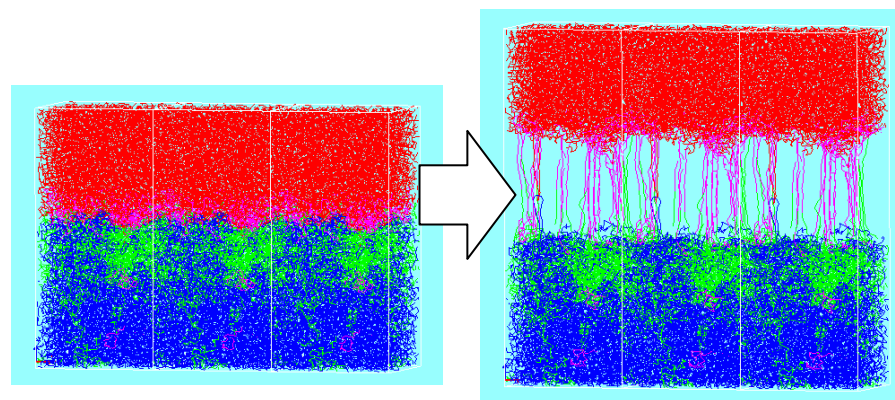


分野名: ナノ

粗視化分子動力学計算

- プログラム名: Octa
- 開発
 - 高機能材料設計プラットフォームの開発プロジェクト
ト研究員 旭化成 青柳岳司
- 概要
 - 高分子、ソフトマテリアル、ナノハイブリッド材料設計を目的とする
 - Octa システムのエンジンのひとつとして開発され、他の階層のシミュレータと組み合わせたマルチスケールシミュレーションが可能
- アルゴリズム
 - C++ によるコーディング
 - NVT、NPT、NVE等各種のアンサンブルに対応
 - 任意の鎖構造のシミュレーションに対応
 - 伸張、ずりなど構造変形のシミュレーションに対応
 - 散逸粒子動力学法などの粗視化モデルに対応
- 現状での計算規模
 - パソコンレベルで最大 10 万粒子程度
 - スパコンレベルで最大 100 万粒子程度
- 次世代スパコンでの計算規模
 - 1億粒子系



高分子材料の接合面の剥離

- どんなことが期待されるか？
 - nmオーダーから μ mオーダーまでのスケールを分子描像で扱うことが可能になり、分子の階層と連続体の階層とを自然につなぐことができる。
 - 分子描像に基づいたナノ構造形成過程のリアルタイムシミュレーションが実行できる。
 - ナノ構造をもつ高分子材料の物性予測および材料設計が可能となる。