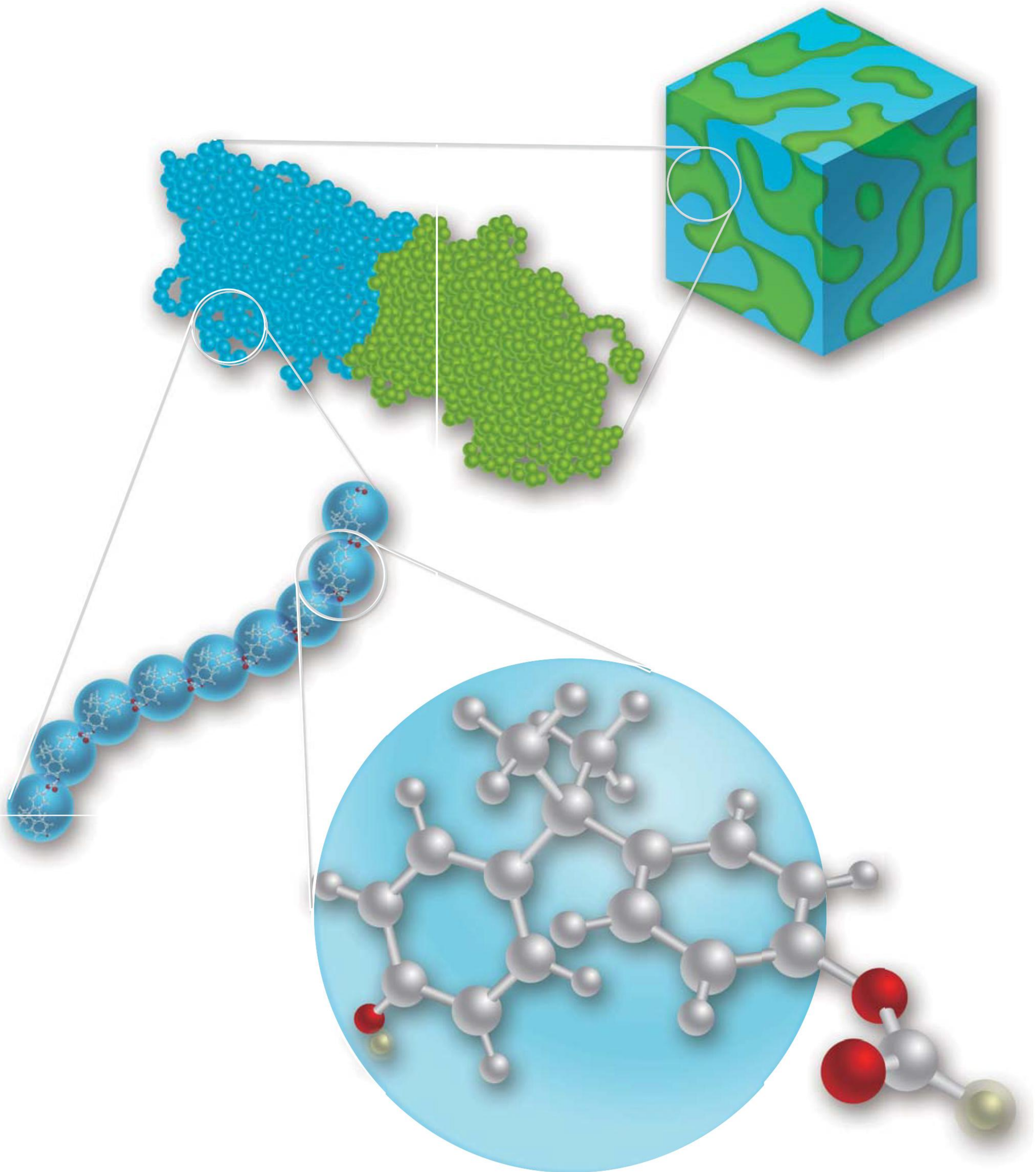


J-OCTA 材料物性分析软件



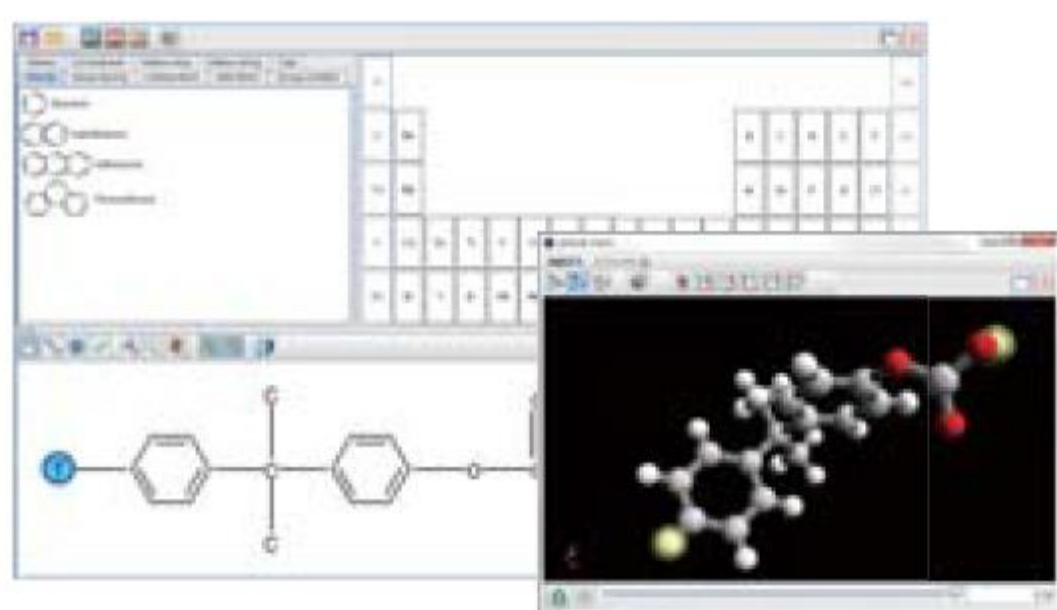
涵盖从微观分子到宏观材料的特性

J-OCTA在材料研发的最前线发挥作用

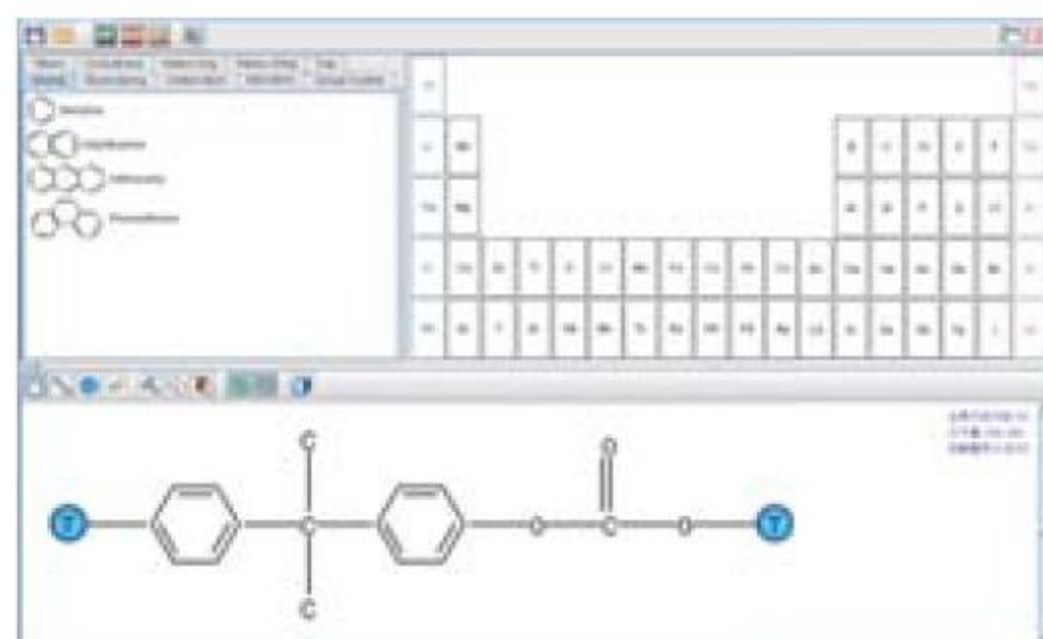
J-OCTA 是可从原子级到微米级的范围内对橡胶、塑料、薄膜、涂料及电解质材料等的开发所需的材料特性进行预测的“材料物性分析软件”。为了理解那些在实验中无法完全把握的复杂现象和材料物性，可将其作为“知识发现工具”进行灵活运用。J-OCTA 通过在共享平台上与面向各尺度开发的模拟器合作，为材料设计与素材开发提供最尖端的技术支持。

分子动力学模拟 (COGNAC、VSOP)

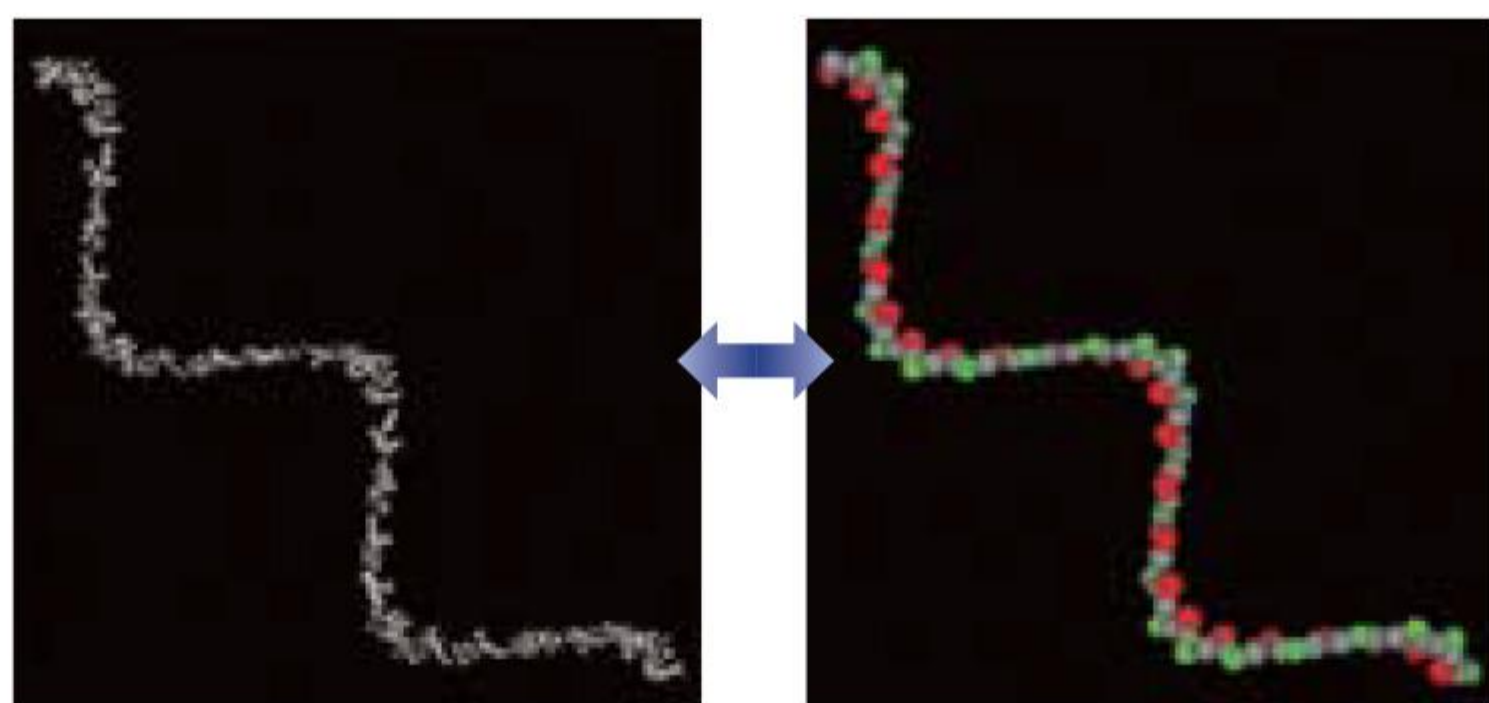
- 从原子分子的层面上来评价和预测材料的静态动态特性。
- 可支持从全原子模型(处理所有原子的详细模型)到粗粒化模型(将原子的集合体作为一个单元进行处理的模型) 的各种类型的模型。
- 使用粗粒化模型，对大规模、长时间的现象进行计算。还支持粗粒化的潜在能推算功能。
- 通过在画面上描画化学式的方式设定全原子模型的力场参数，可以简单地制作出三维分子结构。
- 嵌段共聚物及无规共聚物的构建、聚合物立构规整度的控制等也可以简单地完成。
- 搭载了与外部模拟器 (LAMMPS、GROMACS) 的转换功能。



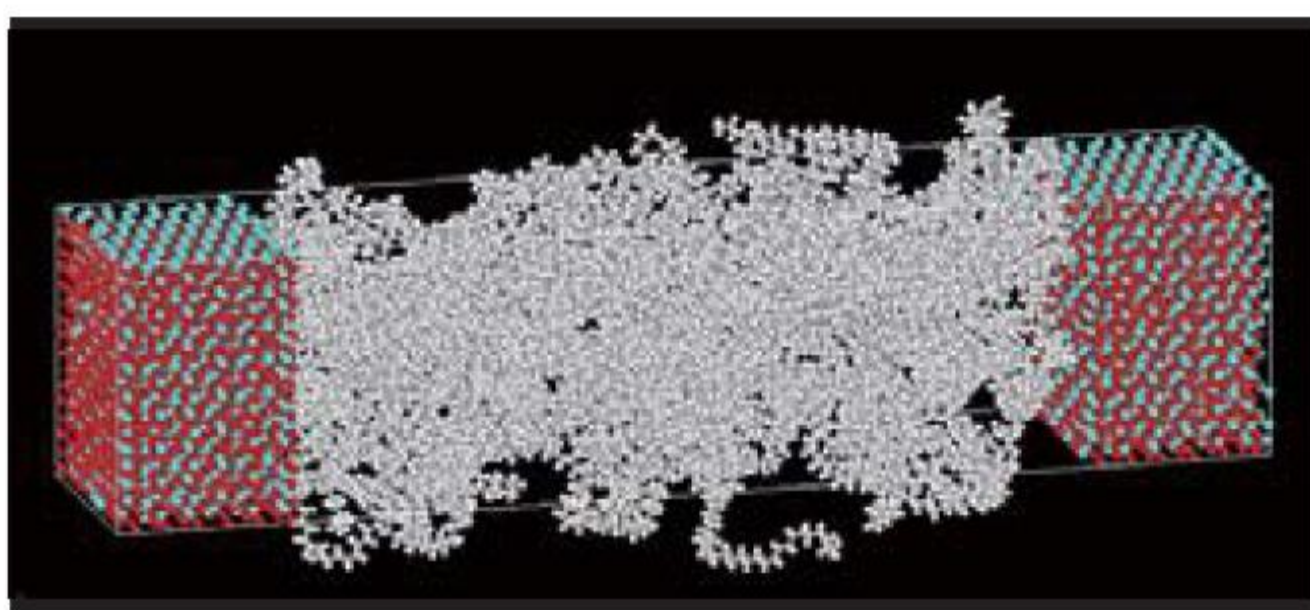
单体建模



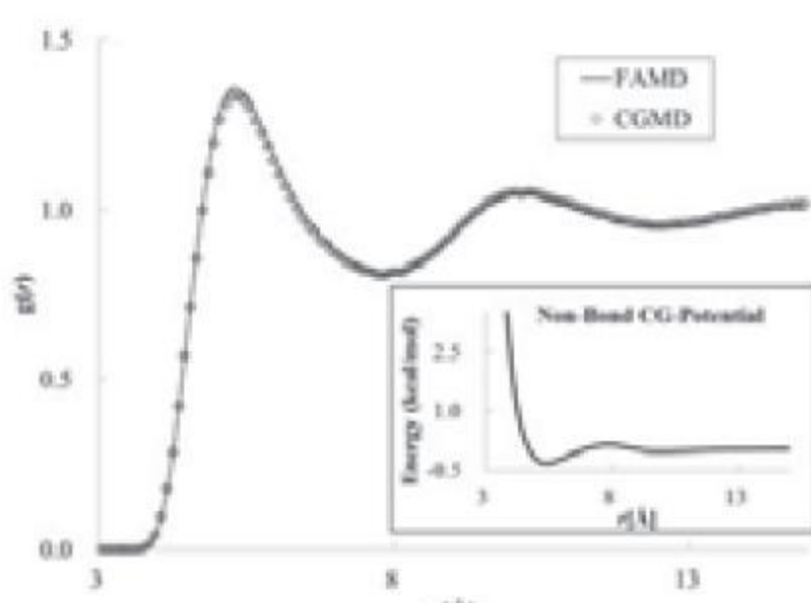
聚合物建模



全原子模型与粗粒化模型



无机-有机界面的建模

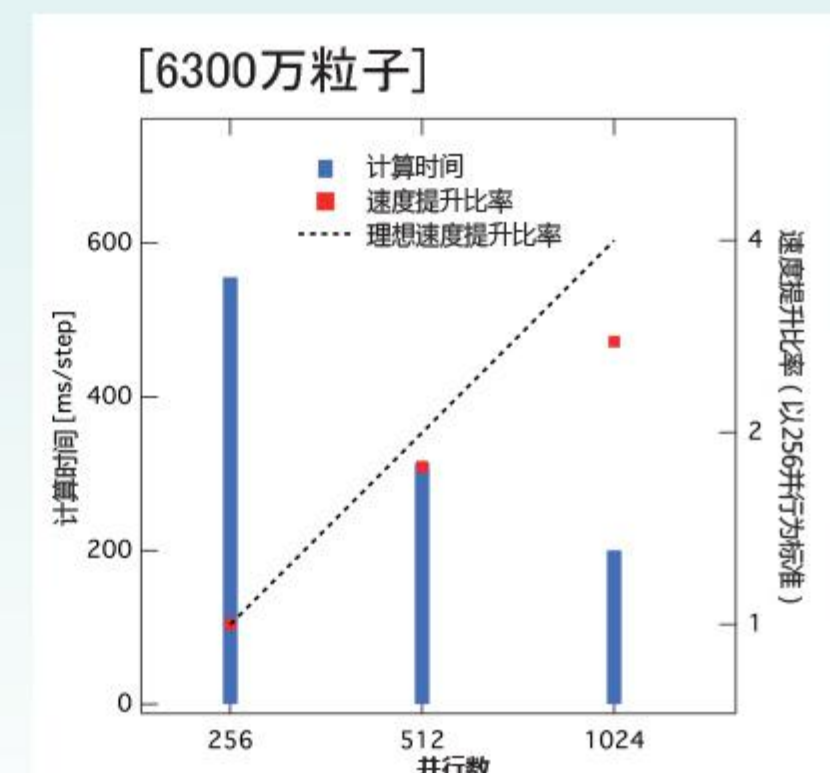
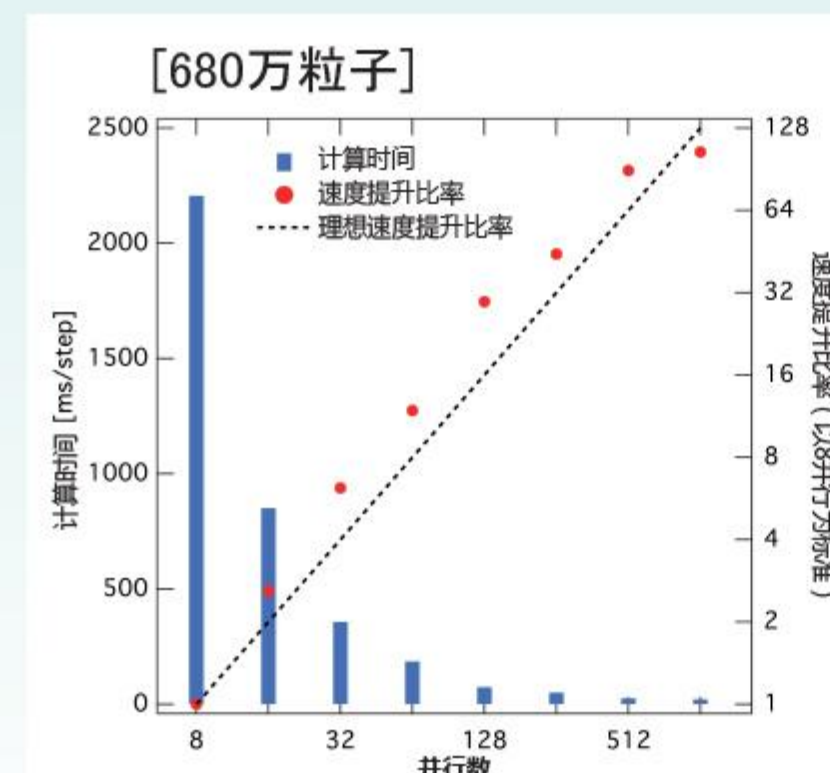


粗粒化单元间的径向分布函数与粗粒化的潜在能 (非结合)

并行化分子动力学引擎“VSOP”

使用并行分子动力学引擎“VSOP”，使得大规模高速计算成为可能。

※支持COGNAC的部分功能。



VSOP并行化效率 (珠簧模型)

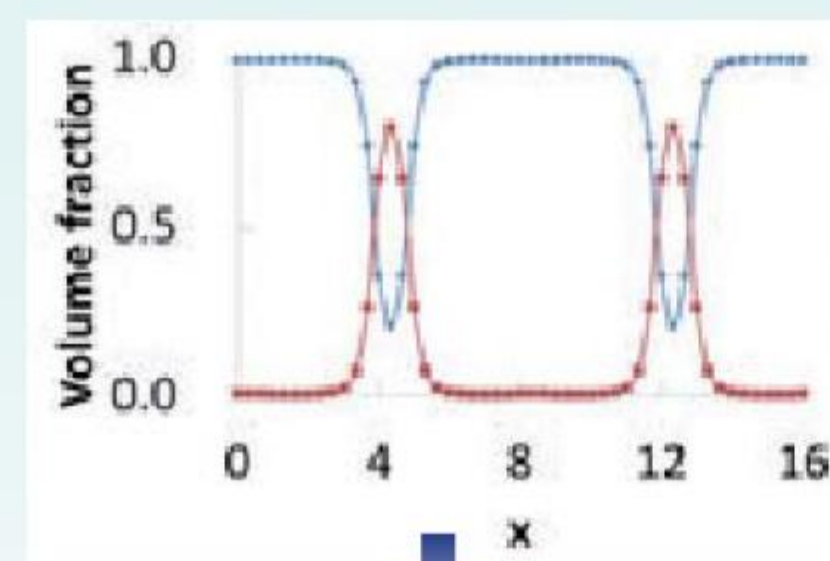
※利用计算科学振兴财团 (FOCUS) 的超级计算机进行速度测量。

※VSOP是由JSOL与独立行政法人日本原子力研究开发机构 (JAEA) 共同研发而成。

变焦、反向映射函数功能

·变焦功能

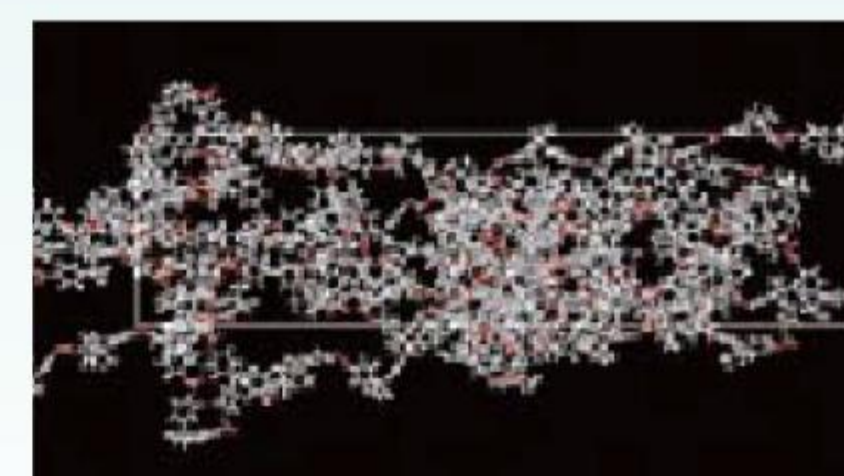
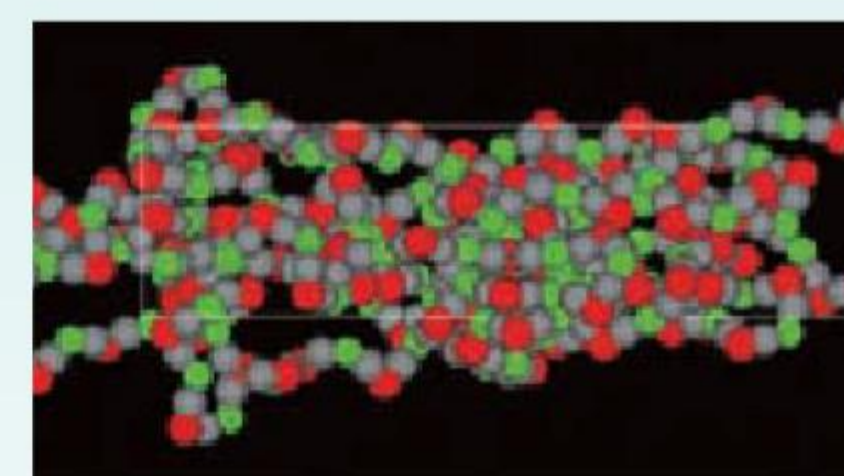
利用由平均场方法 (SUSHI) 获得的成分分布,可生成全原子和粗粒化分子。



利用SUSHI (平均场法) 的体积分率分布生成粗粒化分子

·反向映射函数功能

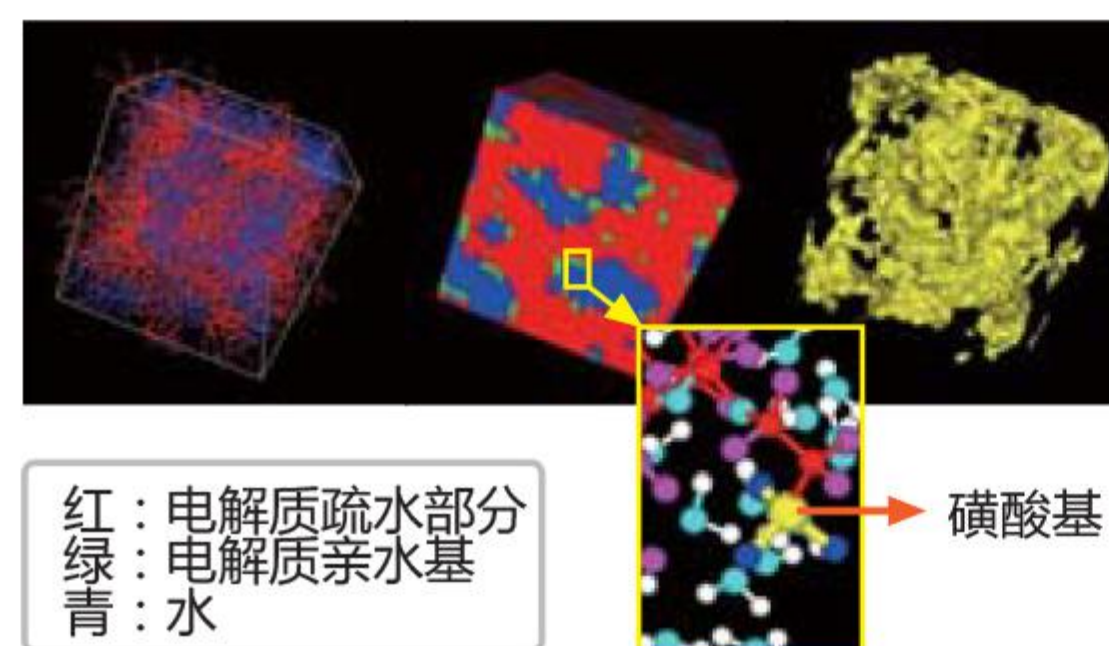
利用由粗粒化分子动力学获得的分子结构,可生成全原子模型。



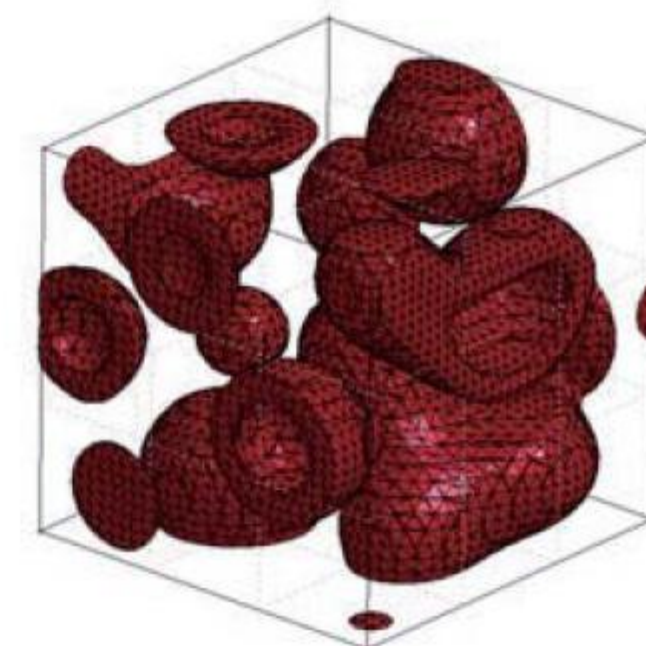
以粗粒化模型的单轴拉伸与对全原子模型的反向映射

界面、相分离模拟 (SUSHI、COGNAC-DPD)

- 利用平均场方法 (SUSHI)、耗散粒子动力学方法 (COGNAC-DPD), 可对含有各种结构的分子及嵌段共聚物等的材料进行相分离结构和界面形状等的预测。
- 拥有推算相互作用参数 (χ 参数) 的功能。
- 可以将相分离结构数据作为 FEM 用数据以体素网格、STL 格式、四面体网格 (部分领域) 等格式输出。



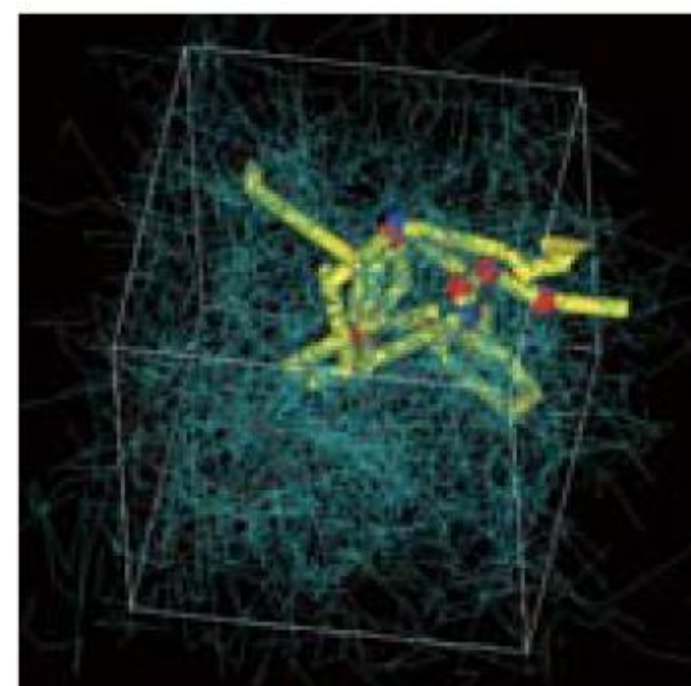
燃料电池的高分子电解质膜



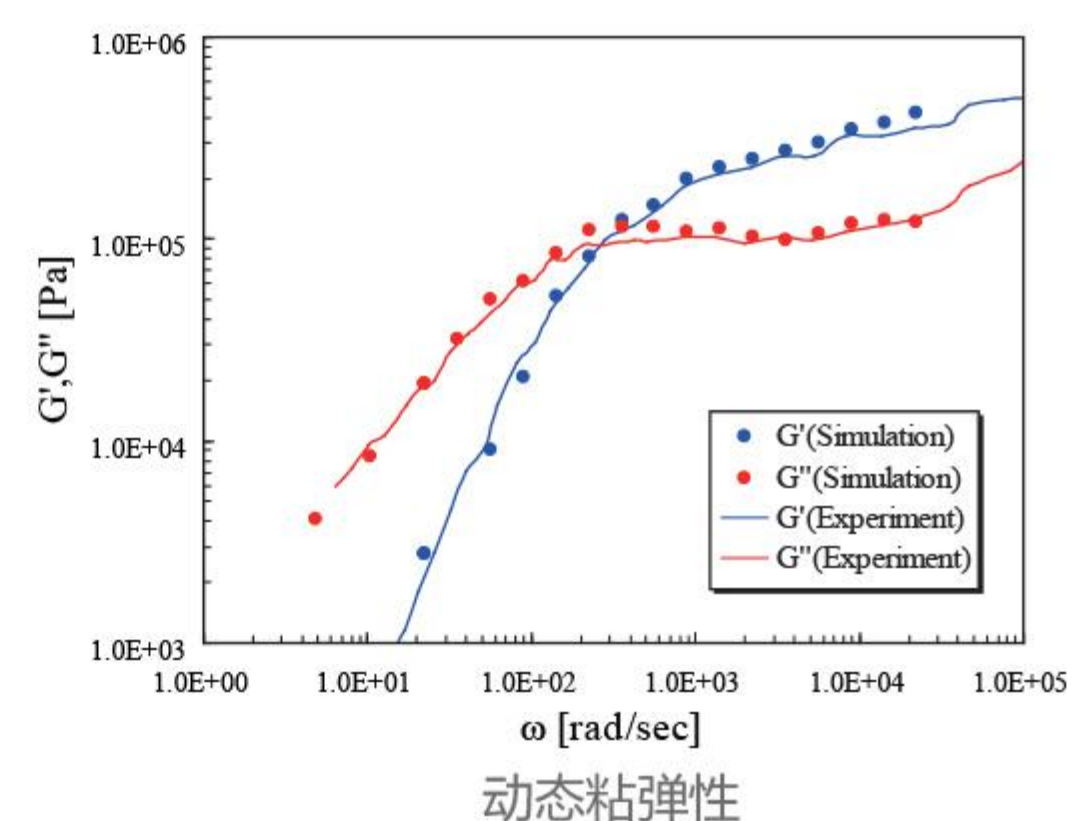
将相分离结构转换为有限元法的网格

流变模拟 (PASTA、NAPLES)

- 利用滑移链模型 (PASTA)、原语链表网络模型 (NAPLES), 可在考虑分子量分布和支链结构等影响的同时, 对熔融聚合物、高分子溶液的流变性能进行预测。
- 还可预测松弛弹性模量、存储模量与损耗模量、延伸粘度等。



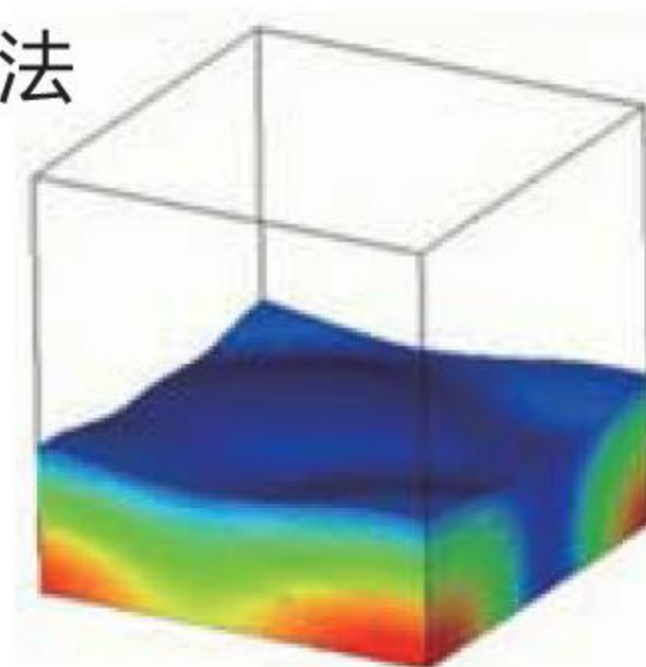
NAPLES



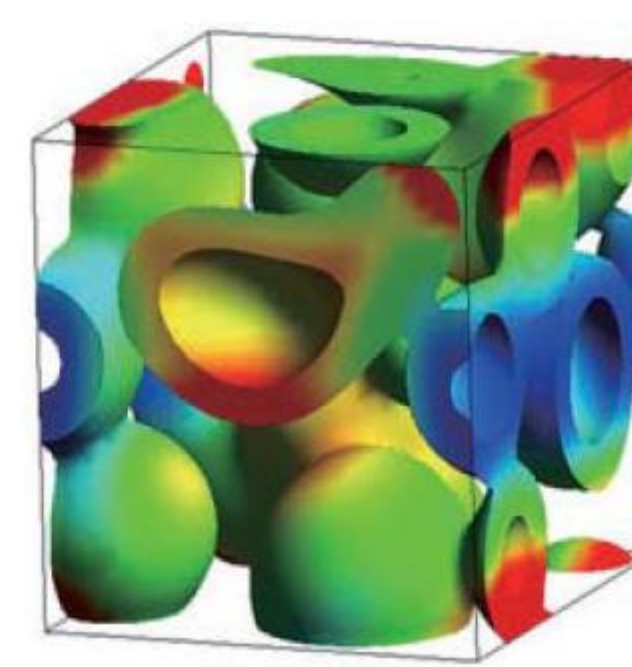
动态粘弹性

多相结构模拟 (MUFFIN)

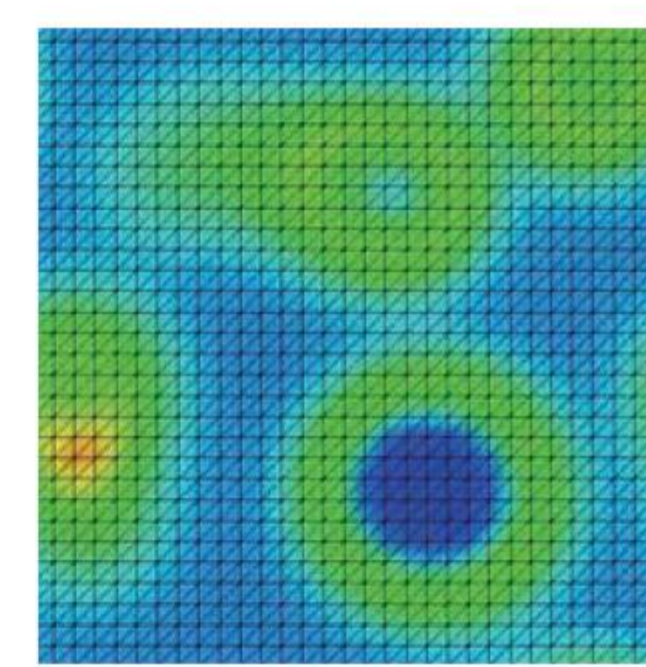
- 利用由平均场法等得到的相分离结构, 可实现弹性体的有限元法 (FEM) 模拟。
- 拥有网格生成功能。
- 可对复合材料中的微结构与材料物性的关系进行评价。
- 可对由多种成分形成的微观流体现象进行评价。



溶剂蒸发与相分离



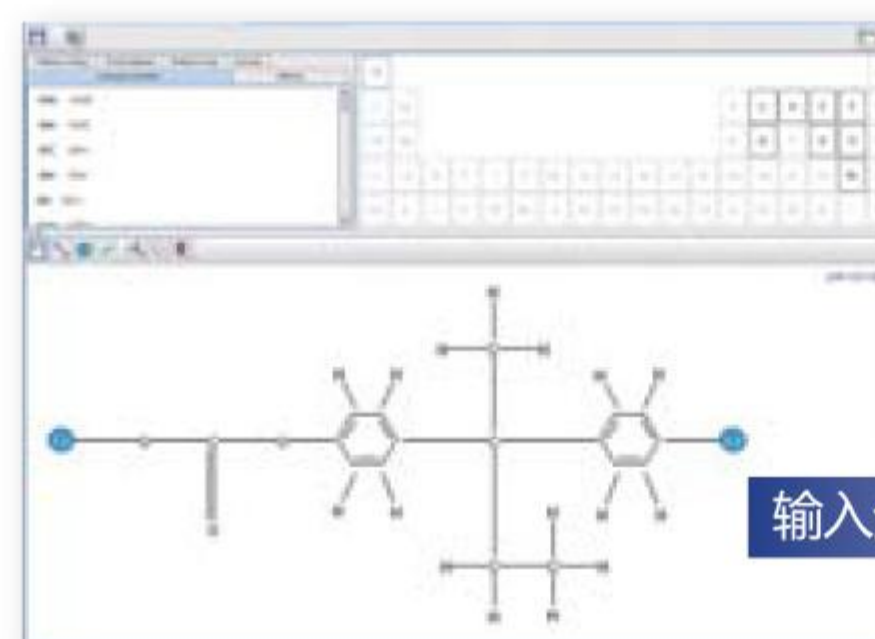
多相弹性体的有限元法分析



将相分离结构导入均匀的网格

定量构效关系 (QSPR)

- 只需输入分子结构, 就可以推算出高分子的各种物性。
- 可在短时间内计算密度、热膨胀系数、玻璃化转变温度、泊松比、介电常数等多种物理性质, 并显示。这是进行有机高分子分子设计时的得力工具。

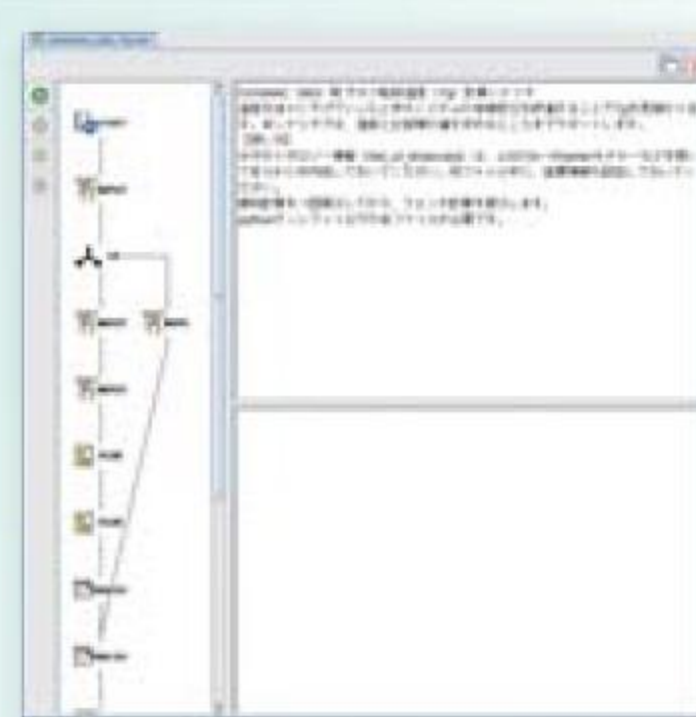


单体建模器

物性推算一览表

案例数据库

- 将分析数据建成数据库, 以供保存、检索的功能。利用此功能可促进分析方法的共享。
- 作为样本, 预先在数据库内提供了数个分析案例。在这些分析案例中, 不仅包括分析中必需的输入文件、结果文件等数据, 还含有对分析步骤进行跟踪的场景功能。



场景·导航

样本案例之一 (高分子材料的特性)

- 高分子中的低分子扩散
- 光学特性 (双折射)
- 玻璃化转变温度
- 力学特性 (单轴拉伸、交联结构)
- 粘度
- 界面张力
- 相分离结构的平均弹性模量

J-OCTA的构成

- J-OCTA平台

分子轨道法界面

分析案例数据库

COGNAC建模模块（粗粒化分子动力学建模器）
包括DPD建模模块（耗散粒子动力学）

PASTA/NAPLES建模模块（流变建模器）

SUSHI建模模块（动态平均场建模器）
- MUFFIN建模模块（多相结构建模器）

VSOP（并行分子动力学引擎）

QSPR（定量构效关系）

反向映射功能

溶解度系数的推算功能

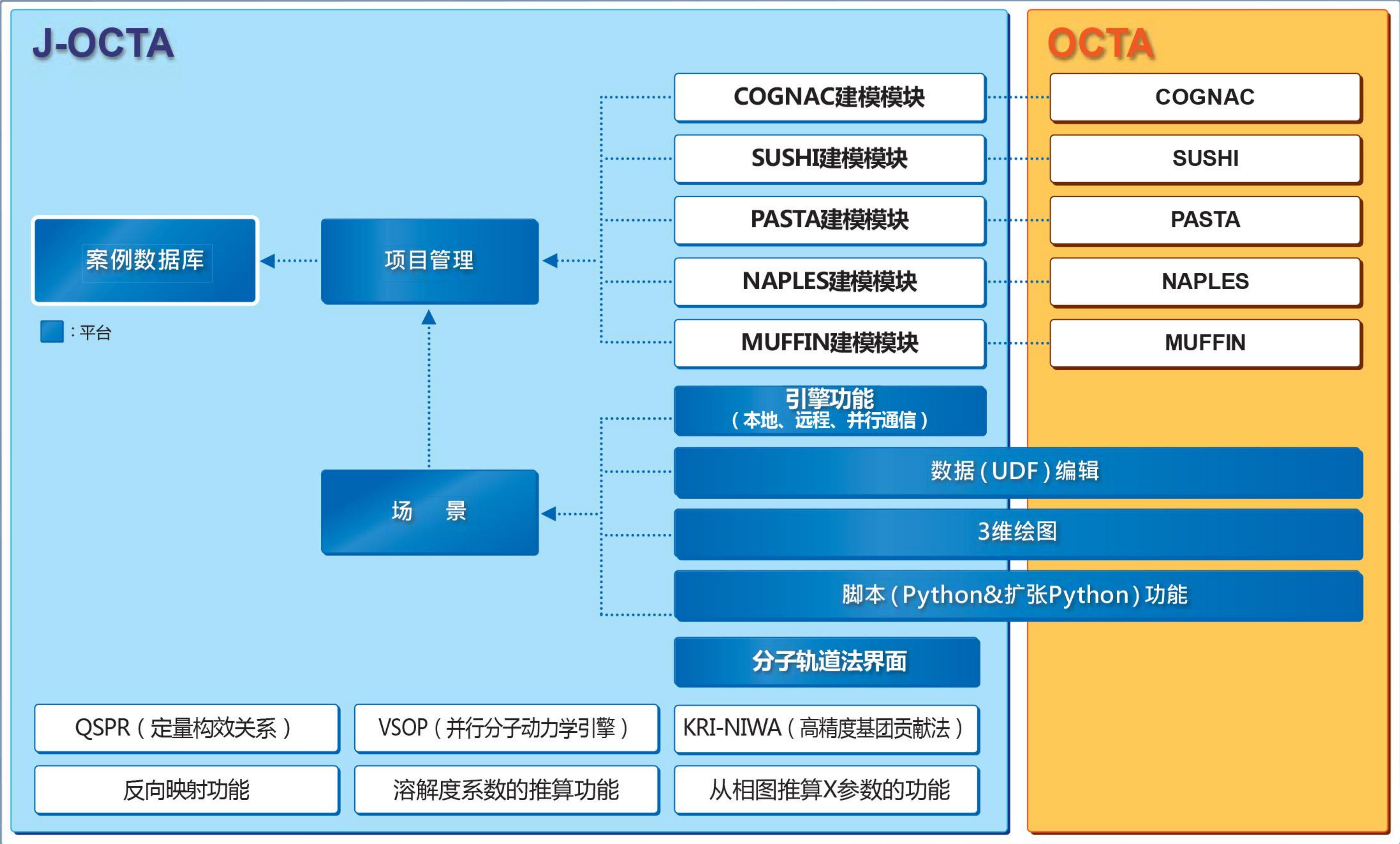
从相图推算X参数的功能

KRI-NIWA（高精度基团贡献法）

OCTA概要

OCTA，是由日本校企合作项目开发的用于软质材料的综合模拟系统。系统由利用多尺度、多物理场技术连接软质材料的微分子特性和宏观材料特性的模拟引擎和共享平台构成。OCTA作为开放源码软件公开，可供免费使用。详情请参考OCTA网站。

 <http://www.octa.jp>



运行环境推荐配置

	J-OCTA平台	分析引擎
OS	Windows 7 (64bit) Windows 8.1 (64bit) Windows 10 (64bit)	Windows / Linux ※Linux推荐版本 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	推荐多核处理器	推荐多核处理器
内存	推荐4GB以上（最低2GB）	推荐2GB以上
硬盘	推荐80GB以上的剩余空间（最低2GB）	推荐80GB以上剩余空间
图像	支持OpenGL的显卡（推荐nVidia品牌、AMD品牌）	
屏幕分辨率	推荐1024X768以上	
屏幕色数	推荐65536色以上	

技术支持

- 专业人员以电子邮件等方式为签订支持服务协议的客户提供技术支持服务。
- 导入初期会协助启动分析业务。
- 会举办从基础理论到操作方法的各种研讨会。

受托分析服务

- 承接分析业务外包服务。
- 提供实验与分析的比较验证及材料素材设计咨询等的工程服务。

欲知更多产品信息，可从下方获取 ▼▼▼

 庭田科技有限公司（ANSCOS LIMITED）

全国热线：400-633-6258

电 话：021-6151 1991

传 真：021-6151 1993*610

网 址：www.anscos.com

电 邮：info@anscos.com



微 信 公 众 号