

6K-5

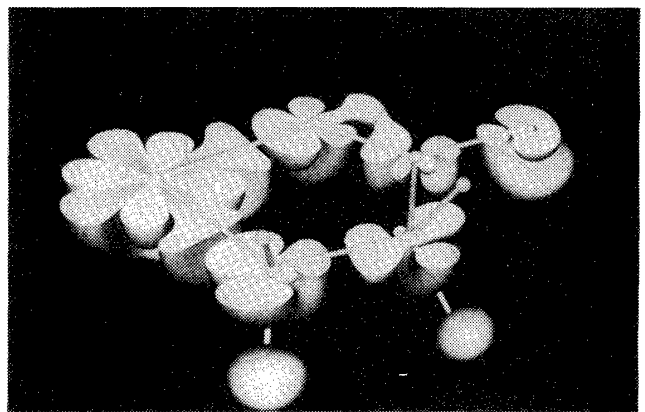
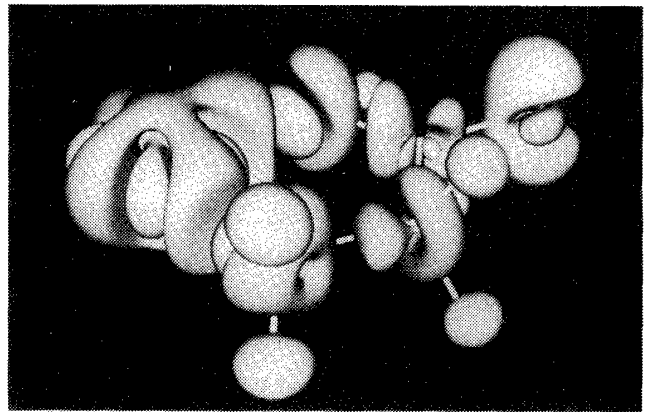
分子グラフィックスへの
スーパーコンピュータの適用伊奈 論¹、柏木 浩¹、長嶋雲兵¹、玉谷 祐²、岡本政久²¹ 分子科学研究所電子計算機センター、² 中部システムズ(株)

分子の性質や化学反応などを純理論的に解析するために非経験的分子軌道計算はたいへん強力である。この計算によって得られる分子軌道や電子分布など、肉眼では見ることでできない分子内の電子レベルの振舞をあたかも顕微鏡を覗くかのように眼前に展開するためのグラフィックシステムを作成した。ここでは分子骨格と波動関数や電子分布を自由に組み合わせて表示することによって、一層理解が容易になると同時に新しい発見の可能性を創り出すことをねらっている。

モデリングの種類にはボンド図、ボールスティックモデル、スペースフィルモデル、3次元等値表面ソリッドモデル、3次元等値表面網目図、3次元断面モデル、等高線図、流線図、鳥瞰図がある。このうち本システムの最大の特長は分子軌道・電子分布の3次元等値表面ソリッドモデル・任意の3次元断面モデルの作成ができること、およびそれらを含む種々の表示形態を重ね合わせて新たな組合せ画像を自在に作成できる点にある。また使う人の好みおよび表示所用時間の大小に応じて種々の表示方式を使い分けられる。同じ表示対象に対しても線画あり面画ありソリッドモデルありといったように豊富な表示形態を用意した。たとえば電子密度の3次元表面を表すのに3次元の等値表面ソリッドモデルと等値表面網目図がある。このどちらを使用するかは計算時間や最終画像の出来映えの好みを反映して決定できるようになっている。

手法的には光線追跡法をベースとした。この理由は次の点にある。1) 一般に分子軌道や電子分布は急激な変化を含んだ連続体であるため空間稠密な表示方法が望ましい。2) 表示装置の分解能を最大限に生かした美しい画像を生成できる。3) 本システムの特長である自在な組合せ表示を行なうための興行き値(Zバッファ)がピクセルごとに求まり、アルゴリズムが単純になる。しかしリアリスティックな表示の程度は計算速度との兼ね合いで、科学的な意味を損なわず実体感および存在感が得られる範囲でよい。このため乱反射と鏡面反射と単純な半透明効果のみを使用した。最も苦心した点は分子軌道や電子分布は簡単な2次元曲

で表されるプリミティブの集合とはならないため、予め3次元直方格子上的データとして与えられた値から3次元超曲面補間を通して等値表面の切り出しを行なった点である。このため機能面でも実行速度面でも通常存在する光線追跡プログラムでは役に立たない。したがってこのシステムでは最新のスーパーコンピュータの計算能力をフルに活用するようなプログラミングを行なって画像生成のターンアラウンド時間を大幅に短縮した。3次元等値表面ソリッドモデルの計算では約1.1倍の速度向上が得られた。以下に作画例を示す。



Molecular Graphics by Supercomputer

Satoshi Ina¹, Hiroshi Kashiwagi¹, Unpei Nagashima¹, Yuu Tamaya², Masahisa Okamoto²¹ Computer Center of Institute for Molecular Science, ² Chubu systems Inc.