(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2009 年2 月5 日 (05.02.2009)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2009/016873 A1

(51) 国際特許分類:
G06F 19/00 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2008/059054

(22) 国際出願日: 2008 年5 月16 日 (16.05.2008)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願2007-199646 2007 年7 月31 日 (31.07.2007) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 住友重機械工業株式会社 (SUMITOMO HEAVY INDUSTRIES, LTD.) [JP/JP]; 〒1416025 東京都品川区大崎二丁目１番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者; および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 市嶋 大路 (ICHISHIMA, Daiji) [JP/JP]; 〒2378555 神奈川県横須賀市夏島町１９番地 住友重機械工業株式会社 横須賀製造所内 Kanagawa (JP). 大西 良孝 (OHNISHI, Yoshitaka) [JP/JP]; 〒2378555 神奈川県横須賀市夏島町１９番地 住友重機械工業株式会社 横須賀製造所内 Kanagawa (JP).

(74) 代理人: 伊東 忠彦 (ITOH, Tadahiko); 〒1506032 東京都渋谷区恵比寿４丁目２０番３号 恵比寿ガーデンプレイスタワー３２階 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

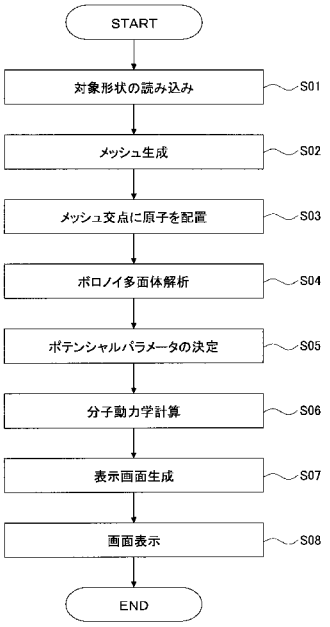
(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD,

/続葉有/

(54) **Title:** MOLECULE SIMULATION METHOD, MOLECULE SIMULATION DEVICE, MOLECULE SIMULATION PROGRAM, AND RECORDING MEDIUM RECORDING THE PROGRAM

(54) 発明の名称: 分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体

[図3]



S01 READ IN OBJECT SHAPE
S02 CREATE MESH
S03 ARRANGE ATOM AT INTERSECTION OF MESH
S04 ANALYZE VORONOI POLYHEDRON
S05 DETERMINE POTENTIAL PARAMETER
S06 MOLECULE DYNAMICS CALCULATION
S07 CREATE DISPLAY SCREEN
S08 DISPLAY SCREEN

(57) **Abstract:** A molecule simulation method for estimating the physical property values or the physical quantities of a preset shape from simulation includes a step of arranging atoms on that shape, a step of acquiring the interatomic potential based on the position of the atoms arranged in the step for arranging atoms, and a step of acquiring the physical property value or the physical quantities by performing molecule dynamics calculation based on the interatomic potential obtained at the step of acquiring interatomic potential.

(57) 要約: 予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーション方法において、前記形状に原子を配置する原子配置ステップと、前記原子配置ステップにより配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得ステップと、前記原子間ポテンシャル取得ステップにより得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算ステップとを有する。

WO 2009/016873 A1

SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, NO, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:
— 国際調査報告書

明 細 書

分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体

技術分野

[0001] 本発明は、分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体に係り、特に安定かつ適切に物性値又は物理量を求めるための分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体に関する。

背景技術

[0002] 従来、古典力学や量子力学等を基に計算機を用いて物質科学全般の現象を探るための方法論として、分子動力学法に基づく分子シミュレーションが知られている。分子シミュレーションは、分子のポテンシャルエネルギーや最安定構造等、物質の特性を分子レベルで解明することができるものである。

[0003] ところで、分子シミュレーションは、主に材料の物性予測に用いられていたため、複雑な形状や一般的な機械構造物等に原子を配置する方法は存在しなかった。なお、物体の複雑な形状を有限の領域に分割してモデル化し、計算する手法としては、例えば、有限要素法がある。また、2次元の計算の場合には、三角形あるいは四角形の領域で物体を満遍なく区切るためにメッシュの生成プログラムを使用することがある（例えば、特許文献1参照。）。

特許文献1:特開2001－67495号公報

発明の開示

発明が解決しようとする課題

[0004] ところで、上述した特許文献1に示されるメッシュ生成手法を、例えば、分子動力学の原子配列に応用すると、三角形要素のみを使用する場合、物体領域を三角形で満たすことを目的としているため，三角形の大きさは一定にはならず、異なってしまう場合が多い。

[0005] また、原子を配置する形状によっては、三角形が非常に歪んだ状態となることがある。したがって、単純にメッシュの格子点に原子を配置すると、初期原子配置の粗密の具合によっては極めて大きな応力が発生し、最悪の場合、物理量の計算が破綻することもある。

[0006] 本発明は、上述した問題点に鑑みなされたものであり、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めるための分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0007] 上述の目的を達成するために、本発明は、予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーション方法において、前記形状に原子を配置する原子配置ステップと、前記原子配置ステップにより配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得ステップと、前記原子間ポテンシャル取得ステップにより得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算ステップとを有することを特徴とする。これにより、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。したがって、原子配置の情報によって適宜ポテンシャルを修正し、物性値又は物理量が再現されるように工夫することにより、複雑形状を表現しても非物理的な残留応力等が生じず安定した計算を実現することができる。

[0008] 更に、前記原子配置ステップは、前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することが好ましい。これにより、メッシュを生成して原子を容易かつ効率的に配置することができる。

[0009] 更に、前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることが好ましい。これにより、最も簡単なポテンシャル形式を用いて効率的に2体間ポテンシャルを計算することができる。

[0010] 更に、前記原子間ポテンシャル取得ステップは、前記原子配置ステップにより配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られる各ボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エネルギーを含むポテンシャル

パラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することが好ましい。これにより、適切な物性値又は物理量を算出でき、適宜原子間ポテンシャルを修正することができる。

[0011] また本発明は、予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーション装置において、前記形状に原子を配置する原子配置手段と、前記原子配置手段により配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得手段と、前記原子間ポテンシャル取得手段により得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算手段とを有することを特徴とする。これにより、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。したがって、原子配置の情報によって適宜ポテンシャルを修正し、物性値又は物理量が再現されるように工夫することにより、複雑形状を表現しても非物理的な残留応力等が生じず安定した計算を実現することができる。

[0012] 更に、前記原子配置手段は、前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することが好ましい。これにより、メッシュを生成して原子を容易かつ効率的に配置することができる。

[0013] 更に、前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることが好ましい。これにより、最も簡単なポテンシャル形式を用いて効率的に2体間ポテンシャルを計算することができる。

[0014] 更に、前記原子間ポテンシャル取得手段は、前記原子配置手段により配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られる各ボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エネルギーを含むポテンシャルパラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することが好ましい。これにより、適切な物性値又は物理量を算出でき、適宜原子間ポテンシャルを修正することができる。

[0015] また本発明は、予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーションプログラムにおいて、コンピュータを、前記形状に原子を配置する原子配置手段、前記原子配置手段により配置された原子の位置に基づいて

原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得手段、及び、前記原子間ポテンシャル取得手段により得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算手段として機能させる。これにより、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。したがって、原子配置の情報によって適宜ポテンシャルを修正し、物性値又は物理量が再現されるように工夫することにより、複雑形状を表現しても非物理的な残留応力等が生じず安定した計算を実現することができる。また、実行プログラムをコンピュータにインストールすることにより、容易に分子シミュレーション処理を実現することができる。

[0016] 更に、前記原子配置手段は、前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することが好ましい。これにより、メッシュを生成して原子を容易かつ効率的に配置することができる。

[0017] 更に、前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることが好ましい。これにより、最も簡単なポテンシャル形式を用いて効率的に2体間ポテンシャルを計算することができる。

[0018] 更に、前記原子間ポテンシャル取得手段は、前記原子配置手段により配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られるボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エネルギーを含むポテンシャルパラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することが好ましい。これにより、適切な物性値又は物理量を算出でき、適宜原子間ポテンシャルを修正することができる。

[0019] また、本発明は前記分子シミュレーションプログラムが記録されたコンピュータ読み取り可能な記録媒体を提供する。これにより、記録媒体により他の複数のコンピュータに容易に分子シミュレーションプログラムをインストールすることができる。

発明の効果

[0020] 本発明によれば、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。これにより、原子配置の情報によって適宜ポテンシャルを修正し、物性値が再現されるように工夫することにより、複雑形状を表現しても非物理的な残留応力等が生じず安定した計算を実現することができる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]本実施例における分子シミュレーション装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[図2]分子シミュレーション装置の機能構成の一例を示す図である。

[図3]本実施形態における分子シミュレーション処理手順の一例を示すフローチャートである。

[図4A]複雑形状を表現する際のポテンシャルの修正理由を説明するための一例を示す図である。

[図4B]複雑形状を表現する際のポテンシャルの修正理由を説明するための一例を示す図である。

[図5]Lennard－Jonesポテンシャルの例を示す図である。

[図6A]本実施形態におけるボロノイ多面体解析を説明するための一例を示す図である。

[図6B]本実施形態におけるボロノイ多面体解析を説明するための一例を示す図である。

[図7A]図7Aは、2次元における横からの荷重をかけた梁の様子を示す図である。

[図7B]図7Bは、梁の曲げ(Length)とそり(Deflection)との関係のグラフの一例を示す図である。

[図7C]図7Cは、梁の振動(周期)(Time)と振幅(Amplitude)との関係のグラフの一例を示す図である。

[図8A]図8Aは3次元における荷重をかけた梁の様子を示す図である。

[図8B]図8Bは梁の曲げ(Length)そり(Deflection)との関係のグラフの一例を示す図である。

[図8C]図8Cは梁の振動(周期)(Time)と振幅(Amplitude)との関係のグラフの一例を示す図である。

符号の説明

[0022] 10 分子シミュレーション装置

11 入力装置

12 出力装置

13 ドライブ装置

14 補助記憶装置

15 メモリ装置

16 CPU

17 ネットワーク接続装置

18 記録媒体

21 入力手段

22 出力手段

23 蓄積手段

24 原子配置手段

25 原子間ポテンシャル取得手段

26 分子動力学計算

27 画面生成手段

28 送受信手段

29 制御手段

31 複雑形状

32, 41, 51 原子

42, 52 線分

43 2等分線

53 垂線

発明を実施するための最良の形態

[0023] (本発明の概要)

本発明では、例えば、汎用のメッシュ生成ソフト等を用いて複雑形状に原子を配置した場合に、原子配置はそのままとし、その周辺原子の情報によってポテンシャルを適宜修正する方法を提供する。なお、このときの計算方法については、例えば、分子動力学法を用いることができるが、本発明においてはこれに限定されるものではなく、例えばモンテカルロ法等、ポテンシャルの安定点を探す方法であればよい。

[0024] なお、分子動力学法(Molecular Dynamics method、MD法)とは、2体(あるいはそれ以上)の原子間ポテンシャルの下に、古典力学におけるニュートン方程式を解いて、系の静的、動的安定構造や、動的過程(ダイナミクス)を解析する手法である。分子動力学により、定温、定圧、定エネルギー、定積、定ケミカルポテンシャル等の様々なアンサンブル(統計集団)の計算が可能である。また、結合長や位置の固定等の様々な拘束条件を付加することも可能である。

[0025] 以下に、上述したような特徴を有する本発明における分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体を好適に実施した形態について、図面を用いて詳細に説明する。

[0026] (本実施例における装置構成)

まず、本実施例における分子シミュレーション装置について図を用いて説明する。図1は、本実施例における分子シミュレーション装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[0027] 図1における分子シミュレーション装置10は、入力装置11と、出力装置12と、ドライブ装置13と、補助記憶装置14と、メモリ装置15と、各種制御を行うCPU(Central Processing Unit)16と、ネットワーク接続装置17とを有するよう構成されており、これらはシステムバスBで相互に接続されている。

[0028] 入力装置11は、ユーザ等が操作するキーボードやマウス等のポインティングデバイスを有しており、ユーザ等からのプログラムの実行や処理結果の表示指示、各処理に必要なデータの入力等、各種操作信号を入力する。また、出力装置12は、本発明における処理を行うためのコンピュータ本体を操作するのに必要な各種ウィンドウやデータ等を表示するディスプレイを有し、CPU16が有する制御プログラムによりプログラムの実行経過や結果等を表示することができる。

[0029] ここで、本発明において、コンピュータ本体にインストールされる実行プログラムは、例えばCD－ROM等の記録媒体18等により提供される。プログラムを記録した記録媒体18は、ドライブ装置13にセット可能であり、記録媒体18に含まれる実行プログラムが、記録媒体18からドライブ装置13を介して補助記憶装置14にインストールされる。

[0030] 補助記憶装置14は、ハードディスク等のストレージ手段であり、本発明における実行プログラムや、コンピュータに設けられた制御プログラム、本発明における分子シミュレーションに必要な入力データや処理結果等を蓄積し、更に必要に応じて入出力を行うことができる。

[0031] メモリ装置15は、CPU16により補助記憶装置14から読み出された実行プログラム等を格納する。なお、メモリ装置15は、ROM(Read Only Memory)やRAM(Random Access Memory)等からなる。

[0032] CPU16は、OS(Operating System)等の制御プログラム、メモリ装置15により読み出され格納されている実行プログラム等に基づいて、各種演算や各ハードウェア構成部とのデータの入出力等、コンピュータ全体の処理を制御して各処理を実現することができる。また、CPU16は、プログラムの実行中に必要な各種情報を補助記憶装置14から取得することができ、また処理結果等を補助記憶装置14に格納することができる。

[0033] ネットワーク接続装置17は、通信ネットワーク等と接続することにより、実行プログラムを通信ネットワークに接続されている他の端末等から取得したり、プログラムを実行することで得られた実行結果又は本発明における実行プログラム自体を他の端末等に提供することができる。

[0034] (分子シミュレーション装置:機能構成例)

次に、分子シミュレーション装置10の機能構成例について図を用いて説明する。図2は、分子シミュレーション装置の機能構成の一例を示す図である。分子シミュレーション装置10は、入力手段21と、出力手段22と、蓄積手段23と、原子配置手段24と、原子間ポテンシャル取得手段25と、分子動力学計算手段26と、画面生成手段27と、送受信手段28と、制御手段29とを有するよう構成されている。

[0035] 入力手段21は、ユーザ等から分子シミュレーションの実施に伴う各指示情報等の入力を受け付ける。なお、入力手段21は、例えばキーボードや、マウス等のポインティングデバイス、マイク等の音声入力インタフェイス等からなる。

[0036] また、出力手段22は、入力手段21により入力された指示内容や、指示内容に基づいて生成された分子シミュレーションの編集内容、編集結果、実行プログラムの実施

指示画面や、原子間ポテンシャルパラメータの途中経過等の内容を表示したり、音声出力を行う。なお、出力手段22は、ディスプレイやスピーカ等からなる。

[0037] また、蓄積手段23は、分子シミュレーションした原子の配置結果や、原子間ポテンシャル配置結果等の結果、入力データ等を蓄積する。なお、蓄積手段23は入力データ等を、送受信手段28を介して通信ネットワーク等により接続された外部装置(図示せず)等から取得して蓄積することもできる。

[0038] 原子配置手段24は、例えば、予め設定された形状(単純形状や複雑形状)に対して原子を配置する。なお、適切な位置に原子を配置する場合には、例えば、予め設定された形状に多数のメッシュを生成し、生成されたメッシュの各格子点に原子を配置するか、あるいは、予め設定された形状の枠に原子を配置した後に形状内部に原子を発生させて充填することで原子を配置する手法等を用いることができる。

[0039] したがって、例えば、上述のメッシュ生成手法を用いる場合、原子配置手段24は、具体的には、メッシュ生成により得られるメッシュ交点に原子を配置する。

[0040] 原子間ポテンシャル取得手段25は、原子配置手段24により配置された原子を、原子配置はそのままとし、その周辺原子の情報によってポテンシャルを適宜修正する。具体的には、メッシュ生成により配置した原子に対してボロノイ(Voronoi)多面体解析を行い、ポテンシャルパラメータを決定する。

[0041] 分子動力学計算手段26は、原子間ポテンシャル取得手段25から得られるポテンシャルパラメータに基づいて、分子動力学による物性値又は物理量を計算する。

[0042] 画面生成手段27は、原子配置手段24により予め設定された形状に配置された原子の様子や、原子間ポテンシャル取得手段25における初期設定や実行結果の表示、分子動力学計算手段26による計算結果の物性値やその値に対応する表やグラフ、図等の処理結果の表示等を行う。

[0043] 送受信手段28は、例えばインターネット等の通信ネットワーク等を介して接続される外部装置等から必要なデータを取得したり、本発明における分子シミュレーション結果等を送信するための通信インタフェイスである。

[0044] 制御手段29は、分子シミュレーション装置10における各機能構成全体の制御を行う。具体的には、制御手段29は、入力手段21により入力されたユーザからの入力情

報に基づいて原子配置手段24により原子を配置させたり、原子間ポテンシャル取得手段25によりポテンシャルパラメータを取得させたり、分子動力学計算手段26により原子の物性値を取得させる等といった処理を制御する。

[0045] これにより、分子動力学を用いて複雑な形状に対しても適切に原子を配置することができる。また、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。したがって、対象とする形状が複雑な場合の分子動力学法の計算において、適当な原子配置であっても安定に計算を行い、かつ適切な物性値又は物理量を算出できるよう原子間ポテンシャルを修正することができる。

[0046] (分子シミュレーション処理手順例)

次に、本発明における実行プログラム(分子シミュレーションプログラム)による分子シミュレーション処理手順について説明する。図3は、本実施形態における分子シミュレーション処理手順の一例を示すフローチャートである。

[0047] 図3に示すように、本実施形態における分子シミュレーションでは、例えば、複雑形状等の予め設定された対象形状に原子を配置する場合、まず、CAD(Computer Aided Design)データ等からの対象形状を読み込み(S01)、メッシュの生成を行う(S02)。なお、メッシュの生成は、例えば、上述した特許文献1に示すようなメッシュ生成手法を行ってもよい。

[0048] また、メッシュ生成手法については、例えば、デラウニー法(ボロノイ分割に基づく三角形分割)、Transfiniteマッピング法(マッピングを4角形以外の領域に拡張)や、バウンダリーフィット法(楕円形偏微分方程式を解く)、アドバンシングフロント法(ある境界から3角形(4面体)を生成)、4分木法、8分木法、ペービング法(ある境界から順に4辺形メッシュを配置していき、矛盾が出た時点で修正)、6面体メッシュ生成法(Whisker Weaving法(表面の4角形分割データから内部に6面体メッシュを生成していく手法)、Grid Based法(立体の内部に立方体のグリッドを配置して、その表面を処理)、Medial Surfaceを用いた空間分割法(マッピングによる6面体生成が可能な基本領域に分割する。なお、全ての頂点において、稜線が3本である必要がある。))、アダプティブ法(解析結果に基づき離散化誤差の分布を推定し、誤差を減らすようにメッシュを改善する手法)等を用いることができる。

[0049] また、メッシュ生成においては、例えば、汎用のCAE(Computer Aided Engineering)ソフトウェア(例えば、「PATRAN」、「FEMAP」、「ATLAS」、「MENTAT」、「TRUEGRID」、「SOLIDWORKS」等)を用いることもできる。

[0050] 次に、S02の処理にて生成したメッシュの各交点に対して原子を配置し(S03)、ボロノイ(Voronoi)多面体解析を行う(S04)。具体的には、原子の配置に対して平面でない点をどの点に最も近いかによって分割してできるボロノイ図(領域)を求め、その図(ボロノイ領域)の境目の線によりボロノイ境界を求め、その境界の各交点によりボロノイ点を求める。

[0051] また、S04の処理により、原子間ポテンシャルパラメータを決定する(S05)。なお、S05の処理では、予めユーザが設定する所望のヤング率等に基づいて、後述する最安定となる原子間距離「r_0」や結合エネルギー「ε」等のパラメータを決定する。

[0052] また、S05の処理に得られる原子間ポテンシャルパラメータに基づいて、分子動力学における物性値又は物理量を計算する(S06)。また、S06の処理により得られた処理結果等をディスプレイ等の出力装置12(出力手段22)に表示する画面を生成し(S07)、生成した画面を表示する(S08)。

[0053] (S04～S06の処理について)

次に、上述したS04(ボロノイ多面体解析)～S06(分子動力学計算)の処理について、具体的に説明する。

[0054] まず、ボロノイ多面体について説明する。例えば、平面R^2上にn個の点p_1, p_2, ・・・, p_nが与えられたときのp_iの勢力図V_iを以下に示す(1)式で定義する。

[0055] [数1]

$$V_i = \{x \in R^2 \mid d(x, p_i) \le d(x, p_j), j \ne i, j = l, \cdots, n\} \quad \cdots (1)$$

このとき、上述の(1)式におけるxの取り得る領域をボロノイ領域といい、p_iはボロノイ

領域の母点(本実施形態では原子位置)である。また、このボロノイ領域は、凸多面体となり、それをボロノイ多面体という。S04では、このボロノイ多面体を用いて解析を行う。なお、具体的な解析手法の例については後述する。

[0056] 次に、分子動力学法の概念について説明する。分子動力学法で実際に解くべき運動方程式は、以下に示す(2)式のニュートン(Newton)の運動方程式であり、直接数値積分して解くものである。

[0057] [数2]

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i \qquad \cdots (2)$$

なお、上述した(2)式において、m_iは原子の質量であり、r_iは原子の位置ベクトル、F_iは原子iに働く力のベクトル(原子間相互作用の合力)である。また、速度v_iは、以下に示す(3)式のように表すことができる。

[0058] [数3]

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = F_i \qquad \cdots (3)$$

したがって、時間刻みをΔtとすると、以下に示す(4)式から速度v_iを求めることができる。

[0059] [数4]

$$m_i \frac{v_i(t+\Delta t/2)-v_i(t-\Delta t/2)}{\Delta t} = F_i$$

$$\therefore v_i(t+\Delta t/2) = v_i(t-\Delta t/2)+\Delta t\frac{F_i}{m_i} \qquad \cdots (4)$$

また、このときの位置は、以下に示す(5)式から求めることができる。

[0060] [数5]

$$r_i(t+\Delta t) = r_i(t)+\Delta t v_i(t+\Delta t/2) \qquad \cdots (5)$$

ここで、原子の初期位置及び初期速度を決めておけば、上述した(4)式, (5)式を用いて原子の位置・速度を順次更新することができる。なお、この数値積分法を蛙飛び法という(詳細は、例えば、岡田勲著「分子シミュレーション入門」、海文堂、1989年、P. 47に記載されている)。

[0061] また、原子に働く力F_iは、以下に示す(6)式から求めることができる。

[0062] [数6]

$$F_i = -\sum_{i<j}^{N} \nabla\phi(r_{ij}) \qquad \cdots (6)$$

このとき、φは原子間ポテンシャル、Nは全原子数である。ここで、上述した(4)式,(5)式を用いて速度・位置を求めるためには、原子間力のみを求めればよく、原子間力を求めるためには原子間ポテンシャルが決定できればよい。

[0063] したがって、本実施形態では、原子間ポテンシャルだけ決まれば、分子動力学の計算を行うことが可能となる。しかしながら、このポテンシャルの決定は、経験的要素が強く、容易でない場合が多い。したがって、本発明では、周辺原子の配置に合わせてポテンシャルを決定し、物性を再現する。

[0064] なお、本実施形態において、ポテンシャルが2個の原子間の距離のみを独立変数として定義されるものを2体間ポテンシャルといい、最も簡単なポテンシャル形式である。また、この2体間ポテンシャルを式で表すと、一般的には通常(7)式のような形で表すことができる。

[0065] [数7]

$$\phi(r_{ij}) = \varepsilon f\left(\frac{r_{ij} - r_0}{\sigma}\right) \quad \cdots (7)$$

なお、「ε」と「σ」は、それぞれ結合エネルギーと原子の大きさを表すポテンシャルパラメータであり、r_0は最安定となる原子間距離であり、r_{ij}は実際の原子間距離である。

[0066] ここで、このポテンシャルを用いて(系のエネルギーが最も低くなる結晶構造である)面心立方格子を保ったまま複雑形状を表現しようとすると、以下に示す問題によりポテンシャルを修正する必要が生じる。図4Aおよび4Bは、複雑形状を表現する際のポテンシャルの修正理由を説明するための一例を示す図である。

[0067] 上述したポテンシャルを用いて面心立方体格子を保ったまま、例えば、複雑形状31に原子32を配置すると、図4Aに示すように、どうしても表面が凹凸を有する形状に

なってしまう。また、図4Bに示すように、最初に複雑形状31に沿って原子32を配置し、その後、内部に原子を充填させていくと、確かに表面は滑らかに表現できるが、このままでは残留応力や空孔が発生してしまう。そのため、エネルギーが安定した状態とはならない。したがって、周辺原子の配置に合わせてポテンシャルを修正する必要がある。

[0068] そこで、本実施形態では、ヤング率を基にしたパラメータの導出法を行う。以下に示す例では、代表的な2体のポテンシャルであるLennard－Jonesポテンシャルの修正法を適用した例について説明する。このポテンシャルは、以下に示す(8)式のように表すことができる。

[0069] [数8]

$$\phi(r_{ij}) = 4\varepsilon\left\{\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right\} \quad \cdots(8)$$

次に、上述した(8)式を2次の項までr＝r_0の周りでテイラー(Taylor)展開すると、弾性領域を記述するポテンシャルが以下に示す(9)式のように表すことができる。

[0070] [数9]

$$\phi(r_{ij}) = \phi^{(1)}(r_0)(r_{ij} - r_0) + \frac{1}{2}\phi^{(2)}(r_0)(r_{ij} - r_0)^2 \quad \cdots(9)$$

なお、上述の(9)式において、$\phi^{(1)}$, $\phi^{(2)}$は、それぞれ1回微分、2回微分したことを示している。また、r_0は最安定原子間距離であり、Lennard－Jonesポテンシャル

では、以下に示す(10)式のように表すことができる。

[0071] [数10]

$$r_0 = 2^{1/6}\sigma \qquad \cdots(10)$$

ここで、図5は、Lennard－Jonesポテンシャルの例を示す図である。なお、図5において、横軸は原子間距離(r)を示し、縦軸は原子間ポテンシャル(φ)を示している。図5に示すように、$r=r_0$のときに原子間ポテンシャルが極小値－εをとる。

[0072] また、$\phi^{(1)}$, $\phi^{(2)}$は、以下に示す(11)式, (12)式で表されることから、上述した(10)式を用いると、以下に示す(13)式のようになる。

[0073] [数11]

$$\phi^{(1)}(r_{ij}) = \frac{\partial\phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = -\frac{24\varepsilon}{r_{ij}}\left[2\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad \cdots(11)$$

$$\phi^{(2)}(r_{ij}) = \frac{\partial\left\{\frac{\partial\phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}}\right\}}{\partial r_{ij}} = \frac{24\varepsilon}{r_{ij}^2}\left[26\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - 7\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad \cdots(12)$$

[0074] [数12]

$$\left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{12}=\frac{1}{4} \quad , \quad \left(\frac{\sigma}{r_0}\right)^{6}=\frac{1}{2} \qquad \cdots(13)$$

したがって、上述した(11)式, (12)式, (13)式を上述した(9)式に代入すると、以下に示す(14)式に示すような調和振動子のポテンシャルの形となる。

[0075] [数13]

$$\phi(r_{ij})=-\frac{24\varepsilon}{r_0}\left[2\frac{1}{4}-\frac{1}{2}\right](r_{ij}-r_0)+\frac{1}{2}\frac{24\varepsilon}{r_0^2}\left[26\frac{1}{4}-7\frac{1}{2}\right](r_{ij}-r_0)^2=\frac{36\varepsilon}{r_0^2}(r_{ij}-r_0)^2 \qquad \cdots(14)$$

ここで、バネ定数をkとすると、上述の(9)式より、以下に示す(15)式が導出される。

[0076] [数14]

$$k=\frac{36\varepsilon}{r_0^2} \qquad \cdots(15)$$

更に、バネ定数とヤング率との関係は以下に示す(16)式となる。

[0077] [数15]

$$k = \frac{S}{r_0} E \qquad \cdots (16)$$

なお、Sは力の働く断面積である。ここで、上述した(15)式, (16)式より、結合エネルギー ε は、以下に示す(17)式により求められる。

[0078] [数16]

$$\varepsilon = \frac{r_0}{36} SE \qquad \cdots (17)$$

ここで、r_0は、初期配置時の原子間距離であり本実施形態では最安定原子間距離であるが、Sは別途決める必要がある。具体的には、上述したようにボロノイ多面体解析(S04)等を行い、原子間距離を表す線分r_0を横切る面積をSとすればよい。

[0079] (ボロノイ多面体解析について)

ここで、ボロノイ多面体解析について、具体的に図を用いて説明する。図6Aおよび6Bは、本実施形態におけるボロノイ多面体解析を説明するための一例を示す図である。なお、図6Aに示す例では、原子41－1～41－7を有し、原子41－1を母点として原子41－1の周りにある全ての粒子(原子)41－2～41－7をそれぞれ直線で結ぶ。また、上述の処理にて得られた線分42－1～42－6に垂直で原子点間距離が等しくなる2等分線(3次元の場合には、2等分面)を生成する。更に、上述の処理にて得られた2等分線43－1～43－5により囲まれる多角形(3次元の場合には、多面体)が、ボロノイ多面体となる。したがって、上述したように定義された多面体から面積

Sを求めることができる。

[0080] ここで、上述した内容を原子配置手段24等により配置された全ての原子について行うことができればよいが、例えば、対象形状の表面側にある原子については、原子数が足りず上述したボロノイ多面体を定義することができない。

[0081] そこで、本実施形態では、図6Bに示すような処理を行う。なお、図6Bに示す原子51－1～51－3のうち、原子51－1，51－2は、対象形状の表面側に存在する原子（表面原子）とし、また、原子51－3は、表面原子に対して内部にある原子（内部原子）とする。

[0082] このとき、各原子間を結ぶ線分52－1，52－2，52－3の垂直2等分線の交点を点pとする。この点pは、ボロノイ多面体を形成する頂点の一つとなるため、ボロノイ点とする。

[0083] ここで、このボロノイ点pから線分52－1に下ろした垂線53と、線分52－1との交点を点mとする。また、点mに対して垂線53上に存在し、点p，m間の距離と等しい距離にある点を点qとする。このようにして定義した点p，qに基づいて、原子51－1と原子51－2との相互作用には線分pqで定義された面積S、具体的には線分pqに奥行きと長さを乗算したものを定義することができる。

[0084] なお、3次元の場合には、線分の代わりに面を扱う必要があるが手順は同じである。したがって、シミュレーション処理実行時にユーザ等により予めヤング率を与えることにより煩雑なポテンシャルパラメータの決定に悩む必要がなく、原子間ポテンシャルパラメータを決定することができる。また、そのポテンシャルパラメータに基づいて、上述した分子動力学の計算を行い、その計算結果に基づいて物性値又は物理量を高精度に決定することができる。したがって、上述にて定めたポテンシャルと、一般的な繰り込み理論を分子動力学法に適用することによりマクロな系の計算が可能になる。

[0085] （本実施形態のシミュレーションによる精度結果）

次に、本実施形態のシミュレーションによる精度結果について図を用いて説明する。なお、以下に示す例では、片持ち梁における曲げと振動との関係を例に取って、本実施形態のシミュレーション手法の精度確認を行う。なお、梁の材質は、例えばSUS等を用いることができる。

[0086] 図7A～7Cは、2次元系片持ち梁の曲げと振動のシミュレーション結果の一例を示す図である。また、図8A～8Cは、3次元系片持ち梁の曲げと振動のシミュレーション結果の一例を示す図である。なお、以下に示す図7A～7Cおよび図8A～8Cは、上述した画面生成手段27により生成され、出力手段22により出力される図の一例を示すものでもある。

[0087] ここで、図7Aは、2次元における横からの荷重をかけた梁の様子を示す図である。図7Bは、梁の曲げ(Length)とそり(Deflection)との関係のグラフの一例を示す図である。図7Cは、梁の振動(周期)(Time)と振幅(Amplitude)との関係のグラフの一例を示す図である。

[0088] なお、図7Aでは、横からの荷重100[N]、ヤング率:208[GPa]、密度:7800[kg／m^3]、横幅×高さ×奥行き＝10×100×1[mm]の梁の様子を示している。このとき、図7Bに示すように、繰り込み分子動力学計算により得られた値(RMD:図7Bにおける点部)が、理論値の値(厳密解)とよく一致しているのがわかる。また、図7Cにおいては、理論周期とRMDの周期(図7Cにおける実線部)とがよく一致しているのがわかる。

[0089] また、図8Aは3次元における荷重をかけた梁の様子を示す図である。図8Bは梁の曲げ(Length)そり(Deflection)との関係のグラフの一例を示す図である。図8Cは梁の振動(周期)(Time)と振幅(Amplitude)との関係のグラフの一例を示す図である。

[0090] なお、図8Aでは、横からの荷重4．2[N]、ヤング率:100[GPa]、密度:7800[kg／m^3]、横幅×高さ×奥行き＝1×10×1[mm]の梁の様子を示している。このとき、図8Bに示すように、繰り込み分子動力学計算により得られた値(RMD:図8Bにおける点部)が、理論値の値(厳密解)とよく一致しているのがわかる。また、図8Cにおいては、理論周期と、RMDの周期(図8Cにおける実線部)とがよく一致しているのがわかる。

[0091] 上述したように本発明によれば、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めることができる。これにより、原子配置の情報によって適宜ポテンシャルを修正し、物性値が再現されるように工夫することにより、複雑形状を表現しても非物理的な残留応力等

が生じず安定した計算を実現することができる。

[0092] つまり、本発明によれば、対象とする形状が複雑な場合の分子動力学法の計算において、適当な原子配置であっても安定に計算を行うことができ、かつ適切な物理量を算出できるよう原子間ポテンシャルを修正することができる。

[0093] また、本発明を適用することにより、機構・弾性の動解析における摩擦による発熱、破壊の計算や、原理的には、量子的な現象を除く全ての古典現象を計算することができる。更に、構造解析や流体解析、運動解析、最適設計、電磁気、熱物質の分野等においても本発明を広く適用することができる。

[0094] 以上、本発明の好ましい実施例について詳述したが、本発明は係る特定の実施形態に限定されるものではなく、特許請求の範囲に記載された本発明の要旨の範囲内において、種々の変形、変更が可能である。

[0095] 本出願は2007年7月31日出願の優先権主張日本特許出願第2007－199646号に基づいており、その全内容はここに援用される。

産業上の利用可能性

[0096] 本発明は、安定かつ適切に物性値又は物理量を求めるための分子シミュレーション方法、分子シミュレーション装置、分子シミュレーションプログラム、及び該プログラムを記録した記録媒体に適用可能である。

請求の範囲

[1] 予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーション方法において、

前記形状に原子を配置する原子配置ステップと、

前記原子配置ステップにより配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得ステップと、

前記原子間ポテンシャル取得ステップにより得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算ステップとを有することを特徴とする分子シミュレーション方法。

[2] 前記原子配置ステップは、

前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することを特徴とする請求項1に記載の分子シミュレーション方法。

[3] 前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることを特徴とする請求項1に記載の分子シミュレーション方法。

[4] 前記原子間ポテンシャル取得ステップは、

前記原子配置ステップにより配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られる各ボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エネルギーを含むポテンシャルパラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することを特徴とする請求項1に記載の分子シミュレーション方法。

[5] 予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーション装置において、

前記形状に原子を配置する原子配置手段と、

前記原子配置手段により配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得手段と、

前記原子間ポテンシャル取得手段により得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算手段とを有することを特徴とする分子シミュレーション装置。

[6] 前記原子配置手段は、

前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することを特徴とする請求項5に記載の分子シミュレーション装置。

[7] 前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることを特徴とする請求項5に記載の分子シミュレーション装置。

[8] 前記原子間ポテンシャル取得手段は、

前記原子配置手段により配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られる各ボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エネルギーを含むポテンシャルパラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することを特徴とする請求項5に記載の分子シミュレーション装置。

[9] 予め設定された形状の物性値又は物理量をシミュレーションから求める分子シミュレーションプログラムにおいて、

コンピュータを、

前記形状に原子を配置する原子配置手段、

前記原子配置手段により配置された原子の位置に基づいて原子間ポテンシャルを取得する原子間ポテンシャル取得手段、及び、

前記原子間ポテンシャル取得手段により得られる原子間ポテンシャルに基づいて分子動力学計算を行い、物性値又は物理量を取得する分子動力学計算手段として機能させるための分子シミュレーションプログラム。

[10] 前記原子配置手段は、

前記形状にメッシュを生成し、生成したメッシュの交点に原子を配置することを特徴とする請求項9に記載の分子シミュレーションプログラム。

[11] 前記原子間ポテンシャルは、2個の原子間の距離のみを独立変数とする2体間ポテンシャルであることを特徴とする請求項9に記載の分子シミュレーションプログラム。

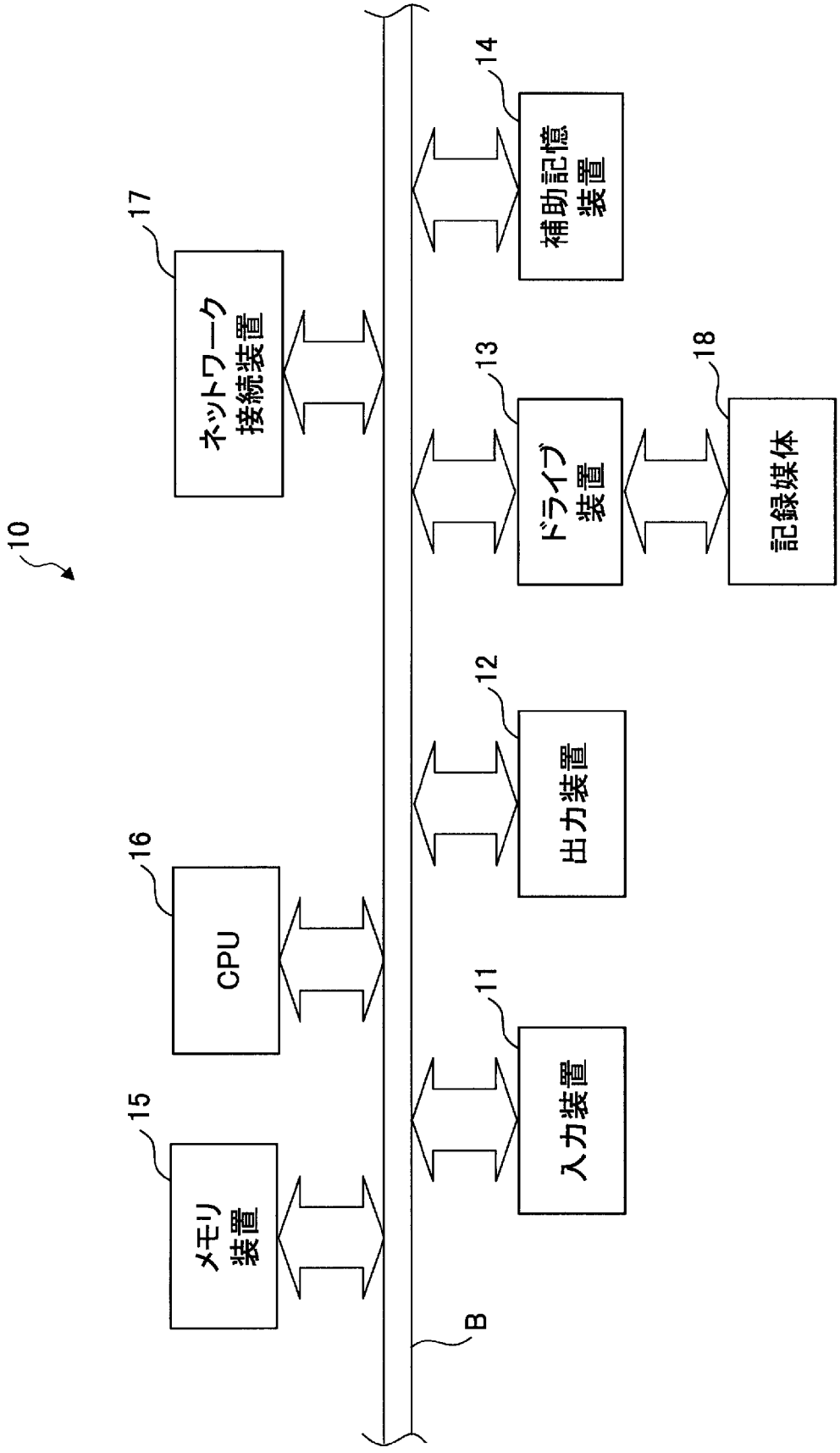
[12] 前記原子間ポテンシャル取得手段は、

前記原子配置手段により配置された各原子点を用いたボロノイ多面体解析により得られるボロノイ点に基づいて、2つの原子間の力の働く断面積及び原子間の結合エ

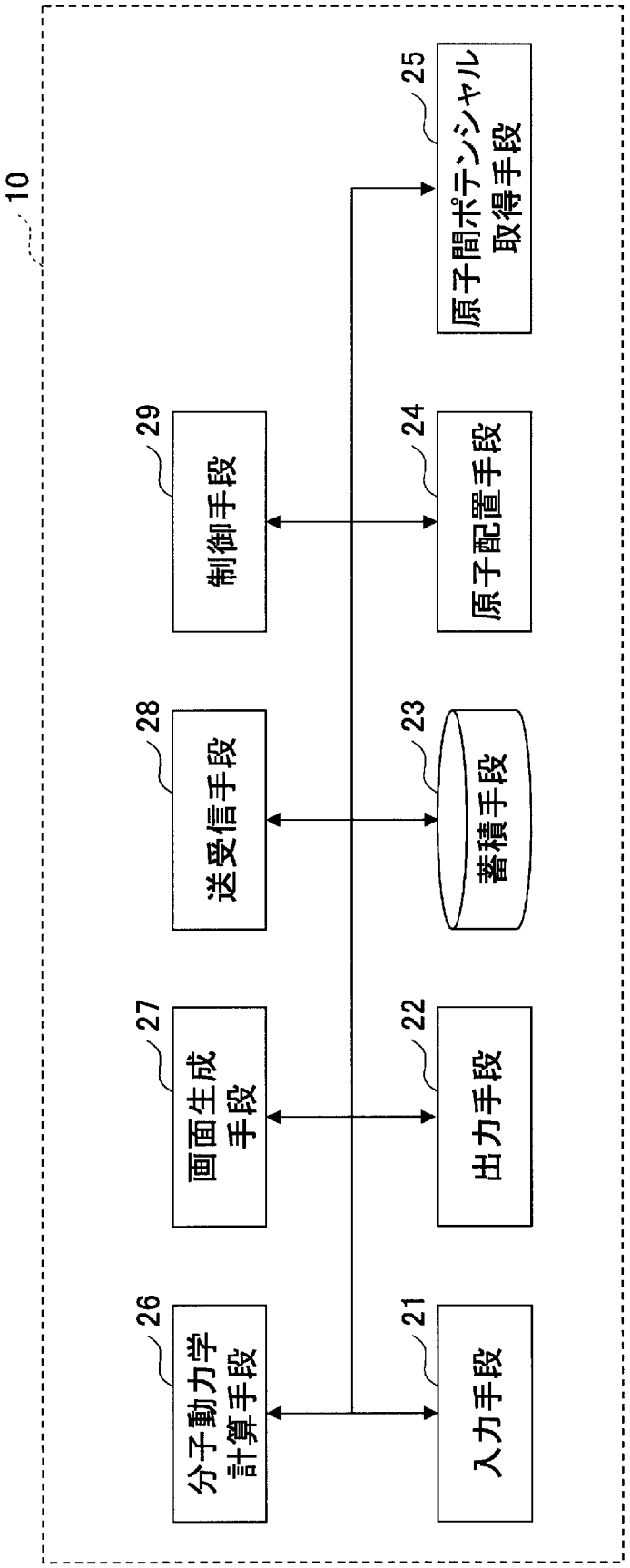
ネルギーを含むポテンシャルパラメータを取得し、前記ポテンシャルパラメータを用いて原子間ポテンシャルを決定することを特徴とする請求項9に記載の分子シミュレーションプログラム。

[13] 前記請求項9に記載された分子シミュレーションプログラムが記録されたコンピュータ読み取り可能な記録媒体。

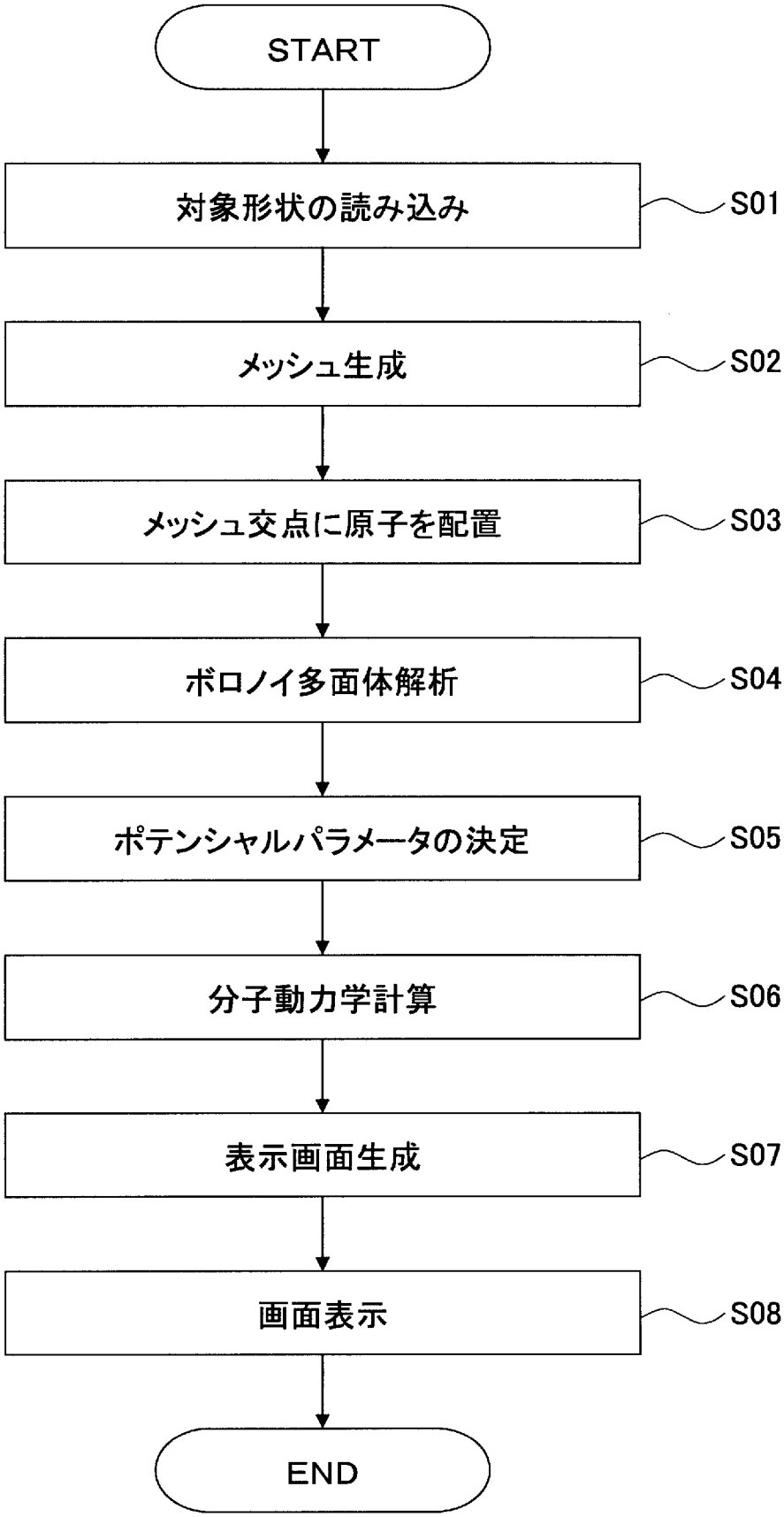
[図1]


10
17
ネットワーク
接続装置
14
補助記憶
装置
13
ドライブ
装置
18
記録媒体
12
出力装置
16
CPU
11
入力装置
15
メモリ
装置
B

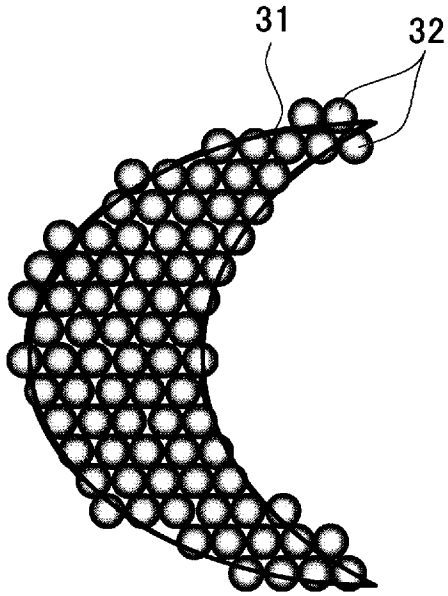
[図2]


10
25
原子間ポテンシャル取得手段
29
制御手段
24
原子配置手段
28
送受信手段
23
蓄積手段
27
画面生成手段
22
出力手段
26
分子動力学計算手段
21
入力手段

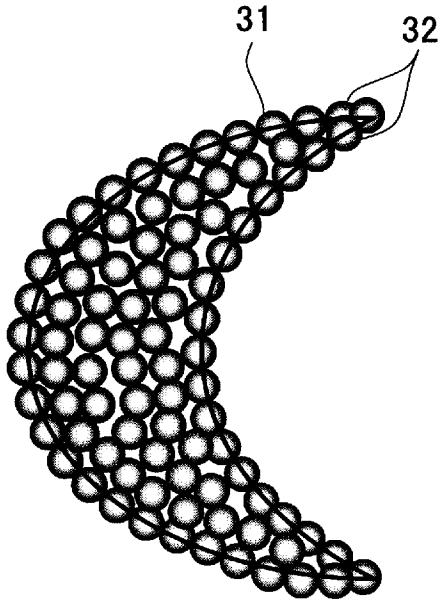
[図3]


START
対象形状の読み込み
S01
メッシュ生成
S02
メッシュ交点に原子を配置
S03
ボロノイ多面体解析
S04
ポテンシャルパラメータの決定
S05
分子動力学計算
S06
表示画面生成
S07
画面表示
S08
END

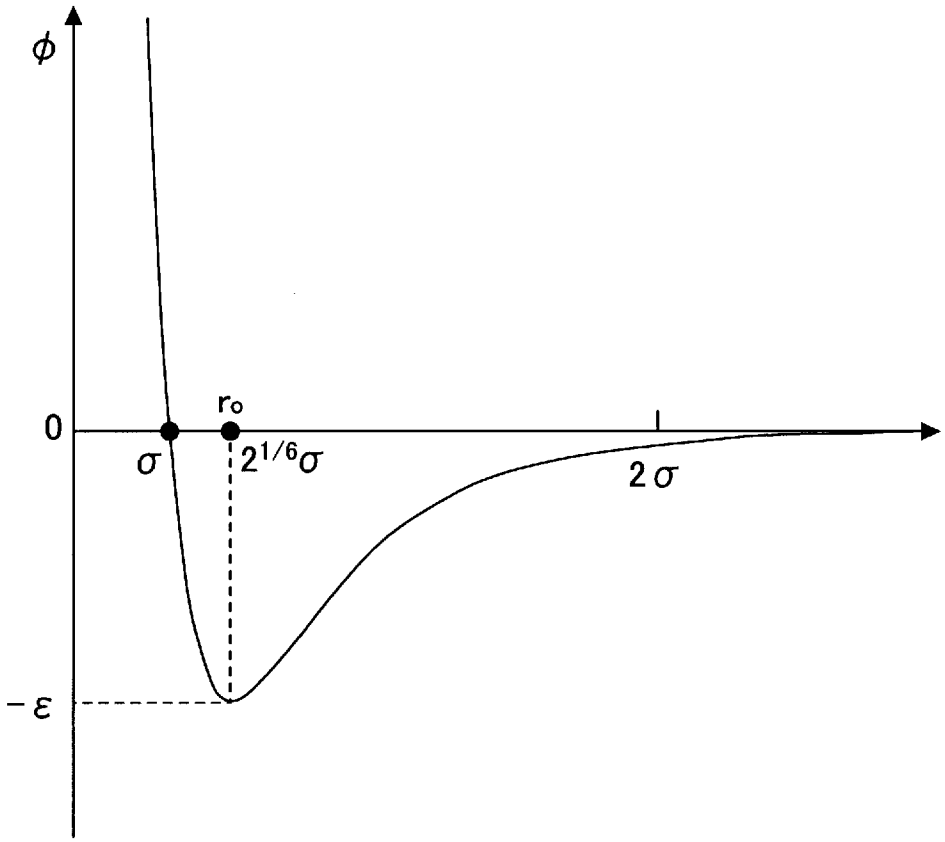
[図4A]



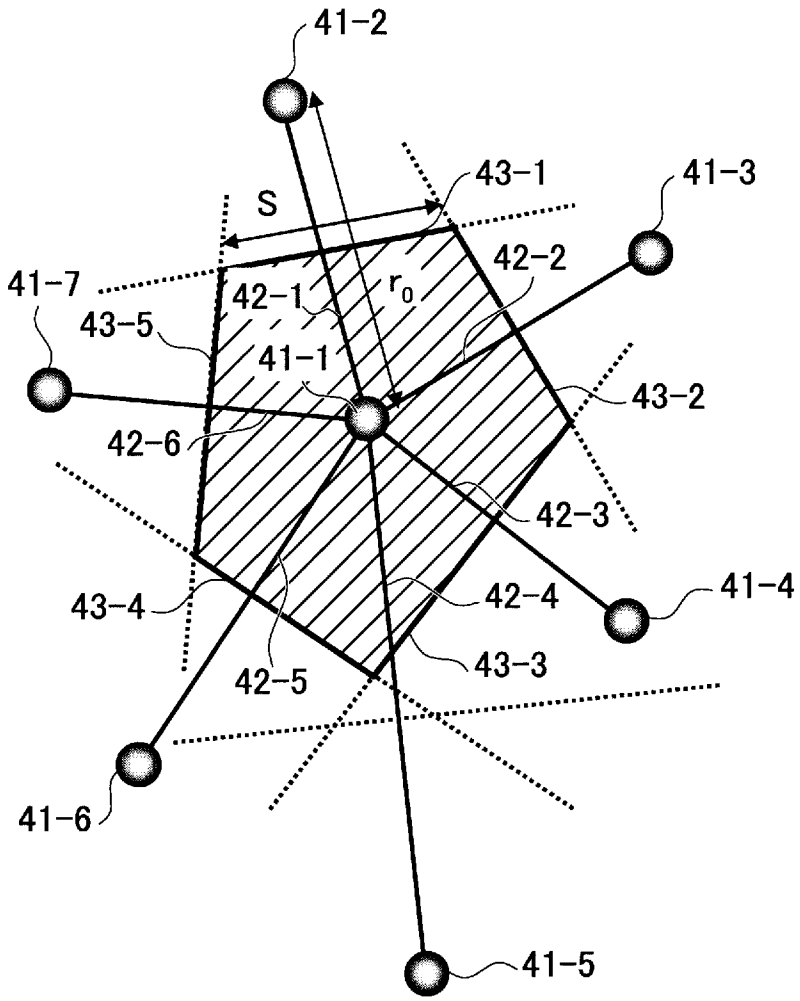
[図4B]



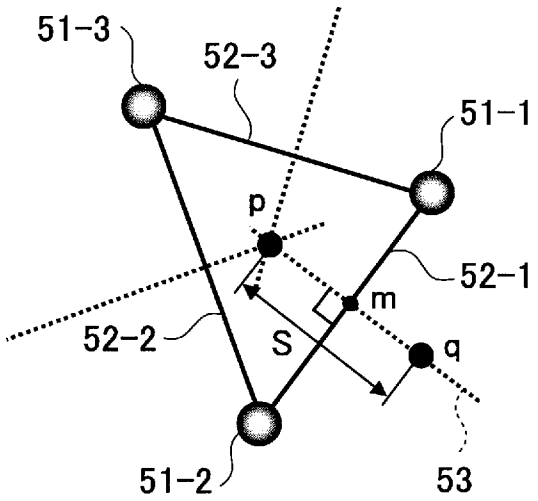
[図5]



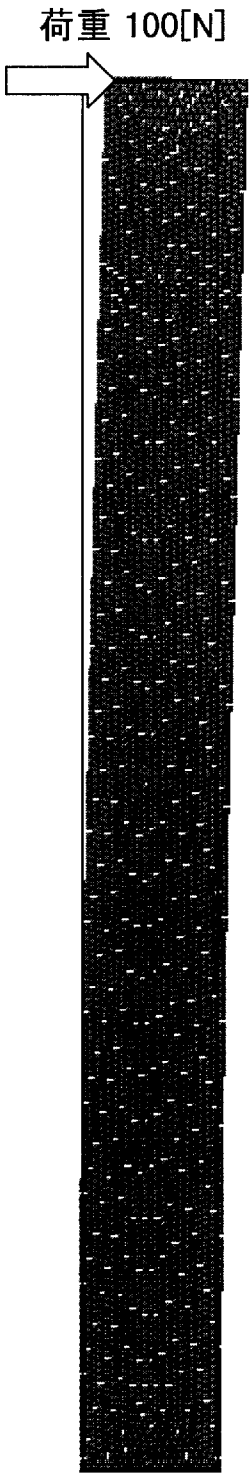
[図6A]


41-2
43-1
41-3
S
42-2
41-7
42-1
r_0
43-5
41-1
43-2
42-6
42-3
41-4
43-4
42-4
43-3
42-5
41-6
41-5

[図6B]

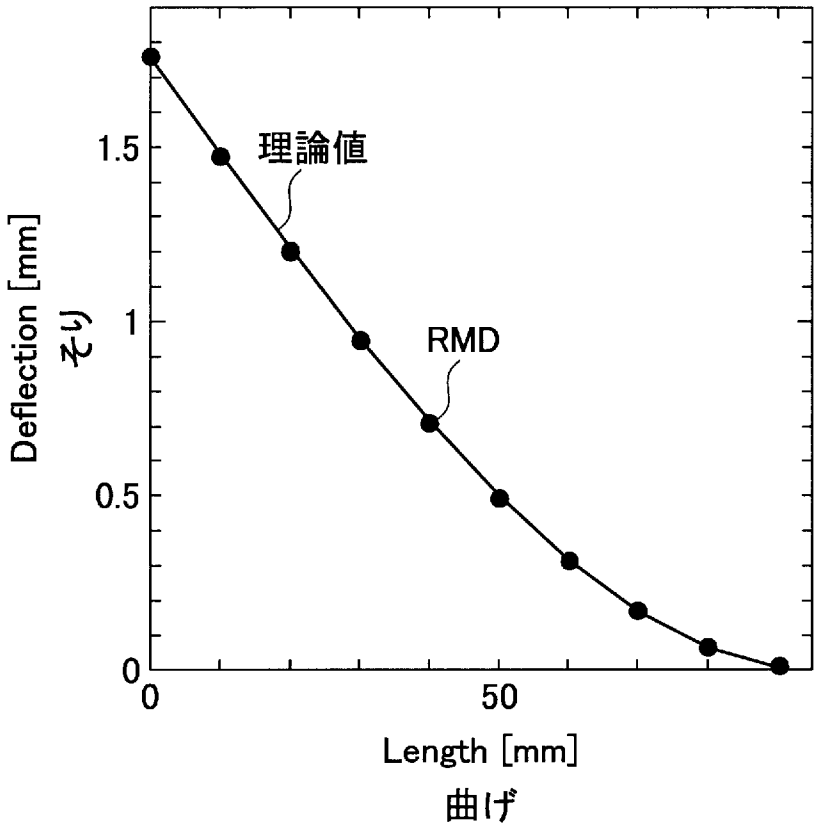


[図7A]

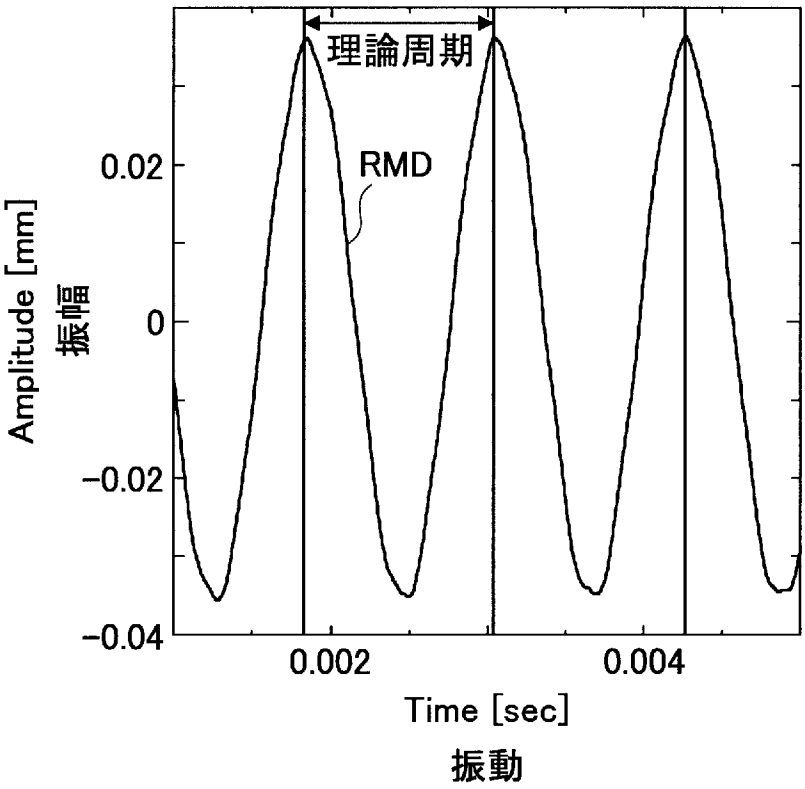


ヤング率:208[GPa]
密度:7800[kg/m^3]
横幅×高さ×奥行き
=10×100×1[mm]

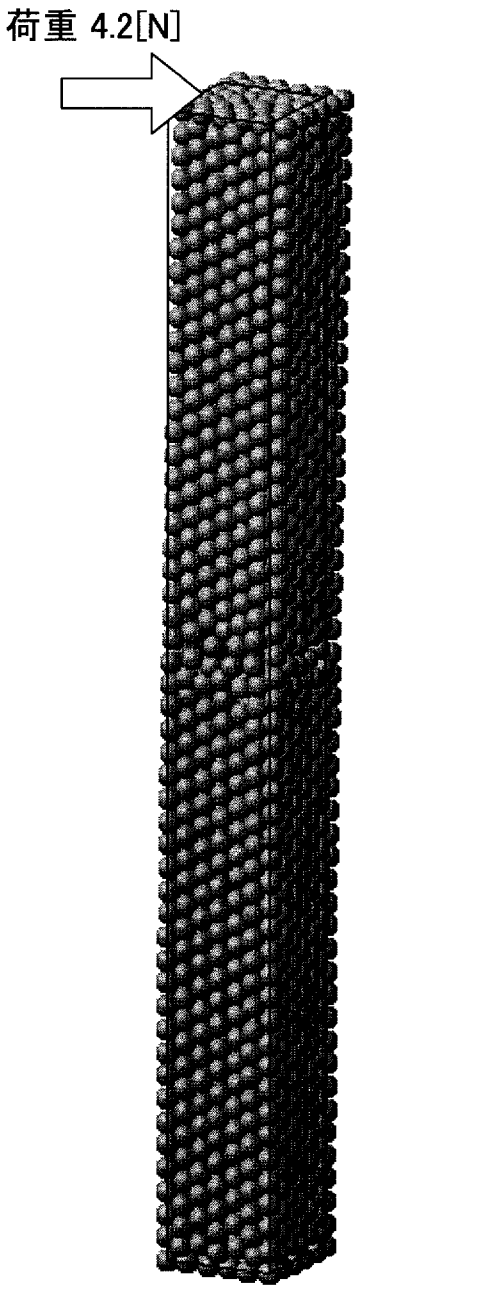
[図7B]



[図7C]

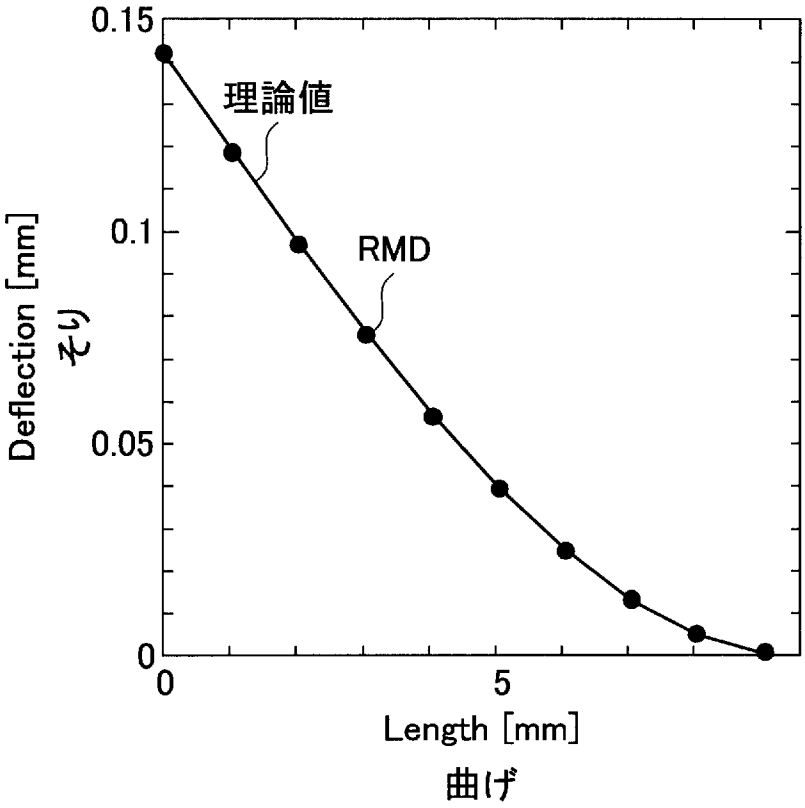


[図8A]

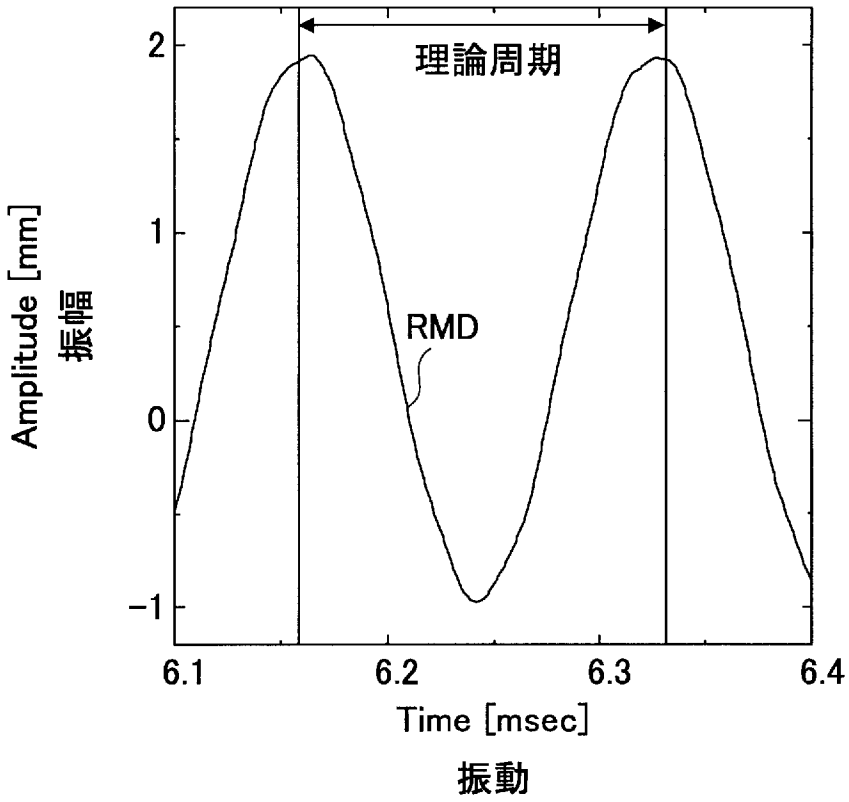


ヤング率：100[GPa]
密度：7800[kg/m^3]
横幅×高さ×奥行き
=1×10×1[mm]

[図8B]



[図8C]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2008/059054

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
G06F19/00(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G06F19/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2008
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2008 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2008

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
JSTPlus(JDreamII), JST7580(JDreamII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Akihiro NAKATANI, "Shuju no Kaiso ni Okeru Sosei Riron no Hatten : 7. Bunshi Dorikigakuho ni yoru Sosei Henkei no Simulation", Journal of the Society of Materials Science, Japan, 15 November, 1999 (15.11.99), Vol.48, No.11, pages 1328 to 1334	1-13
A	Masanori KAYAMA, Nano Simulation Gijutsu Handbook, 1st edition, Kyoritsu Shuppan Co., Ltd., 15 July, 2006 (15.07.06), pages 244 to 245, 294 to 295, 306 to 308	1-13

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
16 June, 2008 (16.06.08)	24 June, 2008 (24.06.08)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2008/059054

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Toshihiro KIDO, "Bunshi Dorikigaku Simulator no Tameno Workbench : COMDES I", Preprints of the 13th Symposium on Chemical Information and Computer Science and the 18th Symposium on Structure-Activity Relationships, 1990.11.28 (Wed) to 30(Fri), 19 November, 1990 (19.11.90), pages 113 to 116	1-13
A	FUJITSU S Family MASPHYC/WB Shiyo Tebikisho (Keisan Zairyo Sekkei System/Workbench), 1st edition, Fujitsu Ltd., 31 October, 1994 (31.10.94), pages 72 to 75, 81 to 95, 103 to 111	1-13

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２００８／０５９０５４

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G06F19/00(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G06F19/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２００８年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２００８年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２００８年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

JSTPlus(JDreamII), JST7580(JDreamII)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求の範囲の番号
A	中谷　彰宏，種々の階層における塑性理論の発展：７．分子動力学法による塑性変形のシミュレーション，材料，1999.11.15，Vol.48，No.11，pp.1328-1334	１－１３
A	香山　正憲，ナノシミュレーション技術ハンドブック，初版，共立出版株式会社，2006.07.15，P.244-245,294-295,306-308	１－１３

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。　　☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー
「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
１６．０６．２００８	２４．０６．２００８

国際調査機関の名称及びあて先
日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ）
郵便番号１００－８９１５
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

特許庁審査官（権限のある職員）　５Ｌ　３７９６
宮地　匡人
電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３５６２

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求の範囲の番号
Ａ	木戸　敏弘，分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＣＯＭＤＥＳ　Ｉ，第１３回情報化学討論会　第１８回構造活性相関シンポジウム　講演要旨集　１９９０年１１月２８日（水）～３０日（金），1990.11.19，P.113-116	１－１３
Ａ	ＦＵＪＩＴＳＵ　Ｓ　ファミリー　ＭＡＳＰＨＹＣ／ＷＢ使用手引書　（計算材料設計システム／ワークベンチ），初版，富士通株式会社，1994.10.31，P.72-75,81-95,103-111	１－１３