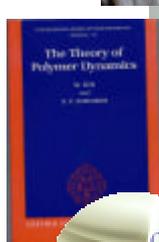
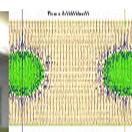
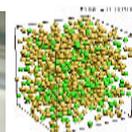


OCTAプロジェクト: 物質の多階層シミュレーション

名古屋大学大学院工学研究科
増淵雄一



名古屋大学土井正男グループ
www.stat.cse.nagoya-u.ac.jp



計算科学, ソフトマター科学,
多階層物理化学



内容

- ? 概要
- ? OCTAの構成
- ? 研究事例
- ? まとめ

OCTA

OCTAとは

- Open
- Computational Tool for
- Advanced material technology

OCTA



OCTA

Advanced Material Technology in Polymer Industry

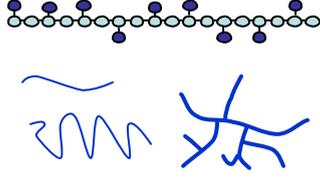


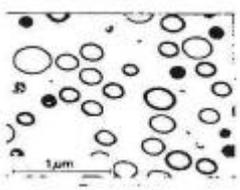
■高分子材料開発 =
材料開発 + プロセス開発
(多機能フィルム、電子デバイス、
バイオマテリアル)

↓

■あらゆる階層の設計と制御

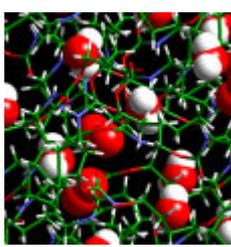
- 局所的化学構造
- 高分子の分子量、分岐
- 界面構造
- 分散構造







高分子材料開発の時空間スケール

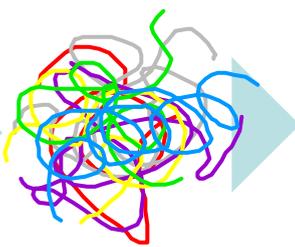


www.msi.com

原子の運動

$<10^{-7}m$

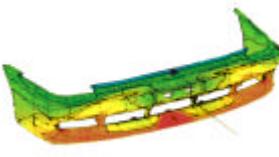
$<10^{-7}sec$



分子全体の運動

$10^{-7} \sim 10^{-4} m$

$10^{-3} \sim 10^3 sec$



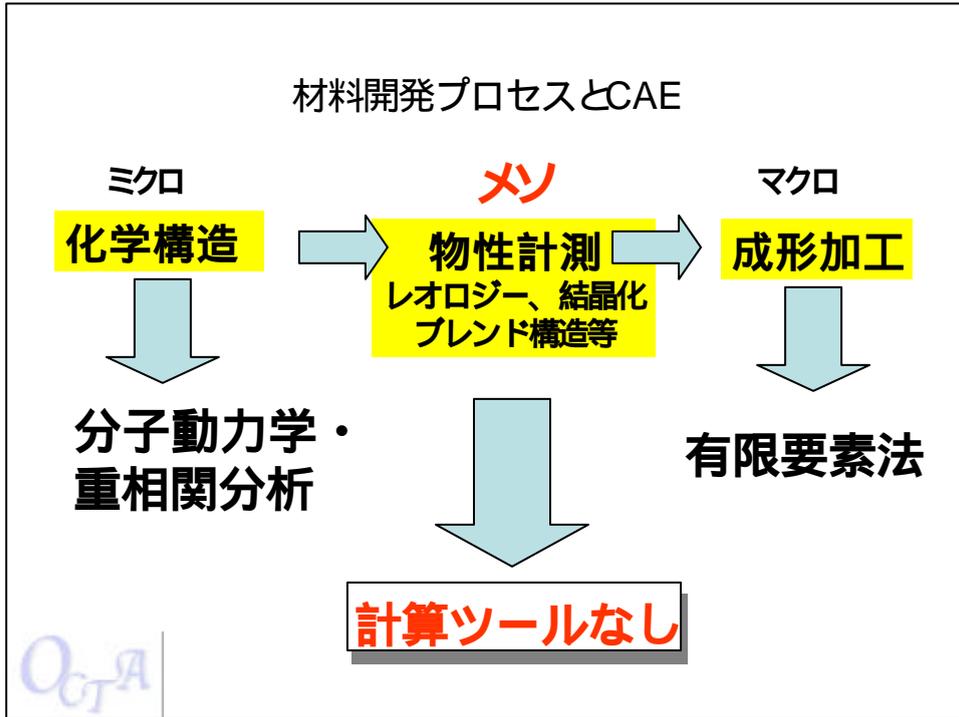
www.plamedia.co.jp

材料挙動

$10^{-3}m <$

$0.1sec <$





- キーワード:メソ領域
- マクロとミクロの間
 - もともと中間、中庸の意味
(例 :メソピアン、メソプラノ)
 - メゾともいう
 - 材料の場合
サブミクロンからサブミリの領域
- OCTA

メソ領域の問題

- 結晶 (ラメラ 球晶、タイ分子)
- 相分離 (ブレンド、発泡)
- ブロック共重合体 (構造、物性)
- からみあい (レオロジー、長鎖分岐)
- 界面 (剝離、接着、スリップ、スキンコア)
- 充填材 (フィラー、粒子、ナノコン)
- 液晶、分子配向
- 超臨界

**材料設計・プロセス設計上
重要な問題の大半が含まれる**

キーワード:多階層性 (マルチスケール)

- 時間的・空間的に複数の階層に分けて物理化学を考える
- 単一のモデル (方程式) では解けない現象を複数の階層に分けて解く
- 階層相互の接続が重要

メゾ領域を解いてCAEを実現するには？

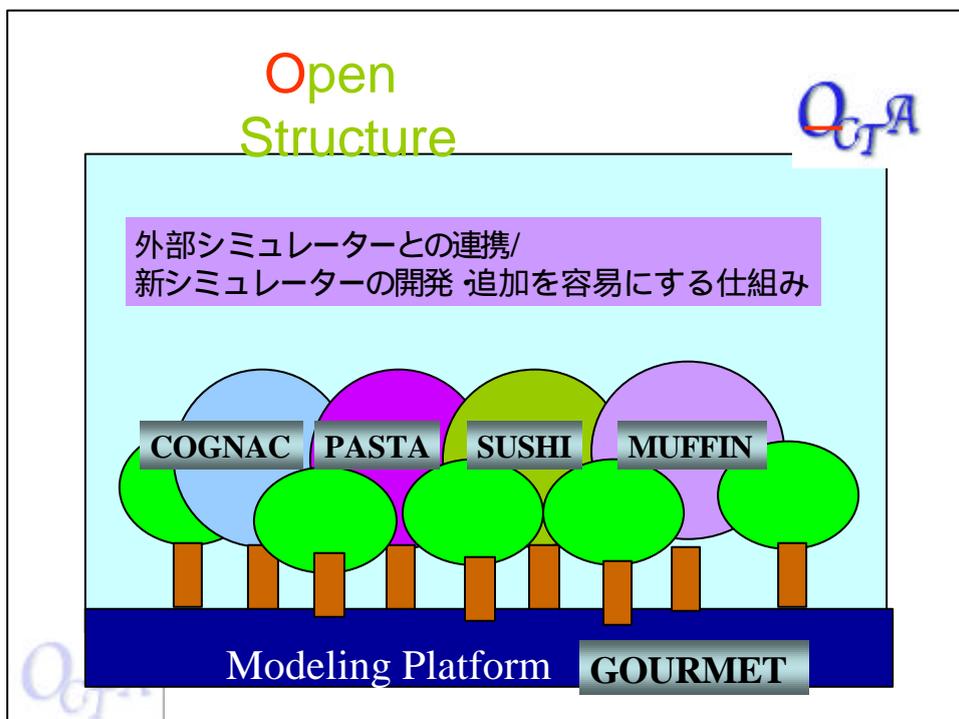
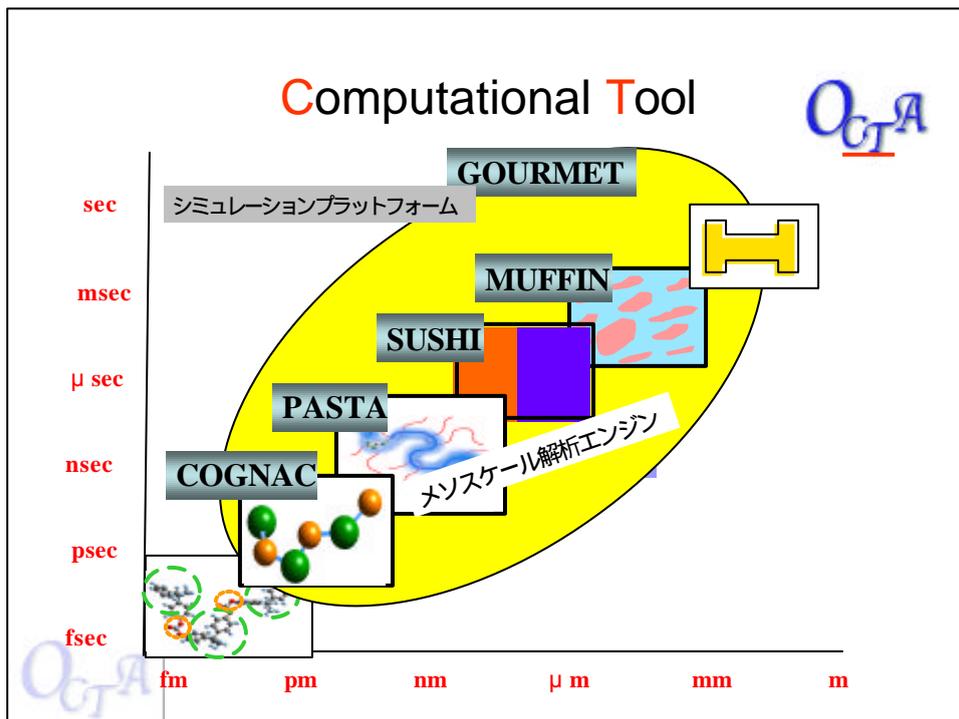
- メゾ領域を扱えるシミュレーター (群) の作成
- シミュレーター間の連携の仕組み
 - シームレスズームングの思想

ОГТЯ

キーワード:シームレスズームング

- シームレス (継ぎ目がない)
- 異種のデータ構造、計算原理に基づくシミュレーター間を連携する
- 数桁から数十桁もの時空間スケールをまたぐ問題を解くには必須となる技術 (または考え方)

ОГТЯ



Open source

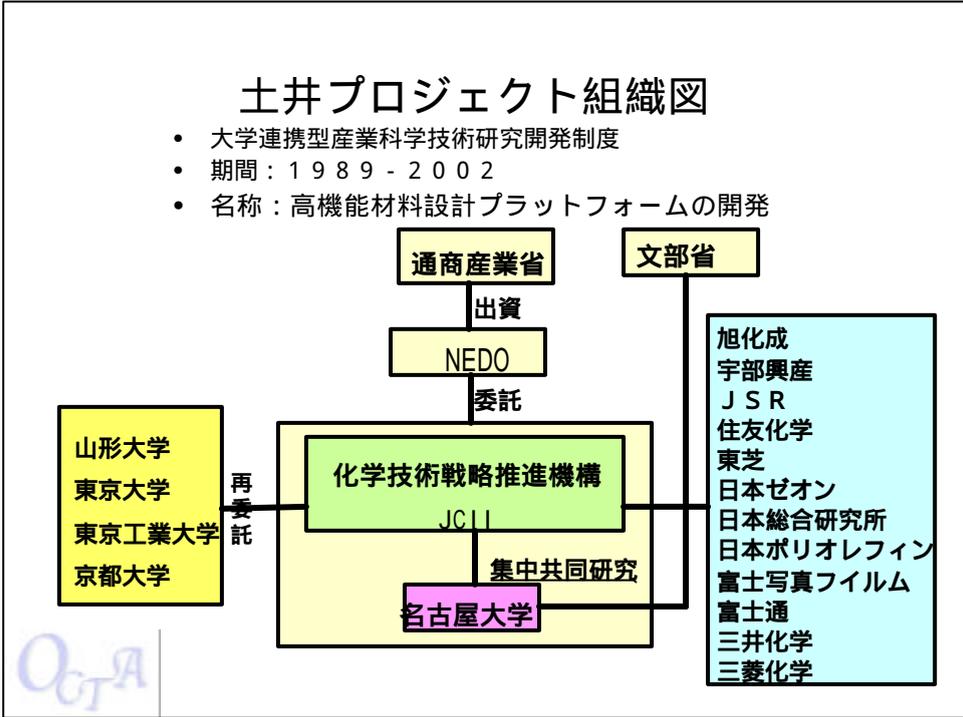
- ソースコードの公開
ホームページ<http://octa.jp>
よりダウンロード可能、CVSサーバーも公開
- ディスカッションの公開
ホームページ上に公開BBSを設置
(ユーザーサポートはしない)



OCTAの歴史

- 1985- コンピュータケミストリプロジェクト提案作業
- 1989 新化学発展協会コンピュータケミストリ分科会設立
- 1991-1992 材料開発革新のための調査研究 第1期
- 1992-1994 材料開発革新のための調査研究 第2期
- 1994 先導研究 "分子集合体プロジェクト"提案
- 1996 先導研究"計算機材料設計 "スタート
- 1997 産業科学技術研究開発制度への提案
- 1998-2002 NEDO土井プロジェクト
- **2002 OCTAリリース**
- 2002- JST バイオレオプロジェクト





海外展開

海外インストール先 (21大学・国立研究機関)

USA: Caltech, UCSB, U. Michigan, U. Colorado, NIST, John Hopkins, Sandia National Lab, New York State U., IIT, ITP, Carnegie Mellon

Europe: U. Edinburgh, U. London, U. Leeds, U. Sheffield, MPI Mainz, U. Wageningen, U. Leiden, U. Amsterdam, U. Naples, U. Patras

Aug. 2003 ミラノ工科大学にftpミラーサイト構築

OCTA開発者

土井正男 (名古屋大), 川勝年洋 (現東北大),
滝本淳一 (名古屋大), 谷口貴志 (現山形大),
青柳岳司, 庄司達也, 澤史雄, 福永宏雄, 田
崎弘恭, 本田隆, 森田裕史, 長谷川龍一, 樹
神弘也, 横溝勝行, 浦下真治, Junn-Ren
Roan, 山上達也, 佐々木誠, 小林直樹, 黒
田明義



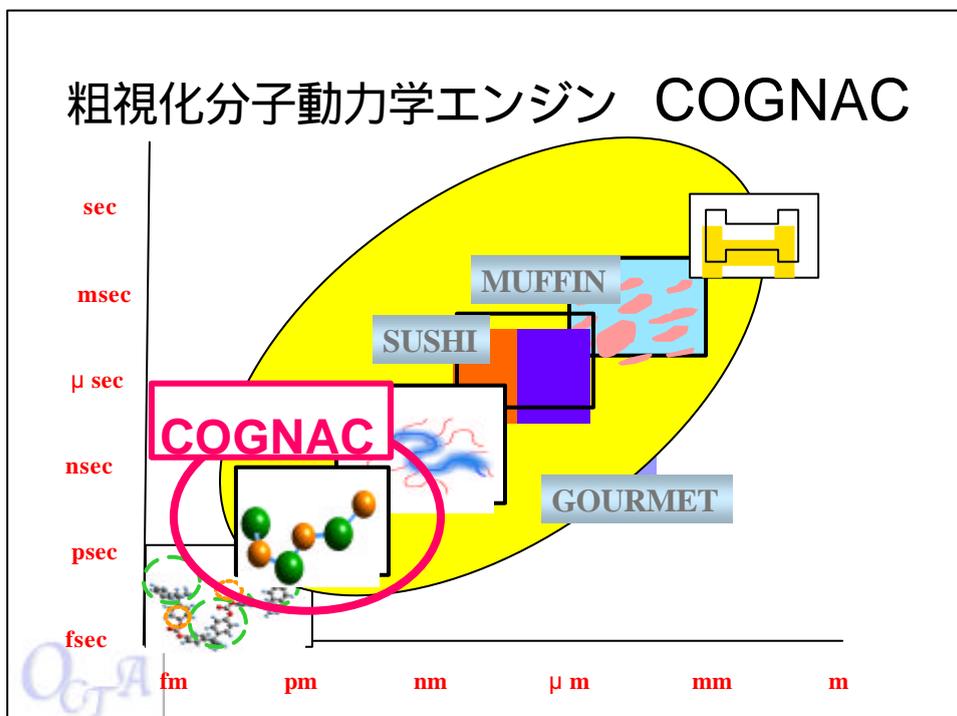
開発言語 & 実行環境

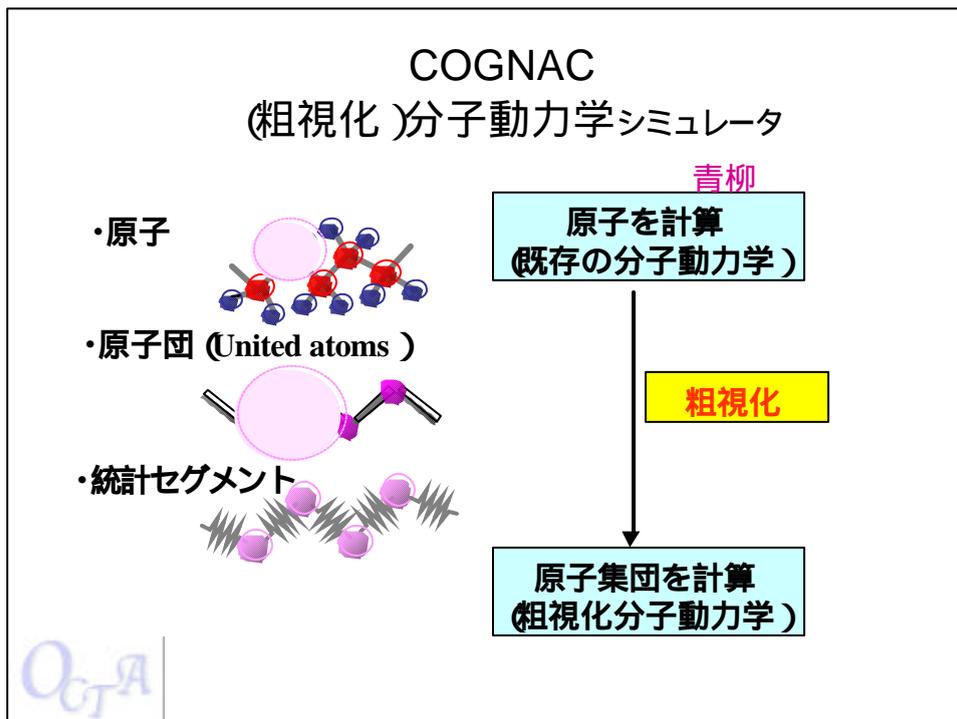
- 開発言語 (ソース配布中)
Java (GUI部分), C++ (シミュレーター)
- 実行環境 (バイナリー配布分)
Windows (2000, XP), Linux (intelCPU)
MacOSX
- 動作確認環境 (シミュレーター部分)
AlphaLinux, DigitalUNIX64, IRIX



内容

- ? 概要
- ? **OCTAの構成**
 - ? COGNAC
 - ? PASTA
 - ? SUSHI
 - ? MUFFIN
 - ? GOURMET
- ? 研究事例
- ? まとめ

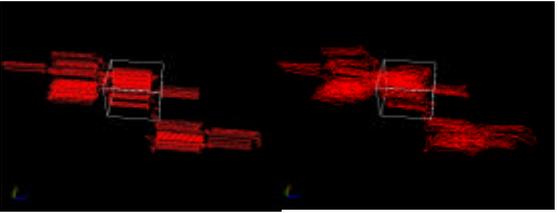





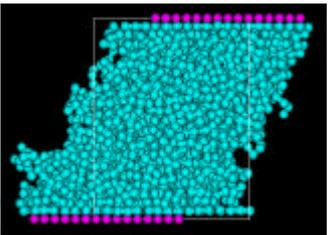
COGNACの適用例

- 伸張、ずり
- 壁の効果
- 任意の外場
- 化学反応

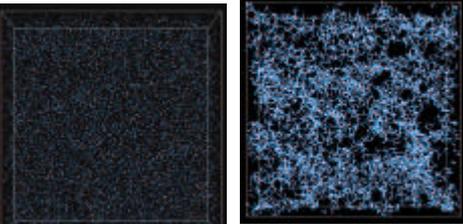
高分子結晶の伸張



ナノ レオロジー

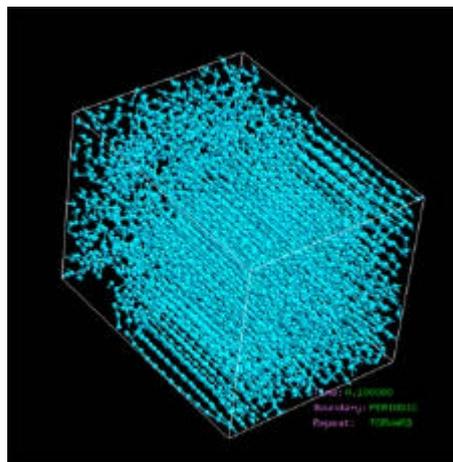


ゲル化
重合反応



OCTA

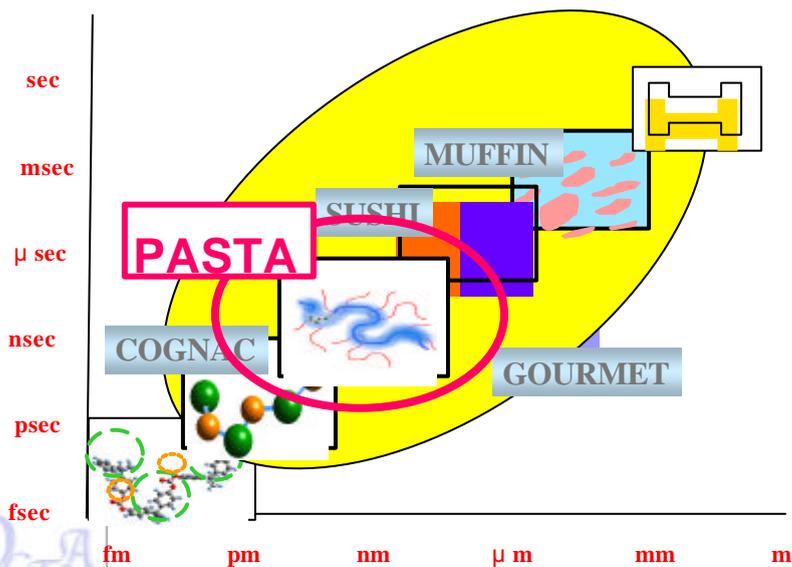
結晶ラメラの延伸



庄司、青柳、土井

OCTA

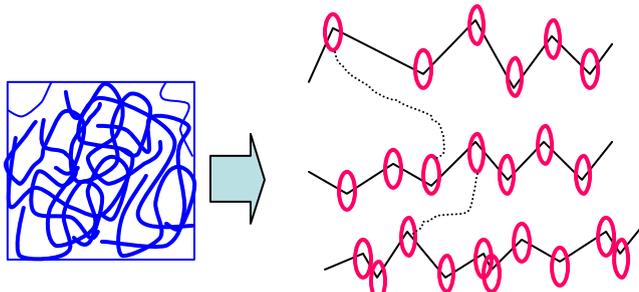
レオロジーエンジン PASTA



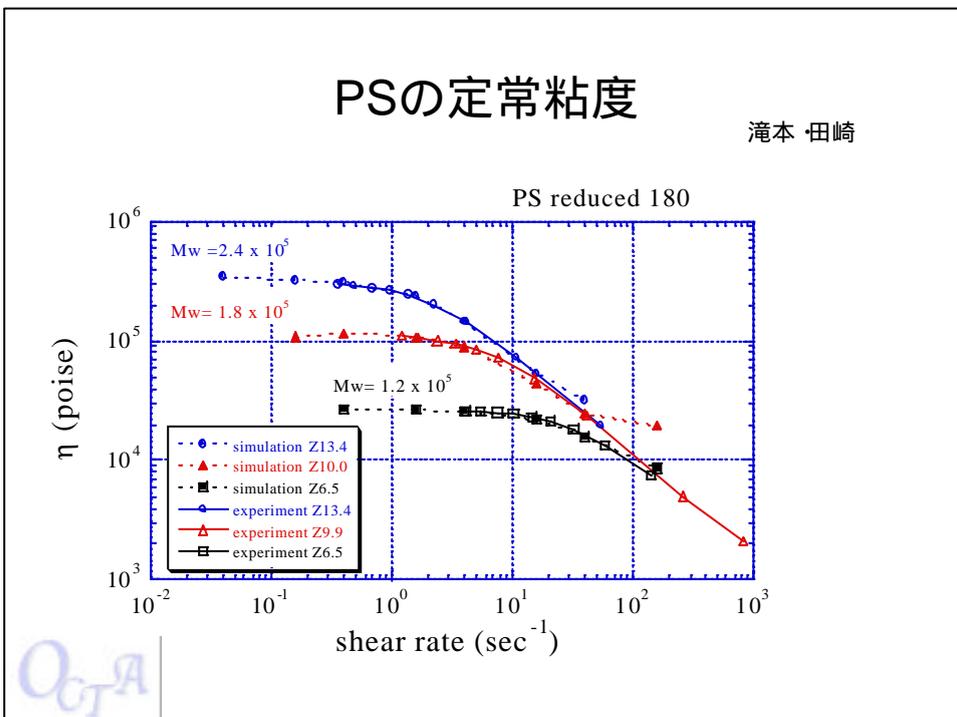
OCTA

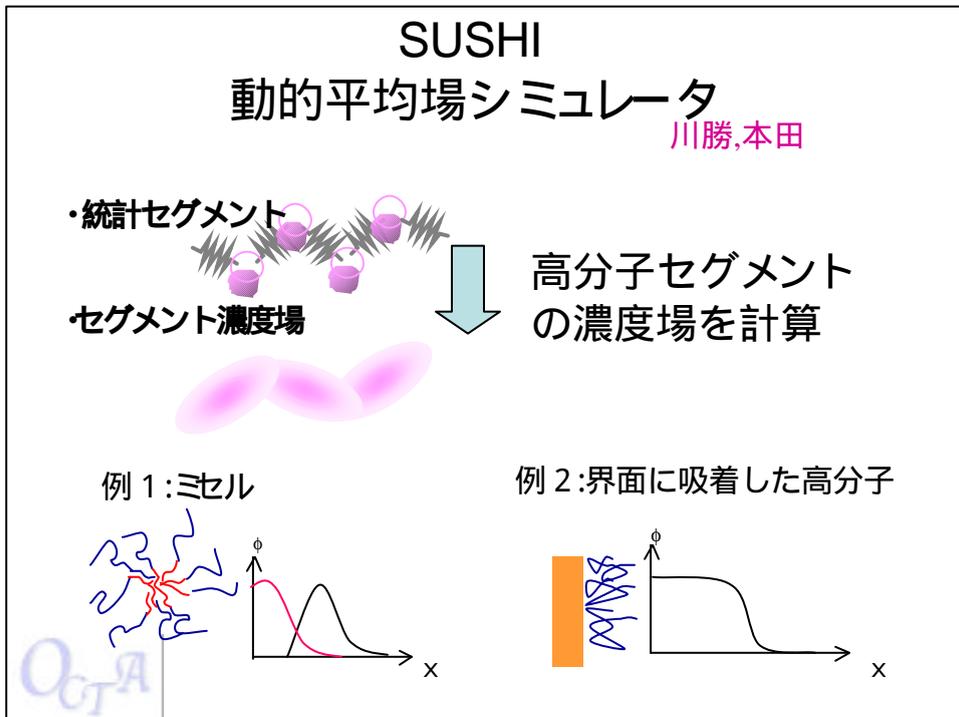
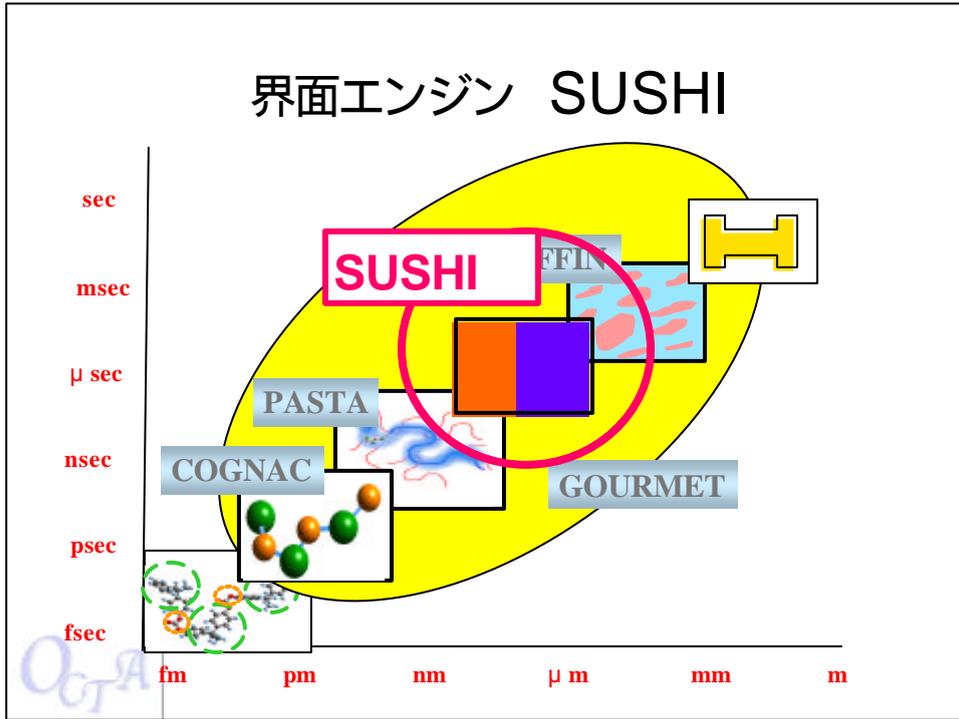
PASTA レオロジーシミュレーター

絡み合い高分子系のレオロジー的性質を計算する

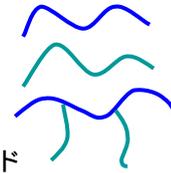


Dual-sliplink model (Takimoto, Doi)



SUSHIの機能



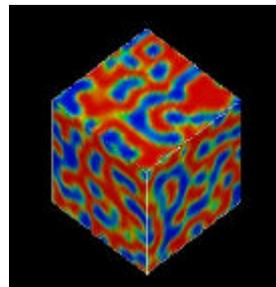
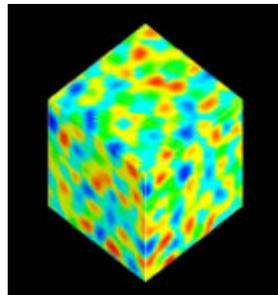
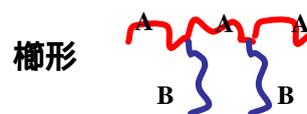
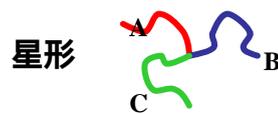
- 対象とする系：
 - 任意の分岐構造のホモ高分子、ブロック高分子のブレンド
 - マクロ相分離、ミクロ相分離、相分離界面
 - 界面 :自由界面、固体基板、高分子のグラフトした基板
- 計算できるもの
 - 自由エネルギー、化学ポテンシャル、吸着量、界面張力
 - 平衡状態の空間構造、鎖の分布、ブリッジ鎖の比率
 - 平衡状態への緩和過程
- 特徴
 - 平衡、非平衡を扱うことができる。
 - 領域指定による局所平衡状態の自由エネルギー (例 :会合体形成の自由エネルギー)



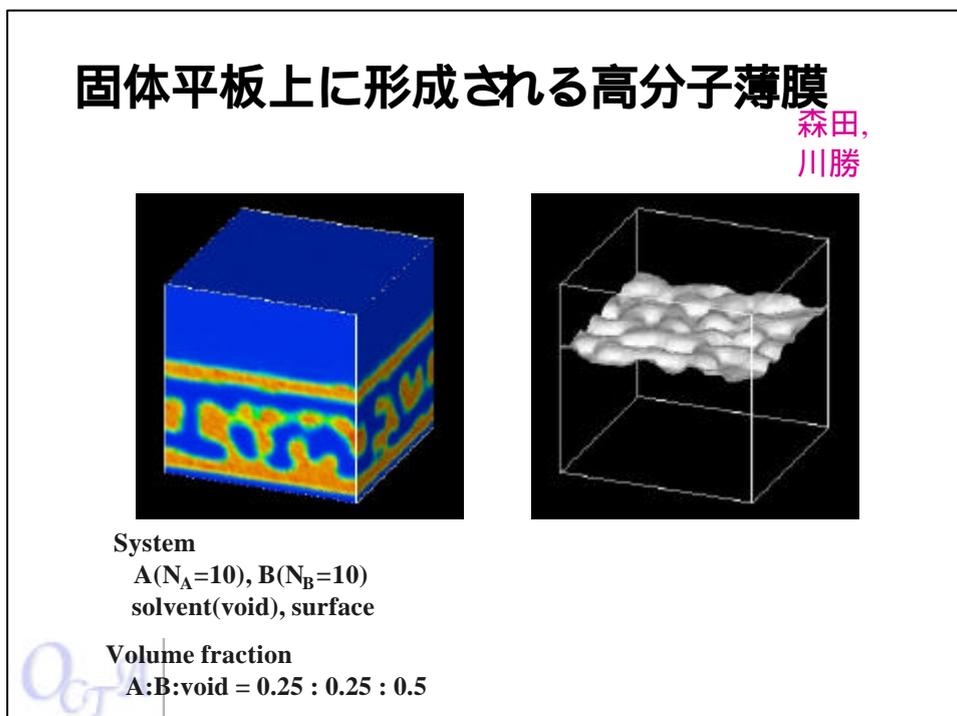
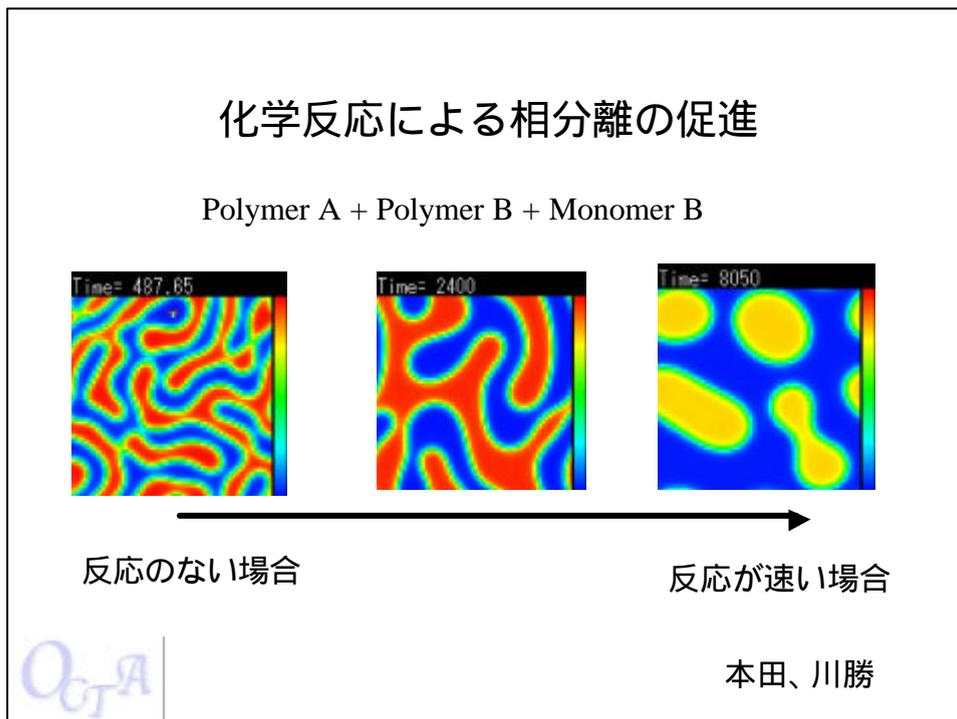
OCTA

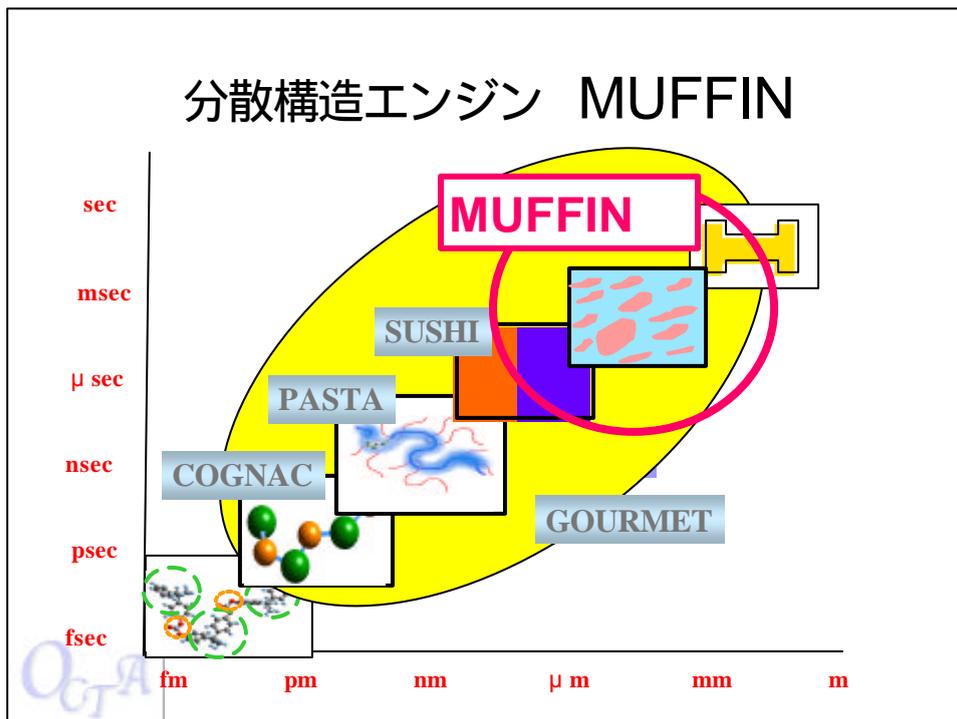
分岐ブロック共重合体の相分離構造

川勝,本田



OCTA





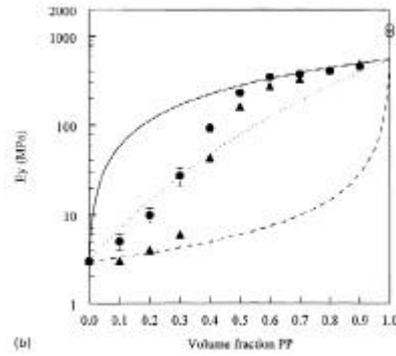
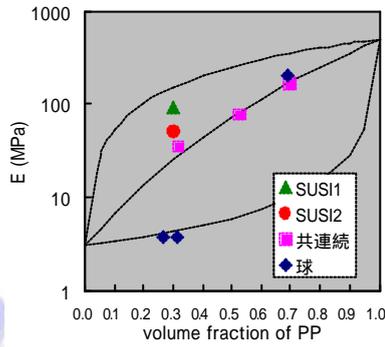
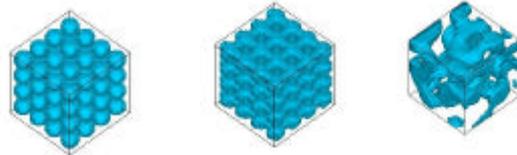
分散構造シミュレーター

- 多相構造をとる高分子混合系の变形、流動、拡散を計算する汎用のシミュレーター

The figure shows three simulation scenarios. On the left, a 3D cube is shown with red and green vertical stripes, with an upward-pointing arrow indicating tension. In the middle, two 3D cubes are shown with colorful internal patterns, with arrows indicating shear deformation. On the right, two cross-sectional views of a layered material are shown: the top one is a flat layer, and the bottom one is a wavy layer, illustrating deformation.

多相構造物質の弾性率推算

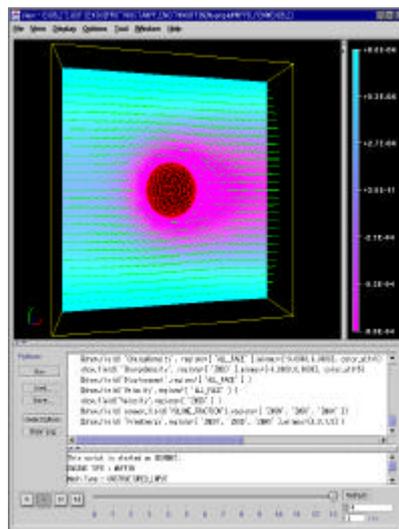
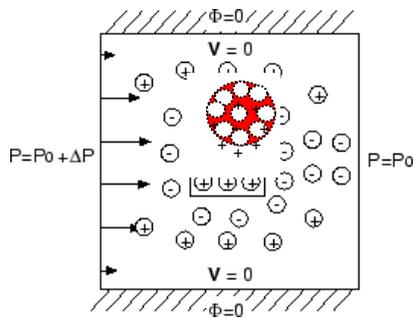
野田



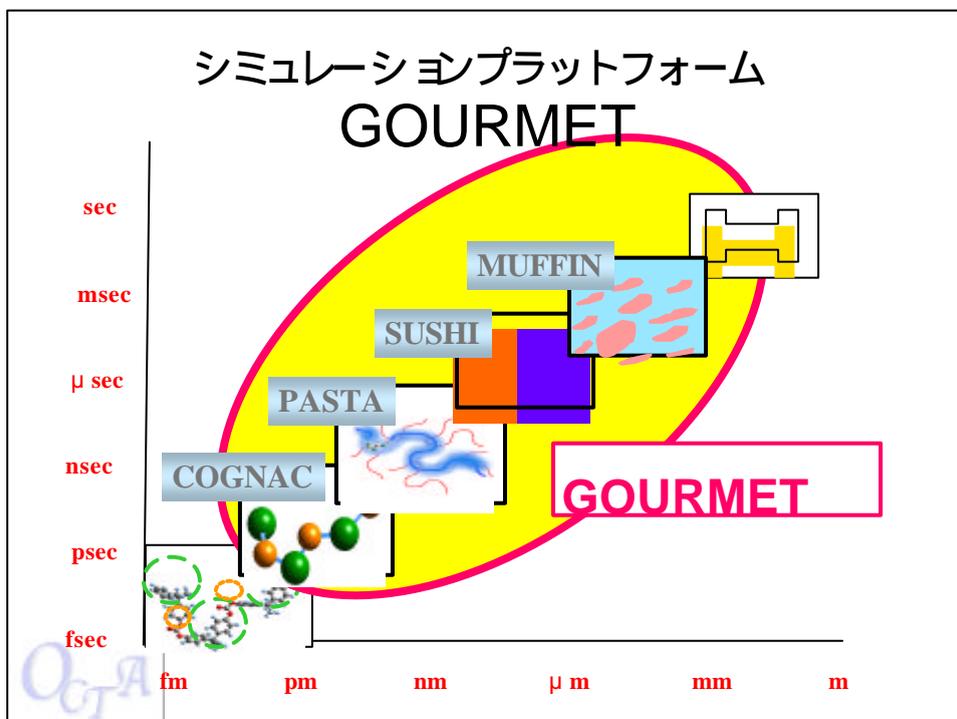
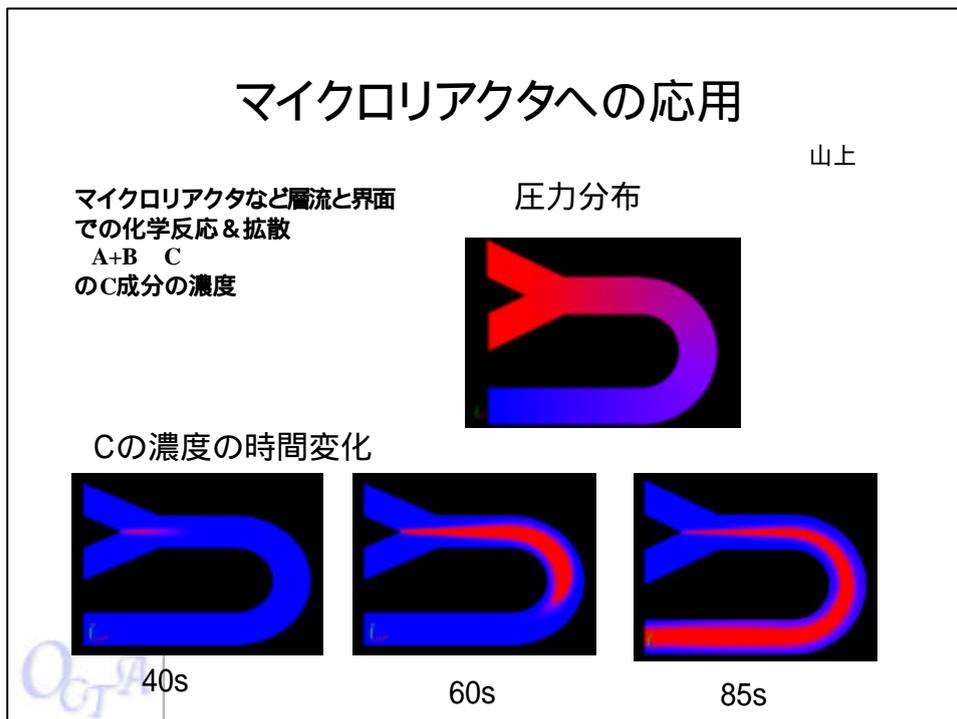
0₂

荷電粒子の電気泳動

M.Sasaki



0_{CTA}



シームレスズームのための仕組み

- **UDF(User Definable Format)**
 - OCTAシミュレーターの共通入出力ファイル書式
 - 定義部とデータ部からなるテキストデータ
 - データ構造、データの名前、説明、単位を定義
- **GOURMET**
 - UDFの編集、データ解析(データ変換)表示 (グラフ,3Dアニメーション)
 - スクリプト言語によるデータ処理
 - エンジンの起動、停止、途中経過表示



UDF (User Definable Format)



```

定義部  ¥begin{def}
        spring_system: {
            spring_const      : float [kg/s^2]
            spring_internal_friction: float [kg/s]
            mass                : float [kg]  }
        ¥end{def}
  
```

```

データ部 ¥begin{data}
         spring_system:{0.05, 0.0001, 0.01}
        ¥end{data}
  
```



GOURMET

Graphical Open User interface for Material design Environment

The screenshot displays the GOURMET software interface with several components:

- 3Dアニメーション表示** (3D Animation Display): A central window showing a 3D wireframe model of a cube with a red line and a purple dot, indicating a trajectory or path.
- エディタ** (Editor): A window on the left showing a table of numerical data with columns for parameters like 'mass', 'length', 'width', 'radius', and 'costly'.
- グラフ表示** (Graph Display): A window at the bottom left showing a 2D plot titled 'Trajectory of a pendulum' with a red wireframe structure.
- 簡易プログラミング** (Simple Programming): A window at the bottom right showing a Python code editor with a script for calculating pendulum trajectories.

OCTA

内容

- ? 概要
- ? OCTAの構成
- ? **研究事例**
- ? まとめ

OCTA

応用研究リスト

Octa.jpのApplication Listより

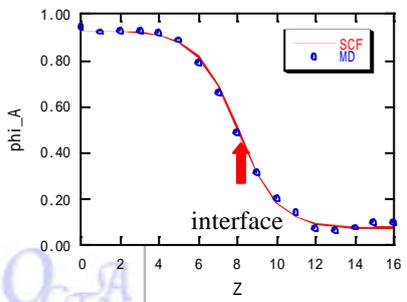
- Prediction of rheological properties of linear polymers.
- Analysis of the interfaces of the phase separated structures in ultra thin polymer films.
- Prediction of electro-rheological effect of binary polymer blends.
- Analysis of polymer melts confined between nanoscale gap.
- Molecular dynamics study of poly (ethylene oxide) (PEO) containing LiI salt.
- Molecular dynamics simulation of alkane crystallization processes. - Effect of short-chain branching -
- Micro- and macro-phase separations of AB block copolymer / A and B homopolymers blends.
- Prediction of elastic properties of thermoplastic elastomer.
- Simulation study of phase separated structures of blends of long and short block copolymers.
- Prediction of the domain structure in ternary polymer blend.
- Inspection of the domain structure for actual polymer blends.
- Parameterization of the Gay-Bern potential for nCB and molecular dynamics simulation of 5CB.
- Derivation of coarse-grained potential for polyethylene.
- Interaction between polymer grafted walls.
- The simulation of the shrinking process of NIPA gels. - The stress-diffusion coupling model for dynamics of gels -
- An analysis of loop/bridge ratio of triblockcopolymer.
- Study of the relation between χ parameter and Lennard-Jones parameter.
- Study of interface strength of polymer blend.
- The influence of short chain branching on polymer crystallization process. - Molecular dynamics simulation -
- Estimation of optical transmittance of polymer materials using spherulites growth model.
- Mechanical properties of topological gel. - Molecular dynamics simulation -
- Analysis of the structure of polymer blend system.
- Calculation of elastic modulus of polymer blend.
- Prediction of strain energy on photo-resist patterns.
- Prediction of the uniaxial elongational viscosity of polydisperse polystyrene(PS) melt.
- Shear viscosity of star polymers.
- Prediction of interfacial tension of an A/B polymer blend.
- Study of interface strength of polymer blend with polydispersity.



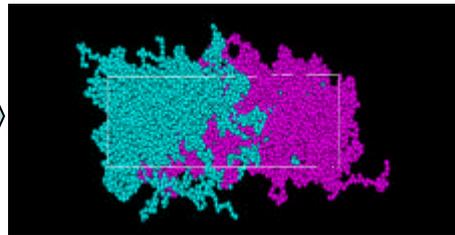
PP/Elastomer の界面 (1) 青柳

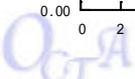
SUSHIとCOGNACの連携による高分子ブレンド界面の検討

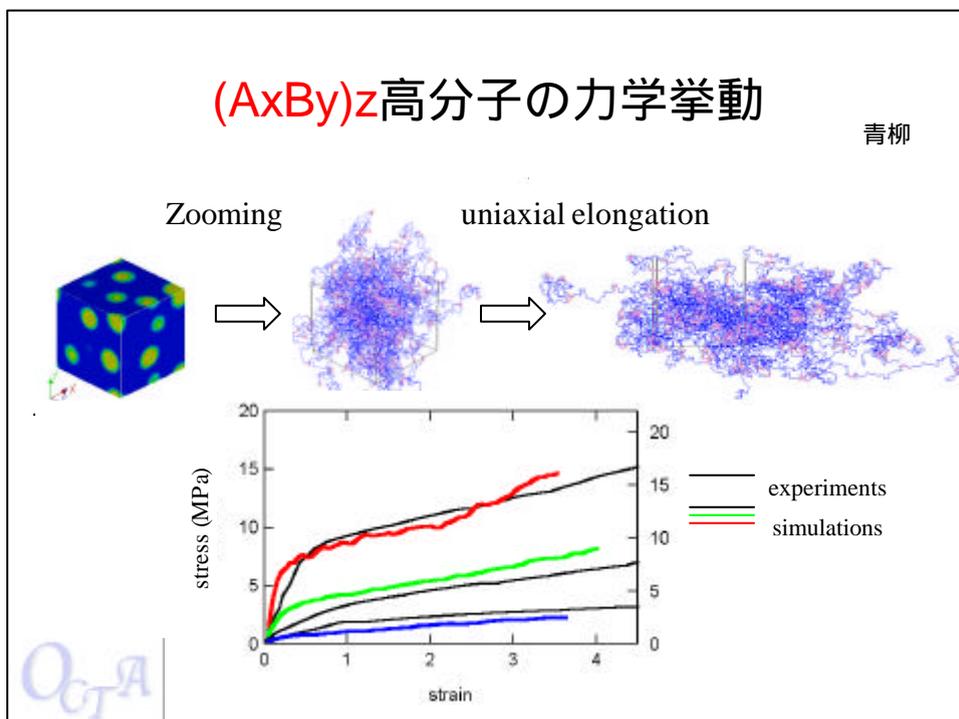
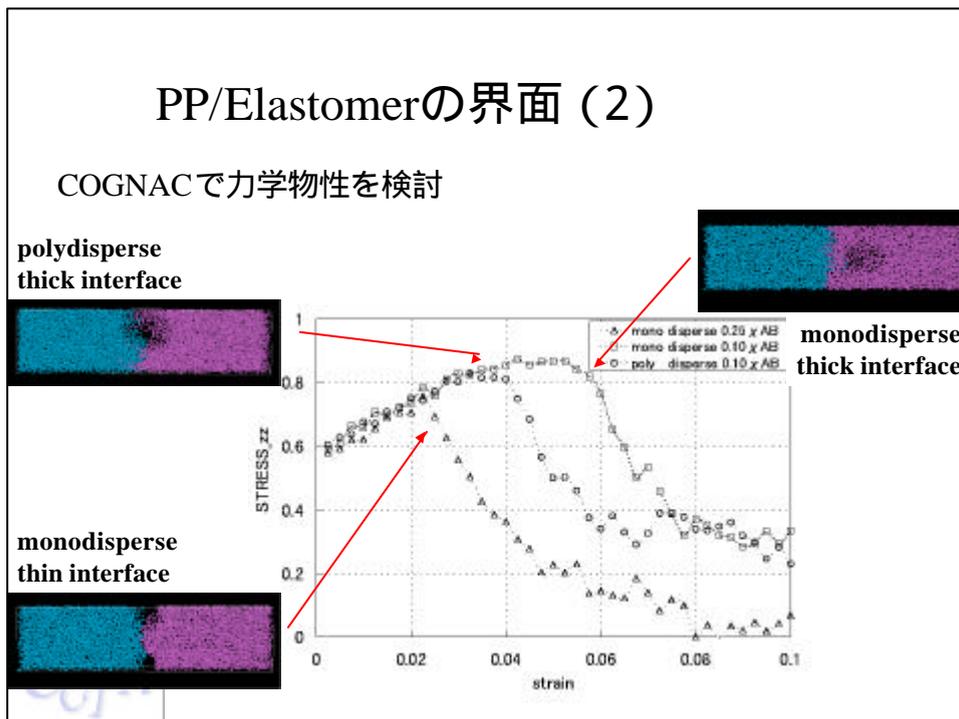
SUSHI
界面の密度分布



COGNAC
SUSHI結果に基づいて生成された
分子モデル







内容

- ? 概要
- ? OCTAの構成
- ? 研究事例
- ? **まとめ**



まとめ

- OCTA :材料設計/プロセス設計のためのCAEをつくるオープンプロジェクト
- 広い時空間スケールをカバーする多階層 (マルチスケール)シミュレーター群とシームレスズームングを目指した仕組みを備える
- すべてはwwwで無料公開/配布中、現在も進行中
<http://octa.jp>



