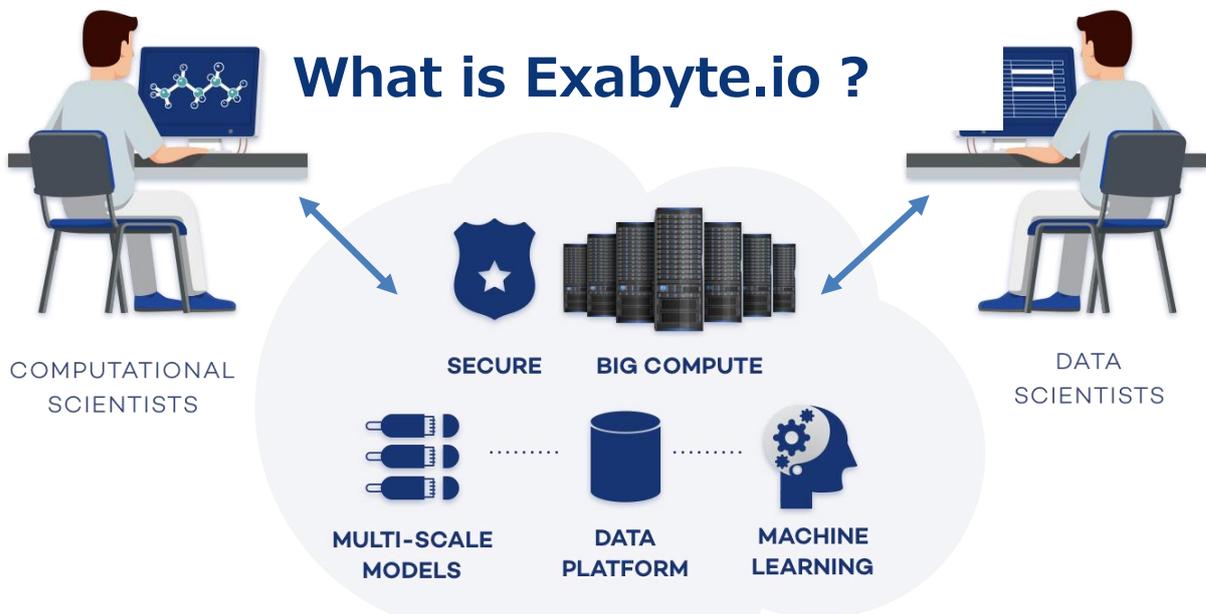


EXABYTE.I   
MATERIALS DISCOVERY CLOUD

材料設計プラットフォーム





Exabyte.io は、材料開発のための計算プラットフォームであり、以下の特長を有しています。

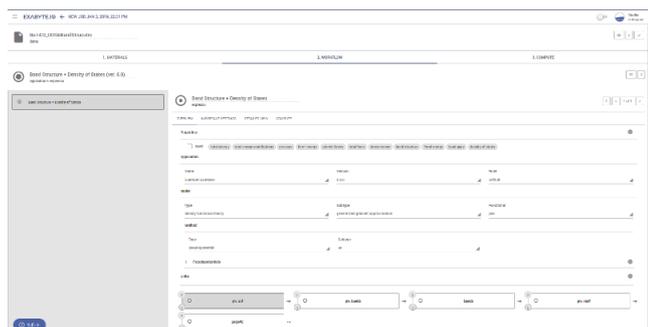
1. 第一原理計算及び分子動力学計算によるナノスケールシミュレーションが、クラウド環境ですぐに利用できます。また、計算リソースに制限がないので、大規模かつ多数のケースが同時に計算できます。
2. ナノスケール材料モデリングのための GUI 及びデータベースを web 上で簡単に操作できます。また、Workflow 機能を搭載しており、ユーザー独自の物性予測計算、自動処理環境および機械学習機能を構築できます。
3. プラットフォームを通じて、計算科学者、実験科学者、そしてデータ科学者を含む複数のユーザーが、オンラインで新しい材料を設計することに参加することができます。

## Features

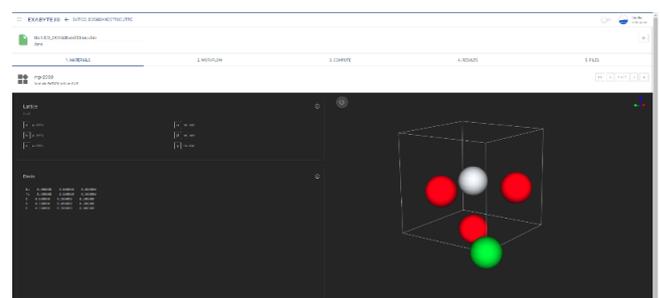
### Exabyte.io の機能

#### 第一原理計算ソフトを制御する GUI

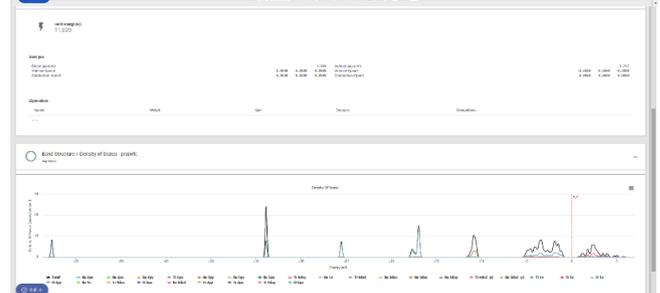
Exabyte.io では、第一原理計算ソフト VASP および Quantum ESPRESSO を制御する GUI を搭載しています。ユーザーは各物性計算に対応した Workflow を選択し計算を実行、その計算結果は可視化され、結果を確認しやすくなっています。クラウド計算機への計算ジョブ投入も GUI 操作でできるように設計されています。



計算条件設定



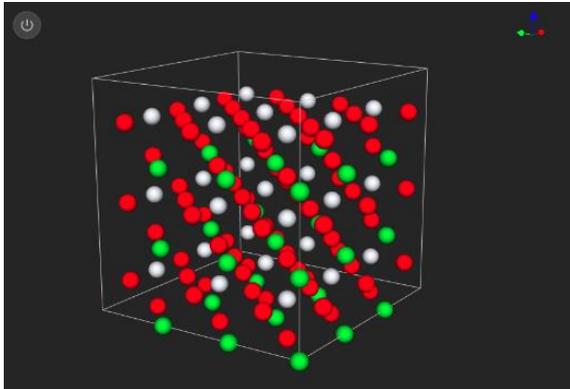
結晶モデル可視化



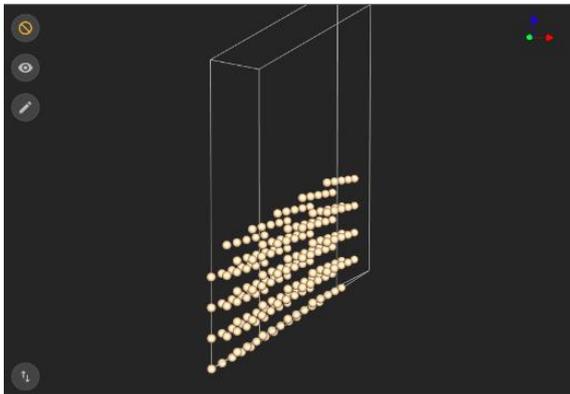
計算結果可視化

## モデリング機能

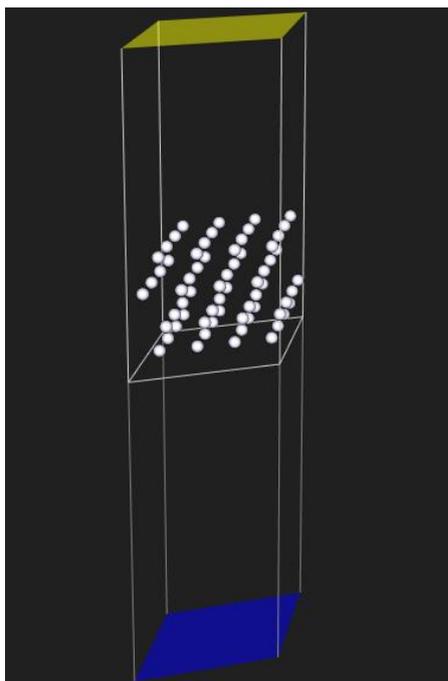
元素置換、挿入、削除といった基本的な動作はもちろんのこと、スーパーセル、金属スラブモデルおよび元素組み合わせモデル、反応経路計算用モデル、表面モデル等の様々なモデルが作成可能です。



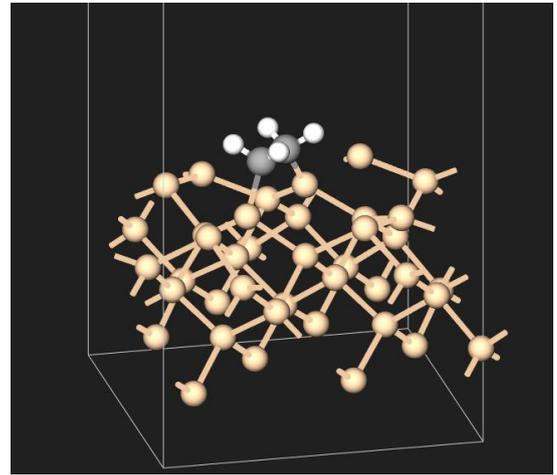
スーパーセル



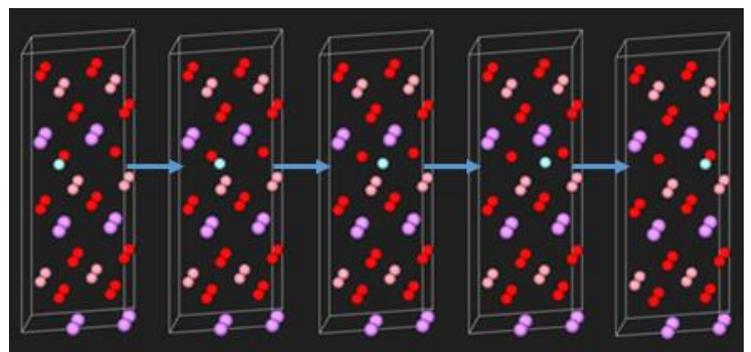
金属スラブモデル



電極の充放電解析モデル



表面モデル



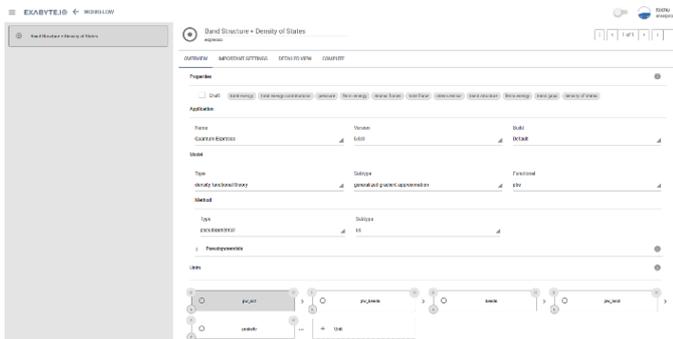
反応経路モデル

Ba, Zn, Sn, Hg	0.000000	0.000000	0.000000
Ti, Ga	0.500000	0.500000	0.500000
O	0.000000	0.500000	0.500000
O	0.500000	0.000000	0.500000
O	0.500000	0.500000	0.000000

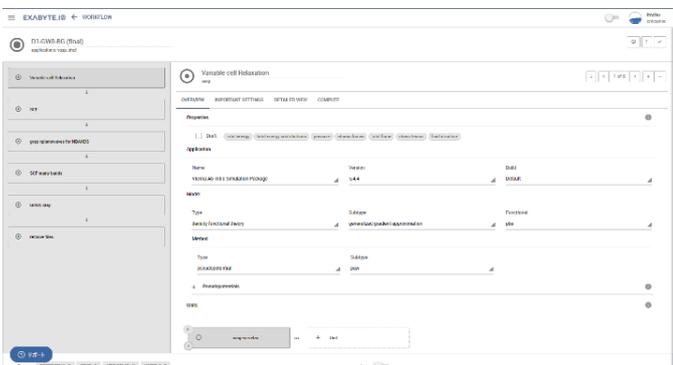
組み合わせモデル

## Workflow 機能

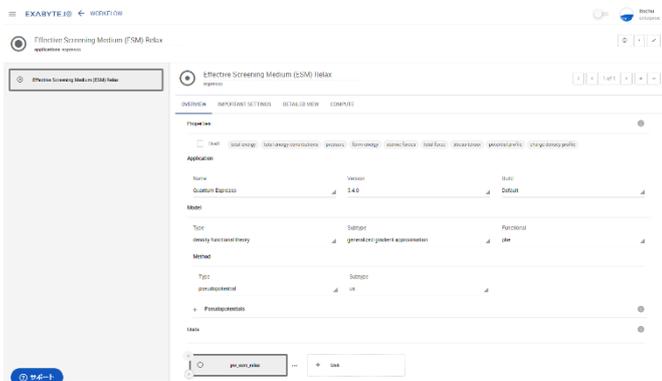
Exabyte.io では、ユーザーが特定の計算をすぐに行えるように、計算フローである Workflow が搭載されています。構造最適化、バンド構造、DOS、フォノンなどの計算をすぐに行うことができます。Workflow は、Exabyte.io 内で公開されているものをダウンロードで入手することができ、またユーザーが自分で作成することもできます。ユーザーが独自で作成する場合には、第一原理計算フローと Python や Shell スクリプトを組み合わせることができます。



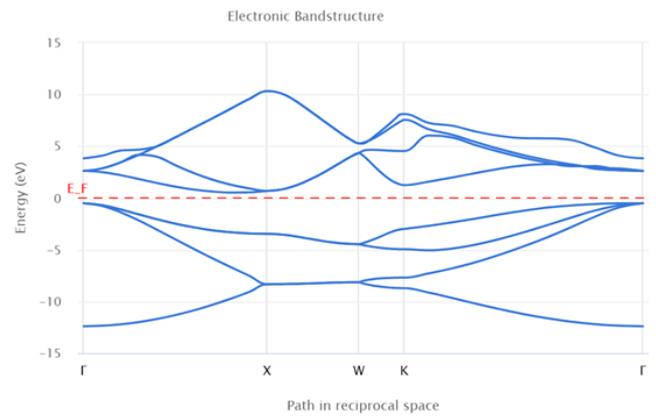
DOS&バンド構造の計算



バンドギャップの計算



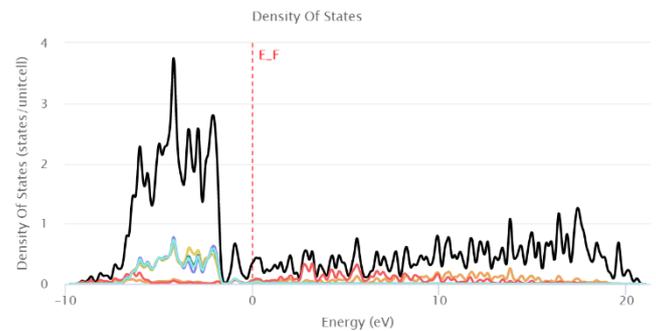
電圧印加下での計算



Band gap					
Direct gap (eV)			3.138	Indirect gap (eV)	1.438
Valence Kpoint	0.0000	0.0000	0.0000	Valence Kpoint	0.0000
Conduction Kpoint	0.0000	0.0000	0.0000	Conduction Kpoint	0.4000

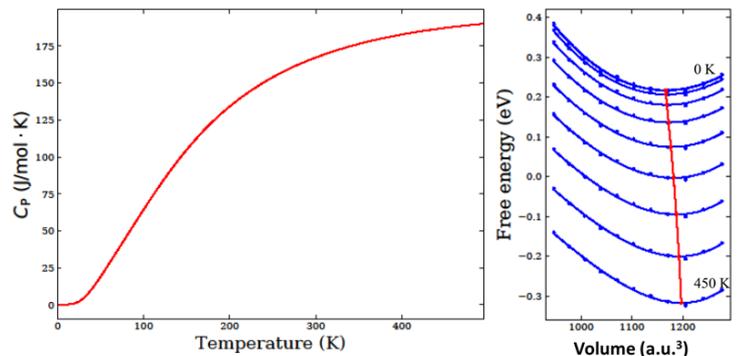
Eigenvalues				
Kpoint	Weight	Spin	Energies	Occupations
...				

バンド構造可視化&バンドギャップ表示の結果表示



DOSおよびPDOSの結果を可視化

ユーザー独自で、Workflow を作成することで、Exabyte.io にまだ実装されていない計算なども行うことが可能です。



独自の Workflow を作成し比熱を計算した結果

## アプリケーション一覧

2019年7月現在、Exabyte.io で使用することのできるソルバーおよびその他のアプリケーションを示します。VASP および Quantum ESPRESSO には、GUI 対応しています。それ以外のアプリケーションについては、Workflow の Shell/Python、ターミナルのコマンドモード、もしくはリモートデスクトップ機能を使うことで可能です。またユーザー独自にソフトをコンパイルして使うこともできます。

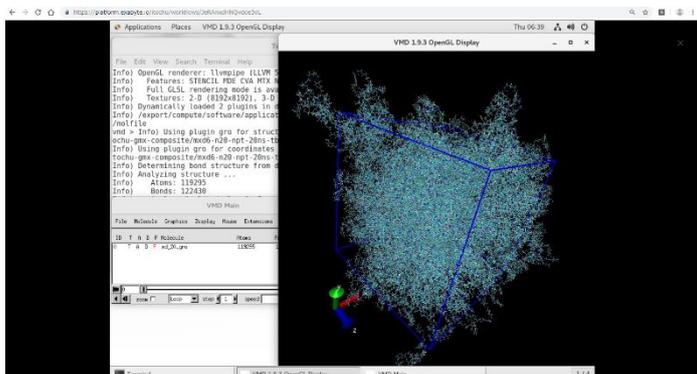
### 利用できるソルバー一覧

ソルバー名	バージョン
VASP	5.3.5, 5.4.4
Quantum ESPRESSO	5.2.1, 5.4.0, 6.0, 6.3
LAMMPS	11-2016
GROMACS	5.1.4, 2018.2
NWChem	6.6
CP2K	4.1
Turbomole	7.0
WIEN2k	17.1

※ VASP, Turbomole, WIEN2k に関しては、事前にライセンスをご用意頂く必要があります。

### 利用できるアプリケーション一覧

ソルバー名	バージョン
VMD	1.9.3
XCRYSDEN	1.5.60
VESTA	3.3.8
P4VASP	0.3.30

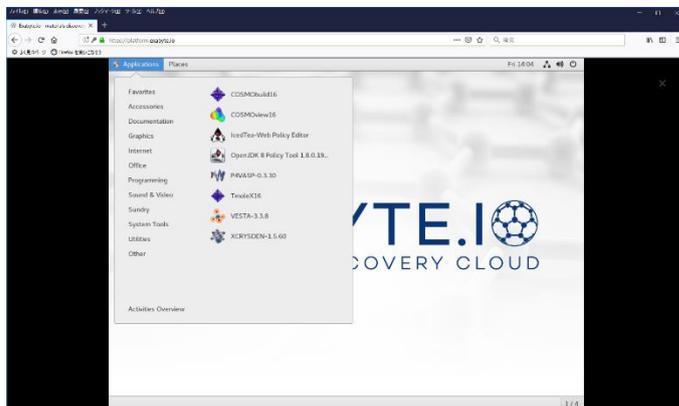


GROMACS で高分子の計算後、

リモートデスクトップ機能を使って VMD で可視化

## リモートデスクトップ

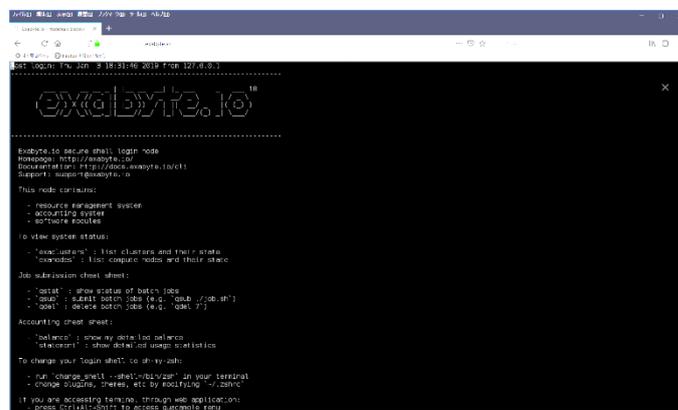
Exabyte.io には、ターミナルモードの他に web ブラウザ上で使用可能なリモートデスクトップ機能も搭載されています。その他のフリーソフトによる可視化やモデリングすることができ、保存したモデルデータは Exabyte.io の GUI から選択することも可能です。



リモートデスクトップ

## ターミナルモード

Exabyte.io では、GUI による操作だけでなくターミナルによる操作も可能です。そのため、各個人のディレクトリで固有のソフトやスクリプトを設定および実行することも可能です。



ターミナルモードの画面

## ターミナルソフトおよび SCF ソフト接続

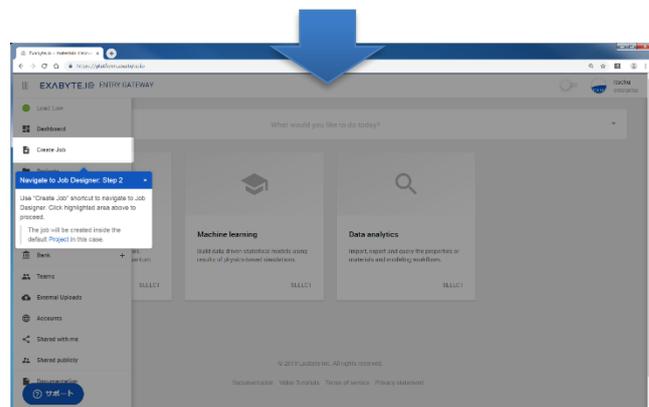
Putty 等のターミナルソフトや SCF でのファイル送受信ソフトを使った Exabyte.io のクラウド計算機とのやり取りも可能です。ジョブ投入には、ジョブコントローラー用のバッチファイルで行います。ユーザー独自のソフトウェアと連携したシステム構築などにも活用することができます。

## データベース連携

Exabyte.io では、米国の Materials Project [1] と連携しています。ユーザーは、組成式もしくは組成元素を入力することで、結晶構造を簡単に検索取得することができます。また結晶構造は、タグ付けされ、判別しやすくなっています。ダウンロードした結晶構造は、可視化、モデル編集および計算モデルとして使用することができます。

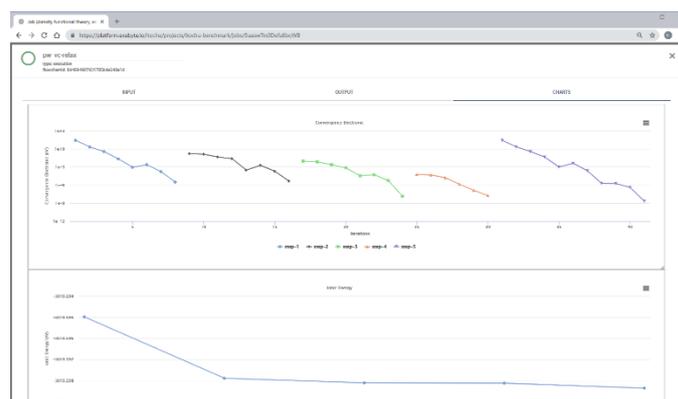
[1] <https://materialsproject.org/>

FORMULA & UNIT CELL	SPCGRGROUP	ID (MATERIALS PROJECT & ICSD)	VOLUME & FORMATION ENTHALPY	TAGS	IMPORTED
Al2O3 Al16O12F4	P1 1	mp-664713	412.47 Å <sup>3</sup> -3.28 eV		
Al2O3 Al16O12F4	P1 1	mp-665036	379.00 Å <sup>3</sup> -3.33 eV		
Al2O3 Al6O6	R-3c 167	mp-1143	87.42 Å <sup>3</sup> -3.44 eV	DIALUMINUM TRIOXIDE - HIGH PRESSURE EXPERIMENTAL PHASE ALUMINUM TRIOXIDE - ALUMINUM TRIOXIDE - ALPHA ALUMINUM TRIOXIDE - BETA DIALUMINUM TRIOXIDE DIALUMINUM TRIOXIDE - ALPHA ALUMINUM TRIOXIDE DIALUMINUM TRIOXIDE - CORUNDUM TYPE CORUNDUM CORUNDUM (C6-20P2)	
Al2O3 Al16O12F4	P1a1_1 33	mp-2254	370.20 Å <sup>3</sup> -3.42 eV	ALUMINA KAPPA	



## リアルタイム計算結果確認

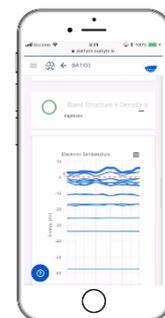
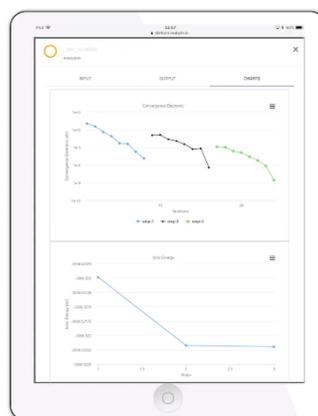
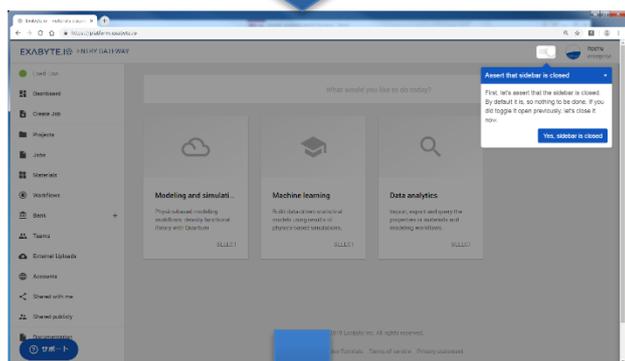
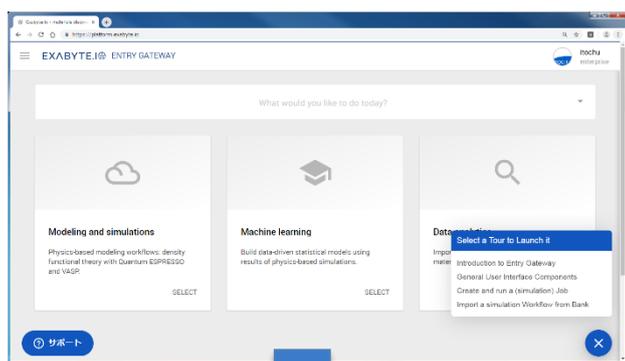
Exabyte.io では、計算ジョブの進行状況をアウトプットファイルの可視化だけでなく、エネルギーの収束状況などをプロットした監視機能も搭載しています。また意図せぬエネルギーの収束状況の際には、計算を止めるボタンがありますので、ボタン1つで計算を中断することもできます。スマートフォンやタブレットからも操作およびリアルタイムで確認することもできます。



リアルタイムに収束状況確認

## チュートリアル機能

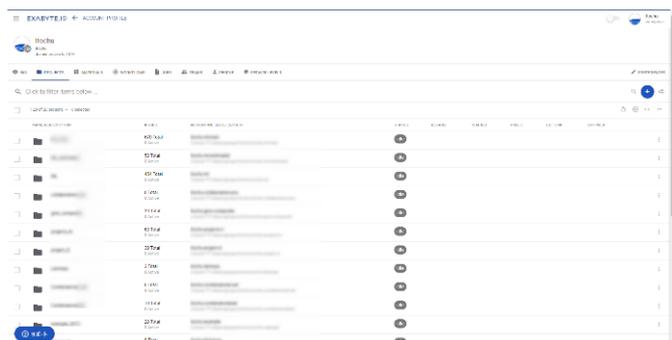
Exabyte.io では、初めて使う方や操作が分からない状態を助けるチュートリアル機能があります。ユーザーはガイダンスに従って進めていくと第一原理計算モデル、Workflow、ジョブの作成法などを習得できます。



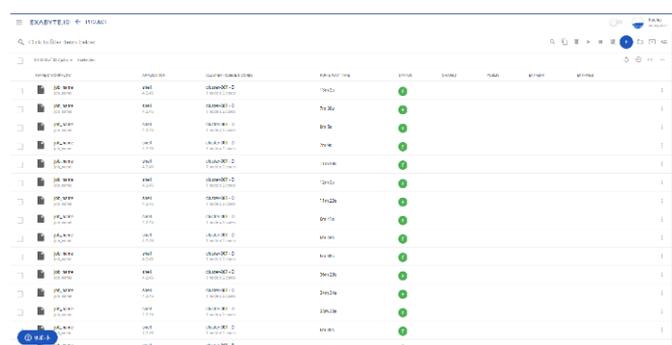
様々なデバイスで操作可能

## 動作&データ管理

Exabyte.io は、web ブラウザ上で使用するため、ソフトをインストールするなどの作業が必要ありません。また全てのデータはクラウドで保存されるため、インターネットに接続しているデバイスならどこからでも管理することができます。計算データは、作成したフォルダの中に保存することができます。計算が正常に終了か、エラーか、途中でユーザーが中断したか等の情報が一目で分かるようになっています。

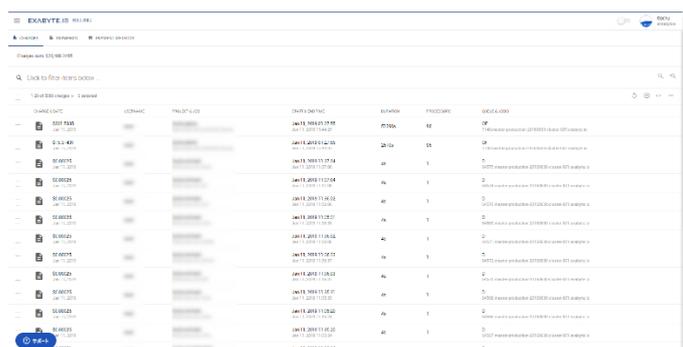


各プロジェクト管理



各ジョブ管理

各ジョブの計算時間および料金も確認することができます。計画的な利用に役立たせることができます。

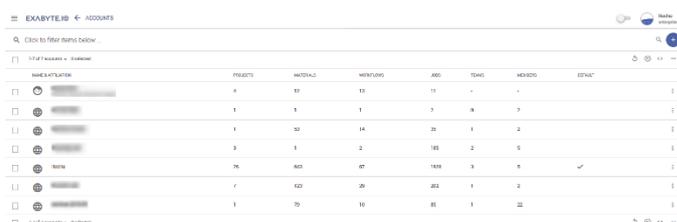


各ジョブの計算時間と料金履歴

## 組織アカウント&シェア機能

Exabyte.io では、個人アカウントの他に組織アカウントを作成し、特定のユーザーを所属させることで、グループ内で計算データ、Workflow、構造モデルを共有することができます。またシェア機能を使うことで、他のユーザーや組織と指定した計算データ、Workflow、構造モデルをシェアして見たり、使用したりすることができます。

※組織アカウントのご利用には Enterprise 以上のプランが必要となります。



個人アカウントと組織アカウント切り替え

組織アカウント機能を使うことで、離れた場所のグループと共同研究を行なうことが簡単にできるようになります。また組織アカウント毎に持つバランス(計算利用料)を使い分けるなども出来ます。

## クラウドコンピューティング

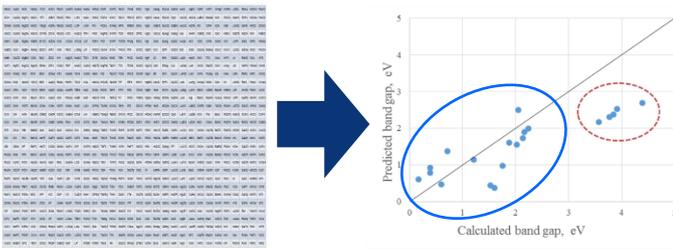
Exabyte.io では、AWS や Azure のクラウド計算機を利用するため、ユーザー各自で計算マシンを用意する必要はありません。また必要な時に必要なだけ使用できるため、迅速に計算を進めることができます。Exabyte.io の搭載されているクラウド計算機には、CPU および GPU が用意されているため、CPU が有効な第一原理計算、GPU が有効な分子動力学計算などに合わせて選択することが可能です。



計算実行する CPU ノード設定

## 機械学習機能

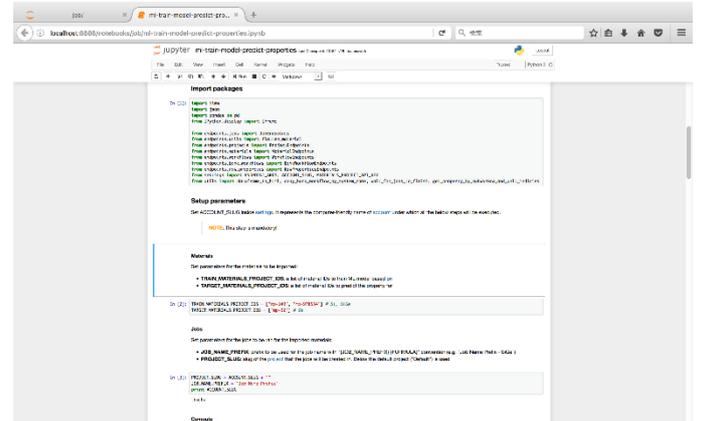
Exabyte.io では、ソフト内で計算したデータを蓄積し、そのデータを基に学習させた後、構造データを基にして物性を機械学習機能によって予測することができます。例えば、精度の高いバンドギャップの計算には高性能パソコンで数時間から数十時間かかりますが、機械学習では、1 コア 数秒で物性を予測することができます。また機械学習のデータには、データが多いほど予測値の精度が上がります。



バンドギャップ計算を行った材料を基にして、結晶構造からバンドギャップを予測した結果です。データ範囲内の結晶グループと範囲外の結晶グループに分かれています。

## REST-API

Exabyte.io には、REST-full API が用意されております。そのためユーザーはこの REST-full API を使って Exabyte.io を使用することもできます。例えば、Python と Jupyter notebook を使って計算やデータベースから結晶構造を取得、機械学習などを行うことができます。



REST-API と Jupyter Notebook 連携



# Case study

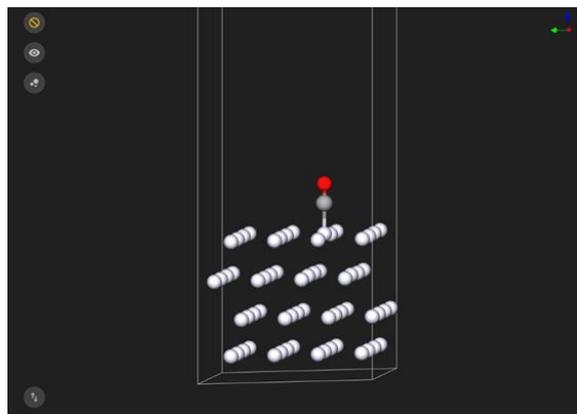
## 計算事例 第一原理計算

### 白金 Pt 表面への一酸化炭素 CO 吸着

Pt のスラブ表面に CO 分子が吸着する際の吸着エネルギーを第一原理計算から求めます。計算に使用する Pt111 スラブと CO を合わせたモデルは、Exabyte.io の Multi-Material 3D Editor 機能を使用することで作成できます。第一原理計算から、吸着エネルギーを求めたところ、1.69 eV になりました。報告されている実験値 1.43~1.71 eV[1]-[3]の範囲内に入った値となっております。よって、第一原理計算を用いて吸着エネルギーを算出することも可能になっています。

参考文献

- [1] G. Ertl et al., Surf. Sci. 64, 393 (1977)
- [2] H. Steining et al., Surf. Sci. 123, 264 (1982)
- [3] Y.Y. Yeo et al., J. Chem. Phys. 106, 392 (1996)



Pt111 表面に CO が吸着した構造

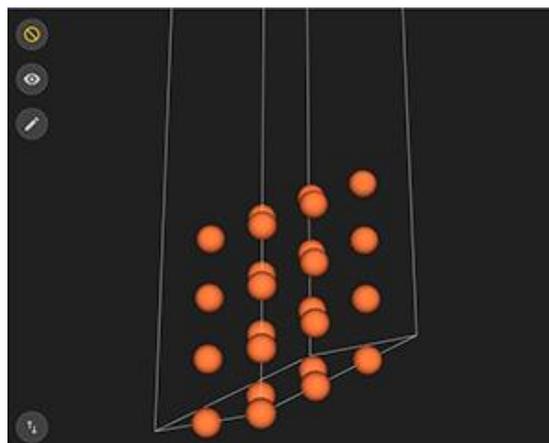
### 金属表面エネルギー

金属鉄鋼、電池、触媒などの分野で必要とされる金属表面エネルギーの計算についても第一原理計算で求めることができます。金属表面エネルギーが分かると、その材質の強度、表面の反応、接着性などの予測が行なえるようになります。

金属種	表面エネルギー [eV/Å]	
	参考文献	Exabyte.io
Au	0.050	0.052
Pt	0.084	0.096
Cu	0.080	0.084

参考文献

- [1] Z. Crljen, P. Lazic, D. Sokcevic, R. Brako, Phys. Rev. B, 68, 195411, (2003)



金属スラブモデル

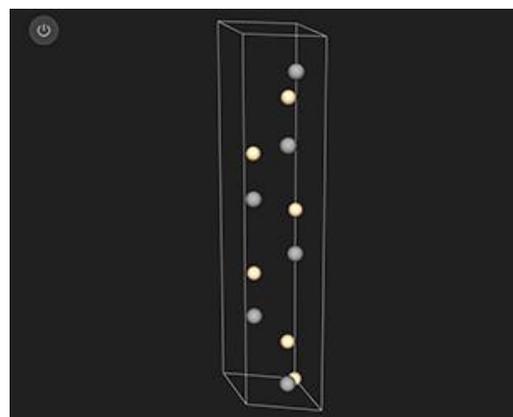
### 弾性定数

Workflow 作成機能を使い、弾性定数を第一原理計算で算出することが可能です。

	6H-SiC の弾性定数 [GPa]				
	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>33</sub>
Exabyte.io	476	100	48	155	519
参考文献 [1]	501	111	52	163	553

参考文献

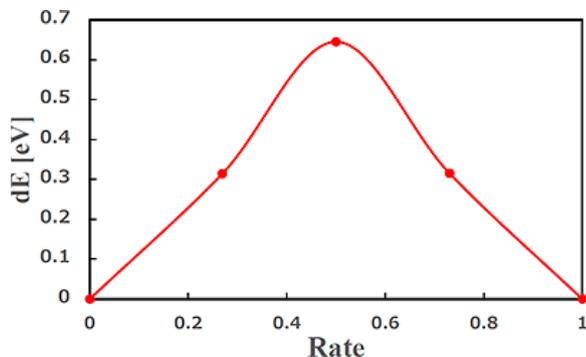
- [1] Kamitani, K., et al., J. Appl. Phys. 82, 6, 3152-3154, (1997)



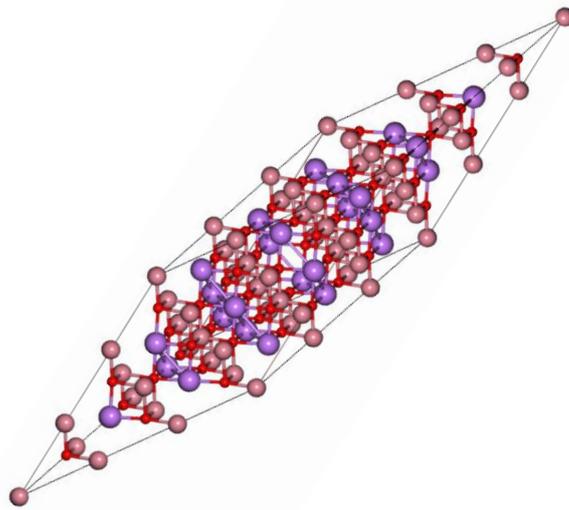
6H-SiC の結晶構造

## NEB 法によるリチウム Li の拡散

リチウムイオン二次電池の正極材料である  $\text{LiCoO}_2$  を用いて NEB 法により Li イオン拡散現象の解析を行うことができます。拡散過程における Li イオンの活性化エネルギーや構造変化を解析できます。



Li 拡散における活性化エネルギー



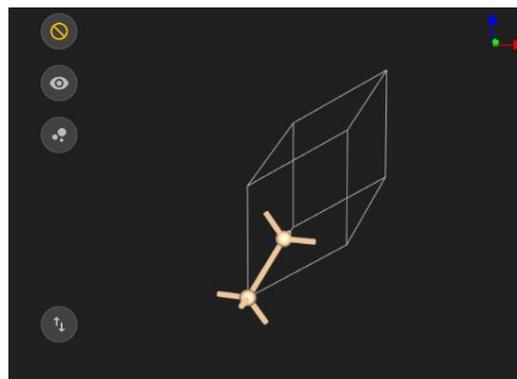
$\text{LiCoO}_2$  の結晶構造

## バンドギャップ計算

バンドギャップの計算に、PBE で計算を行うと特性を表現することができないことで知られています。また GW 法を用いて計算した場合、バンドギャップを評価できることも知られていますが、計算時間がかかります。そこで、実際に Si 結晶に対して PBE で計算した結果および GW 法で計算した結果を示します。

Si 結晶に対する PBE と GW の比較

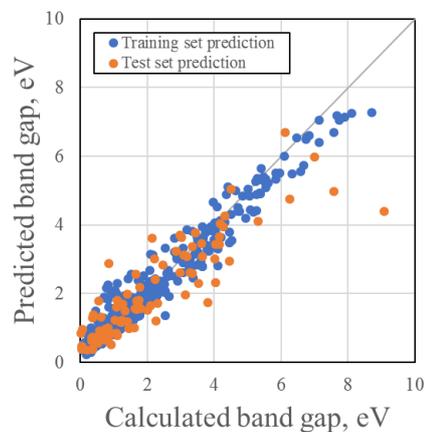
項目	PBE	GW
バンドギャップ	0.62 eV	1.03 eV
計算時間	1m 58s	1h 21m 26s



計算に用いた Si 結晶 (プリミティブセル)

## 機械学習

効率的に物性値を予測する手法として機械学習が注目されています。多量の材料について一挙に計算し、Exabyte.io の機械学習機能を活用したり、データを読み込んで自作のプログラムに活用したりできます。350 種類の材料について計算した結果をトレーニングデータとして学習させた後、90 種類の材料のバンドギャップの予測値と計算値を比較した結果を示します。



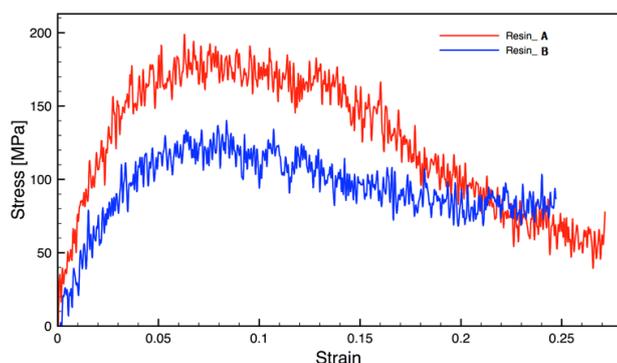
機械学習によるバンドギャップの予測

# Case study

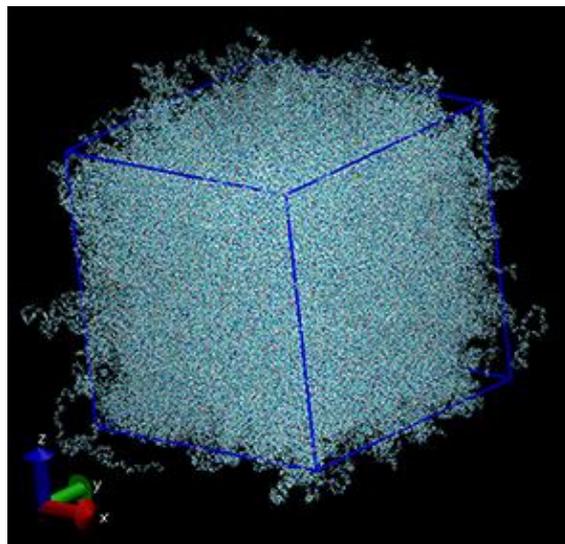
## 計算事例 分子動力学計算

### 高分子の引張りシミュレーション

高分子の材料物性の1つに機械的特性が上げられます。分子動力学計算を用いることで、引張りシミュレーションを行うことができます。さらにGPUを用いることでより高速にシミュレーションができ、多くの分子数のモデル、より引張り速度を遅くすることができます。



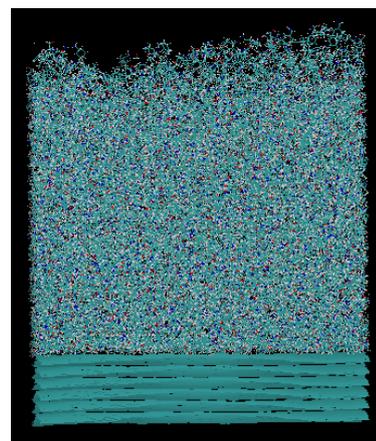
高分子のSSカーブ



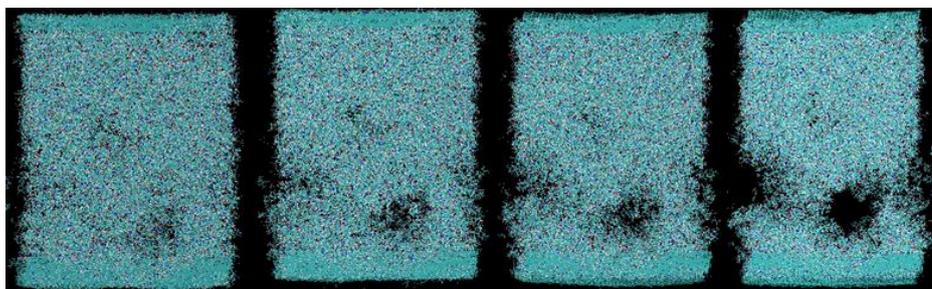
高分子を配置したモデル

### 炭素繊維複合材料に対する解析

炭素繊維複合材の材料開発および現象解析を行う上で、炭素繊維と樹脂の界面解析や、複合材自身の物性解析などについても、分子動力学計算から算出および解析することができます。界面に介在物を導入したり、炭素繊維に見立てたグラフェンシートに官能基をつけたりした複雑なモデルに対しても、分子動力学計算でシミュレーションすることができます。また高分子の引張りシミュレーションと同様に、複合材モデルでも計算可能です。



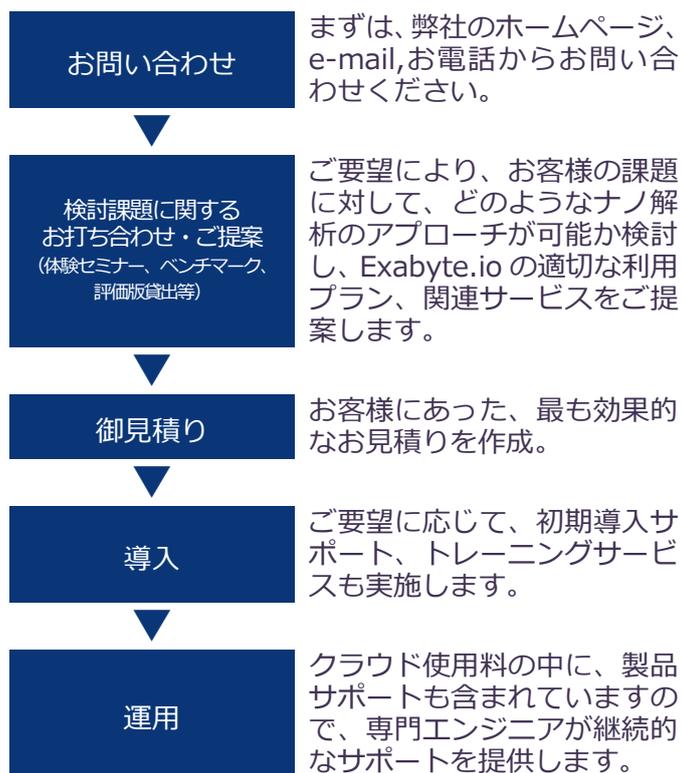
五層のグラフェンシート上に高分子を配置したモデル



複合材モデルで引張りシミュレーションした様子

## 導入の流れと利用プラン

### 導入の流れ



### 利用プラン

Exabyte.io には、お客様の使用料にあった利用プランをお選びいただけます。Exabyte.io の料金はあくまでも計算に利用したクラウド計算料金のみで、GUI の使用や技術サポートもついていきます。これからナノシミュレーションを導入して材料設計される方には、導入しやすいプランになっております。また既にナノシミュレーションを行われている方は、効率化や経費削減が期待できます。

## Services

### 関連サービス

Exabyte.io を導入されたお客様および導入を検討されているお客様向けに、導入効果を最大に引き出すための各種サービスを提供しています。各サービスの詳細のご案内・お問い合わせは、弊社にて承ります。

### 定期セミナー

Exabyte.io を使用した材料設計をご検討中の方を対象としたもので、ナノシミュレーションの概要をご説明した後、それぞれの機能について解析事例を用いてご紹介いたします。また、Exabyte.io の基本的な操作方法から様々な解析条件、評価方法の流れをご紹介しながら、操作を一緒に行っていただきます。

### 解析コンサルティング

ナノ解析の専門エンジニアやソフトウェア開発者によるコンサルティングサービス(受託解析・カスタマイズ)を行っています。

### Exabyte.io Conference

ナノシミュレーションや材料設計の最新技術を広く配信することを目的に、年1回開催しています。開発元およびユーザーの事例発表、大学研究者による最新研究の報告を行っています。

参加お申し込み・開催日時・開催場所につきましては、弊社までお問い合わせください。

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社



科学システム本部 Exabyte.io 担当  
TEL 03-6420-2530  
E-mail [exabyte@ctc-g.co.jp](mailto:exabyte@ctc-g.co.jp)

製品 URL <http://www.engineering-eye.com/EXABYTE/>

