

2P01

分子動力学シミュレーション結果解析用可視化ソフトウェアの開発

○大石 駿介¹、大川 政志²

¹ 沼津工業高等専門学校応用物質専攻 (〒410-8501 沼津市大岡 3600)

² 沼津工業高等専門学校物質工学科 (〒410-8501 沼津市大岡 3600)

【緒言】

近年、コスト削減を目的として分子シミュレーションが材料設計や材料物性の研究分野で広く用いられている。シミュレーション結果の解析は、数値情報を直接扱うより、コンピュータグラフィックスによって視覚的化された環境下で行うことが、結果の理解が容易になり研究を効率的に進めるために重要である。本研究では、分子動力学プログラムのMXDORTO⁽¹⁾のシミュレーション結果を可視化するソフトウェアの開発を目的とした。ユーザインターフェースや開発の容易さ、結果表示などの処理速度を考慮した上で開発環境を決定し、既存の可視化ソフトウェアを参考に機能を実装した。

【手法】

新規なソフトウェアの開発には、.Net Framework 4 を採用し C#を言語として使用した。

MXDORTO では計算ステップごとの原子座標、温度や圧力、エネルギーなどのシミュレーション結果がテキスト形式で出力される。これらの数値情報を読み込んで、原子位置を3次元コンピュータグラフィックス(3DCG)で連続的に表示させ、解析に必要なシミュレーション結果をグラフ化して表示させた。

【結果】

開発したソフトウェアはメイン、データ、オペレーション、チャートの4つフォームから構成される (Fig. 1)。

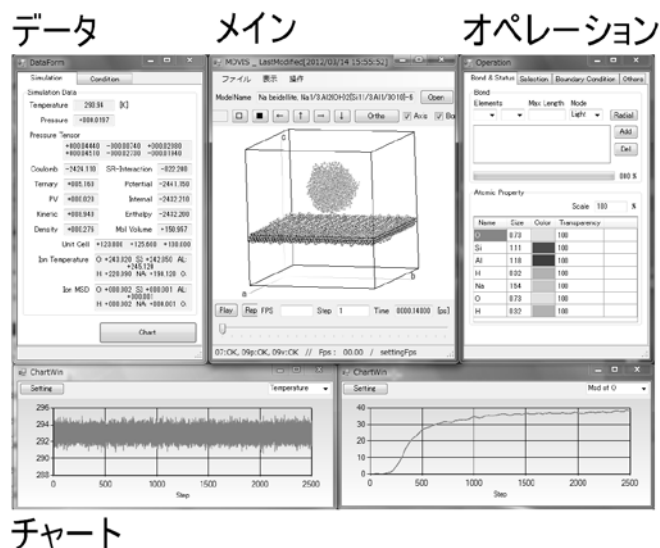


Fig. 1 Screen shot of MDVIS

メインフォームには、MDセルに含まれる原子座標を3DGCで表示し、セルと各原子はマウス操作により任意の方向の表示、拡大縮小、平行移動が行える。任意の原子を複数個選択でき、その軌跡を表示することができる。オペレーションフォームでは、原子の表示プロパティ(色や大きさ)、原子間の結合や表示領域の設定を行える。チャートフォームには、温度、圧力やエネルギー等のシミュレーション結果を計算ステップに対して表示させ、メインフォームの原子の動きと同期させた。さらに、任意の2原子の原子間距離を表示する機能を実装した。

現在、このソフトウェアは.Net Framework 4をインストールした、Windows XP(32bit)およびWindows 7(32bit、64bit)のOS下で動作することを確認している。

以上の特徴を有した分子動力学シミュレーションプログラムMXDORTOの結果解析用の可視化ソフトウェア(MDVIS)を開発することができた。

参考文献

- (1) 河村雄行: JCPE 登録 No. #029, 1990