材料設計支援プラットフォーム

SciMAPS 4.3 リリース

材料設計支援プラットフォーム SciMAPS の各計算プログラムは、計算プログラム本体とそれに対するインターフェースから構成されるプラグインとして提供されます。基本環境である Platform に各プラグインを追加することにより研究に最適な環境を取り揃えることができます。本稿では、6 月にリリースされました最新版の 4.3 の概要について紹介します。

リリース概要

Ver. 4.3 では、新しい粗視化力場 SAFT-γ Mie 力場、リバースマッピング機能 MesoAtom converter、分子集団の解析機能 Size distribution、粗視化力場作成機能 VOTCA が追加されました。これらは、2018 年にリリースされた Ver. 4.1 で初めて導入された粗視化分子動力学計算関連のシミュレーションをより利用しやすくするもので、粗視化分子動力学計算の適用範囲が広がります。また、新しい記述子計算のツールとして PaDEL をサポートするようになりました。PaDEL は QSAR Plug-in に付属する形で提供されます。

SAFT-γ Mie 力場

新しい粗視化力場として SAFT-γ Mie 力場が利用できるようになりました。一般的な粗視化力場パラメーターは、全原子シミュレーション等のミクロな情報からパラメーターを作成する、ボトムアップ的なアプローチでパラメーター作成を行っています。これに対し、SAFT-γ Mie 力場は、統計会合流体理論に基づく状態方程式の手法である SAFT-γ Mie 法[1] で得られたセグメント間相互作用ポテンシャル（Mie ポテンシャル）を基に粗視化力場パラメーターを決定する、トップダウン的なアプローチでパラメーター作成を行っています[2]。SAFT-γ Mie 法では様々な平衡物性を再現しているため、その情報を基にしている SAFT-γ Mie 力場を利用した分子シミュレーションの結果は様々な物性値を精度よく再現します[3]。

SAFT-γ Mie 力場では、ビーズ間の距離および角度のポテンシャルについては単純な調和関数の形をとっています。ばね定数、平衡距離、角度は各ビーズの組み合わせですべて同じ値を取っています。非結合相互作用については、一般化された Lennard-Jones ポテンシャルを利用しています。

$$u^{\mathrm{Mie}} = C\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{\lambda_r} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{\lambda_a}\right] \tag{1}$$

ここで、

$$C = \frac{\lambda_r}{\lambda_r - \lambda_a}\left(\frac{\lambda_r}{\lambda_a}\right)^{\frac{\lambda_a}{\lambda_r - \lambda_a}} \tag{2}$$

AMBER 等の LJ12-6 力場では λ_r、λ_a はそれぞれ 12、6 となっていますが、SAFT-γ Mie 力場では正の実数となっています。λ_a についてはロンドンの分散力を表す項ですので、ほとんどの場合 $\lambda_a = 6$ としています。それぞれのビーズ種がどのような原子団により構成されているかに応じて反発項の λ_r と相互作用の強さを表す ε の値を与えています。

MesoAtom converter

粗視化モデルを全原子モデルに変換するリバースマッピングの機能として MesoAtom converter が追加されました。これにより、SciMAPS 上で全原子モデルから粗視化モデル、粗視化モデルから全原子モデルへの変換が可能となりました。

粗視化モデルを構成する各ビーズに対応する全原子モデルのフラグメント構造を指定することで、粗視化モデルから全原子モデルへの変換が可能となります。

MesoAtom converter では以下のような設定を行いま

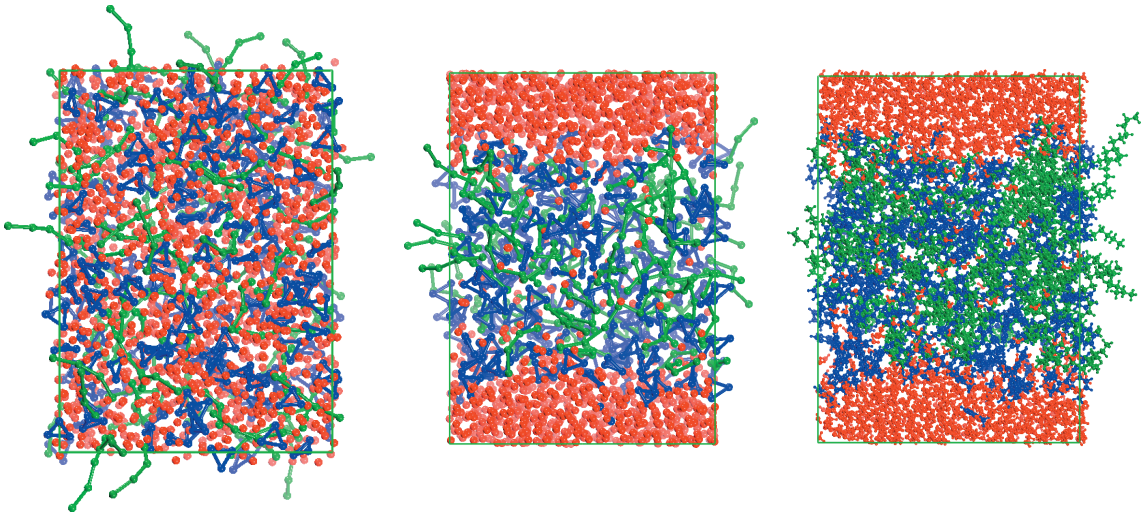

図 1 粗視化モデル（左、中央）と全原子モデル（右）赤：水、青：トルエン、緑：n-ドデカン

SCIENOMICS
delivering science

す。

1）変換に必要なすべてのビーズに対応するフラグメントを準備
2）隣り合うビーズとの結合部にあたる原子を選択し、Head、Tail に登録
3）対応するビーズ種を指定

変換を実行すると、ビーズの結合情報と位置情報から全原子モデルを作成します。

粗視化分子動力学ではランダムな状態（図 1 左）から平衡化された配置（図 1 中央）が容易に得られます。変換により得られた構造（図 1 右）を基に分子動力学計算を行うことで、自然な形で層分離した構造を初期構造として分子動力学計算を行うことが可能になり、その挙動を細かく解析することが可能となります。

Size distribution

解析機能にミセルなど分子の会合状態を解析する Size distribution 機能が加わりました。この解析機能では密度を基にしたクラスタリング手法の 1 つである DBSCAN（Density Based Spatial Clustering of Applications with Noise）法[4] を利用しています。DBSCAN 法は 1996 年に Martin らによって提案されたデータクラスタリングの手法で、任意の形状（三日月形や曲がりくねった形など）を持つクラスターに対しても正常に分類することが可能です。開発元の Scienomics 社では、この特徴を分子集団の分布に対して適用することで、複数の分子からなる凝集体をクラスターとして分類、解析する機能としました。分類されたクラスターには番号が与えられ、それぞれのクラスターの色分けや大きさを解析することで、系の凝集状態の時間変化など詳細な解析が可能となります。

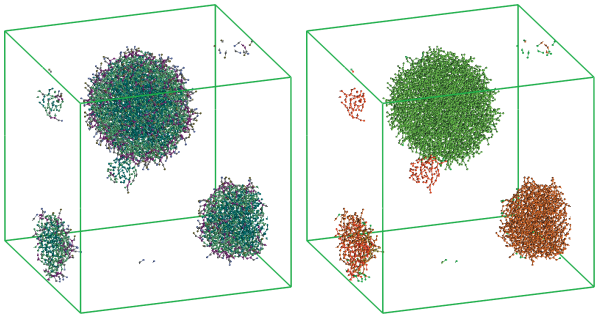

図 2 Size distribution によるクラスタリング
ミセル化した粗視化分子（左）、分類された分子（右）

VOTCA Plug-in

粗視化分子動力学計算の力場パラメーターを作成するソフトウェア VOTCA Plug-in が新製品として加わりました。VOTCA では、全原子での分子動力学計算で得られた構造や原子上に働く力の履歴データを基に、対応する粗視化モデルのビーズ間の相互作用（結合、結合角、二面角、非結合相互作用）を調べ、選択した計算手法に基づいて相互作用の値を求めます。最終的に得られるビーズ間相互作用の値はテーブル化した数値データポテンシャル（以下 tabulated potential）として出力します。得られた tabulated potential は LAMMPS や GROMACS のフォーマットに変換され、利用できるようになります。

選択できる手法としては、iterative Boltzmann inversion（IBI）法、Force Matching（FM）法の 2 つが用意されています。IBI 法は結合したビーズ間の構造パラメーターや各ビーズの動径分布など、構造に関する情報が再現できるようにパラメーターを作成します。これに対し、FM 法では全原子分子動力学計算でサンプリングした原子上に働く力を基にビーズ間相互作用を求めます。

図 3 に IBI 法で求められた各ビーズ間の動径分布関数を示します。IBI 法で得られたポテンシャルが全原子分子動力学計算の動径分布を再現している様子がわかります。

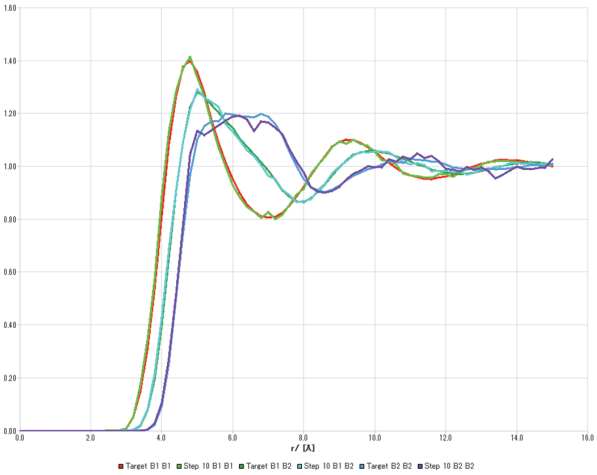

図 3 ビーズ間の動径分布関数
2 種のビーズで近似した n-ヘキサンの結果（B1-B1、B1-B2、B2-B2 の 3 つを表示）

1）Papaioannou, V.; Lafitte, T.; Avendaño, C.; Adjiman, C. S.; Jackson, G.; Müller, E. A.; Galindo, A. *J. Chem. Phys.* **2014**, *140,* 054107.
2）Müller, E. A.; Jackson, G. *Annu. Rev. Chem. Biomolec. Eng.* **2014**, *5,* 405-427.
3）Herdes, C.; Totton, T. S.; Müller, E. A. *Fluid Phase Equilibria* **2015**, *406,* 91-100.
4）Ester, M.; Kriegel, H. P.; Sander, J.; Xu, X. *Proceedings of 2nd International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining（KDD-96）* **1996**, 226-231.