

manimによる有限温度第一原理計算の
アニメーション作成

関西学院大学理工学部
情報科学科 西谷研究室
27016698 寺本征央

2022年3月

概要

本研究では、有限温度下での第一原理計算における難解な問題あるいは考え方について『何をしているのか』『何故そうなるのか』ということ、初学者も直感的に理解出来ることを可能にするアニメーションの制作を目的とした。そのために manim というアニメーションや描画に特化したエンジンを利用し、python によってコーディングを行い、映像を制作していった。

最終的には、『Einstein-model をばねモデルに見立てることが出来る理由』『Einstein 法により得られるエネルギー変位と単振動するばね振子のエネルギー変位の共通性』『MC 法の理屈』『自由エネルギーを得る計算において出現する積分が示すもの』について、可動オブジェクトやリアルタイムのグラフ描画などで説明するアニメーションを複数作成した。

目次

第1章 序論	3
第2章 手法	4
2.1 制作手法の選定	4
2.2 導入	4
2.2.1 共通事項	5
2.2.2 manim のバージョンを選ぶ	5
2.3 構成ファイル	6
2.4 出力手順	6
第3章 結果	8
3.1 ばねモデルによる原子運動と Potential energy の関係	8
3.2 Einstein 法によるエネルギー計算結果の視覚化	9
3.2.1 POSCAR	10
3.2.2 データのフィッティング	10
3.3 Frenkel 法の原理と現実のエネルギー計算の視覚化	12
3.3.1 simulated-annealing	12
3.3.2 巡回セールスマン問題の最適化	12
3.3.3 MC 法との関連付け	13
3.3.4 現実の原子の自由エネルギーの導出	15
第4章 総括	18

目 次

2.1	manim で作成されたグラフ例.	4
3.1	作成されたばねモデル.	8
3.2	ばねモデルと $F(x)$, $E(x)$ を表すグラフ.	9
3.3	POSCAR.	10
3.4	サイト 1 における Potential エネルギーのプロット.	11
3.5	サイト 1 におけるデータのフィッティングにより得られるグラフ.	11
3.6	アニーリング法による巡回セールスマン問題の最適化.	13
3.7	$T = 0.05$ のときの $Step - E$ グラフ.	14
3.8	$T = 0.5$ のときの $Step - E$ グラフ.	14
3.9	$Iteration - eV$ グラフ [6].	15
3.10	平均点のプロット. [6]	16
3.11	$\left\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \right\rangle$. [6]	16
3.12	プロットされたデータ.	17
3.13	$\int_{\lambda=0}^{\lambda=1} \left\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \right\rangle d\lambda$	17

第1章 序論

絶対零度ではない状態において、あらゆる原子は振動している。Einstein は原子の振動を考える上で、複数の同一原子からなる結晶の格子振動を3次元調和振動と見なす Einstein-model[1] を考案した。ここでは一つ一つの原子は独立したものとして扱われるため、ある原子の挙動が他の原子の挙動に影響されることはなく、複雑な計算をする必要がなくなる。Einstein-model を利用した Einstein 法と呼ばれる計算により、近似値とはいえ『有限温度下で原子が持つ自由エネルギー』を導くことが出来る。

更に、熱平衡モンテカルロに基づく非調和性を Einstein 法に組み込んだ Frenkel 法を利用することで、近似ではなく実際の自由エネルギーを導出出来るようになる。

しかし、これらの話は個別の考え方自体が難解であり、考え方同士の関係性も複雑である為、数式やグラフをただ示されただけでは理解しづらい。

VASP 計算を学ぶ以上これらの事柄を理解出来なければならないが、初学者にそれを求めることは酷である。むしろ初学者がこれらの原理を理解する為には 一体何をしているのか ということを知ることが大切であると考えている。そこでリアルタイムで変化するグラフ等を駆使し、受け手の予備知識の量に関わらず『今していること』について直感的に理解出来るような映像を作成することを本研究の最終目的とする。

第2章 手法

2.1 制作手法の選定

今回アニメーションを制作するにあたり, Grand Sanderson によって開発された”manim”と呼ばれる Python ベースで動作するアニメーションエンジンを利用する. 図 2.1 に一例を示す通り, manim には

- Latex に対応している為に数式をイタリック体で表現出来る.
- 文字やグラフを多様な色で表現することが可能である.

などの特性 [2] があり, これらが最終目的を達成する上で最も重視すべき 分かりやすさ・見やすさ に関して非常に有用と考え, このエンジンを採用した.

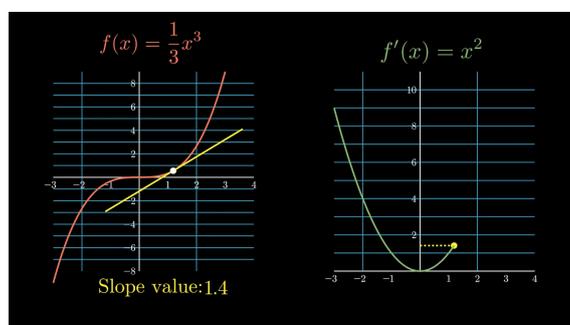


図 2.1: manim で作成されたグラフ例.

2.2 導入

実際に manim を利用するために, 必要なプログラムの導入について記述する. 但し, 私が今回の論文に関わる一切を Mac で行ったため, ここで記述する内容は Mac 準拠のものになる.

また, manim という特殊なシステムの利用を検討している段階では, python や homebrew などの基本的な環境は既に揃っているものと考えられるため, それらの導入については割愛する. なお, Python 3.6 より古い環境では manim が動かないので, 注意すること.

2.2.1 共通事項

manim でアニメーションを作る際, manim 以外にも導入する必要があるソフトウェアやライブラリが存在する. 特に重要なものを以下に示す.

- ffmpeg : 動画/音声処理ソフトウェア
- cairo : グラフィックスライブラリ
- sox : 音声処理ソフトウェア
- latex : 組版システム

この中でも ffmpeg については, 動画の出力時に必須となるので必ず導入すること.

これらはターミナル上で

```
> brew install ffmpeg
> brew install cairo
> brew install sox
> brew cask install mactex
```

と入力し実行することで導入できる.

なお latex はインストールに長時間かかるので, 個人的には 時間に余裕がありかつ安定したネットワーク環境が整っているときにインストールするよう心がけることを推奨する.

2.2.2 manim のバージョンを選ぶ

一口に manim というが, 実際には複数のバージョンがあり, それぞれ僅かに特性が変わる. 私の場合『バージョン毎の特性と自分の作業内容を吟味しなければならない』ということは無かったのでいずれを採用しても良かったが, 今回は manimlib というバージョンを

選んだ。これを選んだ理由としては、数少ない日本語による manim 解説で manimlib が利用されていたからである。他には manimCE や manimcairo などのバージョンが存在する。

manim についてもターミナルで

```
> pip3 install manimlib
```

を実行すれば導入できる。

なお、同じ manim でもバージョンによって使えないコードが存在する場合がありますので気をつけること。例として

```
1 add_coordinates() # 座標軸にラベルを割り振るメソッド
```

というコードは manimCE では使えるが manimlib では使えず、エラーの原因になる。

2.3 構成ファイル

導入された manim に関するファイルは

`usr/local/lib/python3.9/site-packages`

の中に作られる manimlib という名前のディレクトリ内に格納される (Python3.9 の環境下, manimlib を導入した場合)。但し、このファイルは基本手を加えることはないのでもうそこまで重要ではない。

2.4 出力手順

例として、アニメーションのコードが記述された `code.py` というファイルが存在するとする。動画出力する場合は、`code.py` が存在しているディレクトリ内で

```
> manim code.py
```

を実行すればよい。

出力が成功すると、現在のディレクトリ内に新たに `media` というディレクトリが生成されるので

media/videos/1440p60/

と辿っていくことで、出力された MP4 動画を確認出来る。

また

```
> manim code.py -ql -i
```

を実行すれば

media/videos/480p15/

と辿ったところに MP4 動画が出力される。

こちらは画質を落とす代わりに出力速度が上がっており、主に制作途中の確認作業で用いる。

第3章 結果

3.1 ばねモデルによる原子運動と Potential energy の関係

Einstein-model において原子の振動は ある一点に固定されたばねに接続された原子の 3次元調和振動子近似として扱われる為, 図 3.1 のようなモデルを作成する. ばねモデルはそれぞれ固定部 (イメージしやすいように壁に固定されるように描写した), ばね, 原子 (球体部) の三つのパーツから構成されており, シミュレーションではこのモデルを振動させる.

なお現実の原子は三次元空間上で振動している. 今回は ばねの伸縮する方向 の動きだけに着目するが, 他の方向についても同様のことが成り立つということも理解しておく必要がある.

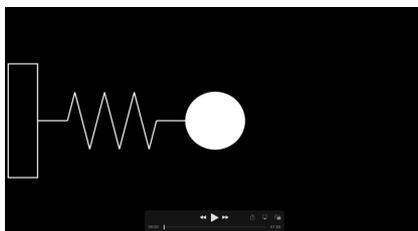


図 3.1: 作成されたばねモデル.

ばねモデルの挙動は, 常微分方程式の数値解法の一つである Euler 法 [3] で定める. 原子の質量 m , 振動中の原子の速度 v , ばね定数 k , ばね長の変化量 x とすると

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m} \quad (3.1)$$

$$\frac{dx}{dt} = v \quad (3.2)$$

の 2 式で示される. なお実行の際は, k は m によって割られ正規化されているものとして扱った.

ここで図 3.1 の原子を左に動かす力の向きを正とすると, このばねモデルにおいてフツ

クの法則

$$F = kx \quad (3.3)$$

が成立する. これを積分した結果が以下の式

$$E = \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.4)$$

であり, これは図 3.1 の原子の Potential エネルギーに等しく, 更に単振動の動きや Potential にも一致する. これらの関係を示したものが図 3.2 であり, 伸縮運動をするばねモデルが任意の状態のとき

- 原子の Potential が 黄色の垂直線と $F = kx$ グラフもしくは $E = \frac{1}{2}kx^2$ グラフとの交点 の x 座標
- 原子にかかる力が 垂直線と $F = kx$ グラフとの交点 の y 座標
- 原子の位置エネルギーが 垂直線と $E = \frac{1}{2}kx^2$ グラフとの交点 の y 座標

でそれぞれ示される.

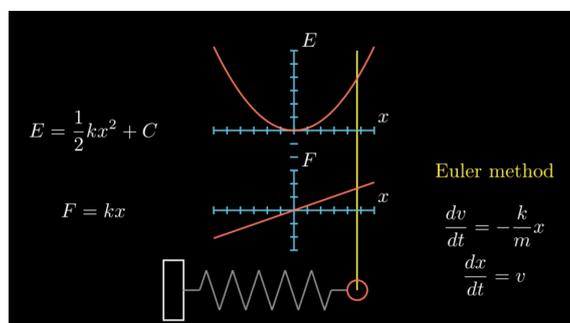


図 3.2: ばねモデルと $F(x)$, $E(x)$ を表すグラフ.

3.2 Einstein 法によるエネルギー計算結果の視覚化

3.1 にて, Einstein-model における原子の Potential energy は単振動するばね振子の Potential energy に見立てることが出来るということを, 直感的に理解してもらえような方法で説明した.

ここでは, 実際にどのようなグラフが描かれるのかを具体的に説明していく.

3.2.1 POSCAR

POSCAR とは, VASP と呼ばれる第一原理計算のためのソフトウェアで必要とされるデータファイルのことである. 今回の目的はあくまでも実行結果の視覚化にあるため, VASP 計算自体は行わない. それ故にここでは VASP に関する具体的な説明は省略する. この中には 物質の格子定数, 原子数, 原子の相対座標 など [4] のデータが入っている (図 3.3).

```
POSCAR
n_expand= 3 x 3 x 1, n_t=5, mirrored,
4.041400000000000
4.1011414643000004 0.0000000000000000 0.0000000000000000 a Lattice
0.0000000000000000 2.5571583294000000 0.0000000000000000 b Lattice
0.0000000000000000 0.0000000000000000 1.0000000000000000 c Lattice

Al Mg
39 1

Direct
0.4884849762933214 0.0091798508329930 0.0000000000000000 Site 1
0.5962001051958126 0.0430266118078890 0.5000000000000000 Site 2
0.3810671166679640 0.0435874609152052 0.5000000000000000 Site 3
```

図 3.3: POSCAR.

Einstein 法による Potential energy = $E^{Einstein}$ は, POSCAR に記述されている 任意のサイトにある原子の座標をある方向にずらす ことで決まる. このことから, ある原子系の $E^{Einstein}$ を求めるためには, その原子系に関する POSCAR データを VASP 計算の入力にする必要がある (なお, VASP 計算には他に三つのデータファイルが必要なので, 別途用意する).

3.2.2 データのフィッティング

今回は VASP 計算を行わないので, 代わりに エネルギー計算の結果 として次のようなサンプルデータを用意する.

$[-0.2, -0.1, 0.00, 0.1, 0.2]$

$d[1] := [-247.55024, -247.65566, -247.69128, -247.65561, -247.55022]:$

$d[2] := [-247.54205, -247.65391, -247.69128, -247.65484, -247.54983]:$

$d[3] := [-247.53877, -247.65407, -247.69128, -247.65407, -247.53883]:$

[-247.69127, 3.52079, 3.62536, 3.82500]

一行目は原子の変位を示しており、二行目から四行目は、それぞれサイト1からサイト3におけるエネルギー計算の結果である。例として、ある原子のサイト2で変位が0であるとき、そのサイトにおけるPotentialエネルギーは-247.69128となる。四行目はそれぞれ、E0, サイト1からサイト3までのそれぞれのフィッティングで得られるグラフの二次の係数を示している。

VASPにより得られたエネルギー計算結果を y 軸に、原子の変位を x 軸にプロットすることで、図3.4のようになる。なお横軸はAA軸、縦軸はeV軸となる。

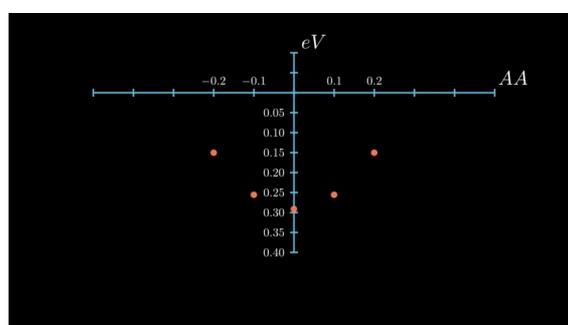


図 3.4: サイト1におけるPotentialエネルギーのプロット。

このデータを二次関数でフィッティングしたものが図3.5示されるグラフであり、この二次の係数をばね定数と見立てると、エネルギー変化のグラフはばねモデルの運動エネルギー変化を表すグラフと見なすことができる。

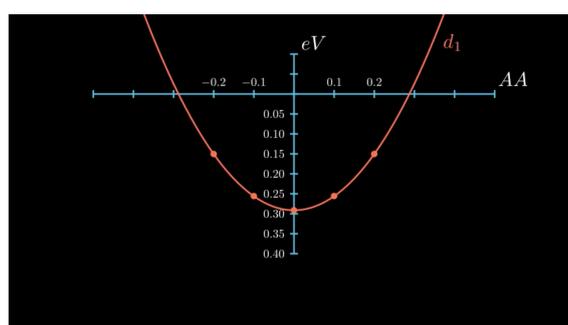


図 3.5: サイト1におけるデータのフィッティングにより得られるグラフ。

3.3 Frenkel 法の原理と現実のエネルギー計算の視覚化

序論でも述べた通り, Einstein 法では 原子は理想的な振動をする独立した 3 次元調和振動子であると近似される. しかし, 現実では原子同士は繋がって互いの挙動に影響を与え合っており, Einstein 法で見なされている様な理想的な動きを示してくれるということはなく, それが Einstein 法で導出された原子の挙動と現実の原子の挙動との差に繋がる.

そこで MonteCarlo-simulation(MC 法)を導入することで, より現実に近い原子の挙動をシミュレートする.

3.3.1 simulated-annealing

MC 法を考える前に, まずはアニーリング法と呼ばれるアルゴリズムについて触れてみる. アニーリング法とは統計力学で用いられる手法であり, MC 法とは基本的な考え方が類似している. そのためアニーリング法による巡回セールスマン問題の最適化について, 道順を配置に, 総移動距離をエネルギーに見立てることで熱平衡 MC 法の原理を理解することが出来る.

アニーリング法のアルゴリズムは次のように示される.

1. パラメータ T を設定する.
2. ある配置 a を現在の配置として設定し, $E(a)$ を求める.
3. 現在の配置とは僅かに異なる新たな配置 $a + \delta a$ を作成し, 同様に $E(a + \delta a)$ を求める.
4. $\Delta E = E(a + \delta a) - E(a)$ を求める.
5. $\Delta E < 0$ ならば新配置を現在の配置として更新.
6. $\Delta E > 0$ ならば, $\exp(-E/T)$ の確率で新配置を更新.
7. 手順 3 以下を適当な回数繰り返す.

3.3.2 巡回セールスマン問題の最適化

ここで, 実際にはアニーリング法で巡回セールスマン問題をシミュレートしてみる. まず T を 0.1 とし, 任意の数の”街”をランダム位置に生成する. 街の生成については, ランダム

な値が格納された同一サイズの二つの配列 x, y を用意し、それぞれの i 番目の要素を街 i の x 座標と y 座標となるようにプログラムを組む。例として、街_1 ならばグラフ上の $(x[1], y[1])$ 地点に表示されることになる。

このようにして生成した街の内の一つを起点として定め、そこから全ての街を回り起点に戻るルートについて上述したアルゴリズムに基づいて更新を繰り返していく。更新毎に

- 現時点での経路図
- 街を辿る順番及び具体的な総移動距離の変遷の表示
- 反復回数とそのときの E の大きさとの関係を示すグラフ

記録していったものが図 3.6 である。

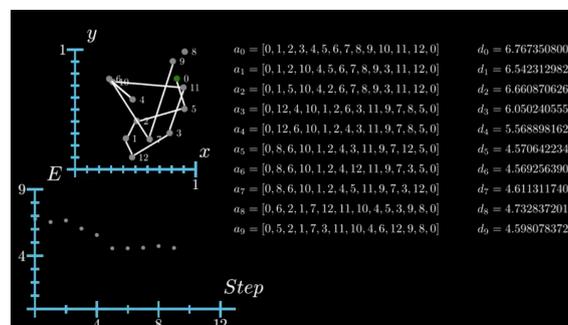


図 3.6: アニーリング法による巡回セールスマン問題の最適化。

今回のシミュレートは manim によるグラフ描画を伴うため、処理が多くなると実行する際非常に時間が掛かってしまう。生成されるランダム値をシードを用いて固定することである程度の軽量化が可能であるが、アルゴリズムが膨大な数の反復を繰り返すと、やはり実行時に支障が出ることは避けられない。

前述の理由に加えて、シミュレートの目的があくまでアニーリング法による最適化の理解であり、具体的な数値を求めているわけではないため、今回は意図的に試行回数を減らしている。

3.3.3 MC 法との関連付け

一般的な計算ソフトを利用すれば、意図的に試行回数を減らす必要はなくなる。その結果得られたデータが図 3.7[5] 及び図 3.8[5] である。なお、ここでは街の数を 16 とし、 T と試行回数はそれぞれ画像の注釈と各グラフの x 軸で確認出来る。

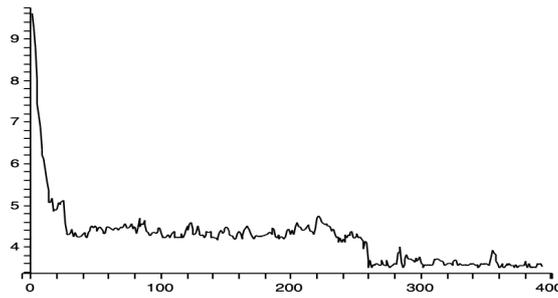


図 3.7: $T = 0.05$ のときの $Step - E$ グラフ.

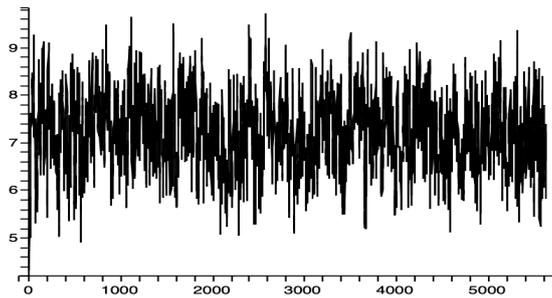


図 3.8: $T = 0.5$ のときの $Step - E$ グラフ.

ここで図 3.6と図 3.7を比較してみると、どちらも試行回数が増えるにつれて $E(a)$ の値が減少していることが分かる。街の数やパラメータ、試行回数などの違いはあるが、パラメータが小さいときの挙動が類似している。なお図 3.8は図 3.7と比べて大きく異なる様子を見せるが、これはパラメータの値の違いに起因する。

アニーリング法のアルゴリズムでは経路配置 (a) や総移動距離 ($E(a)$) などのデータが逐次更新されていくが、更新後の E が前回の E を上回った場合、それらのデータは一定の確率で採用されることになり、その確率に影響を与えているのがパラメータ T である。

余談ではあるが、 $E(a)$ を小さくすることが目的であるにも関わらず $E(a)$ が増加しているデータをも取り入れる理由は、シミュレート結果が $E(a)$ が局所最小値に収束してしまうことを防ぐためである (無論、更新後の E がより少ないものであれば確定で採用される)。

このときパラメータが小さいと 採用される確率が小さくなる = 前回より大きくなった更新データは高確率で棄却される ことになる。結果として E は減少する一方となり、グラフは右肩下がりになる。

一方でパラメータが大きいと、 E が増えた更新データに関しても高確率で採用されることになるため、 E が最小値に向けて収束しにくく、図 3.8のように一定値 (今回は $E = 7$ 前

後) 周辺で揺らぐことになる。

そしてパラメータ T のとき E は一定値 e 周辺を揺らぐ という状況は, MC 法において温度 T の状態で, その原子はエネルギー e 周辺で平行状態にある ことに対応している。

3.3.4 現実の原子の自由エネルギーの導出

Einstein 法で導出された Potential エネルギーを $E^{Einstein}$, Frenkel 法で導出された Potential エネルギーを E^{VASP} とすると, Potential エネルギー E^{total} は

$$E^{total} = \lambda E^{VASP} + (1 - \lambda) E^{Einstein} \quad (3.5)$$

のように E^{VASP} と $E^{Einstein}$ の線型結合で表現される。なお, λ はこの線型結合の式を満たす 0 以上 1 以下の数値である。

さらに, 原子の自由エネルギーを求めるために式 (3.5) を λ で微分すると

$$\frac{dE^{total}}{d\lambda} = E^{VASP} - E^{Einstein} \quad (3.6)$$

となり, これの平均値を $0 \leq \lambda \leq 1$ の範囲で積分したものに, Einstein 法で得られた自由エネルギー $F^{Einstein}$ を加算すると, VASP 計算による自由エネルギー F^{VASP} が求められる。

$$F^{VASP} = F^{Einstein} + \int_{\lambda=0}^{\lambda=1} \left\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \right\rangle d\lambda \quad (3.7)$$

ここで, 横軸を反復回数, 縦軸を E^{total} 及び $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ とするグラフを図 3.9 で提示する。但し, $\lambda = 0$ とする。

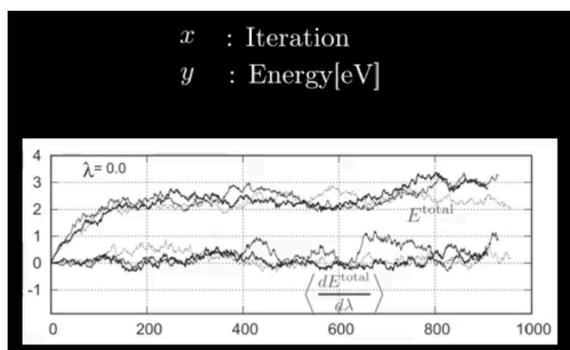


図 3.9: Iteration - eV グラフ [6].

図 3.9 のグラフには E^{total} 及び $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ について、それぞれ色の異なる三本のグラフが描かれている。これは試行回数が三回であることを意味する。

次に E^{total} 及び $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ について、各三本のグラフの平均を取るように点をプロットしていくと、図 3.10 のようになる。

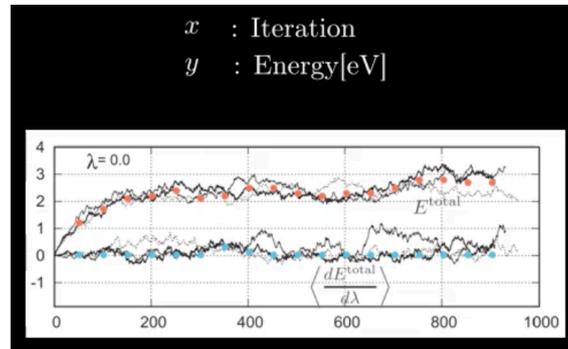


図 3.10: 平均点のプロット. [6]

さらに、ここから $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ が平衡状態になっている部分の値が $\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \rangle$ であることを示したものが図 3.11 である。

今回は $x \geq 500$ のときに平衡状態であるとし、 $x < 500$ の範囲でプロットされた部分は破棄した。また、 $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ を囲む括弧は、その値の平均値を取ることを意味している。

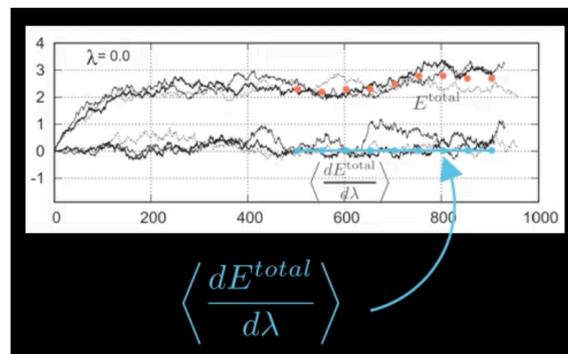


図 3.11: $\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \rangle$. [6]

なお、図 3.9、図 3.10 及び図 3.11 に描写されているグラフは、西谷教授の論文 [6] より引用させていただいたものである。

以上の操作を任意の λ について行い、その都度得られる $\frac{dE^{total}}{d\lambda}$ の最大値、最小値、平均をプロットしていくと、図 3.12 の下側のようなグラフが出現する。

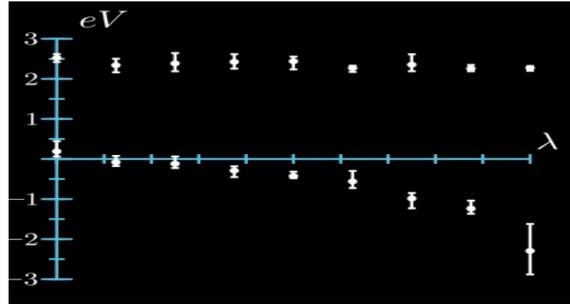


図 3.12: プロットされたデータ.

そして、この平均値を結ぶグラフ (ここでは直線で近似) が作る面積 (図3.13)こそ、 $\int_{\lambda=0}^{\lambda=1} \left\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \right\rangle d\lambda$ である。

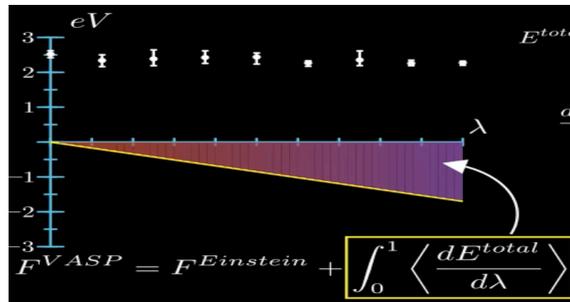


図 3.13: $\int_{\lambda=0}^{\lambda=1} \left\langle \frac{dE^{total}}{d\lambda} \right\rangle d\lambda$.

第4章 総括

今回は、有限温度下での第一原理計算における複雑で難解な部分を如何に直感的に理解してもらえようなものを作るか、ということに重点を置いていた。そのため、かつて自分がこの分野に触れたときのことを振り返り、その時に「こんな資料があれば分かりやすかった」と考えていたものを、出来る限り制作してみた。

結果として出来上がった映像は、直感的な理解を促すものとしては決して悪くはないと考える。

一方で、改善の余地はまだたくさんある。まず、最初のばね振子の単振動に関して Euler 法で処理したため、誤差により振動が発散していくようになってしまった。より精度を上げた Runge-Kutta 法を利用すれば解決するが、処理が非常に複雑になる上に当時はは manim に対する知識も殆ど無かったため断念せざるを得なかった。

それ以外にも、今回はシミュレーションという部分に重きを置いていたため、例えば Einstein 法により得られる自由エネルギー $F^{Einstein}$ のように最終的に F^{VASP} を導出する式の中に出現する重要な要素であるがアニメーションによる説明に不向きなものに関してはアニメーションの制作だけでも手一杯だったこともあり無視してしまったり、相当量の計算を反復処理するアルゴリズムのシミュレーションとアニメーションエンジンとの相性の悪さを予測することが出来なかったために、反復処理を圧倒的に減らす必要が生じ、結果と既出データの比較が容易ではなくなる、など不完全な部分がまだ残されている。

今後の課題は、映像による説明に向かない部分や処理速度の関係でアニメーションエンジンと相性が悪い部分などにおいては、別途計算ソフトを利用する等”アニメーションでの説明”に固執しすぎることのない柔軟な対応をしていくことで、きちんと説明の中に取り入れていくことである。

謝辞

本論文作成にあたり、西谷教授より数多くの助言、ご指導を賜りました。この場で深謝申し上げます。並びに西谷研究室に所属する皆様におかれましても、研究を進める上で多くの助力をいただきまして、心より感謝致します。この度は誠にありがとうございました。

参考文献

- [1] A. Einstein(1907), Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme, *Ann. Phys. (Leipzig)* 327, pp. 180190.
- [2] Manim Tutorial — Graphing with Updaters — Tutorial 5, Manim Explained, <https://www.youtube.com/watch?v=kXqAme1jCmg> (accessed on 9 Sep. 2021).
- [3] S. R. Nishitani, 数値計算による微分方程式解法, 1.2, https://nbviewer.org/github/daddygongon/jupyter_num_calc/blob/master/numerical_calc/ode/python_ode.ipynb (accessed on 9 Sep. 2021).
- [4] 山田真人 (関西学院大学, 2021). Al 111 表面での Frenkel 計算, 卒業論文, 4.(未公開)
- [5] S. R. Nishitani(学振状態図セミナー, 2011). 状態図と統計力学の基礎, 10, <http://www.intechopen.com/articles/show/title/metastable-solvent-epitaxy-of-sic-the-other-diamond-synthetics> (accessed on 20 Jan. 2022).
- [6] S. R. Nishitani(2021). Finite-temperature first-principles calculations of Al $\langle 100 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary energy, *Philosophical Magazine*, Vol.101, Issue 5, 622-642.