

衝突を考慮した結晶集合体のモデリング

田宮聖之^{1,a)} 土橋宜典^{1,b)}

概要: 結晶とは、構成する粒子が規則的に配列した固体のことであり、その形状によって大きく分類すると、多面体結晶、骸晶状結晶、樹状結晶の3つに分類される。結晶学の分野では、現在も結晶の形状を推定するために様々なシミュレーション法などが研究され続けているが、これらのシミュレーション法には専門的な知識が必要とされる上、計算コストも非常に大きいものが多い。そのため、多様性のある形状をより簡便で高速に作成できる手法が求められる。多面体結晶の形状を推定するための簡易的な手法として、Iwasakiらの手法がある。本研究では、この手法を基に複数の結晶の成長を導入することで、多面体結晶の集合体モデルを生成する手法を提案する。その際、結晶同士の衝突による成長の制限を考慮することで、より自然な見た目の結晶を生成することができる。

キーワード: モデリング, 結晶

Modeling of Crystal Aggregates Considering Collision

Abstract: A crystal is a solid in which its particles are regularly arranged, and can be roughly classified into three types according to their shapes: polyhedral crystal, hopper crystal, and dendritic crystal. In the field of crystallography, various simulation methods are being studied to estimate the shape of crystals, but these simulation methods require expertise and many of them have very high calculation costs. Therefore, a method that can create a variety of shapes more easily and at high speed is required. As a simple method for estimating the shape of polyhedral crystals, there is a method by Iwasaki et al, which our method is based on. We propose a method to generate an aggregate model of polyhedral crystals by introducing the growth of multiple crystals. By considering collisions between crystals during their growth phase, more natural model of crystal aggregates can be generated.

Keywords: Modeling, Crystal

1. はじめに

結晶とは、構成する粒子が規則的に配列した固体のことであり、形状から大きく分類すると、多面体結晶、骸晶状結晶、樹状結晶の3つに分類される。結晶学の分野では、現在も結晶の形状を推定するために様々なシミュレーション法などが研究され続けている。しかし、これらのシミュレーション法は結晶の持つ物理的、または化学的な性質を分析する用途で用いられるものが多く、専門的な知識が必要とされる上、計算コストも非常に大きいものが多い。そのため、コンピュータグラフィックスでの用途を考えると、多様

性のある形状をより簡便で高速に作成できる手法が求められる。多面体結晶の形状を推定するための簡易的な手法として、Iwasakiらの手法 [1] がある。本研究では、この手法を基に複数の結晶の成長を導入することで、より自然な多面体結晶の集合体モデルを生成する手法を提案する。今後は、結晶同士の衝突による成長の制限を考慮することでより自然な結晶集合体のモデルを生成する手法を導入したい。

2. 提案手法

本研究では、結晶の形状変化を視覚的に表現する Iwasakiらの手法 [1] を基に、複数の結晶をランダムに生成することで自然な結晶の集合体形状を作成する手法を提案する。この節では、まず Iwasaki らの手法 [1] を紹介し、提案手法を導入する。

¹ 北海道大学
Hokkaido University

a) tamiya@ime.ist.hokudai.ac.jp

b) doba@ime.ist.hokudai.ac.jp

Iwasaki らの手法 [1] では、ミラー指数 (h, k, l) で方向を表す面のセットを入力とし、各面はその面の成長率 $gr(h, k, l)$ を持っている。ミラー指数は面の法線ベクトルに相当し、各面の方向を表している。結晶の形状は以下の式で求められる面のセットで囲まれた最小の領域となる。

$$d(h, k, l) = d_0(h, k, l) + gr(h, k, l)t \quad (1)$$

ここで、 d_0 は初期の距離、 t は時間とする。また、ミラー指数は各結晶の構造によって決まる値である。

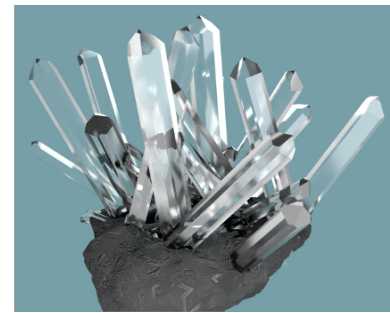
各面の距離が決定されると、3つの面の組から1つの交点が求まる。求めた交点のリストから結晶領域の外部にある点を削除することで、多面体結晶の形状を構成する頂点のリストが得られる。得られた頂点リストから結晶の形状モデルが作成される。

提案システムでは、岩などのモデルを入力として、その表面上にランダムに複数の始点を設定する。各点からランダムな方向に成長するように結晶のモデルを配置することで、多面体結晶の集合体モデルを作成する。

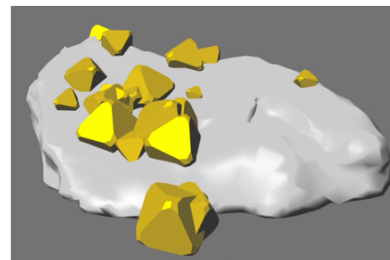
現実の結晶成長の場合、結晶が成長の過程で別の結晶に衝突すると、結晶を貫通するのではなく、隙間を埋めるように成長が制限される。より自然な結晶集合体をモデリングするには、結晶同士の衝突による成長の制限を加える必要がある。衝突による制限を加えるために、空間を $N_x \times N_y \times N_z$ の格子に分割した3次元場 η において複数の結晶を生成する場合を考える。初め η には0を設定し、各結晶の成長開始点では $\eta = 1$ とする。タイムステップごとに式 (1) を用いて全ての結晶がもつ面の距離 d を更新し、各格子点ごとに η を参照して $\nabla\eta$ を計算する。 $|\nabla\eta| \neq 0$ の点において、各結晶の持つ面のリストと内外判定を行い、内部にある点は $\eta = 1$ とする。これを繰り返すことで、すでに結晶の内部と判定された点を更新することなく成長を続けることができる。

3. 結果とまとめ

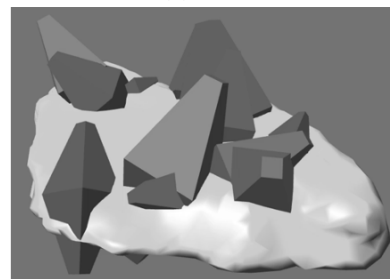
衝突を考慮したモデルは未実装のため、結晶同士の貫通を許した場合の結果を図1に示す。ランダムな配置を導入したことで、より自然な結晶の集合体モデルを作成することができる。また、インタラクティブな操作により、ユーザは任意の形状を簡便に作成することができる。2節でも述べたように、結晶同士の衝突を考慮した手法を実装することにより、結晶の成長が制限され、結晶の大小のバランスがより自然になると考えられる。また、現実の結晶成長では、結晶表面に成長の過程で凹凸ができたり、不純物や気泡が内部に取り込まれるといった現象が起こる。今後はそのような現象の再現も考慮したい。



(a) 水晶(レンダリング)



(b) 黄鉄鉱



(c) 鋭錐石

図 1: 結果

参考文献

- [1] H. Iwasaki, F. Iwasaki, "Morphological variations of quartz crystals as deduced from computer experiments," Journal of Crystal Growth, vol.151, pp.348-358. (1995)