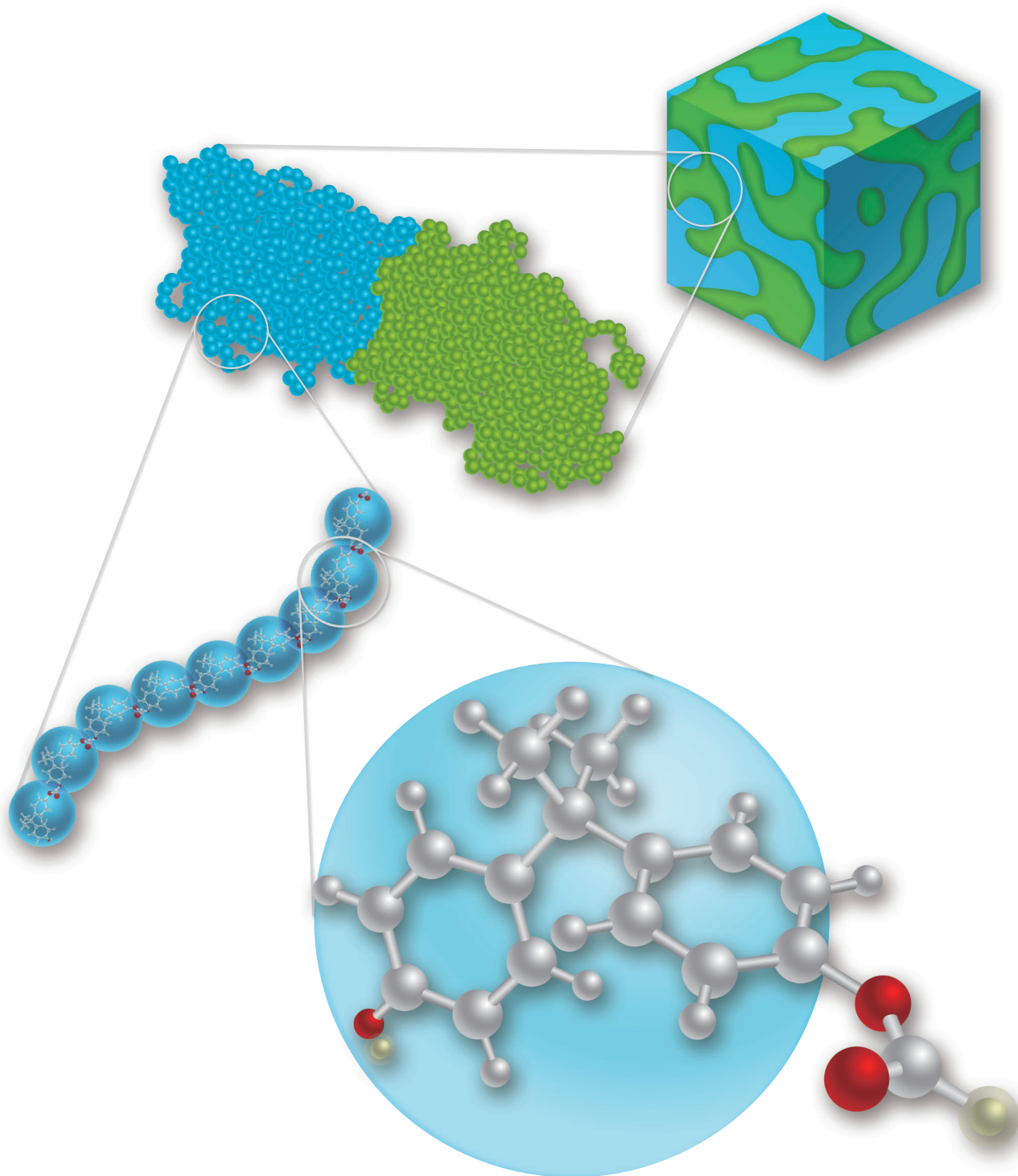


マルチスケールシミュレーションソフトウェア

J-OCTA[®]



ミクロな分子特性からマクロな特性まで

マルチスケールシミュレーションソフトウェア

J-OCTA[®]とは

J-OCTAは、材料設計や創薬・製剤のためのマルチスケールシミュレーション・ソフトウェアです。

様々なスケールのシミュレータを共通のプラットフォーム上で連携させることで、様々な物理量や物性の評価、メカニズム解析が可能です。

データサイエンス機能も搭載し、マテリアルズ・インフォマティクスやAI創薬などの最先端の研究開発をサポートします。

樹脂やゴム、生体分子と薬剤、接着剤、ナノコンポジット、コロイド溶液、化粧品、リチウムイオン電池、太陽電池、有機ELなど、幅広い用途を対象としています。

量子力学

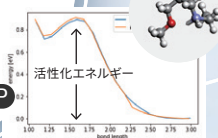
(1nm)

電子状態

相互作用

化学反応

SIESTA ABINIT-MP



分子動力学

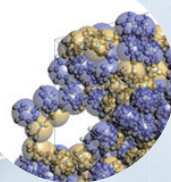
(10nm)

分子運動

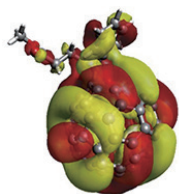
熱力学特性

創薬・製剤

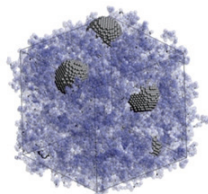
COGNAC VSOP GENESIS



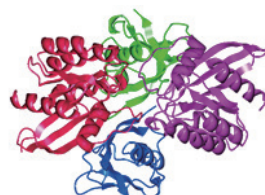
マテリアル・サイエンス & ライフ・サイエンスへの適用



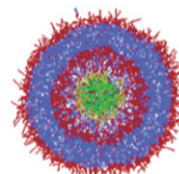
電子状態



フィラー分散



生体分子



リボソーム、脂質ナノ粒子

材料設計のためのモデリング、解析ツール

- 分子や結晶のモデリング、粗視化モデリング、反応計算
- 多様な物理量・物性評価のためのシミュレーションエンジン群
- 相分離構造の予測や複合材料のモデリング、有限要素法のメッシュ出力
- フィラー分散や塗布乾燥などの材料プロセスシミュレーション

生体分子のモデリングや創薬・製剤のための分子シミュレーション

- 中分子～高分子などのモダリティ対応、ドラッグデリバリーシステム
- タンパク質とリガンドのドッキング構造の探索、結合親和性評価のための自由エネルギー計算
- 成分間の親和性、相溶性の評価
- 生体膜のモデリング

J-OCTA[®]

粗視化モデル

(100nm)

相分離

生体膜

レオロジー

COGNAC VSOP

NAPLES/PASTA

SUSHI

連続体モデル

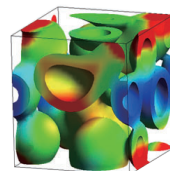
(1 μ m)

複合材料

コロイド分散液

薄膜・液滴

MUFFIN VSOP-PS



J-OCTAの強み

マルチスケールシミュレーションのための統合プラットフォーム

量子から連続体まで幅広いスケールに対応が可能です。それぞれのスケールで適切な手法が選択可能で、スケール間の連携にも対応しています。力学、熱、光学、電気など多様な物性推算による材料解析や、創薬・製剤分野の研究開発をサポートします。

解析初心者をサポート

分子シミュレーションに必要なノウハウを事例DBやシナリオ(ワークフロー)機能でご提供します。初心者の方でもスムーズにモデリングや解析に取り組むことが可能です。



様々な分子シミュレーションソフトへの対応

一般的によく使用されている分子シミュレーションソフト (Gaussian, LAMMPS, GROMACSなど) とのインターフェースをご提供します。ローカルでの実行の他、リモートサーバでの実行 (ジョブ管理システム) にも対応しています。

シミュレーションとデータサイエンス技術の連携

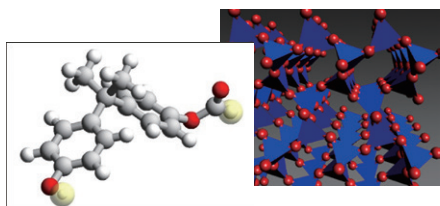
それぞれの強みを活かした運用が可能です。ハイスループット計算機能を用いた物性DBの構築や、機械学習機能による分子構造から物性の予測が可能です。シミュレーションを加速化するための機械学習機能も含まれます。

材料設計分野と生命科学分野にご利用可能

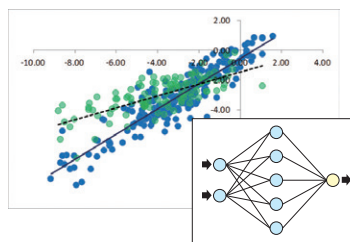
解析の目的に応じた使いやすいモデラや解析ツールをご提供します。



データサイエンス機能 (機械学習機能)



分子・結晶構造



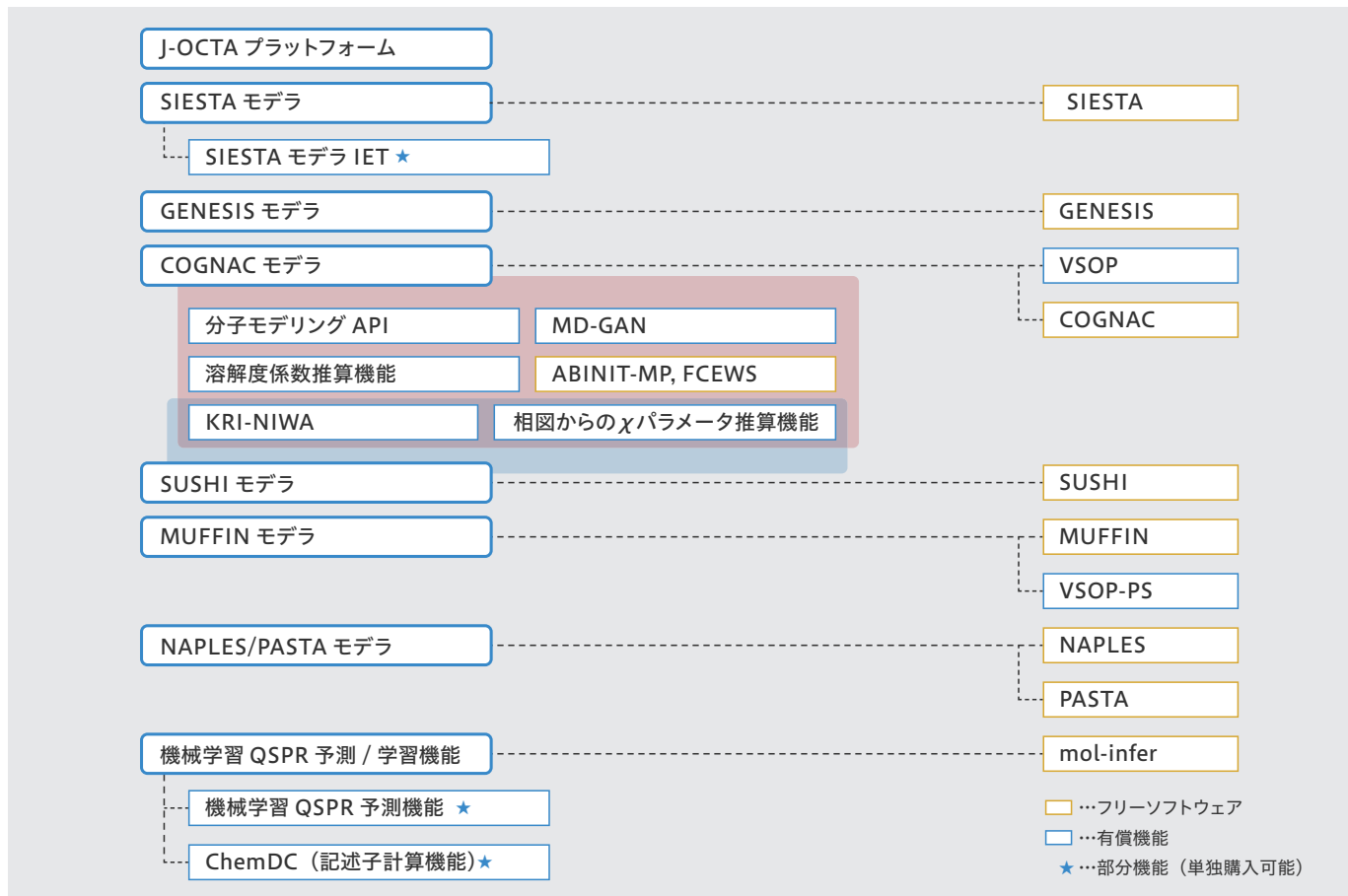
物性値・物理量

- 分子・結晶構造から物理量や物性値を予測
- 物理量や物性値から分子構造を予測する逆解析
- プロセス条件なども説明変数として使用可能 (プロセス・インフォマティクス)
- 短時間の分子動力学計算の結果を用いて、長時間の分子運動を予測

- 分子記述子の計算、公的DBから物理量や物性データの取得
- 分子内の共通部分構造の抽出など、クラスター機能
- ハイスループット計算による大量の物理量、物性データ取得を支援
- Pythonスクリプトによるモデルやデータの加工が可能

J-OCTAの構成

J-OCTAの各機能を用いるにはJ-OCTAプラットフォームが必要となりますが、機械学習QSPRのみ利用できる特別なバージョンもございます。



J-OCTAは産学連携プロジェクト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「OCTA」の商用版ソフトウェアです。OCTAはオープンソースソフトウェアです。



SIESTAはスペイン等の研究者によって開発された密度汎関数法(DFT)のソフトウェアです。SIESTAはスペインSIMUNE社の登録商標です。



GENESIS
Generalized ensemble simulation system

GENESISは理化学研究所を中心に開発している分子動力学ソフトウェアで、フリーソフトウェア(LGPLv3)として配布されています。

動作環境

	J-OCTA	解析エンジン
OS	Windows 10 (64bit)	Windows/Linux Linux推奨バージョン ・Red Hat Enterprise Linux 7 (x86-64) ・CentOS 7 (X86-64)
CPU	マルチコアCPU 推奨	マルチコアCPU推奨
メモリ	16GB 以上推奨 (最低8GB)	16GB以上推奨
ハードディスク	200GB 以上の空き容量を推奨 (最低20GB)	80GB以上の空き容量を推奨
ディスプレイ解像度	1024 X 768以上推奨	
グラフィックカード	OpenGL に対応したグラフィックカード(nVidia製を推奨)	
画面色数	65536色以上推奨	

サポート

サポート契約をお申し込みのお客さまには専属のスタッフによる電子メール等のサポートサービスをご提供いたします。導入初期における解析業務の立ち上げにご協力いたします。基礎理論から操作方法に至るまで、幅広いセミナーを開催しています。

受託解析サービス

解析業務のアウトソーシングを承ります。実験と解析との比較・検証、および材料・素材設計に対するアドバイスのエンジニアリングサービスをご提供します。

詳細情報はこちらのWebサイトから入手できます ▶▶▶ www.jsol-cae.com/jocta/



JSOL

NTT DATA Trusted Global Innovator
NTT DATA Group

※記載されている製品およびサービスの名称は、それぞれの所有者の商標または登録商標です。

株式会社JSOLエンジニアリング事業本部

東京 | 〒102-0074 東京都千代田区九段南 1-6-5 九段会館テラス 11F
TEL : 03-6261-7168 FAX : 03-5210-1142

名古屋 | 〒460-0002 名古屋市中区丸の内 2-18-25 丸の内 KS ビル 17F
TEL : 052-202-8181 FAX : 052-202-8172

大阪 | 〒550-0001 大阪市西区土佐堀 2-2-4 土佐堀ダイビル 10F
TEL : 06-4803-5820 FAX : 06-6225-3517

E-mail hg-cae-info@s1.jsol.co.jp URL <https://www.jsol-cae.com/>