Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

携帯機器とのインタラクションを持った分子シミュレーション可視化システム

稲田純也[†1]　笹倉万里子[†1]

本研究では，PC と携帯機器を連携させた分子シミュレーションの可視化システムを提案する．分子シミュレーションの可視化では，分子の動きや変化を三次元表示やアニメーション表示をすることが多く，従来の PC のみのシステムでマウスを使ってインタラクションを行う方式では回転などに関して直感的な操作が難しかった．本研究では PC と携帯機器を連携させ，携帯機器の加速度センサを用いた直感的な操作で三次元オブジェクトを操作するシステムを構築する．

A visualization system for molecular simulation interacting with mobile devices

Junya Inada[†1] and Mariko Sasakura[†1]

We propose a visualization system for molecular simulation which interacts with mobile devices. Visualization systems for molecular simulation use 3D graphics and animation to represent movements of molecules. In usual PC systems, a mouse have been used to operate 3D objects. However, some operations, such as rotation, are not intuitive by a mouse. In this paper, we report a system in which we operate 3D objects by mobile devices with 3D acceleration sensor.

1. はじめに

分子動力学法などの分子シミュレーション[11] では，シミュレーションの結果得られるデータが膨大であるために，それらを可視化して見るのが一般的である．可視化システムとしては MicroAVS などが用いられることが多い．

分子シミュレーションでは，分子の動きや変化をシミュレーションする．その結果を可視化したものは分子一つ一つを三次元オブジェクトとして表示し，時間的な変化をアニメーションを用いて表示することが多い[5),6),10)]．このような表示方法の場合，可視化結果が表示されるのは通常二次元ディスプレイで，マウスを用いて操作されることが多いため，以下のような問題点がある．

(1) **三次元オブジェクトの回転操作の問題**
三次元オブジェクトを回転させる操作の場合，どの軸に対して回転させるかをマウスで指定するのが直感的でない．

(2) **三次元オブジェクトの内部表示の問題**
複数の三次元オブジェクトが重なった場合その内側を見ることが難しい．例えば複数の三次元オブジェクトが集まって凹物体を形成している時にその内側面または断面と全体を同時に見ることができない．

(3) **時間的変化に関する問題**
アニメーションで示される変化の一部分を取り出して全体との関連を調べることが難しい．

特にこのうち 2, 3 番目の操作は，情報視覚化の分野で全体と注目点を同時に見る「フォーカス＋コンテクスト技術」と呼ばれている技術の一形態であるととらえることができる．フォーカス＋コンテクスト技術は，情報を把握するために効果的といわれている手法である[12)]．

一般に三次元オブジェクトを操作するのは難しいと考えられ，この問題を解決するためにこれまでに様々な研究が行われている．例えば，バーチャルリアリティを使う方法が提案されている[1),2)]．分子をバーチャルリアリティを用いて立体的に表示し，それをデータグローブ等三次元入力が可能なデバイスで操作する方法である．しかし，バーチャルリアリティを実現するには特別な装置が必要とされ，しかもそれが高価であるいう欠点がある．

それに対し，三次元的な操作を手近にある装置で実現するさまざまな試みがなされている．その一つが任天堂 Wii に付属しているリモコン (以下 Wii リモコン) を使った研究である． Wii リモコンは，加速度センサ，赤外線 LED を内蔵し，しかも安価で手に入る．パーソナルコンピュータに対して，マウスの代わりに Wii リモコンをポインティングデバイスとして用いるという研究などが行われている[7)–9)]．この場合，Wii リモコンを三次元空間内で動かすことができるので，マウスよりも直感的に三次元オブジェクトを操作することが

†1 岡山大学
Okayama University

ⓒ2010 Information Processing Society of Japan

Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

できる．

同様に注目されているのが，携帯機器，特に携帯電話である．携帯電話は，ほとんどの人が所持しており，しかも，今や一昔前のパーソナルコンピュータと同等の計算性能を持っており，携帯電話上で分子シミュレーションプログラムそのものを動かす研究も行われている[15]．最近の携帯電話には三次元加速度センサを内蔵しているものがあり，例えば投げる動作を行ってメールを送信するなどのアプリケーションがある[16]．

携帯電話の中でも特に iPhone や iPhone と同じプログラムが動作する携帯音楽プレーヤー iPod touch は，三次元加速度センサやマルチタッチスクリーンを備えており三次元的な操作に利用しやすい．4) では，バーチャルリアリティシステムである CAVE の入力デバイスとして iPhone/iPod touch のタッチスクリーンを使う方法が提案されている．三次元オブジェクトだけでなく，一般的にこれらを利用して他の機器の入出力デバイスとして使用する研究も行われている[3]．

本研究では，iPod touch または iPhone (以下 iPod touch と略す) とパーソナルコンピュータ (以下 PC) を組み合わせて分子シミュレーションの結果を表示するシステムを提案する．iPod touch は加速度センサを内蔵しており，さらに情報を表示するためのタッチスクリーンを備えている．加速度センサを用いて三次元操作を行い，三次元オブジェクトの断面やアニメーションの中の 1 ステップを iPod touch のスクリーンに表示することで前述の三つの問題点を解決する．本稿では，このうち iPod touch の加速度センサを用いた三次元オブジェクトの操作について述べる．

2. 基本アイデア

開発するシステムでは，1 節で述べた三つの問題，すなわち，三次元オブジェクトの回転操作の問題，三次元オブジェクトの内部表示の問題，時間的変化に関する問題を解決するため，iPod touch を PC に対する入力および出力デバイスとして用いる．これにより，以下のようにしてそれぞれの問題の解決を図る．

(1) 三次元オブジェクトの回転操作の問題
iPod touch を傾けることで，PC に表示された三次元オブジェクトを回転される．iPod touch には X, Y, Z の三軸の加速度センサが内蔵されているので，三次元の動きをその傾きで検知することができる．これを利用することで三次元オブジェクトの回転を簡単に指定することができる．

(2) 三次元オブジェクトの内部表示の問題
三次元オブジェクトの全体と断面を同時に表示することで解決する．iPod touch の傾きで断面を指示し，例えば，三次元オブジェクトの全体を PC の画面に，断面を iPod touch の画面に表示する．このようにして三次元オブジェクトの全体と断面を同時に見ることができる．

(3) 時間的変化に関する問題
PC の画面でアニメーションを表示しながら，その任意のステップを iPod touch の画面に表示させたままにすることで解決する．iPod touch を複数使えば，複数のステップを同時に見比べることも可能となる．

これらのアイデアを実現するためには，

- PC と iPod touch をどのように連携させるか
- iPod touch の加速度センサを用いてどのように iPod touch の傾きを検出するか

という課題を解決する必要がある．PC と iPod touch の連携を含めたシステム全体の構成については 3 節で，傾き検出については 4 節で述べる．

3. システム概要

本研究のシステムは PC と iPod touch で構成され，PC は iPod touch の連携なしに単体でも動作可能で，iPod touch は複数台の同時使用も可能である．PC と iPod touch の通信は無線 LAN を用いて行う．PC の入力データはで MicroAVS で使われる MGF 形式で書かれたテキスト形式の三次元時系列データである．iPod touch への入力は PC との通信によって行う．

システムの開発は，PC 側は Java と OpenGL を Java で扱うライブラリの JOGL を用いており，通信にはアップル社の開発した Bonjour を使用している．iPod touch 側は Objective-C と OpenGL ES で開発している．

PC 側の機能には，三次元時系列データを読み込んで三次元オブジェクトとして表示し，表示した三次元オブジェクトをアニメーション表示する機能と操作する機能がある．アニメーションに関する機能には，任意のステップのデータを表示するための機能があり，三次元オブジェクトを操作する機能には，移動や回転などの一般的な操作と断面図を表示する機能がある．

iPod touch 側の機能には，通信によって PC から任意の 1 ステップのデータを取得して表示する機能や，三次元オブジェクトの操作機能がある．iPod touch 側の三次元オブジェクトは，PC と連動させて PC と iPod touch 両方の三次元オブジェクトを同時に操作させ

ⓒ2010 Information Processing Society of Japan

Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

ることも，iPod touch 側だけを操作して PC とは別の表示をさせることも可能である．

PC と iPod touch の機能の一覧を以下に示す．

- PC 上のアプリケーションの機能
  - 三次元オブジェクトに対する操作
    - 回転
    - 平行移動
    - 拡大・縮小
    - 断面図の表示
  - アニメーション
    - 任意のステップにおけるデータ表示
    - アニメーションの一時停止および再生機能
- iPod touch 上のアプリケーションの機能
  - 任意のステップにおけるデータ表示
  - 三次元オブジェクトに対する操作
    - 回転
    - 平行移動
    - 拡大・縮小
    - 断面図の表示
  - 三次元オブジェクトに対する操作の PC 上オブジェクトへの反映

4. 加速度センサを使用した操作

加速度センサでは一定間隔毎に図 1 で示した 3 軸方向の加速度の値を取得することができ，これらの値から iPod touch の動きや傾きを検知できる．本研究では加速度センサを用いることで，以下の操作を直観的に行えるようにする．

(1)　三次元オブジェクトの平行移動
(2)　三次元オブジェクトの拡大縮小
(3)　三次元オブジェクトの回転
(4)　断面の指定

(1) の平行移動の操作は加速度センサが動きを検知した方向に移動させることで実装し，(2) の拡大縮小操作は (1) の操作のうち画面手前または奥の方向を拡大または縮小操作として実装する．(3) の回転操作は加速度センサで傾きを検知することで iPod touch の回転角度と三次元オブジェクトの回転角度を一致させて実装する．(4) の断面の指定は三次元オブジェクトと同様に断面を操作して実装する．

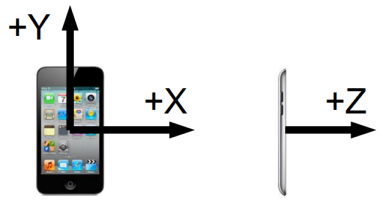


図 1　加速度センサの軸の割り当て
Fig. 1　Axes of the acceleration sensor in iPod touch.

(1)，(2) の操作については，加速度センサによる動きの検知は先行研究されいるものを利用しており[14]，(4) の操作は (1)，(3) を利用して断面を操作するので，ここでは (3) の回転操作について詳しく説明する．

4.1　加速度センサを用いた傾き検出における制限

傾きの検出は重力加速度を加速度センサで検知することで求められる．加速度センサは重力加速度の影響を受け，iPod touch が静止した状態であれば，加速度センサの X,Y,Z 値がそのまま重力のベクトルとなる．例えば，iPod touch を図 1 のように地面に対して垂直に縦長に持てば，Y 軸の値が −1 となり X 軸と Z 軸の値は 0，図 1 の状態から右に 90 °傾けるように地面に対して垂直に横長に持てば X 軸の値が 1 となり Y 軸と Z 軸の値は 0 となる．基準となる iPod touch の姿勢を決め，その状態の加速度センサの値と傾ける操作をした後の加速度センサの値のずれから iPod touch の基準からの傾き具合が計算できる．しかし，重力加速度を利用して加速度センサで傾きを求める場合には次の 2 つの問題がある．

(a) 静止した状態でないと正確に検知できない．
(b) 重力方向を軸とした回転操作は検出できない．

(a) は加速度センサでは重力加速度とそれ以外の加速度を個別に検知できないため起こる．それ以外の加速度とは，iPod touch を左右に動かしたり上下に振ったりといった動作によって生じる加速度のことを指す．ユーザにゆっくり操作してもらうことでこの問題は解決する．(b) は例えば図 2 のように垂直に持った状態で Y 軸中心の回転を行ったり，iPod touch を机の上において縦向きから横向きに変えたりする操作のことである．どちらの場合も操作

ⓒ2010 Information Processing Society of Japan

Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

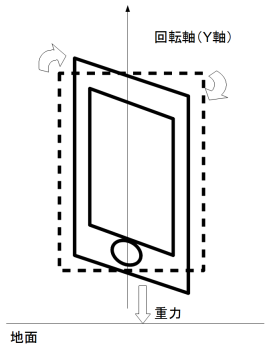


図 2 検出できない回転操作
Fig. 2 Undetectable rotation

の前後で加速度センサは同じ値を示し変化を検知できない．そのため，この操作を用いない回転操作を実現しなければならない

4.2 本研究で提案する回転操作

理想的な操作方法は，iPod touch を自由に回すことで iPod touch 上の三次元オブジェクトを手に持って回しているかのように操作できることである．このような操作に必要な条件として，本研究では以下の 3 つを挙げ，これら全てを備える操作を実装する．

条件 1iPod touch を傾ける方向と iPod touch 上の三次元オブジェクトの回転方向の一致
条件 2iPod touch の回転軸と iPod touch 上の三次元オブジェクトの回転軸の一致
条件 3iPod touch の傾きの角度と iPod touch 上の三次元オブジェクトの回転角度の一致

一般的な iPod touch 用のアプリケーションにおいては，iPod touch を傾ける動作は図 3 のように地面に対して垂直にして持った状態から左右に傾けるものが多い．この動作を用いて三次元オブジェクトを Y 軸中心に回転させようとした場合，回転させる方向は画面の表示と一致するので条件 1 を満たす．しかし，iPod touch 自身の回転軸は Z 軸中心の回転となり条件 2 を満たさないため直観的でない．このように図 3 の状態を基準とすると，条件 2 を満たさない上 4.1 で述べたように iPod touch の Y 軸中心の回転を検知しないため他の状態を基準としなければならない．

そこで，本研究では図 4 のように重力の方向が Z 軸方向になるように地面に対して水平に持つ状態を基準とすることを提案する．この状態を基準とすることで，左右に傾ける動作を用いて三次元オブジェクトを Y 軸中心に左右に回転する操作をした場合，回転方向と回転軸が一致し条件 1，条件 2 を共に満たす．なお，Z 軸中心の回転については加速度センサで取得できない回転操作となるが，X 軸と Y 軸の 2 つの軸を中心とする回転だけで三次元オブジェクトをすべての角度から見ることができるため，iPod touch 上の三次元オブジェクトを手に持って回しているかのように操作するという目的を達成することが可能である．

条件 3 を満たすには，iPod touch が傾いた角度だけ三次元オブジェクトも回転するようにすればよい．iPod touch の各座標軸毎に傾いた角度を求めて三次元オブジェクトを回転させることもできるが，3D グラフィックスの分野では四元数による任意のベクトルを中心とする回転行列が知られており[13]，今回はこの行列を使用している．この行列で回転を行うために必要となるのは，回転軸となる三次元ベクトルと回転する角度である．基準となる状態における三軸の加速度の値からなる三次元ベクトルを $\boldsymbol{a}$，回転後の状態における三軸の加速度の値からなる三次元ベクトルを $\boldsymbol{b}$ とすると，回転軸のベクトルは $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ 両方に直交するベクトルなの $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の外積から，回転する角度については $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の内積から求められる．

以上の方法で条件 1，条件 2，条件 3 を満たす加速度センサを用いた直観的な回転操作は実装できるが，実際に iPod touch で回転操作を行うと，画面が下向きや後ろ向きになってユーザから見にくくなる場合がある．そのため，本研究のアプリケーションでは回転操作は画面上に GUI で描かれたボタンを押しながら操作し，回転操作が終了したときにボタンを離す仕様にしている．これにより操作後はユーザの見やすい角度から画面を見ることが可能となる．また，Z 軸を中心とした回転も，画面を縦向きから横向きのように変えることで iPod touch 上では見ることができる．

作成したアプリケーションでの操作例を図 5 に示した．PC と iPod touch の三次元オブジェクトを連動させ，X 軸と Y 軸それぞれを中心に回転操作を行ったときの様子を示している．初期状態からそれぞれの回転を行ったときの iPod touch と PC 両方の表示の変化を示した．

図 6 には，PC に全体図，iPod touch にその断面図を表示した例を示す．この断面の指定にも iPod touch の加速度センサを用いた傾き検出を利用している．

5. おわりに

本論文では，iPod touch / iPhone の加速度センサを利用した分子シミュレーション可視化システムについて述べた．このシステムは，PC と iPod touch /iPhone で構成される．

ⓒ2010 Information Processing Society of Japan

Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

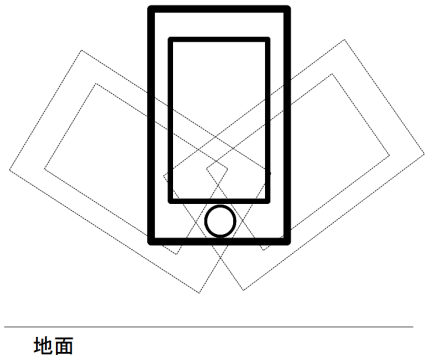


図 3 一般的な iPod touch アプリケーションにおける傾ける動作
Fig. 3 Inclining movements in usual iPod touch applications.

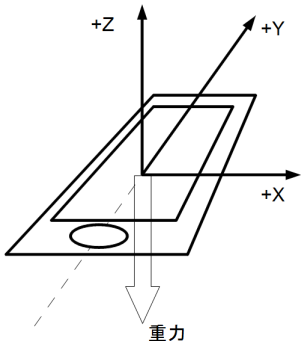


図 4 本システムにおける iPod touch の基準位置
Fig. 4 The initial position of iPod touch.

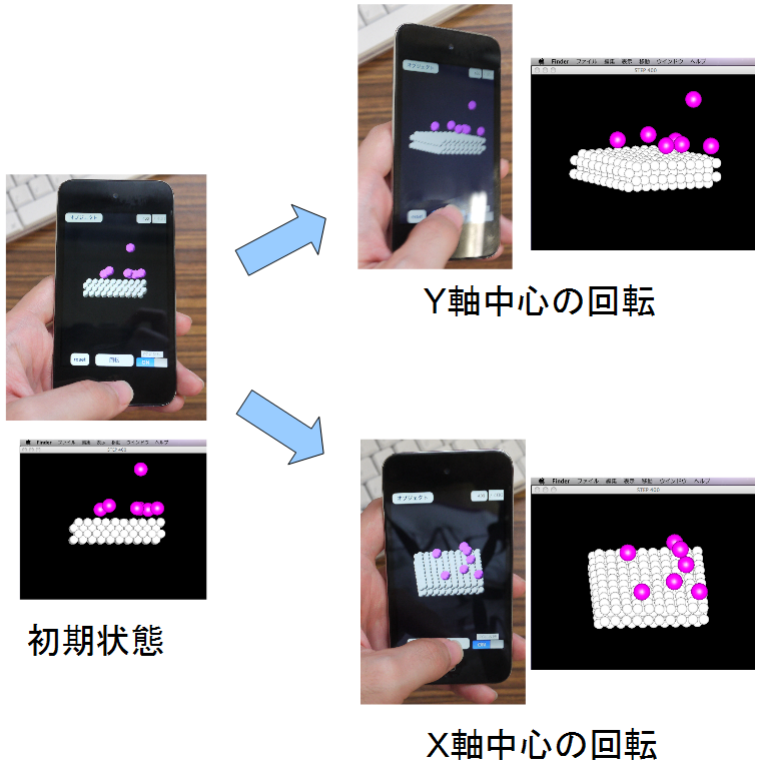


図 5 iPod touch による回転操作
Fig. 5 Rotation operations by iPod touch.

iPod touch / iPhone の加速度センサやスクリーンを利用することによって，三次元オブジェクトの回転操作の問題，三次元オブジェクトの内部表示の問題，時間的変化に関する問題を解決できることを示した．

特に本稿では，加速度センサを用いた三次元オブジェクトの操作について述べた． iPod touch / iPhone を地面に対して水平においた状態を基準とすることで，iPod touch / iPhone に表示された三次元オブジェクトと iPod touch / iPhone の加速度センサの軸を一致させ，直観的な操作が出来ることを示した．また，その操作を PC と連動させると，従来のマウスを用いた操作よりも三次元オブジェクトの操作が容易に行える．

現在は， iPod touch / iPhone を用いた三次元オブジェクトの操作が従来のマウスによる操作よりも直観的ということを感覚的にしか確かめていないが，今後，この二つの方法の厳密な比較を行っていきたいと考えている．

謝辞 分子動力学法を用いたシミュレーションの結果データを提供していただき，有益な助言をいただいた横浜国立大学の百武准教授に感謝いたします．本研究は日本原子力開発機

©2010 Information Processing Society of Japan

Vol.2010-MPS-81 No.21
Vol.2010-BIO-23 No.21
2010/12/17

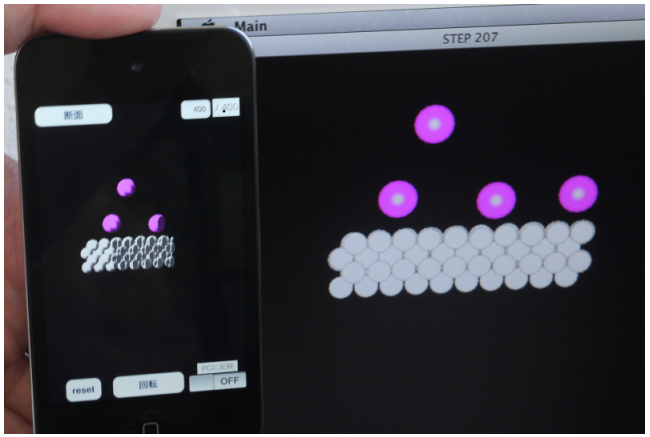


図 6 断面図
Fig. 6 Cross-section view.

構との共同研究「数値解析手法による乾式除染性能評価に関する共同研究」から支援いただきました.

参 考 文 献

1) Bryson, S.: *Virtual reality in scientific visualization* Communications of the ACM, vol.39, no.5, pp.62–71, (1996).
2) Cruz-Neira, C., Langley, R. and Bash, P. A.: *VIBE: a virtual biomolecular environment for interactive molecular modeling* Computer Chem. vol.20, no.4, pp. 469–477, (1996).
3) Diehl, J., Kramer, J.-P. and Borchers, J.: *A framework for using the iPhone as a wireless input device for interactive systems*, UIST' 08, (2008).
4) Kim, J.-S., Gracanin, D., Matkovic K. and Quek F.: *iPhone/iPod touch as input devices for navigation in immersive virtual environments*, IEEE Virtual Reality 2009, pp.261–262, (2009).
5) Nakano, A., Kalia, R. K. and Vashishta, P.: *Scalable molecular-dynamics, visualization, and data-manegement algorithms for materials simulations*, Computing in Science & Enngineering, vol.1, no.5, pp.39–47, (1999).
6) Pettersen, E. F., Goddard, T. D., Huang, C. C., Couch, G. S., Greenblatt, D. M. Meng, E. C. and Ferrin, T. E.: *UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis*, Journal of Computational Chemistry, vol.25, no.13, pp.1605–1612, (2004).
7) Santos B. S., Prada, B., Ribeiro, H., Dias, P., Silva, S. and Ferreira, C.: *Wiimote as an input device in Google Earth visualization and navigation: a user study comparing two alternatives*, 14th International Conference Information Visualisation, pp.473–478 (2010).
8) Sheridan, J. G., Price, S. and Pontual-Falcao, T.: *Wii remotes as tangible exertion interfaces for exploring action-representation relationships*, Whole Body Interaction 2009, A SIGCHI 2009 Workshop (2009).
9) Wingrave, C. A., Williamson, N., Varcholik, P. D., Rose, J., Miller, A., Charbonneau, E., Bott, J. and LaVIola Jr., J. J.: *The Wiimote and beyond: spatially convenient devices for 3D user interfaces*, IEEE Computer Graphics and Applications, vol.30, no.2, pp.71–85 (2010).
10) 阿部博史，長嶋雲兵: リアルタイム三次元可視化分子動力学シミュレータ Molecula Numerica の開発, Journal of Computer Chemistry, Japan, vol.8, no.1, pp.51–58, (2009).
11) 上田顕: 分子シミュレーション, 裳華房, (2003).
12) 岡田謙一，葛岡英明，塩屋秀和，西田正吾，仲谷美江: ヒューマンコンピュータインタラクション，オーム社，(2002).
13) 金谷一朗: "3D-CG プログラマーのためのクォータニオン入門", 工学社, (2004).
14) 小瀧陽，笹倉万里子: iPod touch の加速度センサによる動作判別用ライブラリの構築, 情報処理学会第 140 回 HCI 研究会 vol.2010-HCI-140 no.1, (2010).
15) 程暁紅，沼野なぎさ，高田雅美，城和貴: i アプリによる数値計算実アプリケーションの実装例，情報処理学会論文誌数理モデル化の応用 nol.2, no.2, pp.38–46, (2009).
16) 忍頂寺毅，長谷川慎，落合桂一: 投げメール: 位置情報と身体性を利用したコミュニケーション，WISS 2009 (2009).

ⓒ2010 Information Processing Society of Japan