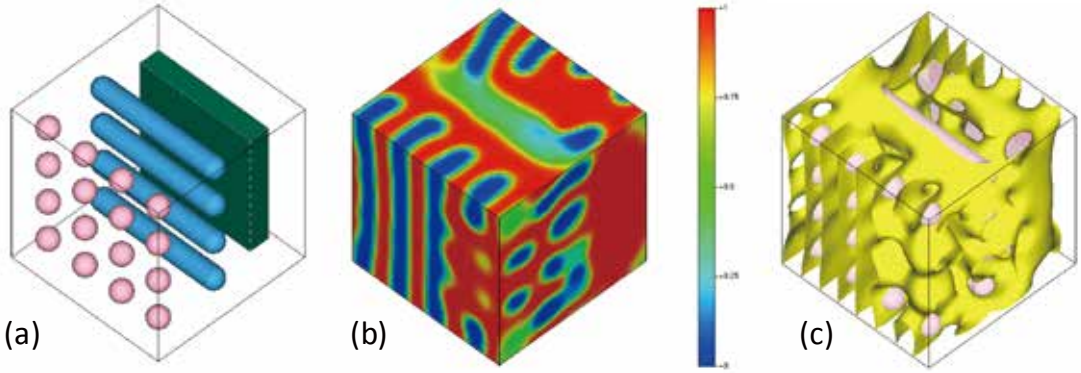
超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト成果

ナノカーボンコンポジット用シミュレータ

（Soft Blends Analyzer Ver.1.0　略称　SOBA Ver.1.0）

シミュレータ概要

- 本シミュレータは、OCTAコミュニティーにより開発、公開(2002～)されている、OCTAエンジン(http://octa.jp/)をPythonスクリプト言語によりラップし、さらに新機能を追加し、機械学習への情報提供を容易にしたナノカーボンコンポジット用Pythonシミュレーション・プラットフォームであり、フィラーが存在する様々な高分子溶融体の相分離構造をシミュレート可能としたものです。



フィラーの配置　　セグメントの密度分布　　セグメント等値面

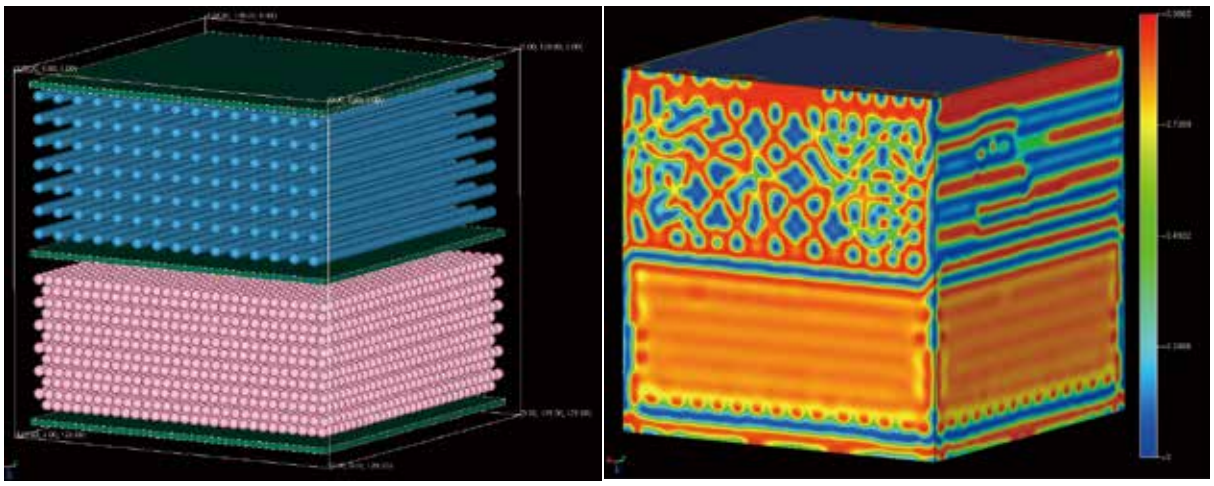
粒子・ファイバー・プレートが存在するA–Bジブロック・コポリマーの
ミクロ相分離の例：粗視化鎖長20、ブロック比0.5、システムサイズ32^3

主な機能

- 粒子（カーボンブラック・シリカの模擬）、ファイバー（CNT等の模擬）、プレート（グラフェン・電極等の模擬）をフィラーとして入力した高分子溶融体の相分離構造のSCF計算
- Diffuse Interface Particle（粒子を界面に濃度勾配のある構造を固定した溶媒として仮定したモデル）を投入した系の、粒子位置と相分離構造の同時最適化（疑似動力学）計算
- MPI, GPGPU, MPI+GPGPU並列計算のPythonスクリプトでの実行

想定用途

- カーボンブラック、シリカ等を投入した高分子複合材料の相分離構造予測
- ファイバー、CNT等を投入した高分子複合材料の相分離構造予測
- グラフェン、電極等を投入した高分子複合材料の相分離構造予測
- 高分子溶液中での粒子間相互作用エネルギーの予測
- 高分子マトリックス中でのフィラー粒子の凝集構造
- フィラーのパーコレーションの評価
- フィラーが存在する高分子複合材料のマルチスケールシミュレーション
- 高分子複合材料の熱・電気伝導等の物理シミュレーション



ジブロックコポリマー高分子複合材のミクロ相分離構造の大規模計算結果

$A_{10}B_{10}$, System size 128^3 , Particle: r =2, nP=10,466, Fiber: r =2, / =100, nF =105, Hexahedron: 120 × 120 × 2, nH=3, FlatMPI 512core Parallel calculation

Ref. T. Honda, 12th SPSJ International Polymer Conference (IPC2018)

動作環境

- コンパイル時には配布ソースコード、OCTA(http://octa.jp/)に含まれるソースコードとインターフェースライブラリ、C++のBoostライブラリ、C++コンパイラが必要
- 動作するOSはWindows10およびLinux
- 実行時にはAnaconda3のPython環境が必要。MPI版実行にはMPI環境が必要。GPGPU版実行にはGPGPU環境が必要

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

ー謝辞ー

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

産総研 ADMAT