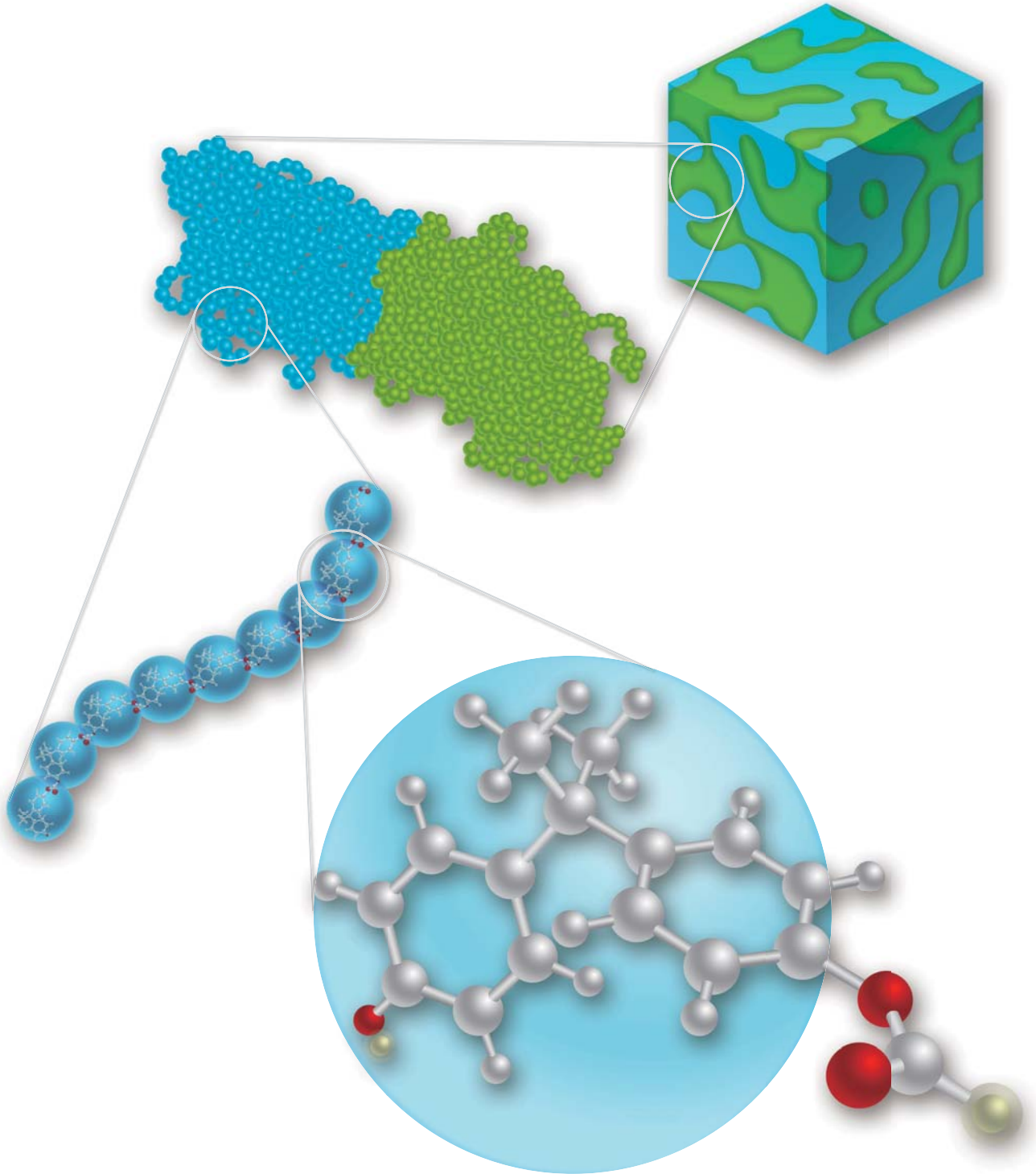
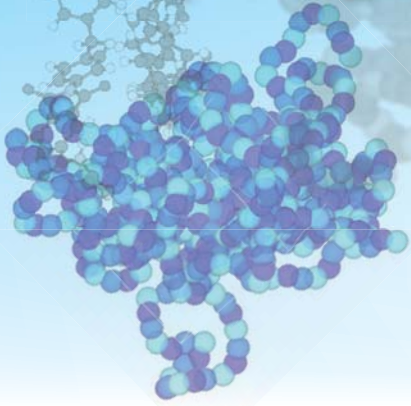


J-OCTA

Integrated simulation system for soft materials



ミクロな分子特性から マクロな材料特性までをカバー

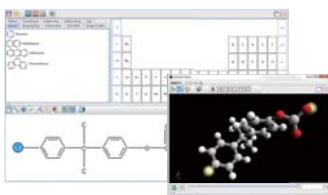


J-OCTAは材料研究開発の最前線でお役に立ちます

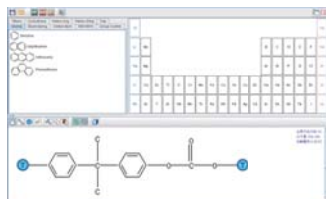
J-OCTA (ジェイ・オクタ) は、ゴム・プラスチック・薄膜・塗料や電解質材料などの開発に必要な材料特性を、原子からマイクロメートルまでのスケールで予測する「材料物性解析ソフトウェア」です。実験では把握しきれなかった複雑な現象や物性を理解するための「知識発見ツール」としてご活用ください。それぞれのスケール用に開発されたシミュレータを共通のプラットフォーム上で連携することで、材料設計や素材開発を最先端の技術でご支援いたします。

分子動力学シミュレーション (COGNAC、VSOP)

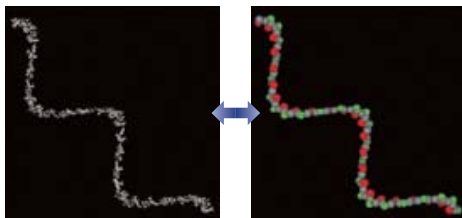
- 材料の静的・動的特性を原子・分子のレベルから評価・予測します。
- 全原子モデル (全ての原子を扱う詳細なモデル) から粗視化モデル (原子の集合体を一つのユニットとして扱うモデル) まで対応しています。
- 粗視化モデルを用いることで、より大規模かつ長時間の現象が計算可能となります。粗視化ポテンシャル推算機能にも対応しています。
- 画面上に化学式を描くことにより、全原子モデルのカ場パラメータを設定し、簡単に3次元分子構造を作成することが出来ます。
- ブロック共重合体やランダム共重合体の構築、ポリマーのタクティシティ制御なども簡単に行えます。
- 外部シミュレータ: LAMMPS 及び GROMACS とのコンバータ機能を搭載しています。



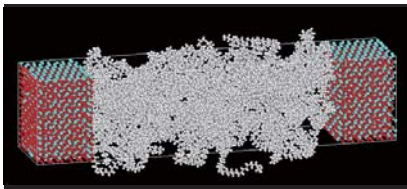
モノマーモデリング



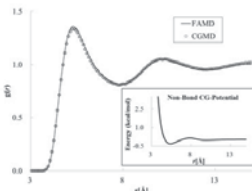
ポリマーモデリング



全原子モデルと粗視化モデル



無機-有機界面のモデリング

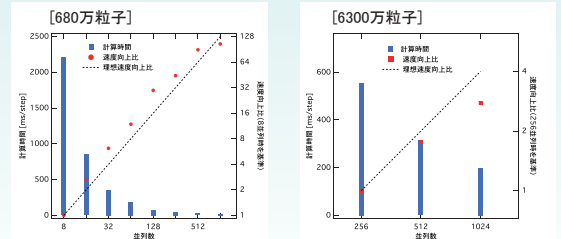


粗視化ユニット間の動径分布関数と粗視化ポテンシャル (非結合)

並列化分子動力学エンジン「VSOP」

並列分子動力学エンジン「VSOP」を用いることで、大規模・高速計算が可能となります。

※COGNACの一部機能に対応しています。



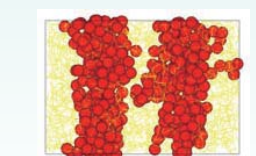
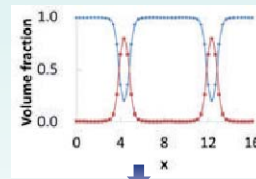
VSOPの並列化効率 (ビーズスプリングモデル)

※速度測定には計算科学振興財団 (FOCUS) のスーパーコンピュータを利用しています
※VSOPは、JSOLと独立行政法人日本原子力研究開発機構 (JAEA) が共同開発しました

ズーム / リバースマッピング機能

・ズーム機能

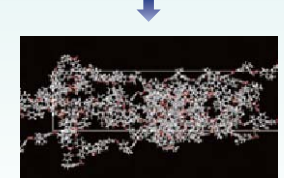
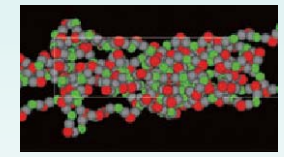
平均場法 (SUSHI) によって得られた成分分布を用いて全原子/粗視化分子を生成します。



SUSHI (平均場法) の体積分率分布を用いた粗視化分子の生成

・リバースマッピング機能

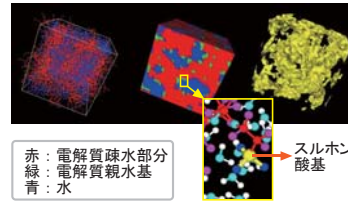
粗視化分子動力学によって得られた分子構造を用いて全原子モデルを生成します。



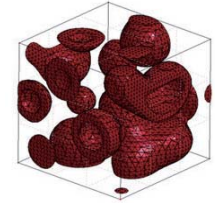
粗視化モデルでの一軸伸長と全原子モデルへのリバースマッピング

界面、相分離シミュレーション (SUSHI、COGNAC-DPD)

- 平均場法 (SUSHI)、散逸粒子動力学法 (COGNAC-DPD) を用いて、様々な構造の分子やブロック共重合体などを含む材料について、相分離構造や界面形状などを予測します。
- 相互作用パラメータ (χ パラメータ) の推算機能を有しています。
- 相分離構造データを FEM 用データとして Voxel メッシュ、STL 形式、テトラメッシュ (部分領域) などで出力可能です。



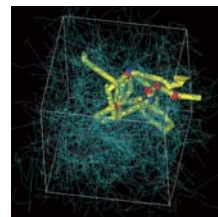
燃料電池の高分子電解質膜



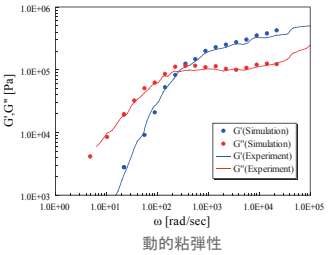
相分離構造を有限要素法メッシュに変換

レオロジーシミュレーション (PASTA、NAPLES)

- スリップリンクモデル (PASTA)、プリミティブチェーンネットワークモデル (NAPLES) を用いて、熔融高分子、高分子溶液のレオロジー特性を、分子量分布や分岐構造などの影響を考慮しながら予測します。
- 緩和弾性率、貯蔵・損失弾性率、伸長粘度などの予測が可能です。



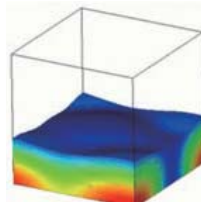
NAPLES



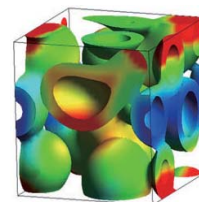
動的粘弾性

多相構造シミュレーション (MUFFIN)

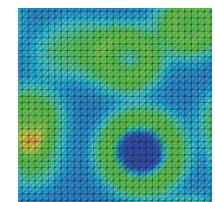
- 平均場法などを用いて得られた相分離構造を用いて弾性体の有限要素法 (FEM) シミュレーションが可能です。
- メッシュ生成機能を有しています。
- 複合材料におけるマイクロ構造と材料物性の関係を評価出来ます。
- 複数成分からなるマイクロな流体現象を評価いただけます。



溶媒蒸発と相分離



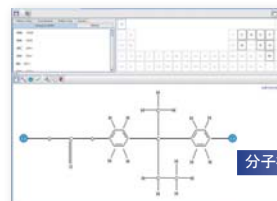
多相弾性体の有限要素法解析



均一なメッシュへの相分離構造のインポート

定量的構造物性相関 (QSPR)

- 分子構造を入力するだけで、高分子のさまざまな物性を推算します。
- 密度、熱膨張係数、ガラス転移温度、ポアソン比、誘電率をはじめ、多数の物性を短時間に計算して一覧表示します。有機高分子の分子設計を行う際に有用なツールとなります。

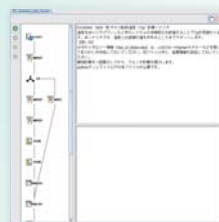


モノマーモデラー

物性推算一覧

事例データベース

- 解析データをデータベース化し、保存・検索するための機能です。この機能を利用することによって、解析ノウハウの共有を進めることができます。
- サンプルとして、いくつかの解析事例がデータベース内にあらかじめ提供されています。解析事例には、解析に必要な入力ファイル、結果ファイルなどのデータだけでなく、解析の手順をトレースするシナリオ機能も含まれています。



シナリオ・ナビゲータ

サンプル事例の一例 (高分子材料の特性)

- 高分子中の低分子の拡散
- 光学特性 (複屈折)
- ガラス転移温度
- 力学特性 (一軸伸張、架橋構造)
- 粘度
- 界面張力
- 相分離構造の平均弾性率

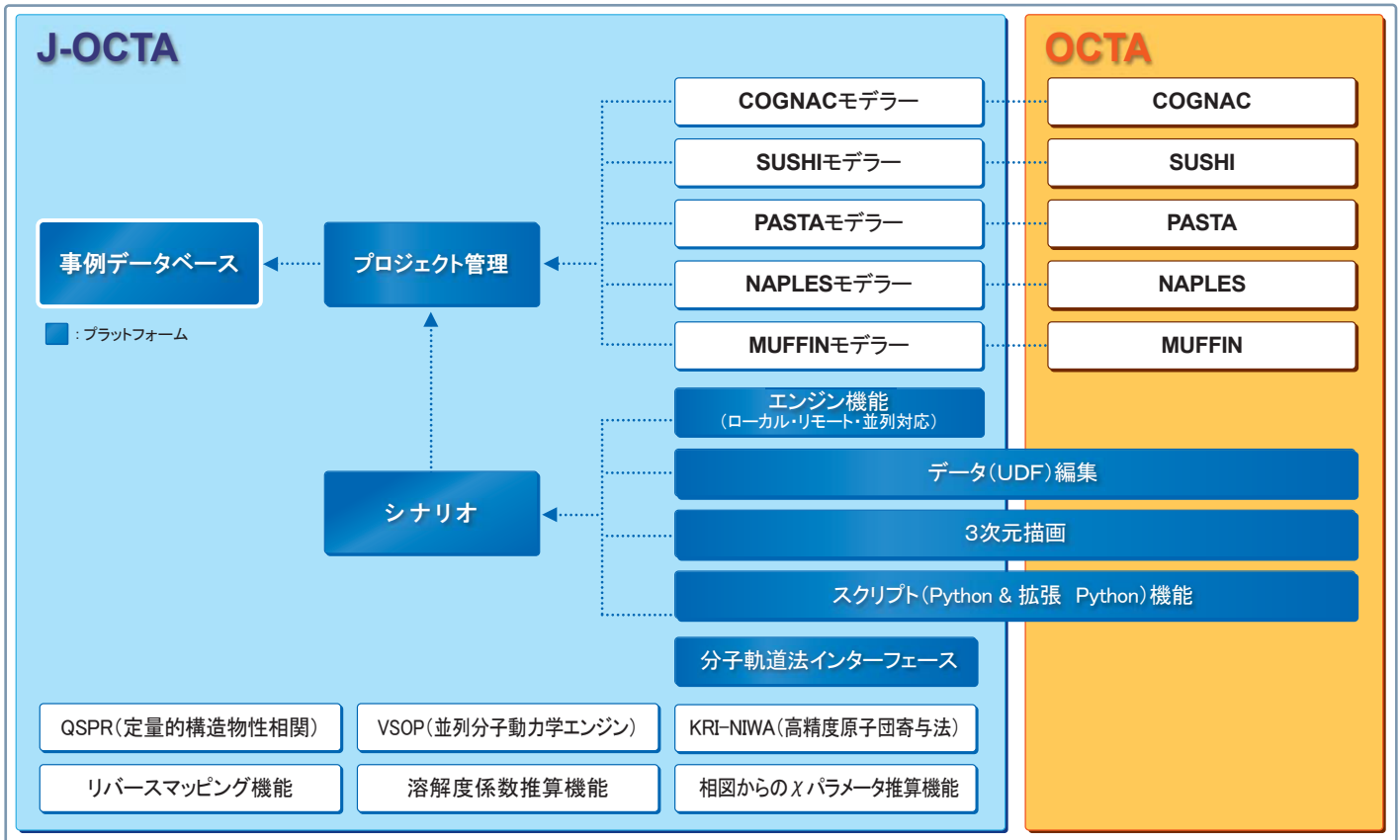
J-OCTAの構成

- J-OCTAプラットフォーム
 - 分子軌道法インターフェース
 - 解析事例データベース
- COGNACモデラー(粗視化分子動力学モデラー)
 - DPDモデラー(散逸粒子動力学)を含む
- PASTA/NAPLESモデラー(レオロジーモデラー)
- SUSHIモデラー(動的平均場モデラー)
- MUFFINモデラー(多相構造モデラー)
- VSOP(並列分子動力学エンジン)
- QSPR(定量的構造物性相関)
- リバースマッピング機能
- 溶解度係数推算機能
- 相図からの χ パラメータ推算機能
- KRI-NIWA(高精度原子団寄与法)

OCTAの概要

OCTAは、日本の産学連携プロジェクトで開発された、ソフトウェア用の統合的なシミュレーションシステムです。ソフトウェアのミクロな分子特性とマクロな材料特性をマルチスケール/マルチフィジックス技術で結びつけるシミュレーションエンジンと共通プラットフォームから構成されています。OCTAは、オープンソースソフトウェアとして公開されており、無償で利用可能です。詳しくは、OCTAのWebサイトをご参照ください。

 <http://www.octa.jp>



動作環境の推奨構成

	J-OCTAプラットフォーム	解析エンジン
OS	Windows 7 (64bit) Windows 8.1 (64bit) Windows 10 (64bit)	Windows / Linux ※Linux推奨バージョン Red Hat Enterprise Linux release 5.9 (x86_64) Red Hat Enterprise Linux release 6.4 (x86_64) CentOS 5.9(x86_64) / CentOS 6.4(x86_64)
CPU	マルチコアCPU推奨	マルチコアCPU推奨
メモリ	4GB以上推奨(最低2GB)	2GB以上推奨
ハードディスク	80GB以上の空き容量を推奨(最低2GB)	80GB以上の空き容量を推奨
グラフィック	OpenGLに対応したグラフィックカード (nVidia製、AMD製を推奨)	
画面解像度	1024 X 768以上推奨	
画面色数	65536色以上推奨	

サポート

- サポート契約をお申し込みのお客さまには専属のスタッフによる電子メール等のサポートサービスをご提供いたします。
- 導入初期における解析業務の立ち上げにご協力いたします。
- 基礎理論から操作方法に至るまで、幅広いセミナーを開催しています。

受託解析サービス

- 解析業務のアウトソーシングを承ります。
- 実験と解析との比較・検証、および材料・素材設計に対するアドバイス等のエンジニアリングサービスをご提供します。

詳細情報はこちらのWebサイトから入手できます ▶▶▶ <http://cae.jsol.co.jp/jocta/>

JSOL

NTT DATA Global IT Innovator
NTT DATA Group

株式会社JSOL エンジニアリングビジネス事業部

- 東京
〒104-0053 東京都中央区晴海 2-5-24 晴海センタービル7F TEL : 03-5859-6020 FAX : 03-5859-6035
 - 名古屋
〒460-0002 名古屋市中区丸の内 2-18-25 丸の内KSビル17F TEL : 052-202-8181 FAX : 052-202-8172
 - 大阪
〒550-0001 大阪市西区土佐堀 2-2-4 土佐堀ダイビル11F TEL : 06-4803-5820 FAX : 06-6225-3517
- E-mail cae-info@sci.jsol.co.jp URL <http://cae.jsol.co.jp/>