

アドバンスソフト株式会社

ソフトマテリアル統合シミュレータ

Advance / OCTA

Advance/OCTA(Open Computational Tool for Advanced material technology)は、ソフトマテリアルに対する統合シミュレータです。ソフトマテリアルは数万、数億の原子を含む複雑な分子からできています。ソフトマテリアルはさまざまなスケールの中間構造を持っており、それらの特徴的な時間はナノ秒から年のオーダーに及びます。ソフトマテリアルを扱う理論モデルもまた多様です。分子モデル、粗視化分子モデル、連続体モデル、およびそれらの混合モデルなどソフトマテリアルの中間構造を扱うための多様なモデルを統合化することでマルチスケール問題を取り扱います。

Advance/OCTAにより、ソフトマテリアルのミクロな分子特性とマクロな材料特性を仮想実験技術によって結びつけ、自動車、家電から医療機器にいたるまでのさまざまな産業における材料設計にご利用いただけます。

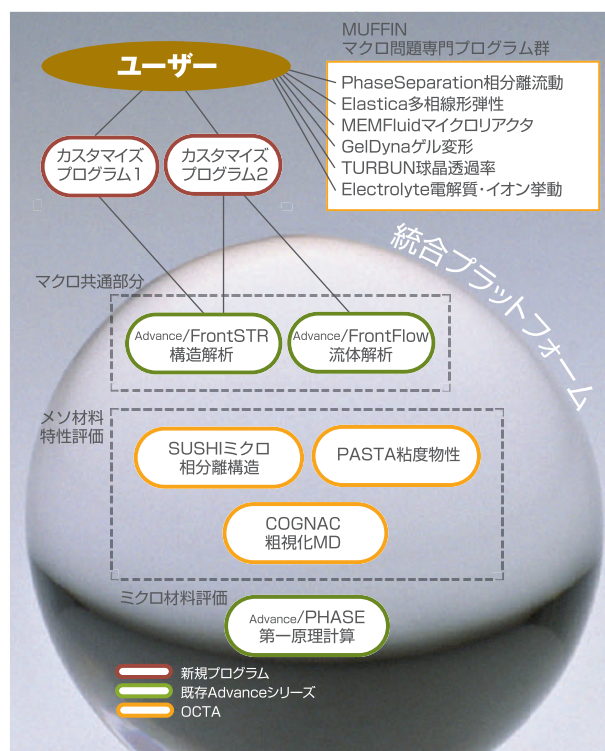
Advance/OCTAのソフトウェア構成

OCTAはCOGNAC、PASTA、SUSHI、MUFFINというミクロからマクロ領域向け4つのシミュレーションエンジンとしてGOURMET というシミュレーションプラットフォームによって構成されます。

Advance/OCTAでは、これらソルバーと革新ソフトプロジェクト*の成果である3つの解析ソフトウェア、構造解析ソルバーAdvance/FrontSTR、流体解析ソルバー Advance/FrontFlow、ナノ材料第一原理シミュレータAdvance/PHASEとのインターフェースが提供されます。

Advance/OCTAの特長

- ① 既存のOCTAとインターフェースをとったアドバンスソフトのアプリケーションによる解析に対応。
- ② テクニカルサポートの提供。
- ③ ご要望に応じた受託開発・受託解析に対応。



Advance/OCTA関連ツール

適用分野

分野	解析用途の例
化学・石油	溶媒/溶質の設計、ナノ繊維材料(耐熱、機能性、吸湿)
塗装・インキ	インクジェット式・ドラム式等の塗布・乾燥過程の機構解明
電気・電子	マイクロ液体プロセス、MEMS
材料	次世代FRPの素材開発、射出形成可能なゴム分散素材の開発
医薬	医療機器で利用する生体物性、ドラッグ・デリバリー・システム
エネルギー	燃料電池のポーラス材料の特性、材料接合面の機構解明
自動車	自動車で利用されている複合材料の物性

Advance/OCTAを構成するソフトウェア

ソフトウェア名		内 容	適用分野
Muffin	Phase Separation	多相高分子流体シミュレータ	高分子溶液系での相分離
	Electrolyte	多成分電解質流体シミュレータ	電解質中のイオンの動き等
	MEMFluid	マイクロ電気化学チップ流体シミュレータ	マイクロリアクタ等
	Elastica	多相線形弾性体シミュレータ	PhaseSeparation・SUSHI結果解析の構造解析
	GelDyna	ゲル弾性体の大変形ダイナミクスシミュレータ	高分子ゲルの膨張と表面の折れ畳み
	Turban	光透過性シミュレータ	球晶充填構造のポリエチレンの光透過性解析
SUSHI		高分子材料のメソスコピック構造予測シミュレータ	マイクロ相分離、ミセル構造
PASTA		高分子溶融体レオロジー特性予測シミュレータ	ずり粘度、緩和弾性率、一軸伸張粘度
COGNAC		粗視化分子動力学シミュレーションプログラム	溶融高分子、液晶、マイクロ相分離

関連ソフトウェア

ソフトウェア名	内容	適用分野
Advance/PHASE	ナノ材料第一原理計算シミュレータ	ナノデバイス開発支援のための、材料探索、物性予測、機能設計に関するソフトウェア。第一原理計算により500原子程度まで取り扱い可能。
Advance/FrontFlow	次世代流体解析シミュレータ	乱流、燃焼、噴霧、混相、騒音、固体応力など複雑なマルチスケール現象が混在する流れ場を解析する総合的ソフトウェア。
Advance/FrontSTR	構造解析用有限要素解析シミュレータ	静的弾性解析、固有値解析を並列計算で取り扱える構造解析ソフトウェア。

稼働環境

OS: Windows XP, RedHatLinux
 必要メモリ: 約256MB
 空きHDD: 1GB
 CPU: Pentium4 2.0GHz以上
 グラフィックスボード*: OpenGL対応
 必要ソフトウェア*: JavaRunTimeEnvironment, OpenGL
 *公開版GOURMETを利用する場合には、上記のグラフィックスボードおよびソフトウェアが必要です。



- 受託開発・受託解析も承ります。
- OCTAは、名古屋大学 土井正男教授(現東京大学)をリーダーとして、経済産業省、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の出資により化学技術戦略推進機構(JCII)において実施された産学連携プロジェクト(1998年8月から2002年3月の4年間)で開発されたソフトマテリアルに対する統合的なシミュレータであり、<http://octa.jpl>において公開されています。アドバンスソフト株式会社は、OCTAの商用化の承認をOCTA 管理委員会から得て「Advance/OCTA」として販売、サービスを提供しています。
- Advance/FrontFlow/red、Advance/FrontFlow/blue、Advance/FrontSTR、Advance/PHASE、Advance/BioSation、Advance/ProteinDF、Advance/PSE Workbenchは、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省 ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトおよび文部科学省次世代 IT基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの成果(ソフトウェア)をアドバンスソフトが商品化したものです。アドバンスソフトはこれらのプロジェクトに参加しソフトウェアの開発を担当しましたが、その成果を独自に改良して商用パッケージ ソフトウェアとし、販売保守を行っております。
- 記載されている商品名や会社名は各社の商標または登録商標です。

octa2_0706.03



アドバンスソフト株式会社

〒107-0052 東京都港区赤坂1-9-20第16興和ビル南館7階
 (営業) TEL:03-5570-1681 FAX:03-5570-1683

URL <http://www.advancesoft.jp/>
 E-mail office@advancesoft.jp