

## 化学情報用インタフェース

分子モデリング・システムCACHe (キャッシュ) を例に、入力/表示/編集等について述べる。

八田 進平

ソニー・テクトロニクス株式会社 DA事業部 キャッシュ部

機械系、電気系のCAD (Computer Aided Design) システムは広く浸透し、成熟期を迎えている。しかし、そのユーザ・インタフェースは、入力や表示方法などを考えると、更に改善の余地がある。一方、化学系のCADは未成熟であるが、これからの成長が期待されている分野だ。ここでは、計算機の利用を余り得意としない実験化学者用に開発されたCACHe (Computer Aided Chemistry) システムを例にそのユーザ・インタフェースを紹介する。CACHeはパソコン・ベースの化学系CADで、立体表示、入力、編集などに特徴があり、直感的なインタフェースで操作ができる。

## INTERFACE FOR CHEMICAL INFORMATION

Shimpei Hatta

CACHe Division, DA Business Divisions, Sony/Tektronix Corp.

1-5-31 Osaki, Shinagawa-ku, Tokyo 141, Japan

Mechanical CAD (Computer Aided Design) and Electronical CAD systems are widely used in Japan and becoming mature products. However, user interface for those have still some room for improvement. On the other hand, Chemical CAD system is still an immature product at present but expected to be growing in the next two or three years. Here I cite CACHe system (or Computer Aided Chemistry system) as an example, which is originally designed for experimental chemist or bench chemist, to introduce a part of the intuitive interface based on personal computer. It enables the user to operate CACHe system with stereoscopic view and the special three dimensional input/edit devices.

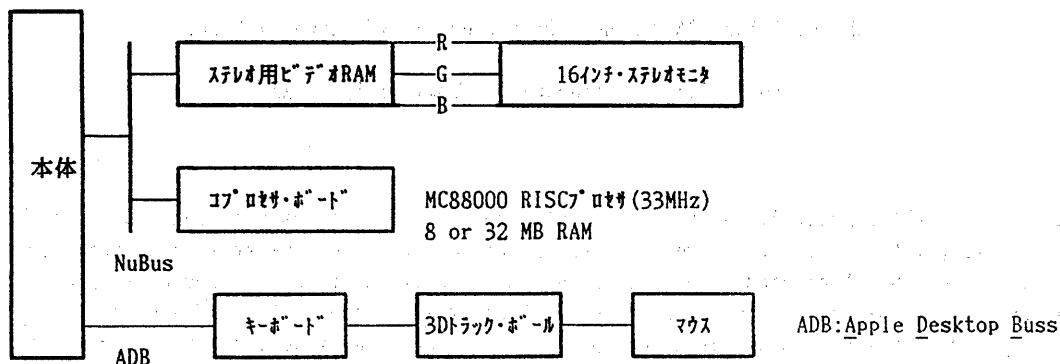
## 1. はじめに

化学系CAD、CACHeシステムの立体表示/入力/編集機能を中心に、使い易い化学情報用のインタフェースについて述べる。

1880年初頭、チャールズ・フィーストン氏により発明されたステレオスコープは、以降継続的に使用され、世界中に普及している。現在では、サイエンス・フィクション映画、NC工作機、医療分野に至るまで、立体表示はその応用範囲を拡大している。化学の分野では、数年前から分子モデルの可視化に対するニーズは高かった[1]。ところが、解析には膨大な計算を伴うため大型計算機またはスーパーコンピュータを必要とし、その可視化には高価な三次元表示装置を利用した。従って、誰でもが使える環境を作れなかった。昨今の計算機の進歩とグラフィックスの技術革新がパーソナル・コンピュータでの解析、可視化、更には立体視を可能にしたと言えよう[2]。CACHeシステムは1989年に米テクトロニクス社の研究所で一号機が生まれた。日本では、1991年4月に販売が開始されている。

## 2. システム構成

CACHeシステムの構成例を図1に示す。アップルコンピュータ社のMacintoshをベースに、ステレオ用のビデオRAM、コプロセサ・ボード(MC88Kプロセサ使用)がNuBus上に装備されている。16インチ・カラー・ステレオモニタは立体視をするときのオプションで、モニタの前面に液晶シャッタがついている。コプロセサ・ボードは高速の演算用に装備されており、解析用のアプリケーション・プログラム(分子軌道法、分子動力学法など)を実行する場合、コンピュータ・エンジンとなる。またグラフィックス・アプリケーションを利用するときはグラフィック・エンジンとなり、Macintoshの画像処理を高速化する。CACHeの立体視は、左右両目の画像を同時に出力するため、通常の約倍のスピードが必要である。Macintoshをプラットフォームに選らんだのは、直感的で分かりやすい操作が魅力的だった事、また化学系の分野でポピュラーになりつつあった事による。これらの条件が揃えば、特にプラットフォームを制限する必要はない。



本体: Macintosh IIシリーズ、Centris650、Quadraシリーズ

図1 システム構成例

### 3. 立体操作

#### 3-1) ステレオスコピック・ディスプレイ (立体視)

蛋白質やDNA (デオキシリボ核酸: 図3) のように複雑な分子モデル、C60 (図2) のような球状分子モデルの表示、また結晶モデルの表示には、立体視が有効である。化学者は時間をかけて分子模型を組上げ、目に見えないモデルを想像してきた。従来の平面的な三次元ディスプレイでは、臨場感や実在感が表現しにくい。そこで古くから立体表示の技術が開発されてきたが、画質の悪さや機構の複雑さが障害となり、実用化されている例は少ない[3]。殆どの立体ディスプレイ技術は、両眼視差 (Binocular disparity) の概念を前提にして開発されている。つまり、私達の両眼は左右異なる位置から物体を見るために、網膜に写る物体は左右で多少違った像となる。この違いが両眼視差と呼ばれるもので、距離間を認識する上で重要な要素である。

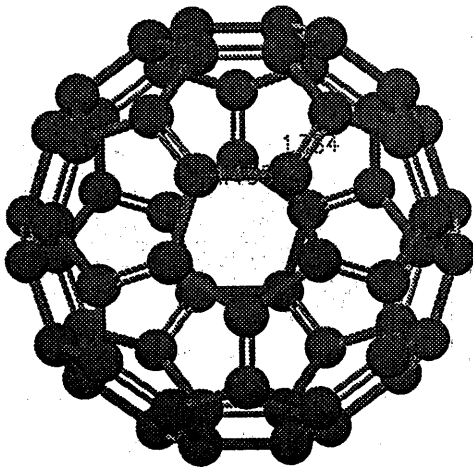


図2 C60(フラーレン)  
サッカーボールに似た炭素60個の分子

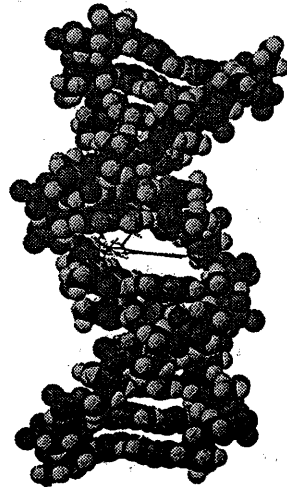


図3 DNAモデルの一部  
DNAに薬物がインターカレートしている

最も簡単なのは、アナグリフ (Anaglyphs) 式あるいはカラー・エンコード方式である。例えば左目用の絵は青色のデータとして送られ、右目用の絵は赤色のデータとして送られるので、赤と青色のレンズを通すと像が認識できる。しかし、この方式の立体画像は鮮明さに欠け、見にくく、目の疲労を引き起こす欠点を持つ。たとえば、左目は赤、右目は青の画像を見るために、視覚システムに不調和が起こる。これを視野闘争 (retinal rivalry) と呼び、見る人に不快感を感じさせる。

画像の良い立体表示の方法は、サイド・バイ・サイド式 (図4)、デュアル・ディスプレイ式 (図5)、フィールド・シーケンシャル式 (図6) がある[3]。サイド・バイ・サイド式は、方式としては簡単だが、眼が疲労しやすいこと、奥行方向のアドレスサビリティに制限があると言う欠点がある。デュアル・ディスプレイ式は、ビューイング位置が固定されてしまう。また、一人につき二台のモニタが必要なので、コストが高くなる。

CACheシステムでは、液晶ステレオ・スイッチ (LCSS; Liquid Crystal Stereo Switch) を用いたフィールド・シーケンシャル方式を採用している。

フィールド・シーケンシャル式のステレオ・ディスプレイは、二つのビューを交互に表示する方式で、モニターは一つで良い。各フレームは二つのフィールドで構成され、走査している。つまり、フィールド1の間には右目のビューが表示され、フィールド2の間には左目のビューが表示される。各ビューは一時的にビデオRAMに保持される。LCSSはモニターの全面に装備されており、直線偏光板、パイ・セル、 $1/4$ 波長板の三つの部分から構成されている。各ビューは、左回りの円偏向と右回りの円偏向にエンコードされる。これを円偏向のメガネを掛けてデコードすると、左目には左目用画像、右目には右目用画像が受け取られる。フレーム・レートは60Hz (左右合計すると120Hz) でちらつきのない安定した画像が見える。

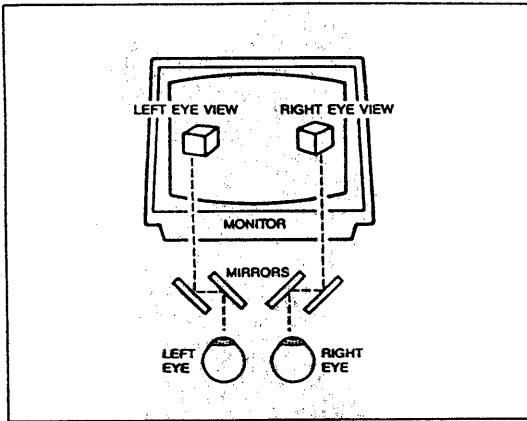


図4 サイド・バイ・サイド 式

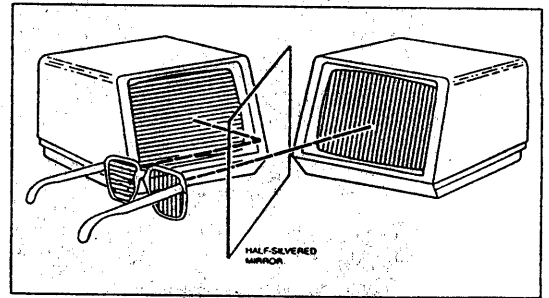


図5 デュアル・ディスプレイ 式

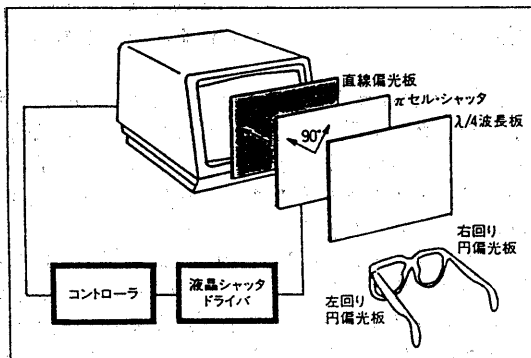


図6 LCSSによるフィールド・シーケンシャル・ディスプレイ

LCSS方式を用いたメリットは次のようになる。

- \* ちらつきのない高解像度の立体イメージを表示
- \* 軽量で使い易いコードレス円偏向メガネを使用。
- \* 同時に多人数で見ることができる。
- \* 液晶シャッターが高透過率であり、日常の照明環境で使える。

立体視の感覚は個人差があるため、視差角やビューイング・ディスタンスの変更が容易になっており、各個人に適した環境パラメータを設定できる。

### 3-2) 3Dカーソル (図7)

CACheの入力/編集、可視化のツールは、三次元のカーソル(3Dカーソル)をもっている。マウスとキーボードのコントロール・キーを併用すると、入力用カーソルが立体的に動く。カーソルが飛び出してきたり、引っ込んだりする。込み入った分子モデルの結合長や結合角、二面角を調べるとき、また球状分子などの入力/編集には有効である。

この3Dカーソルはボックス・カーソル(可変な直方体のカーソル)にもなり、ボックス内にある原子すべてを選択(セレクト)、取り出し(カット)、消去、移動したりできる。置換基を一度に選択し、消去したり、結晶モデルの一部を取り出して、新たなファイルに写す(ペースト)事ができる。

3Dカーソルは、原子または分子単位での操作ができる。例えば同一原子を一度に選択したり、予め登録されている分子モデルを立体的操作で配置する事ができる。



図7 3Dカーソルの例

### 3-3) 3Dトラック・ボール

これまでのトラック・ボールは、二軸(例えばX、Y軸)の入力しかできなかった。CACheシステム用に開発された三次元トラック・ボール(3Dトラック・ボール)は三軸の入力ができる。3Dトラック・ボールには、三つのスイッチがあり、図8-1の左から回転(Rotate)、移動(Translate)、拡大/縮小(Scale)の機能が割り当てられている。スイッチを一回クリックすると、その機能が使用可能になる。例えば図8-2では、一番左のスイッチが押されたので回転機能が動くようになっている。ボールをZ軸回転(横またはX軸に沿って回す)、X軸回転(縦またはY軸に沿って回す)、Y軸回転(回転またはZ軸に沿って回す)すると分子モデルがそのボールの回転に同期して動く。

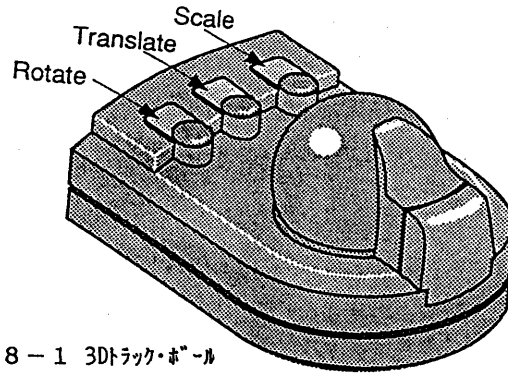


図 8 - 1 3Dトラック・ボール

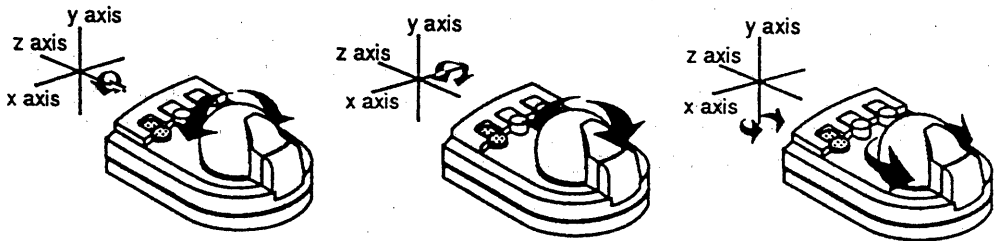


図 8 - 2 回転

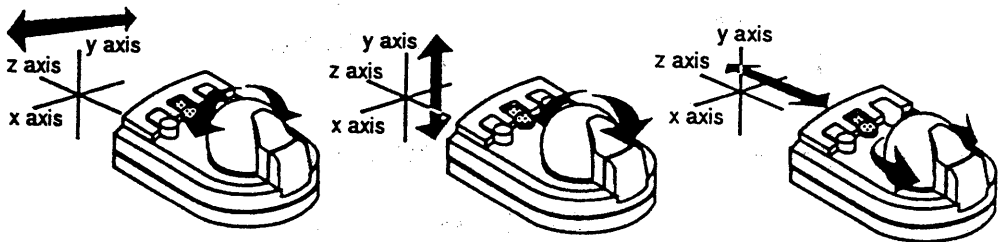


図 8 - 3 移動

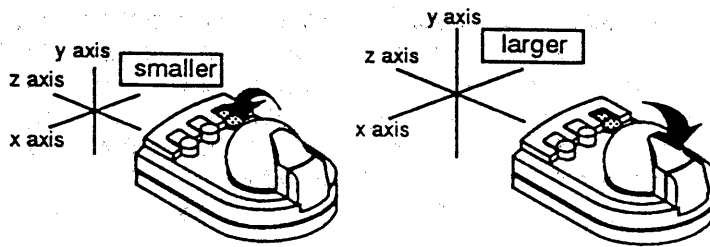


図 8 - 4 拡大／縮小

ステレオスコピック・ディスプレイと3Dトラック・ボール及び3Dカーソルを併用すると便利である。例えば、3Dカーソルで選択した部分を立体視しながら回転、移動、拡大/縮小することができる。また、重ね合わせやドッキング・コンフォメーションの推定も容易に行える。

#### 4. その他のインタフェース

##### 4-1) データ交換

ここまでユーザ・インタフェースについて述べたが、CADにはデータ交換も必要である。計算機システムがこれだけ広く使い出されると、スタンドアロンのような利用法だけでは満足できない。一つのシステムで総てをカバーできればよいが、通常は他のシステムと一緒に使われるので、親和性は重要である。C A C h eでは、多く利用されているデータベースのフォーマット、他のソフトウェア・パッケージとデータ交換できるように、予めいくつかのフィルター・ソフトウェアが用意されている。C A C h eで作成された分子モデル・データは他のシステムでも利用できるし、他システムで利用しているデータの多くはC A C h eシステムでも利用できる訳だ。

##### 4-2) ファイル・フォーマット

化学情報、特に分子モデル・データ(物性値を含む)に関しては、業界標準的フォーマットが定まっていない。殆どの場合、独自のフォーマットを採用しており、その内容が開示されている。パワーのあるユーザならファイルの特定内容を読み出して、他のアプリケーションに利用できる。テキスト・ファイルであれば読み書きは容易である。C A C h eファイルは分子モデルの構造物性値などがオブジェクト、クラス、属性別に整理されており、ファイルの読み出しや書き込み時に便利である。

##### 4-3) ユーザ・コマンド

汎用システムを使っていると、ユーザ独自のコマンド(ユーザ・コマンド)を作成/登録/変更し、利用したくなる。通常、システムがサポートしていなければ実現は難しい。

C A C h eにはプロジェクト・リーダーという機能があり、ユーザがメニュー選択により計算の手順、計算結果の利用方法などを指示できる。また、四則演算、関数入力もできる。つまり、計算の解法やプログラミング手法を熟知しなくても、解析結果を利用できる。例えば、四つの分子モデルA、B、C、Dの特定原子に対するパーシャル・アトミック・チャージをAM1[4]から得て、計算結果と実験値の相関をグラフ化するという一連の操作を簡単に指示できる(図9)。計算結果は自動的にインプットされるので、マニュアル入力は不要である。

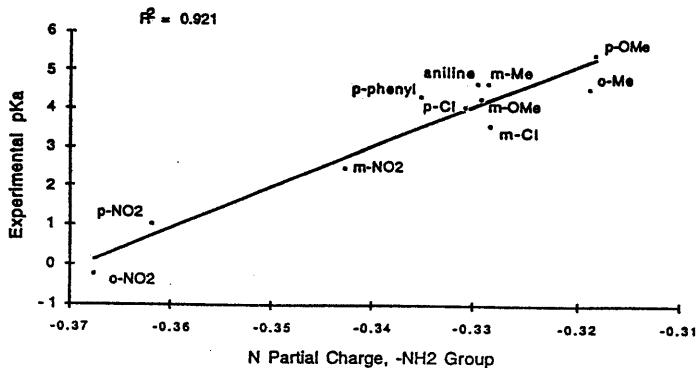


図9 プロジェクト・リーダーで求められたpKa

#### 4-4) 解析の可視化

半経験的分子軌道法AM1[4]や分子力学法[5]で計算された結果をコンピュータ・グラフィックスの技術を利用して可視化すると、新たな発見ができる場合がある。等電子密度面、等静電ポテンシャル面、分子軌道図、フロンティア分子軌道図などを可視化すると、反応性を定性的に予測するのに役立つ[6]。

#### 5. 終わりに

これまでCACHeシステムの各種インタフェースにつき紹介した。今後、実験、分析に従事する所謂実験化学者も、計算機を利用して多くの計算化学用ソフトウェアを利用することだろう。それには、なるべく親切で利用範囲の広いインタフェースを考えるべきだ。実験や分析の新たな発想が生まれる可能性もあり、また、それらのトライアルの回数を減らすだけで、相当の時間と費用の削減ができる[7]。更なる解析ソフトウェアの進歩を望むと同時に、使いやすいシステムの構築に力を入れていきたい。

#### <参考文献>

- [1] "次世代グラフィックス・コンピューティング環境の開発と普及促進に関する調査報告書"、日本コンピュータグラフィックス協会、1988。
- [2] 八田、"CG OSAKA ガイドブック(P28-33)"、June 1992。
- [3] Richard DeHoff、"次世代三次元コンピュータグラフィックス"、シーテクトロニクス、1986年。
- [4] M.J.S Dewar, J.J.P Stewart, and S. Olivalla, J. Am. Chem. Soc., 1986, 108, 5771
- [5] Ulrich Burkert, Norman.L. Allinger, "Molecular Mechanics", American Chemistry Society, 1982
- [6] George.D. Purvis III, Journal of Computer-Aided Molecular Design, 5(1991)55-80
- [7] "A White Paper", CAChe Scientific, Inc., Jan. 1992