

## HTML5 Canvas を使って表現する結晶粒界の時間発展

学習院大学計算機センター教授 横山悦郎

学習院大学計算機センター助教 磯上貞雄

学習院大学計算機センター助教 城所弘泰

学習院大学計算機センター助教 村上登志男

### 1. はじめに

自然界にみられる結晶の大部分は、単結晶集合体からなる多結晶である。個々の単結晶の境界は、結晶粒界と呼ばれる。本研究の目的は、1) 2つの粒界で囲まれた二次元結晶の表面の運動を調べること、2) それをブラウザで動画描画を可能にする HTML5 (Hyper Text Markup Language 5) Canvas [1] を使ってデモンストレーションすることである

### 2. HTML5 における描画環境

HTML5 では、Canvas タグを使って2次元グラフィックス表示が簡単に行える。また、WebGL [2] を使えば、3次元グラフィックス表示も行える。これらは新たな授業教材として大きな可能性がある。

「マルチメディア論1」(1学期)では、これまでc言語を基にしたOpenGLを使って、3次元コンピュータ・グラフィックス(3DCG)の講義を行っている。今年度(2014年度)では、この授業で番外編として、JavaScriptで記述されたHTML5のWebGLを使って3次元3DCGを紹介したところ、そのスムーズな動きと精巧な描写に学生には驚きをもって迎えられた。現状ではInternet Explorerでは動作しないが、コンパイルすることなくFirefoxなどのブラウザを使って3DCG動画シミュレーションを行うことは、その手軽さから、今後、ますます授業教材として価値がでてくると思われる。図1は、WebGLで描いたローレンツ・アトラクター [3] の参考例である。

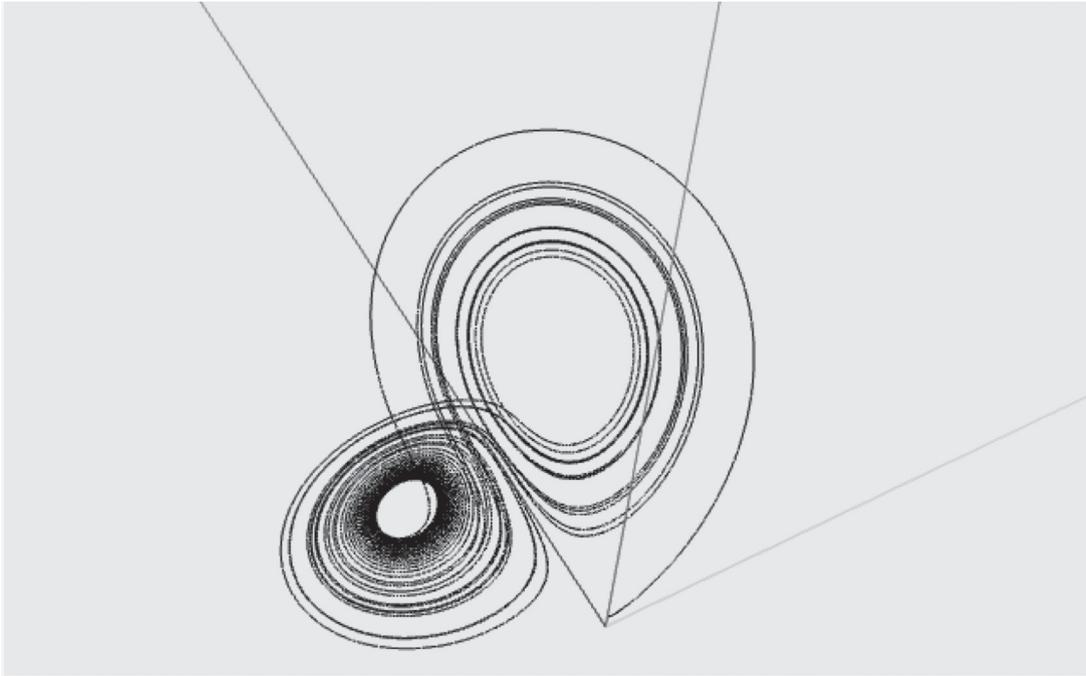


図 1

また昨年度の「数値解析および計算機 2」(2 学期) では、Canvas を使って、2 次元であるが分子動力学の基礎も講義した。学生も実際にプログラミングを行い、簡単なモデル計算を行うところまで到達した。図 2 は、Canvas を使って作成した剛体粒子の 2 次元分子動力学シミュレーションのスナップショットである。外円と内円に囲まれた領域 (ドーナツ状の領域) における粒子の振る舞いと拡散係数を観察する目的でこのシミュレーションを行った。



図 2

### 3. 2つの粒界で囲まれた二次元結晶の表面の運動

当初、本研究では、結晶界面での吸着分子の濃度勾配に比例した分子の巨視的な流れによって界面が変形していく Mullins モデルを、JavaScript を使って計算し、HTML5 Canvas を用いて表現する計画であった。ところが、フロリダ工科大学の M. E. Glikzman 教授に提案された「Interfacial Bias Filed」というモデルに関して、昨年度（2013年）の秋に北海道大学で Glikzman 教授と直接に討論する機会を得た結果、研究計画の重大な新展開が起こった。そのモデルは、吸着分子の流れではなく界面に沿っての熱の流れが、界面の運動に重要な役割を果たしているというものである。他の多くの研究者はこのモデルに否定的見解をもっているのが現状である。そこでこのモデルの検証を、13年度秋以降この研究の重要な目標として新たに設定した。具体的には、「Interfacial Bias Filed」モデルを使って結晶の平衡形を求めることができるかを目指した。この結果の報告はこの年報ではなく、別の査読付き雑誌（英語）で報告予定である。本稿では、分子の表面拡散で界面が変形していく Mullins モデルを、JavaScript を使って計算し、HTML5 Canvas を用いて表示した例を紹介する。

図3のように、単結晶同志の境界である2つの粒界で囲まれた単結晶 A の気相と結晶の界面の運動を調べる。ここで結晶と気相は温度及び圧力一定の閉じた系にあると仮定する。Mullins は、「原子、分子の表面拡散」または「原子、分子の蒸発・凝縮」で結晶界面が運動するモデルを提案した [4]。ここで、結晶表面の外形を  $h(x,t)$  とし、添え字は偏微分を表すとすると

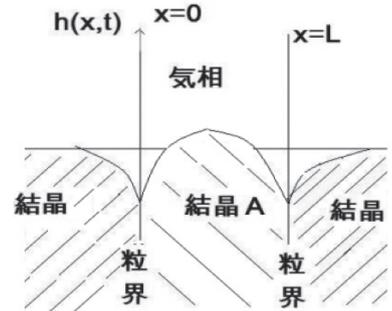


図3

表面拡散モデル 
$$h_t = -Ah_{xxx} \quad (1)$$

蒸発・凝縮モデル 
$$h_t = Bh_{xx} \quad (2)$$

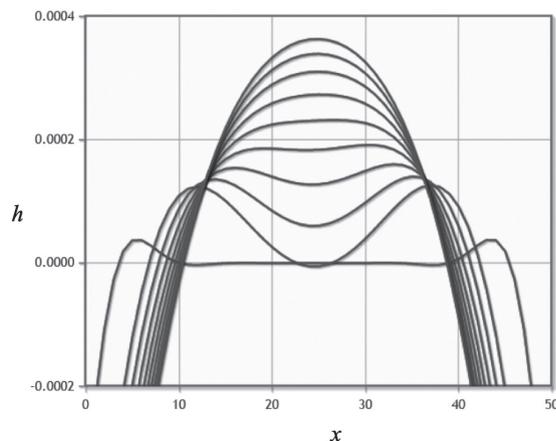


図4

ただし、 $A$  と  $B$  は定数である。Mullins は、2次元結晶の反無限界面  $[0, \infty)$  を扱った。ここでは界面は、閉区間  $[0, L]$  の領域を取り扱う。また表面拡散モデル (1) 式の界面の運動結果のみを示す。境界条件として  $x=0$  では  $h_x(0,t)=m$ ,  $h_{xxx}(0,t)=0$  及び、 $x=L$  では  $h_x(L,t)=-m$ ,  $h_{xxx}(L,t)=0$  とした。また平坦な形である  $h(x,0)=0$  を初期条件とした。ここで  $m$  は正の定数である。結晶表面の時間変化を JavaScript を使って計算し、HTML5 Canvas を用いて表示した結果が図 4 である。 $L=50$ ,  $m=0.16$ 。外側から内側へ、更に中央部の高さの増加、という形の時間発展が得られる。後から気づいたが、この結果は、すでに Khenner et al. [5] においてすでに 2001 年に行われていた。今後は、非対称な境界条件の場合などを調べる予定である。

### 参考文献

- [1] HTML5 Canvas Native Interactivity and Animation for the Web, S. Fulton and J. Fulton, 安藤慶一訳, O'REILLY 2012.
- [2] たとえば WebGL Aquarium [webglsamples](https://webglsamples.googlecode.com/hg/aquarium/aquarium.html)  
<https://webglsamples.googlecode.com/hg/aquarium/aquarium.html> は有名。また、本稿では HTML5 による物理シミュレーション JavaScript で Three.js/jqPlot/jquery UI を使う, 遠藤理平, カットシステム 2013 を参考にした。
- [3] E. N. Lorenz, Deterministic Nonperiodic Flow, Journal of the Atmospheric Science, Vol.20, 1963, 130-141. カオス研究の起点となった有名な論文。図 1 のアトラクターは、Lorenz の論文 Fig.2 と同じ条件で描いたもの。
- [4] W. W. Mullins, Theory of Thermal Grooving, Journal of Applied Physics, Vol.28, 1956, 333-339.
- [5] M. Khenner, A. Averbuch, M. Israeli and M. Nathan, Journal of Computational Physics, Vol.170, 2001, 764-784.