

- OCTA 講習会 & トレーニング 2022 -

第1回

2022年1月14日(金)

13:30-17:00

座学 + インストール解説

第2回

2022年1月21日(金)

13:30-17:30

実習

OCTAは経済産業省の提案による産学連携プロジェクトで開発されたソフトウェアに対する統合的なシミュレータです。マルチスケールシミュレーションだけでなく、シミュレーション結果の機械学習も可能です。今回の講習会は、OCTAを使い始めたばかりの方、これからOCTAを使ってみようとする方、あるいは「そもそもOCTAって何？」という興味を持たれた方など、主に初心者向けの内容です。

参加無料
オンライン開催

両日参加:定員40名
第1回のみ:定員60名



申込URL: <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R03/OCTA-hands-on/>

2022年1月12日(水)17:00迄。参加者多数の場合には先着順とさせていただきます。

プログラム

第1回

1月14日(金)

- 13:30-13:40 挨拶 (東北大 川勝 年洋)
- 13:40-14:10 OCTAの概要 (産総研 森田裕史)
- 14:10-14:40 拡張OCTAの概要 (産総研 青柳 岳司)
- 14:40-15:00 休憩
- 15:00-15:40 COGNACの機能と事例紹介 (産総研 青柳 岳司)
- 15:40-16:20 SUSHIとSOBAの機能と事例紹介 (ADMAT 本田 隆)
- 16:20-17:00 総合質疑応答 & OCTAインストール解説

第2回

1月21日(金)

- 13:30-16:00 OCTAトレーニング 1 (JSOL 小沢 拓)
 - ・ファイル操作や可視化、Pythonスクリプトの使い方
 - ・COGNACとSUSHIを用いたマルチスケールシミュレーション
 - ※ 他講師がサポートします
- 16:00-16:15 休憩
- 16:15-17:00 OCTAトレーニング 2 (JSOL 小沢 拓)
 - ・AIToolを用いたシミュレーション結果の機械学習 (画像分類)
 - ※ 他講師がサポートします
- 17:00-17:30 総合質疑応答

共催: 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/>
 極限環境対応構造材料研究拠点 (RISME) <http://risme.imr.tohoku.ac.jp/>
 協賛: 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター (CCMS) <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/>

※PCoMS IPD対象者の方が受講後に所定の報告書を提出された場合は、IPDプログラム 選択科目カテゴリー A&B 1単位 として認定されます。



問合せ: 計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>
 Email: pcoms@imr.tohoku.ac.jp

概要

「ソフトマテリアルのための統合シミュレータ：OCTA」は経済産業省およびNEDOの出資による「高機能材料設計プラットフォームの研究開発」（通称「土井プロジェクト」）の成果物として2002年に公開されました。プロジェクト終了後もバージョンアップが続けられ、2021年6月には最新版のOCTA8.4がリリースされました。また、2017年7月には、OCTAの応用事例をまとめた成書である「高分子材料シミュレーション-OCTA活用事例集」（化学工業日報社）の増補版も発行されました。2016年7月には同書の英訳に相当する"Computer Simulation of Polymeric Materials. Applications of the OCTA System"もSpringer社から出版されています。

さらに、経済産業省およびNEDOの出資により、2016年度に産業技術総合研究所を中心として始動した「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」においてAI活用による材料開発の加速などを目的としてOCTAの機能拡張が実施され、その成果の一部はOCTA8.4にも搭載されています。

これらの背景のもとに、このたび新たな拡張機能を含めたOCTAの講習会とトレーニングを開催します。OCTAを使い始めたばかりの方、これからOCTAを使ってみようとする方、あるいは「そもそもOCTAって何？」という興味を持たれた方など、主に初心者向けの内容です。1月14日（第1回）はシミュレーションに用いられている理論的背景の解説を行い、1月21日（第2回）は実際にOCTAを使って操作法を学んでいただきます（各自のPCにOCTAをインストールして頂きます）。

1月21日（第2回）の実習の時間では、

- ・OCTAの代表的な入出力ファイルとその可視化方法
- ・OCTA上でのPythonスクリプトの使い方
- ・COGNAC（分子動力学エンジン）とSUSHI（平均場法エンジン）を用いたマルチスケールシミュレーション
- ・AITool（機械学習ツール）を用いたシミュレーション結果の機械学習（画像分類）

などを取り上げます。

また、最後にOCTAに関する総合的な質疑応答の時間を取り、ユーザー、エンジン開発者との直接的な議論の場を設けます。

各自でご用意いただく物

トレーニングではOCTA8.4を用います。

以下の手順を参考に、できるだけ事前にインストールを行っておいてください。

トレーニングで用いるOCTAのダウンロード方法

◆対応OS

今回の講習会はWindowsOSにて説明を行います。テキストはWindows向けの記載です。

当日の実習のサポートOSはWindowsに限定させていただきます。

ご用意いただくWindowsOSは8、10のいずれかでお願いいたします。

Linux/Macについては、事前にインストールしていただき、問題が生じた際にご自身で対応いただける場合は受講可能です。講習会当日、講師によるサポートはできませんのでご注意ください。拡張OCTA(Alttool)の機能はLinuxでは動作確認済みですが、Macでは未確認です。

(1)OCTA-BBSのサイトにアクセスしてください。

<http://49.212.191.63/phpBB/>

※初めての方は上記サイトでアカウント登録を行うことを推奨します。

（インストーラのダウンロードのためには不要です）

(2)上記サイトにあるOCTA8.4の中に入って下さい。

「OCTA8.4 for Windows is released!」に含まれる

「OCTA84_WIN64.exe」がインストーラです。

ダウンロードしたインストーラを実行して、インストールしてください。

対象OSはWindows 8, 10の64bit版となります。

(3) インストール後、COGNACなどのエンジン実行時にエラーが出る場合、

「Microsoft Visual C++ 再頒布可能パッケージ（2015, 2017）」

をインターネットで検索、ダウンロードしてインストールしてください。