

汎用インターフェース (拡張OCTA)

シミュレータ概要

- ▶ 本インターフェースは、NEDOプロジェクト「高機能材料設計プラットフォームの開発」(1998-2002)により開発されたマルチスケールシミュレーションシステムOCTAを機能拡張したものです。
- ▶ 高分子複合材料の研究開発を想定し、グラフィカル・ユーザ・インターフェースGOURMETの機能拡張、並びに、Image Loader、AI Toolの新規実装を行いました。



拡張機能

- ▶ 拡張GOURMET: 高速ファイル処理、高速描画、材料界面の描画・解析機能、など
- ▶ Image Loader: 電子顕微鏡画像の画像解析機能、画像ファイルから計算機シミュレーションファイルへの変換機能、など
- ▶ AI Tool: 計算機シミュレーションファイルや画像ファイルからのデータフレーム作成機能、機械学習・深層学習によるデータ解析機能、など

想定用途

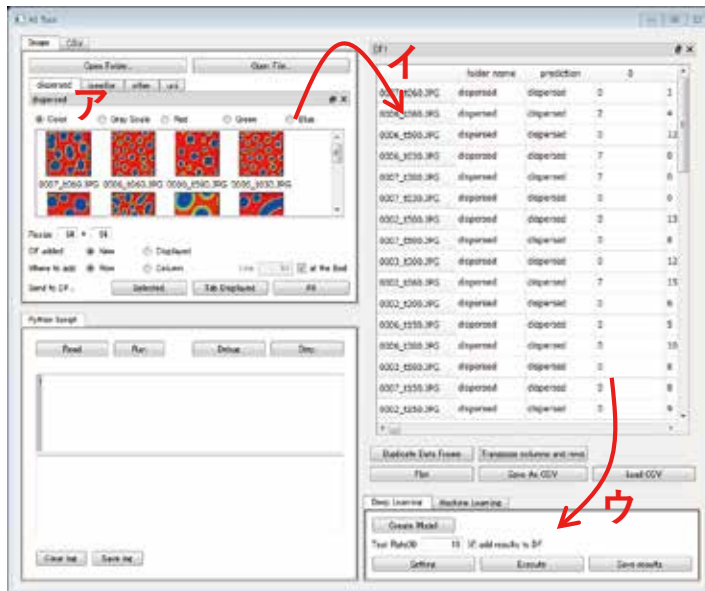
- ▶ 材料の電子顕微鏡画像をそのまま取り込んだ計算機シミュレーション（Image Loaderとマルチスケールシミュレータの連携）
- ▶ 高分子ブレンド材料の相分離構造に対する機械学習・深層学習解析（マルチスケールシミュレータとAI Toolの連携）
- ▶ 1000万粒子、1億メッシュ相当の大規模シミュレーションに対する高速化された結果描画と結果解析（マルチスケールシミュレータと拡張GOURMETの連携）

Image Loaderによる電子顕微鏡画像をそのまま取り込んだ計算機シミュレーション



- ① 材料の電子顕微鏡画像
- ② 画像処理、ファイル変換。
- ③ シミュレーション用濃度場ファイル。これを利用した計算機シミュレーション。

AI Toolによる相分離構造の機械学習・深層学習解析



- ア) 相分離構造(計算機シミュレーションの結果)
- イ) 数値データに変換し、データフレームを作成
- ウ) 機械学習・深層学習解析の設定。解析の実施。

動作環境

- ▶ 必須: Windows 10 (64 bit)、6 GB以上のHDD空容量
- ▶ 推奨: 12 コア以上のIntel社製CPU、64 GB 以上のメモリ、NVIDIA社製ビデオカード

ライセンス・配布方式

- ▶ 利用規約は「OCTAの利用規約」に準拠する
- ▶ OCTA公開サイト(<http://octa.jp/>)よりPJ外に公開中

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により開発されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04