

# 拡張OCTA

## 計算材料科学とデータ科学融合の ためのツール

2020年9月7日

第7回 東北大学 知のフォーラム

実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー

「計算材料科学&マテリアルズ・インフォマティクス入門」

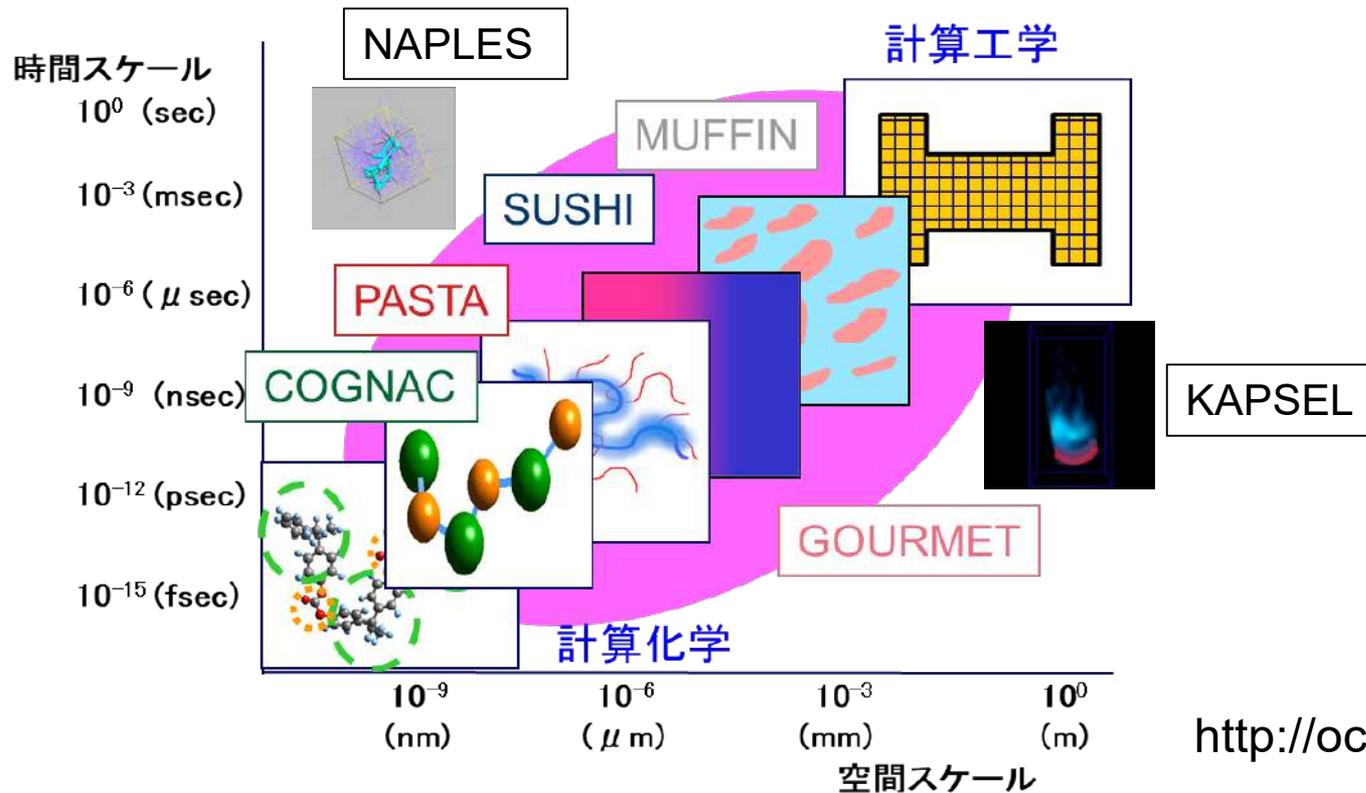
産業技術総合研究所

青柳 岳司

- 青柳岳司（あおやぎたけし）
  - 産業技術総合研究所 機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター(CD-FMat) 総括研究主幹
- 経歴
  - 1987年3月 薬学研究科博士前期課程修了（薬学修士）
  - 同 4月 旭化成工業(株)（当時）入社
    - 1991年10月－1992年9月 カリフォルニア工科大学客員研究員
    - 1998年8月－2002年3月 （財）日本化学技術戦略推進機構(JCII)（出向）  
NEDOプロ「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」においてOCTAを開発
    - 2002年9月 博士（工学）学位取得（名古屋大学）
  - 2016年4月 旭化成退社
  - 2016年5月 産総研入所
- 専門分野
  - 高分子計算機科学、高分子材料物性解析
- 現在関与する主なプロジェクト
  - 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト（超々プロ）（NEDO 2016-2021）
  - 次世代物質探索のための離散幾何学（新学術領域計画班 2017-2021）

# 高分子材料開発のための統合シミュレータ **OCTA**

- NEDOプロ(1998-2002)において開発された統合システム
- ミクロ～マクロ間のスケールをカバーする複数のシミュレーションプログラム (エンジン) とユーザーインターフェース



<http://octa.jp/>

# OCTA現在の活動

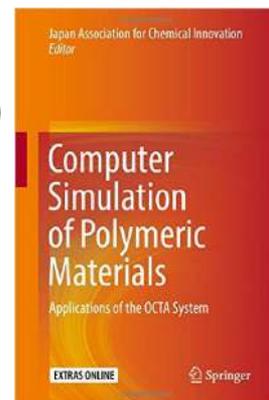
## • OCTAユーザーグループによる活動 (2002/4-)

- Webページの運営 (<http://octa.jp/>)
  - プログラム公開 / ユーザー登録は3000サイト以上
  - 掲示板によるディスカッションの場提供
- プログラムのデバック、バージョンアップ
  - OCTA8.3 (最新版)    OCTA8.4 (近日公開予定)



## • (公社) 新化学技術推進協会(JACI)による活動 (<http://www.jaci.or.jp/>)

- 技術セミナー：30社程度のメンバーがOCTA活用に関して情報交換、議論 ⇒ 对外発表 (高分子討論会等)
- 書籍出版：高分子材料シミュレーション-OCTA活用事例集  
Computer Simulation of Polymeric Materials  
-Application of the OCTA System



## • OCTA商用版

- J-OCTA：(株) JSOL
  - 主に、インターフェース (モデラーなど) 提供と技術サポート、受託解析

## 超々プロジェクト(2016-2021)の狙いとアウトプット目標

### <プロジェクトの狙い>

主に**有機系材料**を対象にした従来に無い材料設計シミュレーションの開発や人工知能(以下、AI)を活用した材料開発支援等を、革新的な試作プロセス開発や評価計測技術開発と共にナショナルプロジェクトとして行うことで、これまで“経験と勘”に基づいた材料開発文化に変革の兆しを誘発すると共に、**競争力の高い日本の素材産業の優位性を確保する。**

### <アウトプット目標>

高性能材料・部材の研究開発支援を可能とする**高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術**を駆使して革新的な**材料基盤の構築**を目指す。これにより従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間の1/20の短縮**を目指す。

基本計画書より抜粋

# 超超PJのコンセプト: 計算・プロセス・計測の連携

原子

反応・  
重合

低分子/  
高分子

高次  
構造

高分子反応/  
表面修飾

複合材料(有機/  
有機・無機)

成形加工  
(積層/配向)

ハイスループット合成



マルチスケール計算  
シミュレータ技術

計算機支援  
ナノ構造設計  
基盤技術



スーパー  
コンピューター

機能性材料開発

高速・革新  
プロセス  
技術開発

高速かつ自在な製造  
が可能なプロセス技術

先端  
ナノ計測評価  
技術開発

機能と構造の関係などを  
精密に解析する先端計測技術

電子分光型電子顕微鏡



陽電子消滅法

計算/AI・プロセス・計測の  
連携による研究開発促進

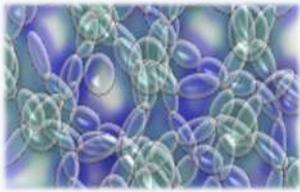
多様な材料・機能に対応したシミュレータ群 (2019/4初期バージョン公開)

## 開発シミュレータ

- ・電気・光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ (I, II)
- ・モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ・誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ (I, II)
- ・汎用インターフェース(拡張OCTA)
- ・フィラー充填系コンポジットシミュレータ
- ・ナノカーボンコンポジット用シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

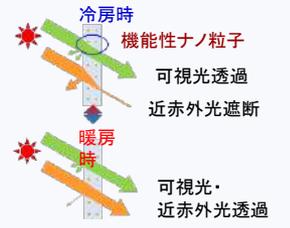
### 高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等



### 半導体材料

高透明なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



冷房時  
機能性ナノ粒子  
可視光透過  
近赤外光遮断

暖房時  
可視光・近赤外光透過

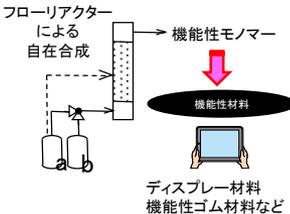
### 高性能高分子材料

高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等  
自動車系部品など



### 機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO<sub>2</sub>を原料とする機能性化成品・材料等



フローリアクターによる自在合成 → 機能性モノマー → 機能性材料 → ディスプレー材料、機能性ゴム材料など

### ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等



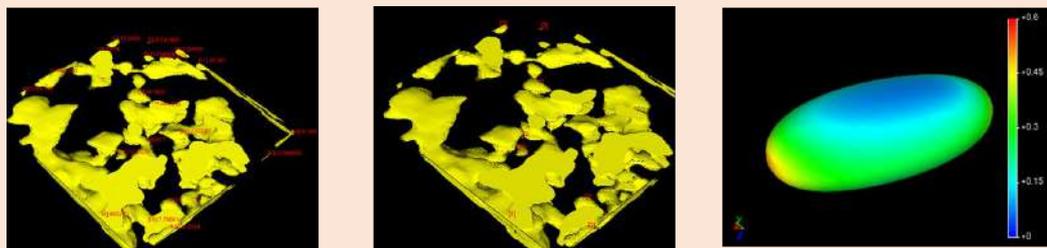
自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など  
導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など  
フレキシブルディスプレイ・照明など

# 拡張OCTA開発の経緯

- マテリアルズインフォマティクス、データ駆動型材料開発への対応
  - 解析ツールの整備（シミュレーション結果から記述子の抽出）
  - 実験データとの連携（画像解析）
  - 機械学習ツールとの連携
- 大規模シミュレーションへの対応
  - 描画、データ処理の高速化（エンジンの高速化が先行）

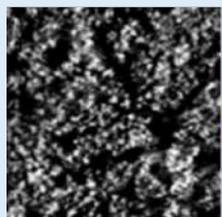
# 拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

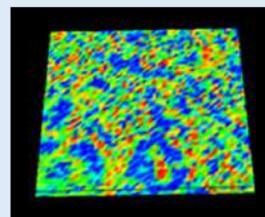
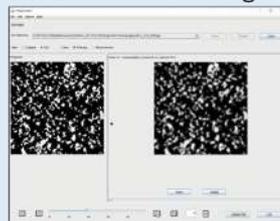


大規模データ対応、  
解析機能強化：  
**拡張GOURMET**

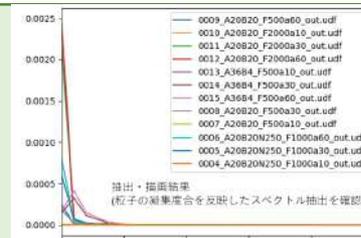
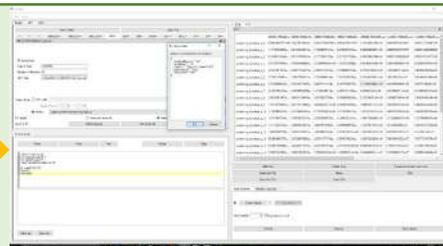
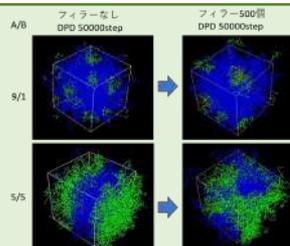
TEMデータ



開発ソフト： Image loader OCTA入力データ (2成分の濃度)



実験データとの連携：  
**ImageLoader**



機械学習との連携：  
**AI Tool**

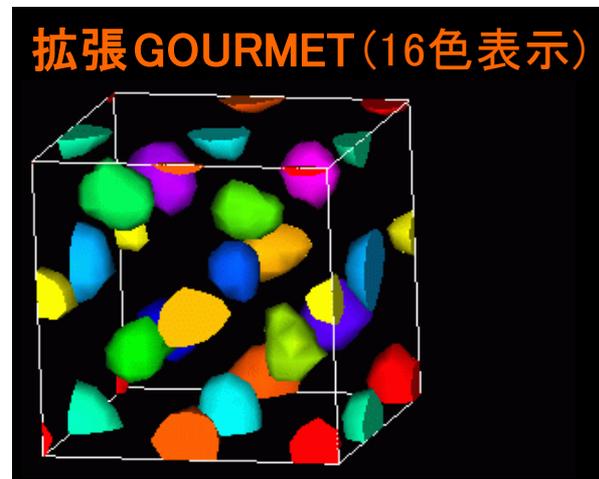
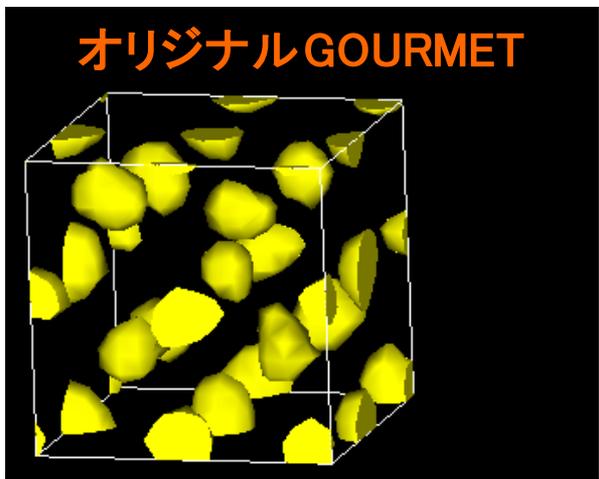
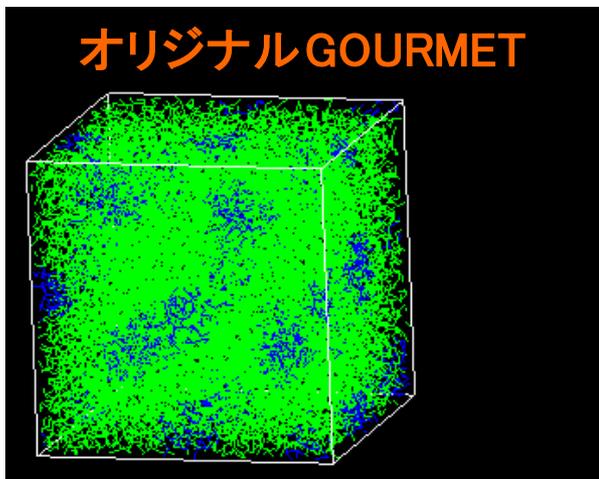
# 拡張GOURMETの機能：界面描画・解析機能

■ 界面：高分子複合材料の機能・性能に大きく影響



拡張GOURMETでは、OCTAのシミュレーション結果に対する  
界面の描画・解析機能を実装

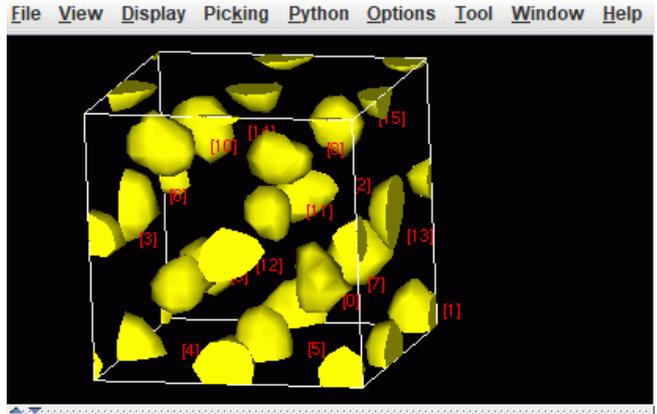
例  $A_5-B_{73}-A_5$  トリブロックポリマーの一軸伸長分子動力学シミュレーション  
ポリマーがマイクロ相分離し、A/B 界面を形成



# 界面解析機能

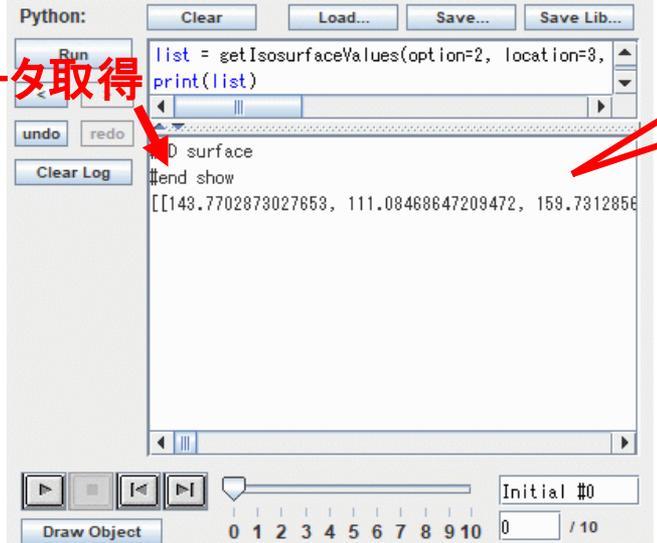
表面積、領域体積、領域重心座標を取得可能

ファイル出力可能



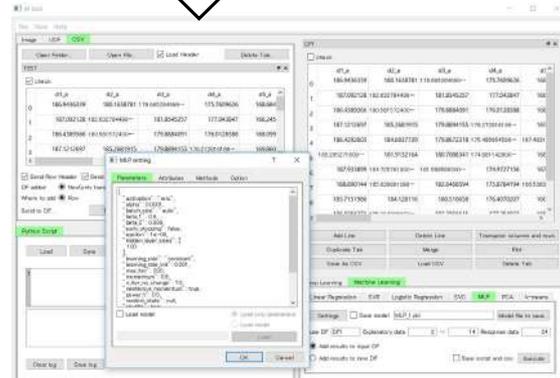
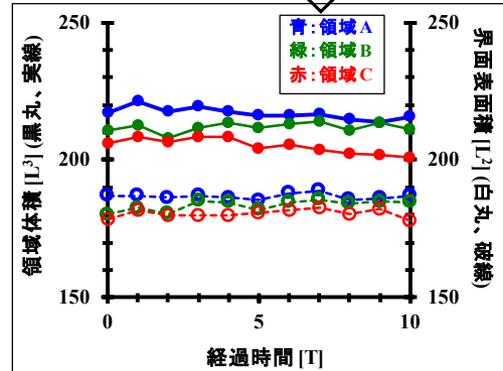
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	time	d1_a	d2_a	d3_a	d4_a	d5_a	d6_a	d7_a
2	0	186.9436	180.1639	178.6653	175.761	168.6848	166.2327	162.23
3	1	187.0921	182.6328	181.8545	177.0438	166.2451	165.063	163.31
4	2	186.4389	180.5816	179.8884	176.0128	168.0994	164.4397	162.33
5	3	187.1213	185.2682	179.8894	176.2728	169.8607	164.8465	163.18
6	4	186.4293	184.6938	179.8672	175.4857	167.4832	163.9122	162.9
7	5	185.2953	181.9132	180.7088	174.8811	168.4552	165.9065	163.26
8	6	187.9339	184.7258	181.5886	174.9727	167.3554	165.377	164.58

データ取得



界面について  
数値解析

AI Toolを用いた  
データ解析



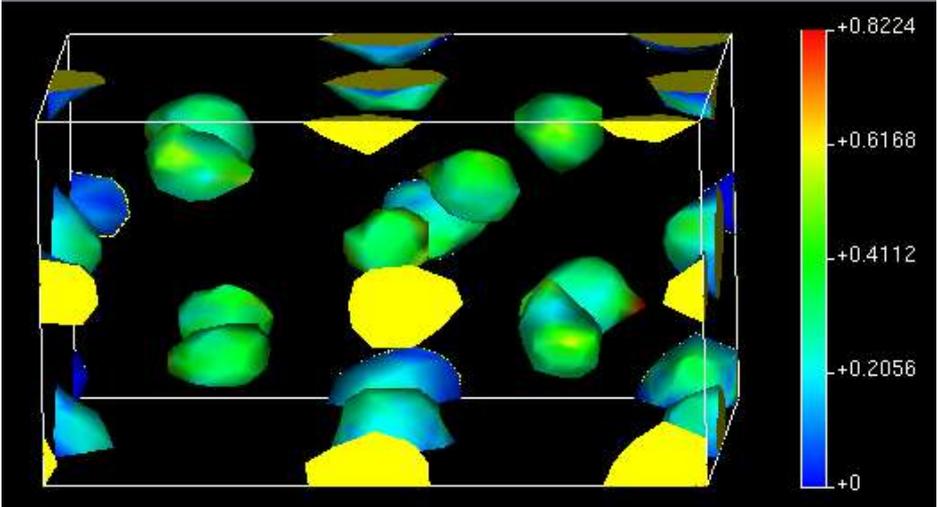
# 曲率算出・表示機能

- 曲率：界面張力、界面エネルギーと関連する重要な要素

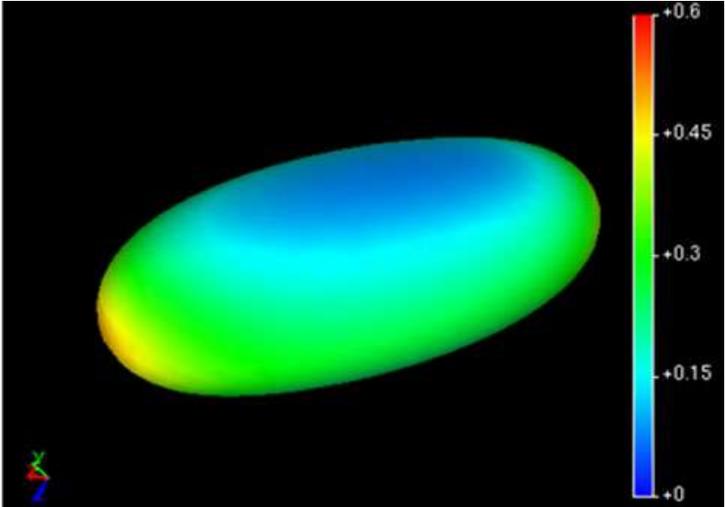


拡張GOURMETでは、界面のGauss曲率及び平均曲率の  
算出・表示機能を実装

Gauss曲率の表示例



平均曲率の表示例



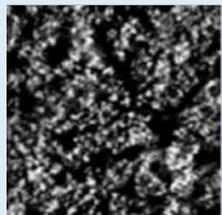
# 拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

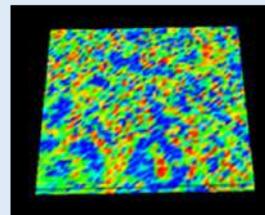
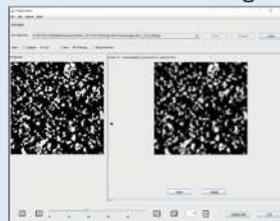


大規模データ対応、  
解析機能強化：  
**拡張GOURMET**

TEMデータ



開発ソフト： Image loader OCTA入力データ（2成分の濃度）



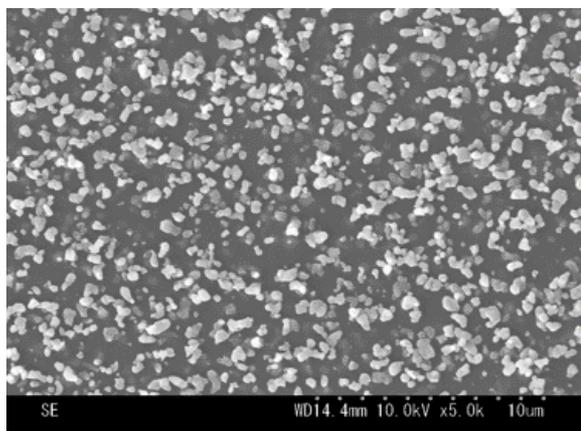
実験データとの連携：  
**ImageLoader**



機械学習との連携：  
**AITool**

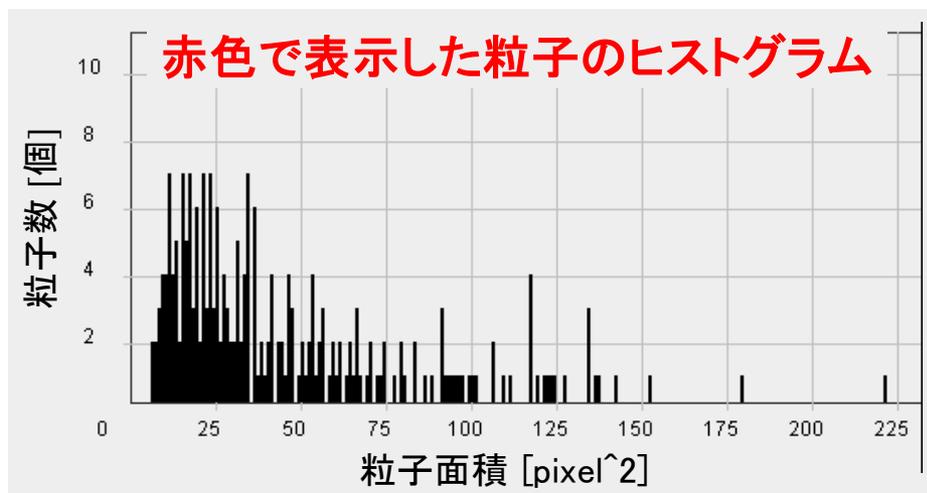
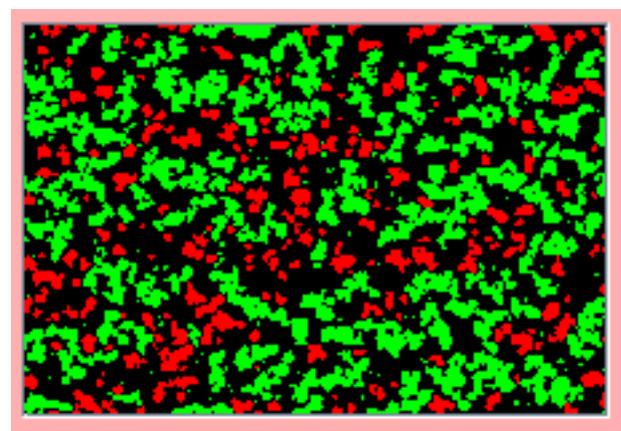
# Image Loaderの機能：画像データの解析

例

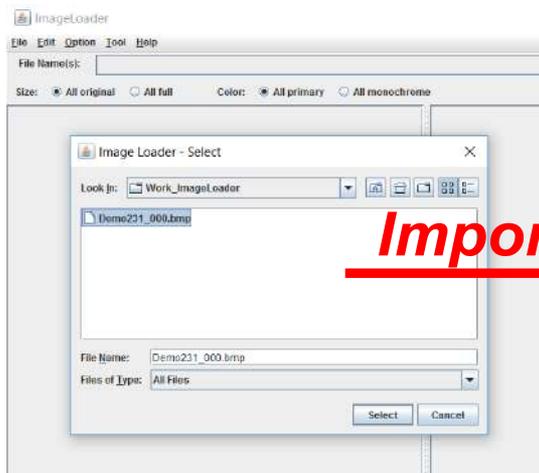


樹脂／無機ファイラー複合材料の  
電子顕微鏡画像

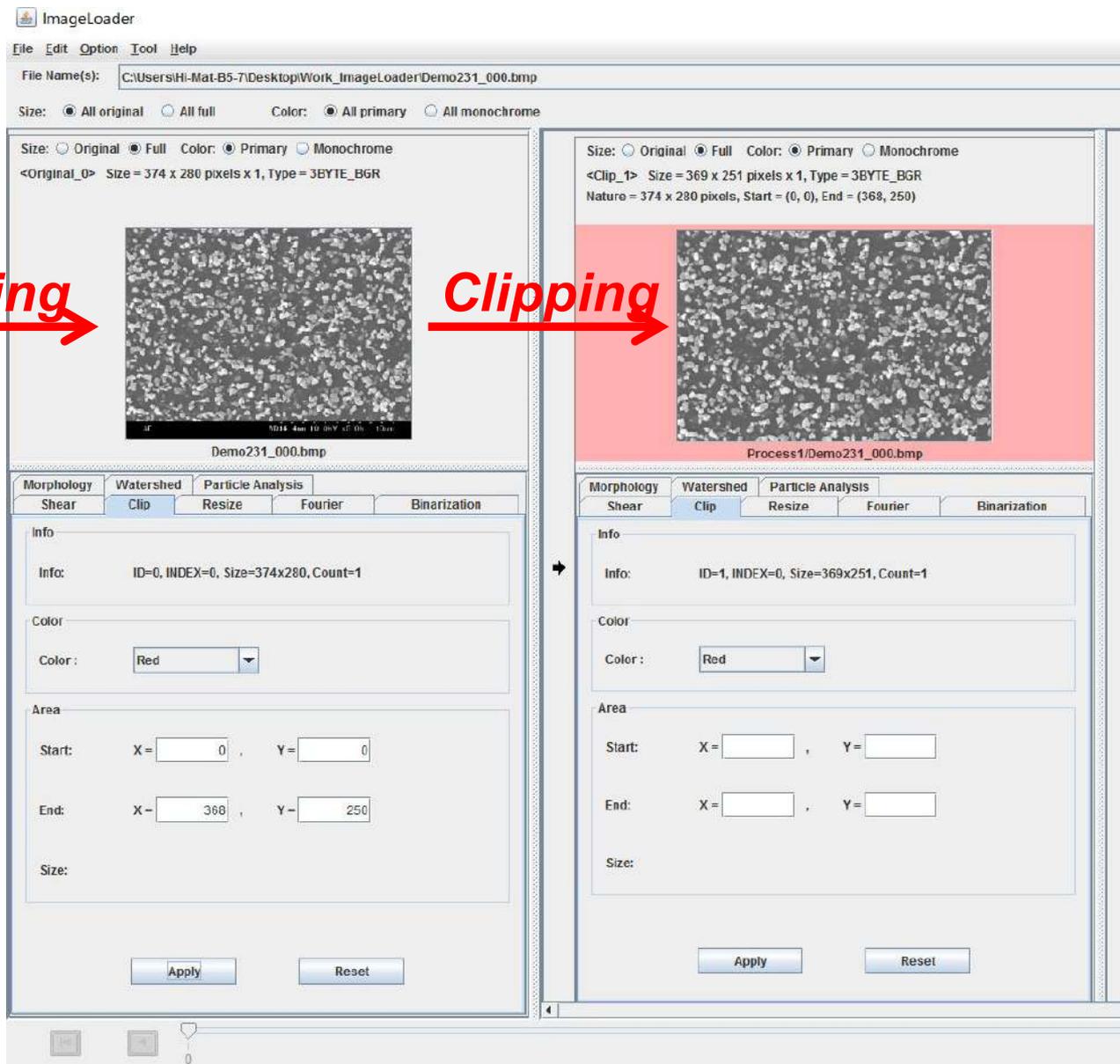
真円度0.5-1.5の粒子を赤色で表示



# 画面イメージ



*Importing*



*Clipping*

# 画面イメージ

## Binarization

The screenshot displays the 'Image Loader' software interface, showing the process of binarizing an image in three stages:

- Stage 1 (Left):** The original image 'Demo231\_000.bmp' is shown. The 'Binarization' tab is selected in the bottom panel. The 'Color' is set to 'Red'. The 'Threshold' is set to 'THRESH\_BINARY' with a value of 125. The 'Ratio' is 60.50% (Lower: 0.00% / Upper: 39.50%).
- Stage 2 (Middle):** The image is processed into a red-tinted image 'Process1/Demo231\_000.bmp'. The 'Histogram' shows a peak at 125. The 'Ratio' remains 60.50%.
- Stage 3 (Right):** The image is processed into a binary image 'Process2/Demo231\_000.bmp'. The 'Histogram' shows a peak at 125. The 'Ratio' remains 60.50%.

Red arrows indicate the flow from the original image to the red-tinted image, and then to the binary image.

# 画面イメージ

## Particle Analysis

ImageLoader - SegmentHistogram

Basic Info: ID = 2, INDEX = 0, Size = 369 x 251 (92,619), Start = 0, Range = 1, Interval = 2

value	count
0	0
1	0
2	0
3	0
4	0
5	0
6	2
7	2
8	3
9	4
10	4
11	7
12	4
13	5
14	2
15	7
16	5
17	7
18	3
19	6

Value: Min: 6, Max: 221, Total: 10,588, Number: 228  
Auto / Manual:  Auto, Range: 1

Method: CV\_CHAIN\_APPROX\_NONE  
Connectivity: 4  
Condition:  Circularity: min = 0.50, max = 1.50  
Color 1: RED, Color 2: GREEN

Summary

Count	Total Area	Average Size	%Area	Std Dev.
228	10588	46	11.43	37.32

Data

No.	Area	Circularity	Radius	Centroid	Color
1	29	1.48662	2.49187	(12, 2)	(132, 160, ...)
2	36	0.539012	4.61081	(20, 2)	(215, 124, ...)
3	51	0.569155	5.34066	(38, 1)	(107, 190, ...)

Select:  Original  Segments  Effect

Buttons: Histogram, CSV, Reset, Apply, Cancel, Copy

① 真円度 0.5-1.5 を赤、  
それ以外を緑に塗り分け

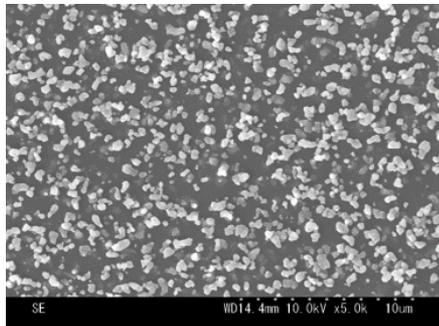
② 粒子の個数 vs 粒子面積の  
ヒストグラム作成

# Image Loaderの機能:

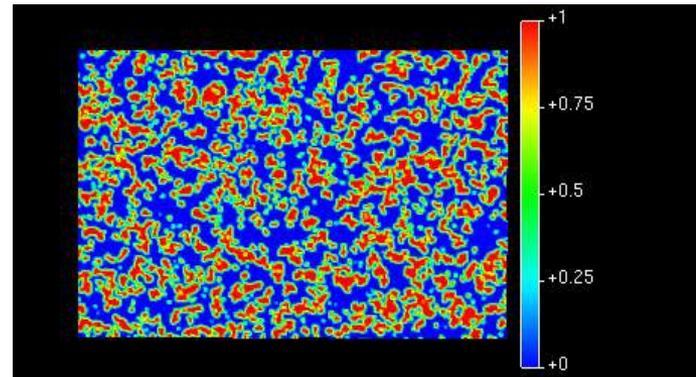
## 画像ファイルからシミュレーション用ファイルへの変換

例

樹脂／無機フィラー複合材料の  
電子顕微鏡画像

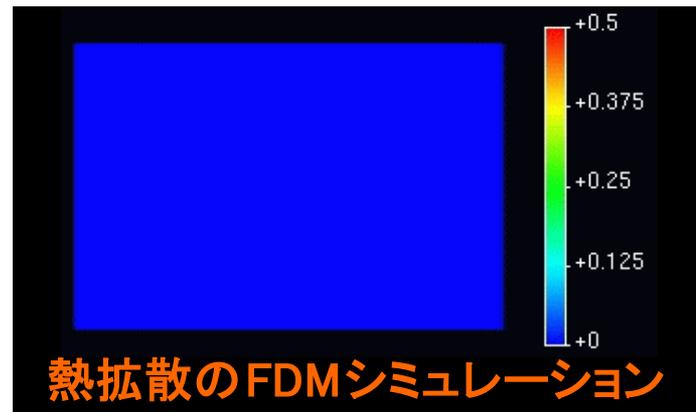


シミュレーション用ファイル (UDFファイル)



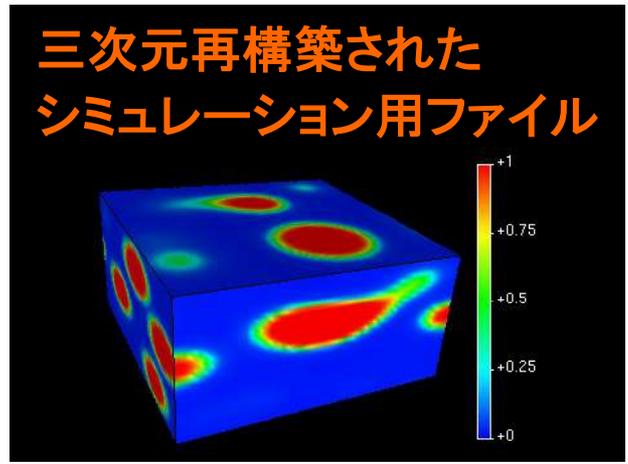
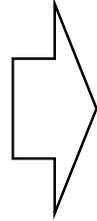
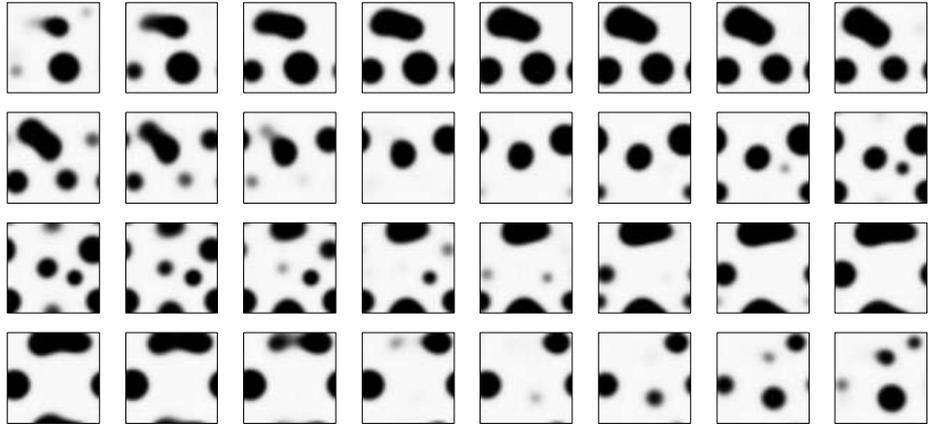
### OCTAによるシミュレーション

- ・MDシミュレーション (COGNAC)
- ・SCFシミュレーション (SUSHI)
- ・FEM, FDMシミュレーション (MUFFIN)

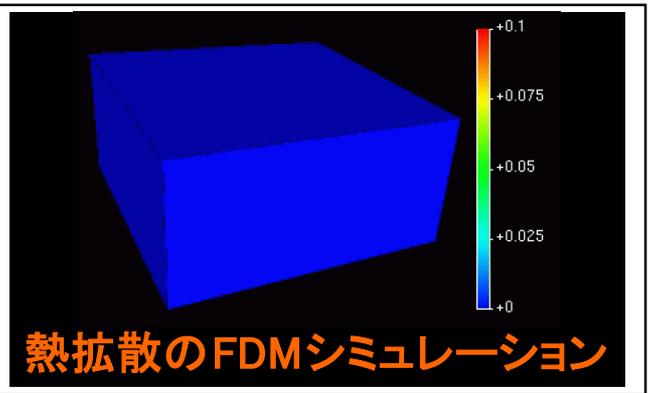


# 応用例：断層画像からの三次元再構築、 シミュレーション用ファイルへの変換

断層画像 (32枚) ※実材料ではなく、モデルの画像



- OCTAによるシミュレーション
- MDシミュレーション (COGNAC)
  - SCFシミュレーション (SUSHI)
  - FEM, FDMシミュレーション (MUFFIN)



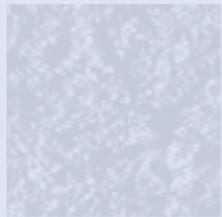
# 拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

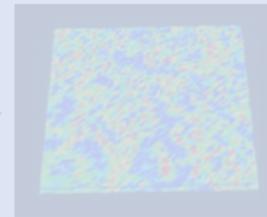


大規模データ対応、  
解析機能強化：  
拡張GOURMET

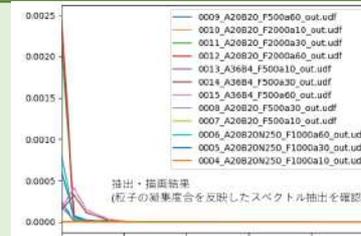
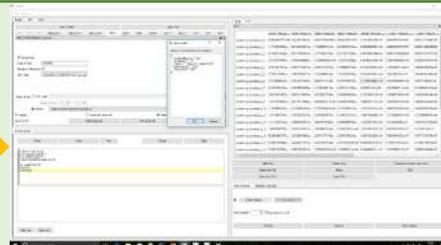
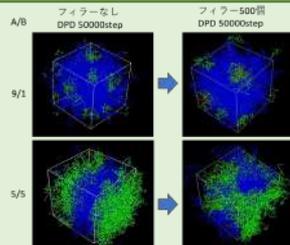
TEMデータ



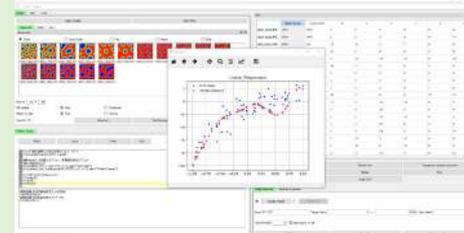
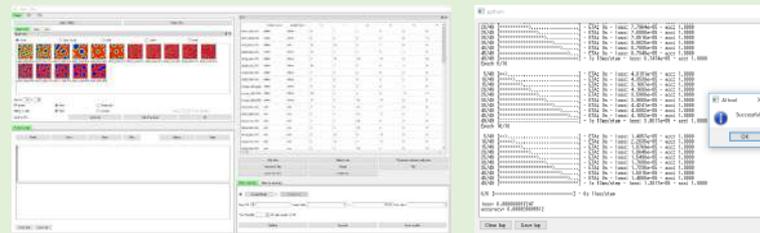
開発ソフト： Image loader OCTA入力データ (2成分の濃度)



実験データとの連携：  
ImageLoader



機械学習との連携：  
AITool



# AI Toolの機能

OCTAシミュレーター出力(構造化データ)、実測画像データ等処理し、機械学習ツールを起動する統合インターフェース

## 単純な配列構造への変換

The screenshot shows the AI Tool interface with several key components:

- Image UDF CSV:** A panel for importing data, showing a list of files (e.g., Demo243\_1\_01.jpg) and options for where to add data (Row or Column).
- Data Frame (DF1):** A table displaying data for various demo files, with columns for file names and numerical values.
- Python Script:** A code editor showing a script for data processing and machine learning.
- Machine Learning:** A section with options for different models, including SVC, MLP, GA, and k-means.

Red arrows and text boxes highlight the workflow:

- データのインポート (CSV、UDF、画像):** Points to the Image UDF CSV panel.
- データフレーム (データの確認と前処理):** Points to the DF1 data frame table.
- Python:** Points to the Python Script editor.
- 機械学習 (Scikit-learn利用) / 深層学習 (TensorFlow利用):** Points to the Machine Learning options.

Red text labels "操作" (Operation) are placed near the arrows indicating the flow of data and actions.

# AI Toolの機能: OCTA のシミュレーション結果からデータフレームを作成

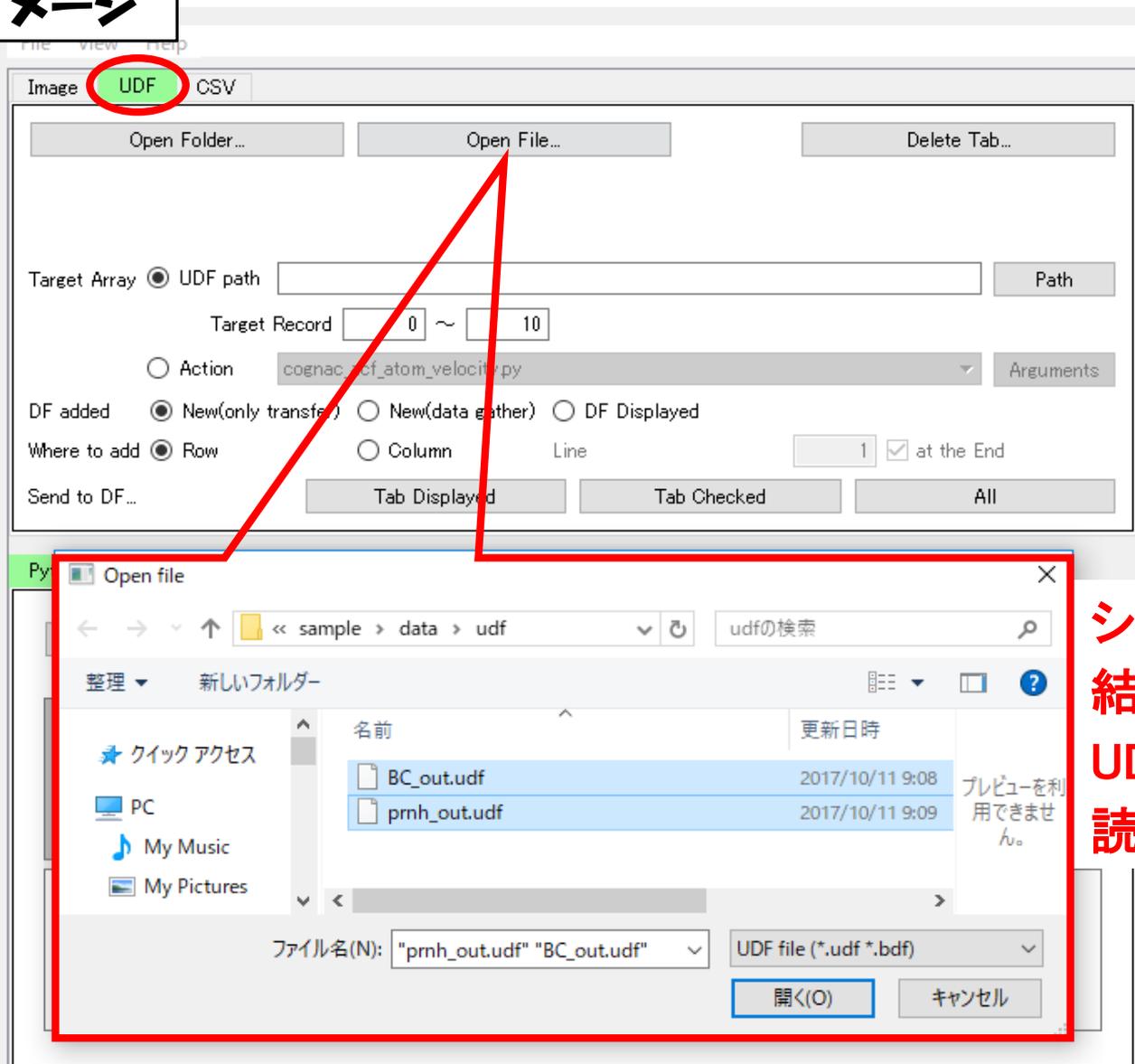
The screenshot displays the AI Tool interface with several key components:

- Left Panel (COGNAC Results):** A text box titled "COGNACによるMDシミュレーションの結果" (Results of MD simulation by COGNAC) lists two files: "BC\_out.udf" and "prnh\_out.udf".
- Center Panel (Data Frame):** A table titled "DF3" showing simulation data. A red arrow labeled "変換" (Conversion) points from the left panel to this table.
- Right Panel (Data Frame Preview):** A box titled "単純なデータフレーム" (Simple Data Frame) highlights the table content.
- Bottom Panel (Python Script):** A section titled "OCTAのシミュレーション結果を機械学習・深層学習するための準備" (Preparation for machine learning/deep learning using OCTA simulation results) with buttons for "Load", "Save", "Clear", "Run", "Debug", and "Step".
- Bottom Right Panel (Deep Learning):** A section titled "Deep Learning" with options for "Create Model" (selected) and "Prediction". It includes input fields for "Input DF" (DF1), "Target data" (1 ~ 20), and "Use Label" (21). Other options include "Test Rate(%)" (10), "add results to DF" (checked), and "Save script and csv" (unchecked). Buttons for "Setting", "Execute", and "Save results" are also present.

Time	BC_density	prnh_density	BC_r2	prnh_r2
25.5	1.74348	1.72731	1.46015605488...	1.54115566717...
26.0				
26.5				
27.0				
27.5				
28.0				
28.5	1.71223	1.75921	1.48643462298...	1.53955098380...
29.0	1.70461	1.7833	1.52581537593...	1.55021917287...
29.5	1.71141	1.78674	1.53762629101...	1.55251918855...
30.0	1.71518	1.74573	1.52468396718...	1.55002407774...

※ BC\_out.udf (Brown-Clarke NPT)、prnh\_out.udf (Parinello-Rahman NPT)、いずれもOCTA/COGNACのサンプルファイル sample¥NPT¥out

# 画面イメージ



シミュレーションの  
結果である  
UDFファイルの  
読み込み

## 画面イメージ

MDシミュレーションの結果(UDFファイル)から  
51-100レコードのTimeデータを取得し、データフレームに転送

Image UDF CSV

Open Folder... Open File... Delete Tab...

BC\_out.udf prnh\_out.udf

BC\_out.udf

check

Engine Type COGNAC

Number of Records 101

UDF Path S:/AITool/sample/data/udf/BC\_out.udf

Target Array  UDF path Time Path

Target Record 51 ~ 100

Action cognac\_acf\_atom\_velocity.py Arguments

DF added  New(only transfer)  New(data gather)  DF Displayed

Where to add  Row  Column Line 1  at the End

Send to DF... Tab Displayed Tab Checked All

DF1

check

	0
51	25.5
52	26.0
53	26.5
54	27.0
55	27.5
56	28.0
57	28.5
58	29.0
59	29.5
60	30.0

## 画面イメージ

Image UDF CSV

Open Folder... Open File... Delete Tab...

BC\_out.udf prnh\_out.udf

BC\_out.udf

check

Engine Type COGNAC

Number of Records 101

UDF Path S:/AITool/sample/data/udf/BC\_out.udf

Target Array  UDF path  Path

Target Record  ~

Action  Arguments

DF added  New(only transfer)  New(data gather)  DF Displayed

Where to add  Row  Column Line   at the End

Send to DF...

DF 1

check

	Time	0
51	25.5	1.74348
52	26.0	1.74019
53	26.5	1.73427
	27.0	1.72933
55	27.5	1.72225
56	28.0	1.72372
57	28.5	1.71223
58	29.0	1.70461
59	29.5	1.71141
60	30.0	1.71518

Densityのデータを取得

入れ子型の複雑な構造の配列データを  
二次元配列構造に変換して転送

UDF

Open Folder... Open File... Delete Tab...

BC\_out.udf prnh\_out.udf

BC\_out.udf

check

Engine Type COGNAC

Number of Records 101

UDF Path 5/AITool/sample/data/udf/BC\_out.udf

Target Array  UDF path Statistics\_Data.Density.Batch.Average Path

Target Record 51 ~ 100

Action cognac\_r2\_range.py Arguments

DF added  New (only transfer)  New(data gather)  DF Displayed

Where to add  Row  Column Line 1  at the End

Send to DF... Tab Displayed Tab Checked All

DF1 DF2

DF2

check

	R2_rec_0	R2_rec_1	R2_rec_2
BC_out.udf	1.43864770991064	1.422914308858...	1.44096146738

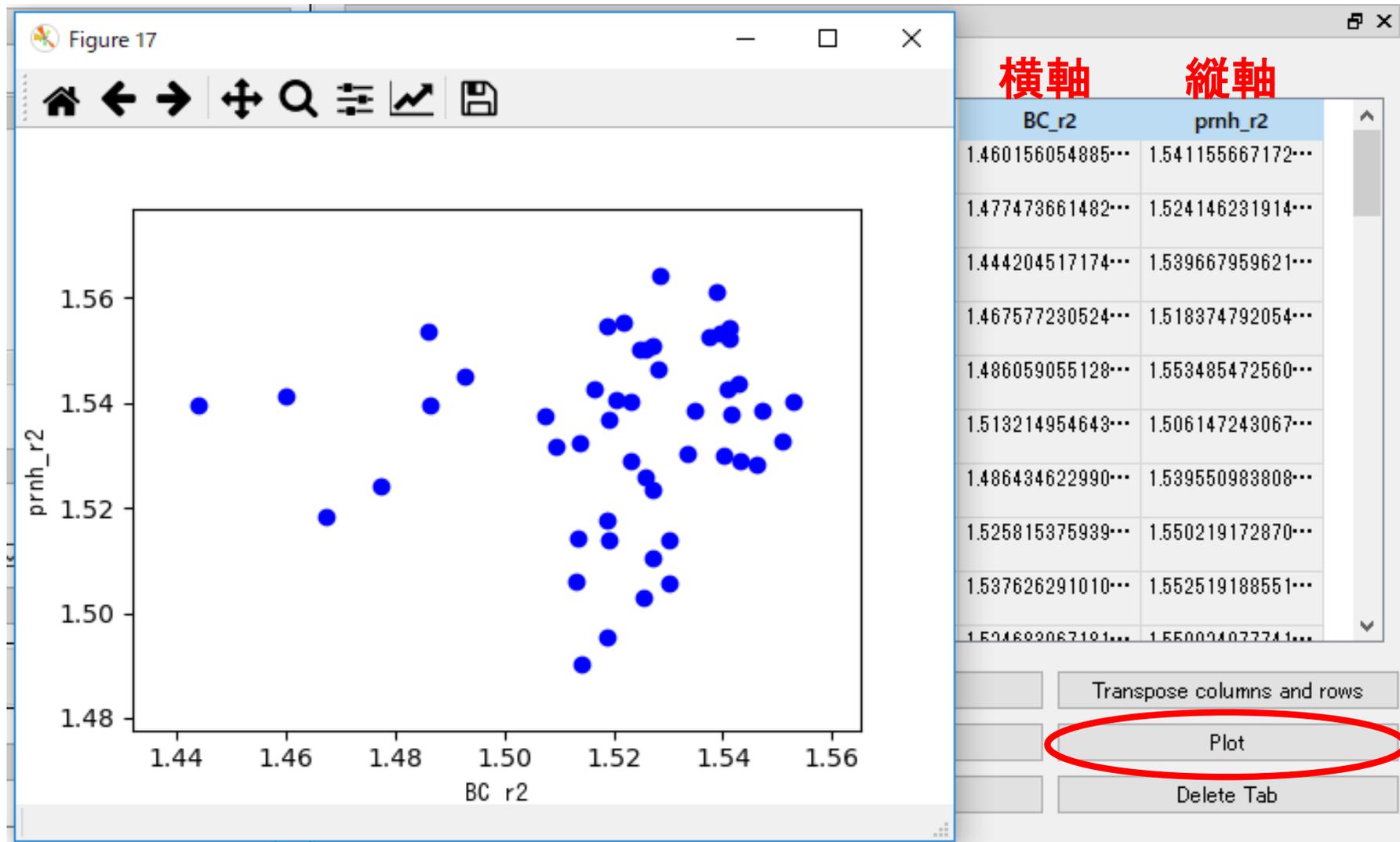
0-100の各レコードで  
処理を行い、  
得られた $\langle R^2 \rangle$ 値を  
データフレームに転送

### スクリプト処理 (Action) の設定

- 末端間距離二乗値の平均 $\langle R^2 \rangle$ を計算

# 画面イメージ

## 解析対象のデータをグラフを描いて確認



# AI Toolの機能：画像ファイルからデータフレーム作成

サンプル毎の配列データ  
への変換

The screenshot shows the AI tool interface with two main windows. The left window displays SEM images for Material A and Material B. The right window shows a data frame with columns for image IDs and numerical values. A red arrow points from the image files to the data frame.

	4090	4091	4092	4093	4094	4095
Demo243_2_01.jpg	125.0	175.0	165.0	98.0	110.0	129.0
Demo243_2_02.jpg	228.0	28.0	0.0	60.0	88.0	98.0
Demo243_2_03.jpg					37.0	153.0
Demo243_2_04.jpg					92.0	92.0
Demo243_2_05.jpg					59.0	40.0
Demo243_2_06.jpg	39.0	145.0	157.0	91.0	63.0	115.0
Demo243_2_07.jpg	122.0	126.0	154.0	136.0	7.0	53.0

**データフレーム**

顕微鏡画像のファイル(jpgファイル)から  
二次元配列構造のデータフレームを作成

機械学習解析・深層学習解析

# 応用例：画像ファイルからデータフレーム作成

The screenshot shows the 'AI tool' interface with several panels:

- Image Panel:** Displays 'Material\_AのSEM画像(10枚)' and 'Material\_BのSEM画像(10枚)'. Below the images are buttons for 'Send to DF', 'Selected', 'Tab Displayed', and 'All'.
- DFI Panel:** A data frame viewer showing a table of data. A red arrow points from the image thumbnails to this panel, which is labeled 'データフレーム' (Data Frame). The table contains columns for image IDs (e.g., 4090-4095) and numerical values.
- Python Panel:** Contains a red text box: '画像の数値データ変換は、Image Loaderの粒子解析機能を使う方法もある' (Image numerical data conversion can also be done using the particle analysis function of Image Loader). Below this is a workflow: a grayscale SEM image is processed into a color-coded particle analysis image (red and green particles on a black background), which is then used to generate a histogram.
- Histogram Panel:** A histogram titled '赤色粒子(真円度0.5-1.5)のヒストグラム' (Histogram of red particles (circularity 0.5-1.5)). The y-axis is '粒子数 [個]' (Number of particles [pieces]) and the x-axis is '粒子面積 [pixel^2]' (Particle area [pixel^2]).
- CSV Panel:** A red arrow points from the histogram to a panel labeled 'CSVファイル' (CSV File), indicating the output format.

# データフレーム上のデータを用いた 機械学習・深層学習解析

The screenshot shows an AI tool interface with several panels:

- Image Panel:** Displays image processing options like 'Material A', 'Material B', and color/gray scale selection. It shows a grid of image thumbnails.
- DF1 Panel:** A data frame table with columns for image names and numerical values. A red arrow points from the 'Python' label to this panel.
- Python Script Panel:** Contains a code editor with Python code for data processing and machine learning. A red arrow points from the 'Python' label to this panel.
- Machine Learning Panel:** Shows options for 'Linear Regression', 'SVR', 'Logistic Regression', 'SVC', 'PCA', and 'k-means'. A red arrow points from the 'Python' label to this panel.

**Python**

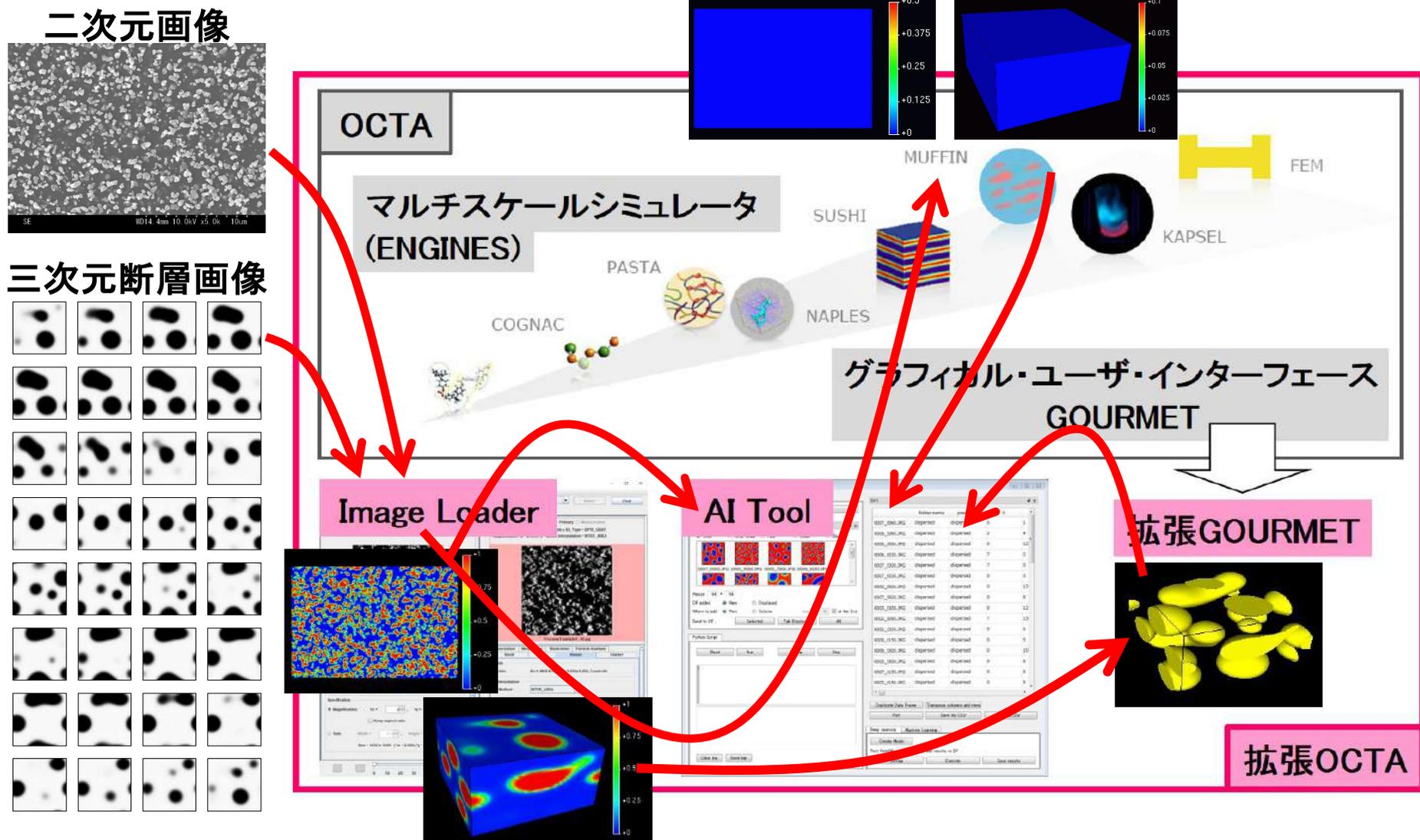
**データフレーム**

**機械学習 (Scikit-learn利用)**  
**深層学習 (Keras/TensorFlow利用)**

Pythonスクリプトにより  
テンプレートにない解析も実施可能

基本的な機械学習、深層学習のテンプレートを用意  
⇒ 設定を少し変更するだけで解析を実施できる。

# まとめ：実験・シミュレーション・機械学習の連携



# OCTA/拡張OCTAの入手法

- OCTA-BBSよりダウンロード可能  
(<http://49.212.191.63/phpBB/>)
  - OCTA（ユーザー登録不要）
    - 現バージョン OCTA8.3
    - 近日公開予定 OCTA8.4（拡張OCTAの機能を一部含む）
  - 拡張OCTA（ユーザー登録必要）
    - OCTA8.3U2Mより
- 利用規約
  - 両者とも「OCTAの利用規約」に従う

OCTA/拡張OCTAをぜひお試しく下さい！