

物理現象視覚化ソフトのライブラリ構築

西谷研究室 1536 榎原 健

1. 目的

物理現象を数式だけから理解するのは非常に困難である。例えば、粒子の運動を描写する分子動力学法(MD)では、ニュートンの運動方程式に従って粒子の運動を数値的に決定していく。しかし、数値を直接追いかけるだけでは、直感的な理解が得られない。この際、実際に粒子の運動を視覚化することによって直感的な理解を深め、学習を促進することができると考えられる。

本研究ではWeb上でInteractiveな操作が可能で、MDなどの物理現象の深い理解の助けとなるツールの作成を目的とする。今回は、Web上で動作させるプロトタイプとしてProcessing言語を用いて、MDにおける粒子の運動を操作・視覚化するプログラムを作成した。

2. 手法

作成したプログラムをWeb上で動作させるために、JavaScript言語への変換を行う。JavaScriptは動的なWebサイトの構築に有効な言語の一つである。視覚表示を容易に実現するProcessing言語においては、JavaScript言語への自動変換が組み込まれおり、Processing言語で作成したプログラムを、Web上でInteractiveに動作させることができる。

Verlet法

分子動力学法における粒子の座標を逐次的に求める方法であり、ニュートンの運動方程式、テイラー展開から導出することができる[1]。ある粒子に対して、次式が成り立つ。

$$r(t+h) = 2r(t) - r(t-h) + \frac{h^2}{m}f(t)$$

これは、粒子の現在の座標 $r(t)$ 、 h 秒前の座標 $r(t-h)$ 、現在かかっている力 $f(t)$ 、質量 m から h 秒後の座標 $r(t+h)$ を求めることを示している。

Lennard-Jonesポテンシャル

2原子間での相互作用ポテンシャルエネルギーを経験的に表したモデルである[2]。ある2原子に対して、 ψ をポテンシャルエネルギー、 A, B を適当な定数、 R

$$\psi(R) = A\left(\frac{1}{R}\right)^{12} + B\left(\frac{1}{R}\right)^6$$

を原子間距離とすると次式が成り立つ。

この式を距離で微分する事によって、原子間の相互作用によってかかる力を求めることができる。

3. 結果

Verlet法とLennard-Jonesポテンシャルを用いて粒子の振る舞いをシミュレーションし、視覚化するプログラムを実装した。これにより、MDにおける粒子の振る舞い、クラスタの移動を確認することができる。特徴的なのは、キー入力で状態の切り換えが可能であり、凝固現象、粒子に加わる力を視認することができる。また、粒子の個数をスライダーで自由に変更でき、粒子を選んで力を加えることが可能であり、粒子の速度に比例した色で表示することで、エネルギーの推移がわかりやすくなっている。そして、JavaScriptへの変換ができ、Webブラウザ

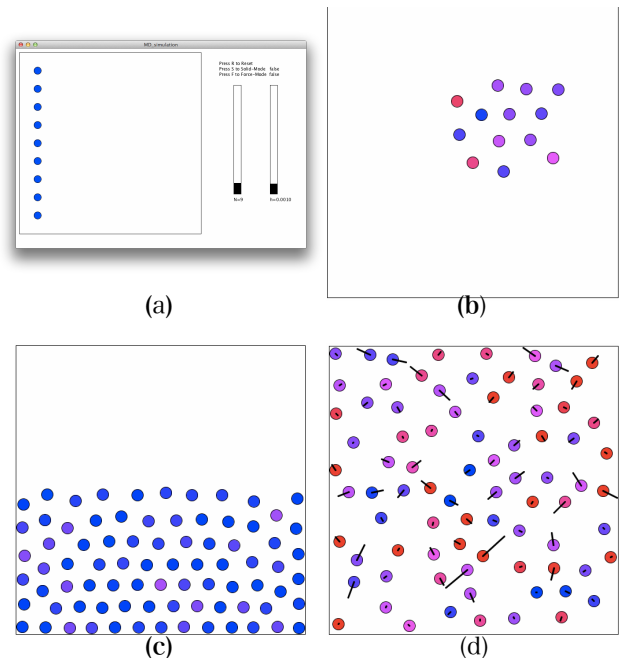


図1:プログラムのスクリーンショット; (a)全体像, (b)クラスタの移動, (c)凝固, (d)粒子に加わる力を視覚化。

上で動作させることができる。

4. 総括

本研究で作成したプログラムによって分子動力学法における粒子の振る舞いの直感的な理解が可能になった。また、Webブラウザ上で動作可能なため、手軽に扱うことができ、学習意欲、学習効率の向上に繋がると考えられる。

5. 参考文献

[1] 神山新一, 佐藤明, 「分子動力学シミュレーション」, (朝倉書店 1997).

[2] 西谷滋人, 「個体物理の基礎」, (森北出版株式会社
2006).