

## 高機能材料設計プラットフォーム OCTA のデモ

名古屋大学工学部物理工学科 畝山多加志 梅舘拓也 小島正寛 増淵雄一  
滝本淳一 土井正男

OCTA とは、汎用粗視化分子動力学プログラム COGNAC、動的平均場法界面動力学シミュレータ SUSHI、汎用多相構造ダイナミクスシミュレータ MUFFIN、汎用多相構造ダイナミクスシミュレータ PASTA、グラフィカルユーザインターフェース GOURMET で構成されるシミュレーションプラットフォームであり、Windows、Linux で動作させることができる。また、OCTA はフリーで公開されており、<http://octa.jp> で ID を登録する事で誰でも使うことができる。

これらのシミュレータは UDF (User Definable Format) という形式のファイルを経由してデータの入出力を行うことにより、各シミュレータ間でのデータのやりとりを簡単にし、GOURMET により少々の python スクリプトで容易にアニメーション、グラフ等を作製する事ができる。

また、OCTA には自分で新たにシミュレータを追加し、他のシミュレータと連携させる事ももちろん可能である。その際には、C/C++上で libplatform という付属のライブラリを使うことで UDF 形式のファイルを容易に扱うことができる。

OCTA は未だ発展途上のものであり、さまざまなシミュレータを取り込むことで無限に発展することができる。

そこで、今回の発表では多重振り子、連成振動などの簡単なシミュレータをとおして OCTA にシミュレータを追加する手順の一通りを紹介する。また、OCTA の CD-ROM (二枚組み) にパンフレット、注意書きを添えて配布する予定である。

### 参考文献

OCTA マニュアル

概要

GOURMET Primer

GOURMET 操作マニュアル

libplatform リファレンスマニュアル

GOURMET PYTHON スクリプト リファレンスマニュアル