

使い易い材料シミュレーターAdvance/NanoLabo

西原 慧径*

User-friendly materials simulator Advance/NanoLabo

Satomichi Nishihara*

本稿では、使い易い材料シミュレーターとして多くの実験および理論研究者の皆さまに親しまれている Advance/NanoLabo の基本機能や設計指針、最新機能や今後実装予定の機能について紹介する。個別機能の詳細については、オンライン製品マニュアルなどに記してあるのでここでは言及せず、ユーザーの利便性向上のための取り組みや考え方を中心に述べる。

Keywords: 第一原理計算、分子動力学、Quantum ESPRESSO、LAMMPS、Advance/NanoLabo、GUI

1. はじめに

Advance/NanoLabo は第一原理計算や分子動力学計算などの材料シミュレーションを実施するための、GUI ソフトウェアである。第一原理計算には Quantum ESPRESSO[1]、分子動力学計算には LAMMPS[2]といったオープンソースソフトウェアを活用している。計算の実行や計算結果の可視化だけでなく、複雑なモデル構造を作成するためのモデリング機能が充実していることも特徴である。モデリング機能としては、表面や界面のモデル作成、溶媒分子充填や高分子モデル作成などの多彩なツールが搭載されており、いずれも GUI 画面にて操作しやすいように設計されている。モデリング機能を中心とした GUI の使い易さが高く評価された結果、おかげさまで 2018 年 8 月の販売開始から国内外で数百名のユーザーの皆さまにお使いいただいている。Advance/NanoLabo のユーザーとしては、実験研究をしながらその傍らでシミュレーションを行うライトユーザーが過半数を占める(図 1)。ユーザーの多くが実験研究者であることは Advance/NanoLabo の使い易さの証左であり、本雑誌(アドバンスシミュレーション Vol.31)のタイトルである「計算科学の裾野を広げる」にもよく合致している。

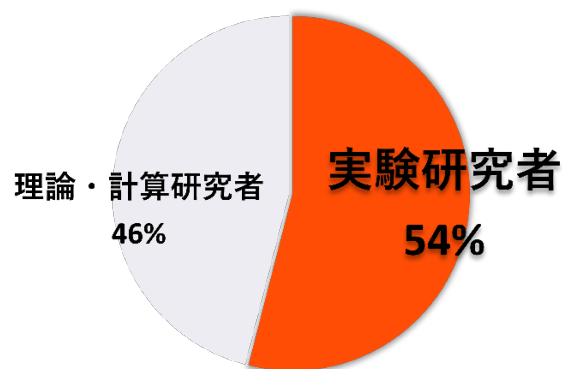


図 1 ユーザーの比率(2023 年 12 月時点)

2. 基本機能の紹介

Advance/NanoLabo の基本機能は主に 2 つある。計算に使用する結晶や分子などのモデル構造を事前に作成するプレ処理としてのモデリング機能、および、第一原理計算や分子動力学計算などのシミュレーション実行機能である。

2.1. モデリング機能

Advance/NanoLabo に搭載されている主要なモデリング機能としては、以下のものがある。

- スーパーセルの作成
- セルの並進移動
- 原子座標の操作
- 結晶群検出・Primitive Cell への変換
- 元素置換や欠陥ドーブ
- 表面モデルおよび界面モデルの作成

*アドバンスソフト株式会社 第 6 事業部

6th Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

- 表面への分子吸着
- 溶媒分子および高分子の充填

いずれのモデリング機能においても、ユーザーがGUI画面上で入力すべき情報を整理整頓して、且つ、「ユーザーの操作に伴う画面遷移」を活用することで使い易さを実現している。シミュレーションという分野においては、他分野と比べて扱う情報量が非常に多いために開発者目線ではどうしても「ユーザーが入力すべき情報」に注目しがちになる。その結果、全ての情報に関する入力項目を唯一つの画面に配置するといった設計になることが往々にしてある。シミュレーションの専門家であるソフトウェア開発者にとっては分かり易い設計なのだが、専門家ではないユーザーにとっては全ての入力項目を同時に見せられても戸惑ってしまう。ユーザー目線に立つと、一つの画面に表示される入力項目をできるだけ少なくして、入力完了する毎に画面遷移した方がシンプルで分かり易いのである。銀行ATMやスマホアプリなどの一般消費者向けソフトウェアを見れば、いずれもそのような画面遷移型の設計となっており、ユーザーの利便性向上には必須の設計と言える。

Advance/NanoLaboにおいては、界面モデルの作成機能が画面遷移型設計の典型例である。界面モデルを作成するためには、2つの材料の結晶構造、2組のミラー指数、2つのスラブの厚さ、2つのスラブの表面切り出し時のオフセット、2つのスラブのXY方向の超格子形状、歪の掛け方、真空層の厚さ等々、かなり多くの設定項目が含まれる。これら全ての項目を同時に一つの画面でユーザーが設定するのは難儀である。そこで、Advance/NanoLaboでは界面モデリングのために4つの画面を用意して、これらの画面の間を適宜遷移させることで難解な界面モデルの設定を容易にしている。具体的には、以下の4つの画面である。

- A) 両材料の並列表示画面
- B) 材料1のスラブモデル設定画面
- C) 材料2のスラブモデル設定画面

D) 界面モデルの作成画面

まずは、「両材料の並列表示画面」(図2)が表示される。この画面にて、2つの材料の結晶モデルを設定する。その後、一つ目の材料(材料1)のミラー指数を入力すると、「材料1のスラブモデル設定画面」(図3)へと遷移する。この画面にて、スラブの厚さや表面の原子配置などを設定する。もう一つの材料(材料2)についても同様である。両材料のスラブモデル設定が完了したら、「界面モデルの作成画面」(図4)へと遷移する。さらに、界面モデルの作成画面においても各入力項目は同時には設定できず、ユーザーの操作に付随して画面が逐次変化しながらモデリング手続が進行していく。同時に全ての項目を設定できないという不自由さ(=拘束条件)こそが、ユーザーの利便性へとつながるのである(詳細は第3章にて言及)。

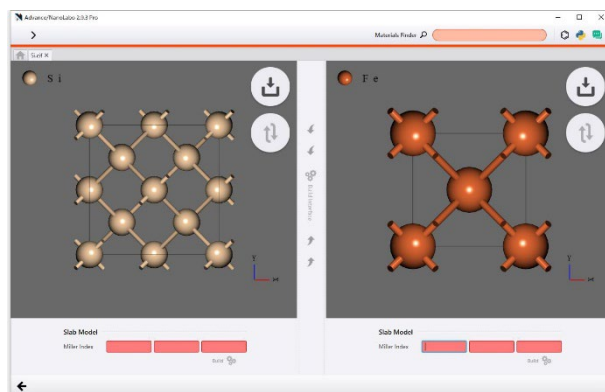


図2 両材料の並列表示画面

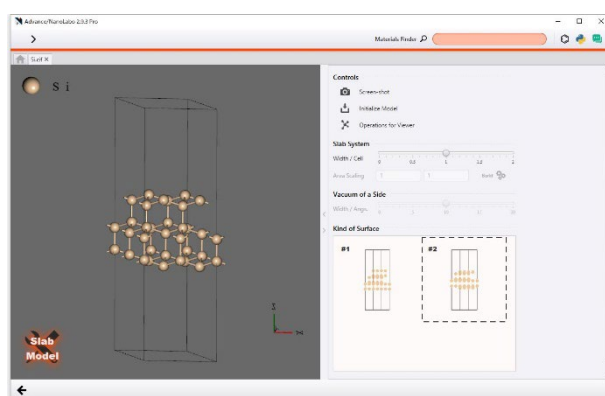


図3 一つの材料のスラブモデル設定画面

2.2. シミュレーション実行機能

シミュレーションの実行機能としては、Quantum ESPRESSOによる第一原理計算および

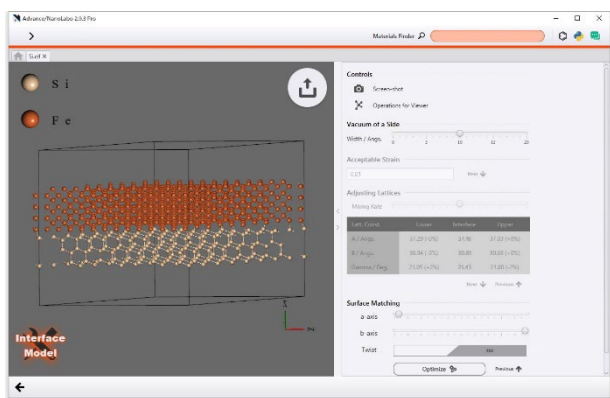


図 4 界面モデルの作成画面

LAMMPS による分子動力学計算に対応している。Quantum ESPRESSO については、比較的多くの計算手法を網羅しており、以下の計算機能が利用可能となっている。

- SCF 計算および構造最適化計算
- 第一原理 MD / Car-Parinello MD
- 状態密度およびバンド構造
- TD-DFT / XAFS / NMR のスペクトル
- フォノンモード、フォノン分散
- NEB 法による反応経路解析

いずれの計算機能も、よく使う入力項目は GUI 画面上から簡単に設定できるようになっている。しかしながら、あまり使わない項目については非表示となっており、ユーザーが入力ファイルを直接編集する必要がある。よく使う項目とあまり使わない項目に差をつけることで、何が重要項目なのかを初心者にもわかってもらうことができる。その反面、熟練者にとっては全項目をすぐに設定できないというデメリットがある。

LAMMPS においても、Quantum ESPRESSO と同様に、よく使う重要項目を中心とした画面設計となっている。具体的には、設定すべき内容を「原子構造」「分子力場」「計算スキーム」の 3 種に大別して、3 つの画面を用意している。また、LAMMPS の入力ファイルは自由度の極めて大きいフリーフォーマットになっている。このため、3 画面では設定しきれない項目がどうしても出てくる。そのような項目については、画面上で簡便

に任意の入力コマンド(LAMMPS 入力ファイルにおける命令文)を追加できる仕組みを用意しており、かつ、追加された任意の変数をグラフとして可視化することもできる。

3. GUI の設計指針

第 1 章にて Advance/NanoLabo の使い易さが多くユーザーから好評を頂いていることについて言及したが、ここではどのような設計指針に基づいて使い易い GUI を実現しているのかを紹介する。ソフトウェア開発者が GUI を開発しようとするとき、多くの開発者は「使い易い GUI を作ってやろう」と決意するものである。しかし、ここに落とし穴がある。「あえて、使い難い GUI を作ろう」と考える開発者など実際には存在しないのだから、使い易い GUI を作ろうという決意は自明であり、意味を生じることがない。むしろ、GUI の開発者が最初に考えるべきことは、「使い易さとは何か」を自分なりに定義することである。ここで重要なのは、“自分なり”の定義であり、決して万人にとって正しい客観的な内容であるとはならない。客観的な正しさは一義的に定まるため自由度の欠損つまりエントロピーの減少を伴わず、意味を生じることがない。意味とはエントロピーの減少に等しい。つまり、使い易い GUI の設計には、賛否両論が出てくるような主観的な判断に基づく「使い易さの定義」が必要になるのである。

それでは、Advance/NanoLabo における「使い易さの定義」について述べる。実験研究の傍らでシミュレーションを実施するライトユーザーを主な対象として、必要最小限の入力項目の設定のみでそれなりに妥当な計算が実行できるシステムを使い易い GUI の定義としている。ライトユーザーに的を絞ることでユーザーに関する自由度を削減している。また、それなりに妥当な計算の実行を優先した設計となっているため、完全に厳密な計算のためには条件設定などでやや不便さが残ることを許容している。抽象的な言い方をすれば、不自由さこそが使い易さであると定義したのである。このように Advance/NanoLabo では「計

算科学の裾野を広げる”べく、シミュレーションの初心者にとって使い易い設計となっている。逆に、熟練者やシミュレーション分野に詳しいヘビーユーザーにとっては少し物足りないかもしれない。1つの製品で全てのユーザーを満足させることは難しく、万人受けを狙えばコンセプトのぼやけた全てのユーザーにとって使い難い GUI になってしまう。あくまでも、当社の Advance/NanoLabo は初心者(ライトユーザー)にとって使い易い GUI なのである。

しかしながら、当社としてはヘビーユーザーをなおざりにするつもりはない。Advance/NanoLabo はライトユーザー向けの GUI 製品であるが、Neural Network 力場を運用するための計算エンジンである Advance/NeuralMD[3]は最新の計算手法に興味のあるヘビーユーザーにお勧めのソフトウェアである。1つの製品で全てのユーザーをカバーすることは難しくとも、複数の製品を組み合わせることで多くのユーザーの皆さまに最良のサービスの提供に努めている。

4. 最新機能の紹介

ライトユーザーに向けて、Advance/NanoLabo の使い方などを説明する Chatbot をリリースした(図 5)。ChatGPT3.5[4]をベースとしており、ウェブアプリケーションとして提供している。Advance/NanoLabo の画面からも表示できる。Chatbot を活用することで、簡単な使い方などはマニュアルを見ることなく直ぐに確認できるため、特に Advance/NanoLabo を初めて導入されたお客さまにとっては非常に便利な機能となっている。

また、ヘビーユーザー向けには、最新の汎用 Graph Neural Network 力場のバリエーションをさらに増やしている。Open Catalyst 2022、M3GNet、CHGNet、SevenNet が利用可能である。特に SevenNet に関しては、CUDA-aware MPI w/ NVSwitch による GPU 間の peer-to-peer 通信を利用してグラフ畳み込みプロセスの計算速度を担保しつつ、複数 GPU でのモデル並列を実現できている。これにより、汎用力場をそのまま用いた 10 万原子系の計算も現実的な時間で可能になっている[5]。

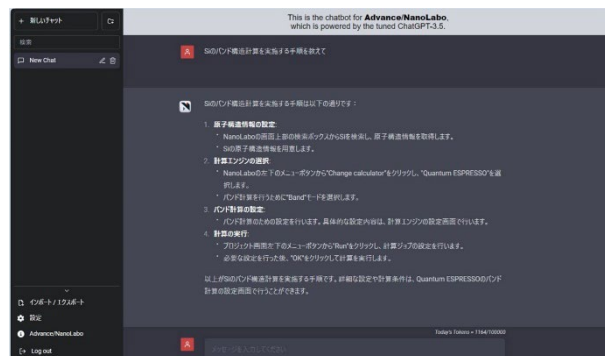


図 5 Advance/NanoLabo の Chatbot 画面

5. 今後実装予定の新機能

今後は、(1)Advance/NanoLabo にて利用可能な計算エンジンの機能を増やしつつ、さらに(2)AIを活用したライトユーザー向けの利便性向上に寄与する機能を積極的に実装していく。(1)については、Quantum ESPRESSO における ESM-RISM[6]や量子化学計算ソフトウェア NWChem に対応予定である。さらに、Advance/NeuralMD も随時バージョンアップ予定である。(2)については、モデリング機能の“Autopilot 化”を実装中である。Autopilot 機能では、ユーザーが日本語や英語で作成したいモデルを入力すると、ChatGPT がその内容を判断して自動的に GUI 画面を操作して該当モデルを生成してくれる。Autopilot 機能は優先的に開発を進めており、本誌発刊時には既にリリースされているかもしれない。

参考文献

- [1] <https://www.quantum-espresso.org>
- [2] <https://www.lammps.org>
- [3] <https://neuralmd-doc.readthedocs.io/ja/latest/>
- [4] <https://chatgpt.com>
- [5] <http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/SevenNet-multi-GPU/index.html>
- [6] <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.96.115429>

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル (カラー版) がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)