

コンピュータによる多体系の物性研究

安藤 祐子

研究の目的

近年、コンピュータの計算能力が革命的と言って良いほど高速化され、それに伴ってシミュレーションの研究が非常に活発になってきた。それと同時に、パソコン上でも十分に利用可能である様々な種類の3次元コンピュータ・グラフィックス作成ソフトが普及するようになった。そのソフトの中には、得られたデータを入力すると3次元画像を作成できるものがある。

本研究ではこの種のソフトを使って、多粒子系のシミュレーションデータを動画表示(可視化)するシステムの開発を目的とする。現在、本システムは開発途中であるが、その完成を目指すとともに、限定されている使用可能なOSをWindows、MS-DOSから、LINUX、もしくは、UNIX上においても利用できるように、汎用性を求める計画である。更に最終的には、シミュレーションデータのみから、動画を自動的に作成するシステムの完成を目指す。本システムは研究用に使用できるとともに、教育用教材の作成も容易に行えるものである。

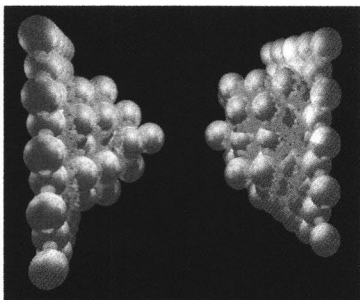
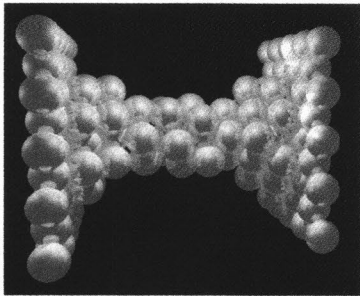
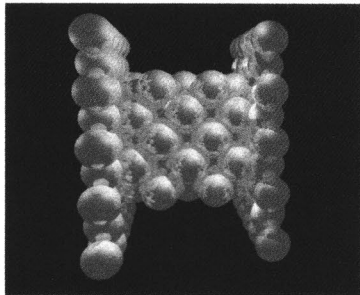


図1 ナノコンタクトの引張切断過程

研究成果

3次元画像作成ソフトはPOV-Rayを、および、動画画像作成ソフトはVFDを用いることにする。これらはフリーソフトである。今日、これらのようなソフトは様々なものがあるが、概して高価なものも多く、更に複雑な機能が多く付随しており、個々のユーザーにとっては結果的に使いづらいものとなっている。そこで本研究において、最も基本的な機能のみを持つソフトを使用することにした。

本研究での動画表示システムの過程は、

- [1] 多粒子系の各粒子の位置座標を記録した時系列データと、シミュレーション画像での「背景、形状(ここでは球)、色、照明、カメラ(視点)」などの粒子の情報を含むシーンファイルを作成する。
- [2] POV-Ray用シーンファイルを時系列データファイルから自動作成する。
- [3] [2]で作成した時系列シーンファイルをPOV-Rayによりレンダリングを行い、時系列静止画像ファイルを自動作成する。
- [4] 動画画像作成ソフトVFD(MS-DOS上の場合)により、前段階で作成したそれぞれの静止画像ファイルの一つの動画画像ファイルに変換する。
- [5] 作成した動画画像ファイルを、Windows上ではWindows Media Player Ver.7によって再生する。

現在、Windows/MS-DOS上においてこれらのシステムを開発中であるが、前述の段階[2]は、FORTRANプログラムにより既に完成している。目下の所、段階[3]において手動で行っているレンダリングの自動化を検討中である。

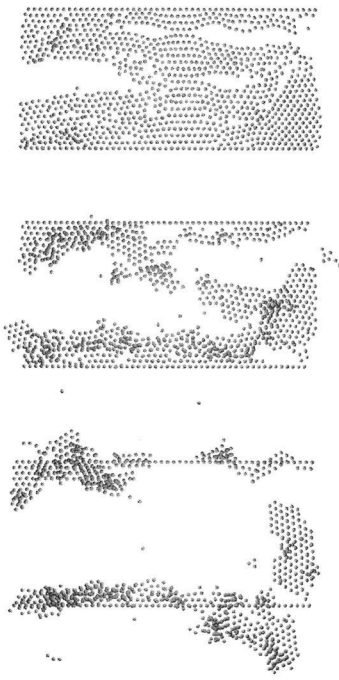


図2 破壊による原子放出現象

本システムにより、実際に作成している画像シミュレーションは、

- ・ ナノコンタクトの引張切断過程
 - ・ 破壊による原子放出現象
- である。

更に本研究における今後の課題として、システムのWindows/MS-DOS上での完成、および、LINUX/UNIX上での完成を図り、システムの汎用性を目指す。

産業技術への貢献

前述の通り3次元画像作成ソフト、並びに、動画画像作成ソフトは、市場に数多く出回っているが、あまりにも多くの機能を兼ね備え、使用が煩雑であったり、非常に高価であったりすることが多く、シミュレーションを行うことが困難である場合が多い。反面、科学技術のこれからの進歩に伴い、シミュレーション研究は、産業界においてもこれまでより頻繁に行われることが予想される。よって、様々なコンピュータシステムにおいて利用できる動画表示の簡易システムの開発と、フリーソフトの使用による自由な利用が必要となる。

グループメンバー

氏名	所属	職(学年)
嶋村 修二	工・共通教育	教授
吉國 公人	工・機能材料	B4
安藤 祐子	VBL	非常勤研究員

連絡先

電話 0836-85-9850 (ダイヤルイン)、8870
 FAX 0836-85-9850 (ダイヤルイン)
 E-mail: yando@po.cc.yamaguchi-u.ac.jp