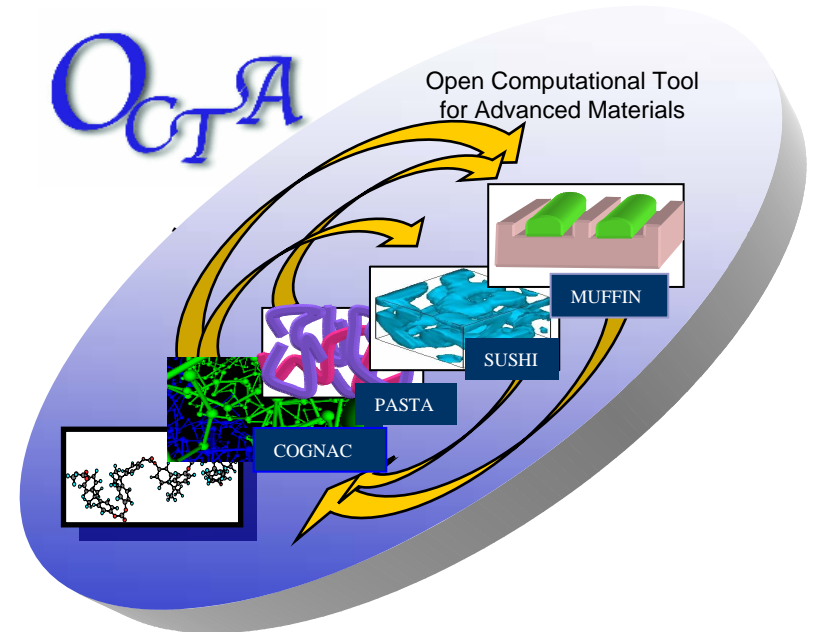


# — — Octa — —

## Open Computational Tool for Advanced Materials

- 開発者
  - 高機能材料設計プラットフォームの開発プロジェクト 代表 土井正男
- 概要
  - 高分子および高分子をベースとする材料の動的挙動のシミュレーション
  - オープンな仕組みによるマルチスケール・マルチフィジクスシミュレーション
  - 他のシミュレータとの連携を意図した設計
  - 実験装置との連携
- アルゴリズム
  - 粗視化分子動力学、散逸粒子力学
  - 高分子の自己組織構造に対する動的平均場近似法
  - 流体力学、弾性力学、相分離、拡散など連続体モデルについては有限要素法および差分法
- 計算規模(分子動力学の例)
  - パソコン、ワークステーションの利用を想定した場合、1万粒子程度
  - スーパーコンピュータを利用した場合100万粒子程度



- どのようなことが期待されるか？
  - 高分子、微粒子分散系などメソ領域の構造が重要な材料の設計
  - ミクロ、メソ、マクロの様々な階層を自由に行き来する技術(シームレスズーミング)の構築
  - インクジェットプリント、ナノインプリントなど材料とプロセスのマッチングがキーとなる技術の開発支援