

計算化学のための曲面可視化に関する C#コアプログラムの開発

○吉永崇、野口文雄、小林秀彦 (埼玉大工)

埼玉大学工学部応用化学科(〒338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255)

【緒言】数値シミュレーションなどから得られた膨大な量の数値データは、それらを見ただけで計算結果の全体を把握することが困難である。そのため、グラフの作成など数値データの可視化が必要となる。とりわけ、等値面として表現され得る三次元のデータでは、可視化がその計算結果の理解に非常に有効である。そこで、三次元の等値曲面を可視化するためのコアプログラムを作成した。

【方法】コンピュータでの曲面の表現は面上に存在する複数の点の空間座標を求め、これらの点を頂点とする三角形のパッチを作成し、曲面に割り当てることで可能となる。しかし、算出された膨大な数の点から適切なパッチを作成することは困難である。そこで、我々は空間を微小六面体に切り分け、各六面体と曲面との交差パターンから容易にパッチを作成するプログラムを開発した。しかし、六面体と曲面との交差パターンは多様であり、4つ以上の交点からなるパッチの組み合わせは1つに定まらず、実際の曲面とは矛盾したパッチを割り当ててしまうケースがある。そのため今回は、空間を切り分けるメッシュを立体図形の中で最も基本的な四面体に変更し、四面体の稜線と曲面との交点をもとに、四面体内部でパッチを作成した。手順は以下のとおりである。

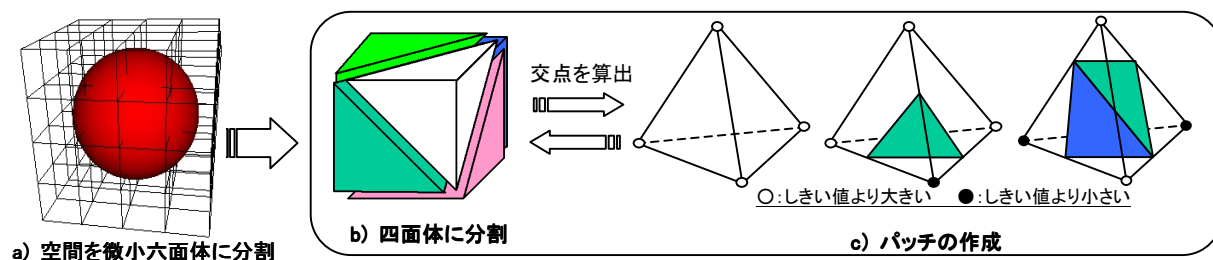


Fig. 1 空間の切り分けと三角形の割り当て

- ①四面体メッシュの作成：空間に敷き詰めた各六面体を六個の四面体分割した(Fig. 1 - b)。
- ②交点の算出：まずメッシュの各頂点における値を算出する。そして、各格子点上の値を等値面における値(しきい値)との大小で分類し、端点の一方の点がしきい値より大きく、もう一方がしきい値より小さいとき、曲面がその稜線と交差するとみなし、線形補間を用いて交点を算出した (Fig. 1 - c)。
- ③パッチの作成：四面体内で作成されるパッチのパターンはしきい値に対する各格子点における値の大小の組み合わせで決定でき、それを大きく分けると僅か3通り(Fig. 1 - c)となるので、あらかじめそれぞれのパターンごとにテーブルを作成し、それをもとにパッチを作成した。

【結果】四面体メッシュを用いることにより、メッシュ内部で作成されるパッチの数は0~2個と少なくなり、六面体メッシュを用いたパッチ作成の際に生じる矛盾を解消できた。また、四面体と曲面との交差パターンを分類して、それぞれに対応した三角パッチをあらかじめ用意したため、我々がこれまで開発してきた曲面可視化プログラムよりも大幅に高速化された。最後に、出力例としてスピノーダル分解シミュレーションの結果と面心立方格子(fcc)のフェルミ面をそれぞれ Fig. 2, 3 に示す。この結果から、本プログラムを使用することにより、様々な形状の曲面を容易に可視化できることがわかった。従って、本プログラムは科学技術計算の結果の可視化に応用できると考えられる。

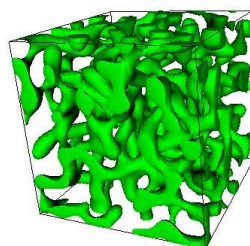


Fig. 2 スピノーダル分解

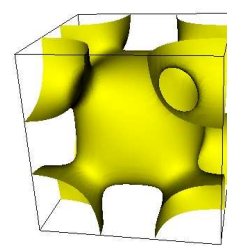


Fig. 3 fcc のフェルミ面

【参考文献】1) 吉永崇、野口文雄、小林秀彦、日本コンピュータ化学会 2005 秋季年会, 1P04