

核座標の変化に伴う分子軌道変化のリアルタイム可視化表示

— 等値面 —

○中 貴俊¹, 山本 茂義², 秦野 やす世³, 遠藤 守³, 山田 雅之³, 宮崎 慎也³¹中京大学情報科学研究科(〒470-0393 愛知県豊田市貝津町床立 101)²中京大学教養部(〒466-8666 名古屋市昭和区八事本町 101-2)³中京大学情報工学部(〒470-0393 愛知県豊田市貝津町床立 101)

【はじめに】

分子軌道は電子の挙動を記述するための基本となる空間分布量であり、分子軌道の形状を把握することは、反応のメカニズムを解明するうえで重要である。分子軌道の図形表現については、断面の等高線や鳥瞰図による表現、等値面のワイヤーフレームによる3D表示等が用いられている[1,2]。これらは原子分子の電子状態や特徴を把握するのに役立つが、ある断面での2D表現や等値面表示は基本的に電子密度情報の一部しか表現できないため、軌道全体を理解するためには複数の画像が必要となる。また、軌道の特徴がよく表現された画像を得るためには、適切な断面や等値面を選ぶ必要があり、経験的な知識や試行錯誤が必要であった。その後、急速に進歩したコンピュータグラフィックスの技術を用いてこれらの情報を3次的に可視化しようという試みが、ここ十数年の間に盛んに行われてきた[3]。

一方、核座標の変形に伴う分子軌道の変化が理解できれば化学反応の予測などに有効であることは周知のところである。また、内部節面[4]は分子のRydberg軌道の対称性の帰属や分子軌道の分類に重要な情報を提供する。しかしながら、その可視化の方法については、あまり議論されてこなかった。

本研究の目的はリアルタイムCGを利用した分子軌道変化の可視化にある。過去に、我々はリアルタイムCGの技法におけるテクスチャマッピングを利用したボリュームレンダリング手法を用いて、多原子分子の分子骨格中の特定の原子を、あるパスに沿って移動させた際の分子軌道変化を雲状オブジェクトとしてリアルタイムでの表示を実現し報告した[5,6]。この方法は、数値計算によりあらかじめ求められた複数の分子軌道データを基に描画するため、GPUが基本的なテクスチャマッピングの機能を有してさえいれば分子軌道の再計算を必要としないリアルタイムでの表示が可能であり、通常のPCでの利用が可能となる点で有利であった。しかしながら、はっきりとした輪郭を有し、形状として認識できる等値面表示への期待も寄せられた。

そこで本研究では、テクスチャマッピングを利用したボリュームレンダリングにおいて等値面においても雲状オブジェクトと同様のリアルタイム性を維持し提供する補間手法を実現した。このアルゴリズムに基づいて、分子軌道描画プログラムシステムMOOTIC (Molecule Orbital Observation Tool with Iso-surface and Cloud)を開発した。このプログラムには、本研究の描画アルゴリズムに加え、従来の描画機能も数種類備えており、利用者の目的に最適な描画方法に切り替えて分子軌道を表示することができる。

【分子軌道描画システム—等値面表示—】

通常、ボリュームデータの等値面表示には、MarchingCubes法や四面体メッシュを用いた方法などが考案されており、これら的高速化手法も確立されている[7-9]。このため、PCの性能の進歩に伴って

リアルタイム処理可能なケースは広がりつつある。これらの手法は基本的に単一のボリュームデータを対象としたものである。これに対し、本研究で目的とする核座標の変化における分子軌道の等値面変化の表示を実現するには、複数の分子軌道データの補間状態を表示する必要がある。補間状態の等値面をボリュームデータを求めることなくリアルタイムで表示するためには、異なる等値面の補間状態を求めるアルゴリズムを確立する必要があるが、実現は容易ではない。そこで本研究では、テクスチャマッピングを利用したボリュームレンダリングにおいて等値面においても雲状オブジェクトと同様のリアルタイム性を維持し提供する補間手法を実現した。

【MOOTIC (Molecular Orbital Observation Tool with Iso-surface and Cloud)】

核変化に伴う MO の変化を可視化するためのプログラム MOOTIC を開発した。MOOTIC では、観察目的に適した 5 種類の表示を自由に切り替えることができ、視点もマウスを利用し、自由に分かりやすく変更することができる。このプログラムは OpenGL[10]を基礎としており、可搬性が高い点も特長のひとつである。現在、Windows, Linux 環境下で稼動しており、分子科学者への利用に供するよう試用版を WEB サイトで公開している。

開発言語は C++で、描画には windows, Linux 共に OpenGL を用い、windows 版での GUI 操作部分については Microsoft .NET FrameWork を用いて開発した。

MOOTIC では核変化に伴う MO の変化を可視化することを目的とした雲オブジェクト、等値面(雲)による表示、また MO の輪郭・形状を把握することを目的とした、等値面(面、ワイヤフレーム、点)による表示がおこなえる。また、内部節面への応用を考慮し等値面での表示法においては透過度を自由に変更する機能を付加した。

【むすび】

本研究ではボクセルデータとして与えられた分子軌道データに基づき、分子骨格の変形に伴い分子軌道が変化する様子を、5 種類の表示によりリアルタイムで表示する分子軌道描画プログラム MOOTIC を開発した。分子軌道計算結果の可視化解析ツールとして、分子の電子状態の特徴を把握するのに役立つことが期待できる。当日は MOOTIC のデモを行う予定である。

【参考文献】

- [1] 神沼二真, 鈴木勇, 「分子を描く」(啓学出版, 1988) .
- [2] T. Helgaker, P. Jorgensen, and J. Olsen : "Molecular Electronic-Structure Theory", John Wiley and Sons, 2000.
- [3] The Journal of Computer Chemistry, Japan, Vol. 5, No. 3 (2006).
- [4] Y. Hatano, S. Yamamoto, and H. Tatewaki, J. Comput. Chem., 26, 325-333 (2005).
- [5] 中貴俊, 山本茂義, 秦野やす世, 山田雅之, 宮崎慎也, Journal of Computer Chemistry, Japan, Vol. 1, No. 4, pp. 135-142, Dec. 2002
- [6] 中貴俊, 山田雅之, 宮崎慎也, 秦野やす世, 山本茂義, 電子情報通信学会 MVE 研究会, 2002-6, 東京, Jun. 2002
- [7] T. Itoh, and K. Koyamada, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol. 1, No. 4, pp. 319-327, 1995.
- [8] P. Cignoni, P. Marino, C. Montani, E. Puppo, and R. Scopigno, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol. 3, No. 2, pp. 158-170, 1997.
- [9] S. Grimm, S. Bruckner, A. Kanitsar, and E. Groller : Memory Efficient Acceleration Structures and Techniques for CPU-based Vol
- [10] J. Neider, T. Davis, and M. Woo : OpenGL Programming Guide, Addison-Wesley, p. 478, 1993.