

演 題	OpenGL を用いた分子シミュレーション教育用ソフトウェアの開発	
発 表 者 ( 所 属 )	○玉井良則 (福井大学工学部物理工学科)	
連 絡 先	〒910-8507 福井市文京 3-9-1 福井大学工学部物理工学科 TEL 0776-27-8032 FAX 0776-27-8032 e-mail: tamai@polymer.apphy.fukui-u.ac.jp	
キーワード	Molecular Dynamics Simulation, OpenGL, 3D Graphics, Material Design	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	ナノスケール物質設計を目指した分子シミュレーション法に関する教育を行うために、3次元グラフィックス表示と視覚的に操作を行うことが可能な GUI 機能を備えた実習用シミュレーションソフトウェアを開発した。	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	Windows 95/98/Me/2000/XP および Linux
	ソ ー ス 言 語	C++
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他 ○未定</li> </ul>	具 体 的 方 法

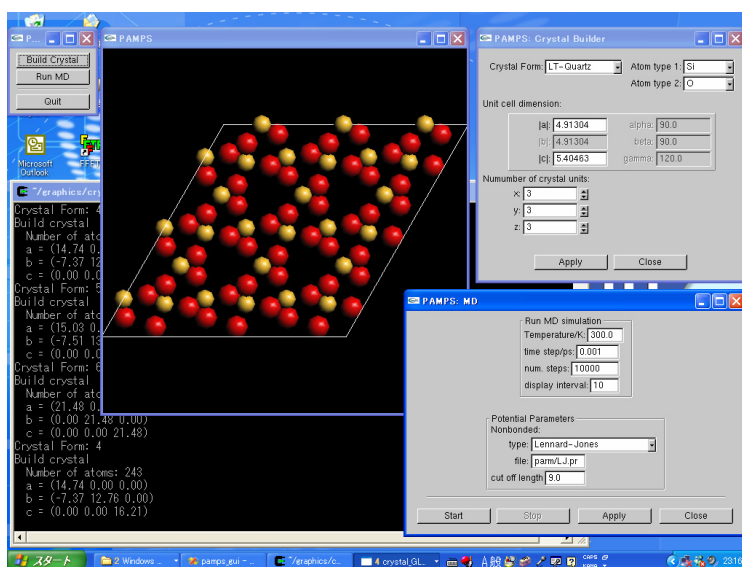
## 1. はじめに

近年、材料開発、物理工学、生命科学などさまざまな分野において、ナノスケールの構造およびダイナミクスを分子レベルで解明することが急務となっており、分子軌道法や分子動力学法などの計算化学、計算物理的手法に基づいたシミュレーション技術の発展に期待が寄せられている。しかし、これらの手法に関する体系的な教育システムはいまだに十分に整備されているとはいえない。計算科学の教育においては学問的な基礎を学ぶことも重要であるが、実際にシミュレーションをおこない、解析の結果得られる種々の物理量の意味を分子レベルの構造や運動と関連付けて理解することもきわめて重要である。そこで、わかりやすいユーザーインターフェースを備えた物質設計支援シミュレーションシステムを開発し、これを分子シミュレーションに関する教育に活用することにした。シミュレーションシステムの大枠が完成したので報告する。また、授業でデモンストレーションや計算機実験の実習に活用した様子についても報告する。

## 2. プログラミング

開発言語には C++ を用い、オブジェクト指向プログラミング (OOP) の手法を全面的に取り入れた。OOP の手法を用いることにより、システムの信頼性を格段に高めるとともに、拡張性を保証し、将来開発される新たなシミュレーション手法を容易にシステムに取り込むことができるようになる。プログラムが扱うオブジェクト (ナノスケール物質、および、分子シミュレーションの種々の手法) を詳細に解析し基本設計を行った。グラフィックス機能は標準グラフィックスライブラリ OpenGL を用いてコーディングした。OpenGL に対応したグラフィックスカードを用いることにより、高速で滑らかな 3 次元グラフィックス機能が実現される。また、グラフィックスユーザーインターフェース (GUI) 機能については OpenGL を拡張した GLUT を用いてコーディングした。これにより、比較的簡単に GUI 機能を実現することができ、さらに Windows と Linux の両環境でソースプログラムの完全な共通化を図ることが可能となった。

シミュレーションシステムの実行画面の例を図に示す。分子の 3 次元構造を表示するウィンドウ、結晶構造を生成する GUI ウィンドウ、および、シミュレーション条件を指定し実行する GUI ウィンドウがあり、これらを統括するウィンドウを備える。シミュレーションを実行しながらリアルタイムで分子運動を観察することが可能である。また、マウス操作により、分子が運動している状態で任意の角度に視点を変えることもできる。ハミルトニアン、温度、圧力、密度などの数値はターミナルウィンドウに表示される。



## 3. 教育利用の試み

シミュレーションシステムの主な機能が完成したので、「分子統計力学」(物理工学科 3 年前期) の講義で本システムを計算化学や計算物理の教育に試験的に用いた。この授業では講義形式で分子シミュレーションの基礎を解説しているが、イメージをつかむために本システムを用いたデモンストレーションを適宜おこなった。また、本システムを用いたシミュレーション実習もおこなった。計算時間を勘案し、アルゴン結晶の融解、および、アルゴン流体の PVT 図の作成といった基礎的な内容の課題について計算機実験をおこなった。

## 参考文献

- (1) OpenGL: <http://www.opengl.org/>
- (2) GLUT: <http://www.cs.unc.edu/~rademach/glui/>