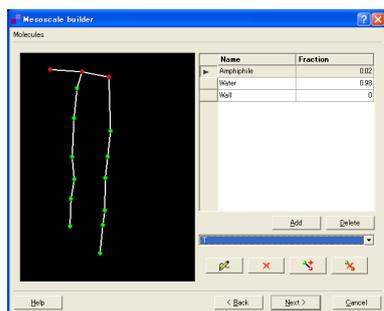


図1 Mesoscale Builderのスケッチ画面

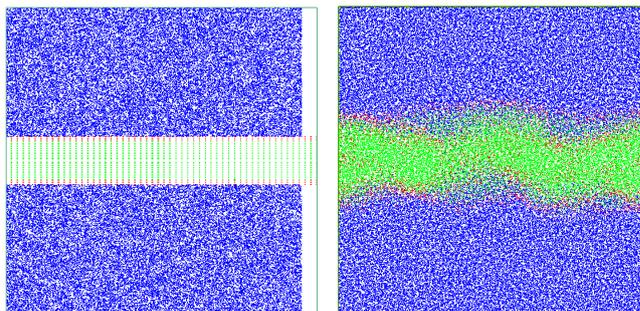
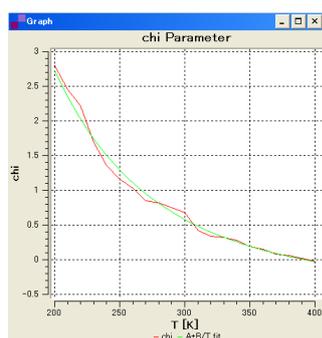


図2 2分子膜の構造とシミュレーション後の構造(左図:初期、右図:10000ステップ後)

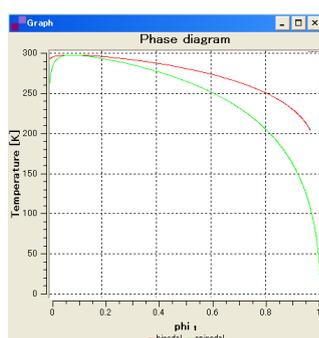
FHMixing

FHMixingは、Molecular Silverware法による二元混合物のためのモンテカルロシミュレーションソフトウェアです。ここでは、モンテカルロ法を利用してセグメント間相互作用エネルギーの分布とその配位数を計算することで χ パラメータを求め、混合自由エネルギー、余剰自由エネルギーをグラフ化したり、二元混合系の相図を描いたりします(図3)。

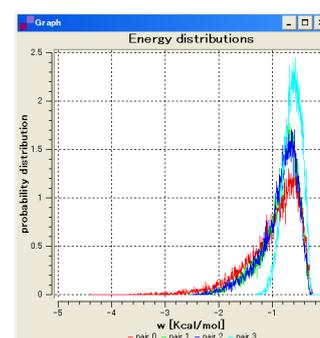
図3 シクロヘキサンとポリスチレンのFHMixing計算の結果



χ パラメータの温度依存性



相図



相互作用エネルギー分布

低分子はそのまま利用しますが、高分子はモノマーをセグメントとして近似します。エネルギーは力場計算を基に評価しますので、力場計算が可能な分子であれば、どのような分子にも適用できます。

χ パラメータはSciDPDの保存力のパラメータと関連付けられますので、SciDPDの相互作用パラメータの推算にも利用できます。

統合環境としてのSciMAPS

SciMAPSは、今回紹介したSciDPD、FHMixing以外にも、ABINIT、NAMD、LAMMPSなど学会で定評のある種々のプログラムに対してインターフェースを提供しています。SciMAPSは、入力データの準備から計算結果の解析まで、計算プログラムの種類にかかわらず、同じ操作環境を提供します。

◆リモート計算機能

SciMAPSは、ABINIT、NAMD、LAMMPS等の計算プログラムがインストールされたリモートサーバに対して、ジョブを送信し、各計算プログラムに実行させることが可能です。リモートサーバ上で計算された結果は、自動的にSciMAPSに受け渡され、結果の解析に使用されます。また、リモートサーバに実行させるコマンドはユーザが任意に指定できますので、キューイングシステムを導入しているマシンのキューに対してジョブを投入することも可能です。

◆ジョブ管理機能

SciMAPSを通して投入されたジョブは、SciMAPSのJob managerウィンドウから、ジョブの状態、進行状況等を確認することが可能です。また、実行待ち状態のジョブの開始や実行中のジョブの終了といったジョブ管理機能も実装されています。

◆並列ジョブのサポート

ABINIT、NAMD、LAMMPSは、いずれも並列計算に対応した計算プログラムです。SciMAPSでは、計算に使用するマシンを選択する際、指定したマシンが複数CPUを搭載したマシンであれば、並列計算用のジョブを投入することも可能です。

◆フリーソフトウェアへの対応

一般に、商用の計算プログラムの場合、シリアル計算や並列計算に使用するプロセス数は、購入したライセンス数を上限とした制限を受けます。一方、SciMAPSは、Turbomole等の商用の計算プログラムだけでなく、フリーソフトウェアライセンスとして配布されている計算プログラム(ABINIT、NAMD、LAMMPS等)に対してもインターフェースを提供しています。フリーの計算プログラムの場合、使用できるプロセス数に制限はありませんので、計算資源を最大限に活用した計算が可能です。SciMAPSは、今後も、商用、フリーを問わず、さまざまな計算プログラムに対応していく予定です。