

2L-3

疑似ダイレクトボリュームビジュアライゼーションによる  
イオン・原子衝突シミュレーションの解析白井恵美, 松本英美, 柳瀬京子, 藤代一成, 佐藤浩史  
(お茶の水女子大学理学部)

## 1. はじめに

原子の世界は最新の技術をもってしても視ることができない。しかし、物理現象を正しく理解するためには、原子の世界で何が起きているかを知る必要がある。我々は、イオン・原子衝突を例にとり、原子の世界の可視化を試みている。

昨年春の全国大会で発表した「Volume Visualizationのイオン原子衝突問題への応用」[1][2]の後続研究として、今年はずまず昨年求めた陽子・水素原子衝突の計算の高速化をはかった。これにより、三次元離散空間内の電子分布の時系列ボリュームデータを、物理パラメータ値を変更して複数本作成することができ、現象そのものの解析に重点を置いた研究に移行することができた。

実際の解析に主として用いたボリュームデータの可視化ツールは、別稿[3]で提案した疑似ダイレクトボリュームビジュアライゼーションと呼ばれる手法である。本稿では、実際に計算したボリュームデータに対し本手法の適用を試み、従来のインダイレクト/ダイレクトな可視化手法と比較して、その優位性を実証する。

なお、本研究に使用した計算機は米国旧Stardent社のTITAN3000システム、また可視化ソフトウェアにはAVS (Application Visualization System) Vers.4を用いた。

## 2. 半古典近似によるイオン・原子衝突

水素原子に陽子を中または低速で衝突させた際に起こる現象を可視化することを考える。計算手法は前回の発表と同じである[1]。前回は、各時間ステップごとに行列要素を計算していたために、計算量が膨大であった。今回は、三次のSpline補間を用いて計算の高速化をはかった。これにより、物理現象のパラメータ値を変化させ、様々な初期条件での計算が限られた計算資源においても可能となった。

## 3. ボリューム時系列データの作成

可視化の対象となるボリューム時系列データを得るには、波動関数 $\Psi$ の一般形と展開係数ベクトルの時系列を格納したファイルから、三次元離散空間内の各点(等間隔)・各時刻における電子分布 $\rho$  ( $=|\Psi|^2$ )を算出するプログラムを作成すればよい。

後述するAVSを用いてアニメーションを実行するには、このプログラムに対応するような時系列ボリュームデータ生成モジュールを、可視化ネットワークの入力部に用意すればよい。

## 4. ボリュームビジュアライゼーションによる可視化例

AVSでは、モジュール(基本機能)を画面上で組み合わせることによって、ネットワークを対話的に構築することが出来る。

図1にAVSを用いて作成した3種類のボリュームビジュアライゼーションアプローチによる可視化例を示す。これらの図はすべて、初速度1原子単位 ( $2.19 \times 10^8$  cm/sec), 衝突径数0.1原子単位 ( $5.29 \times 10^{-10}$  cm)のケースのシミュレーションで、水素イオンが水素原子に最も近づいた直後の同時刻における電子密度分布を表示したものである。

同図(A)には、電荷移動と呼ばれる現象が顕著に見られる電子密度値を選び、その等値面を表示した。離れていく水素イオンによって引き寄せられていった電荷が、もとの水素原子核の方向に引き戻される様子がわかる。

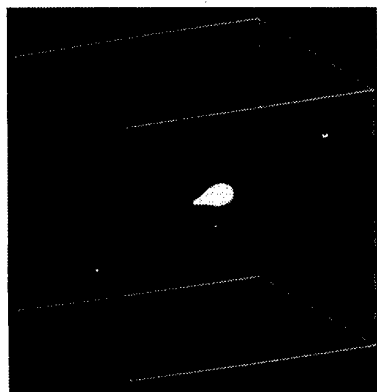
同図(B)は、ボリューム光線追跡法を用いて、3次元の電子密度分布全体を真横から半透明化して表示したものである。水素原子から近距離の位置にある水素イオンが、水素原子の周りの電子雲の形状に少なからず影響を与えていることがわかる。

同図(C)は、同図(A)の等値面も含めて4枚の等値面を半透明化して疑似ダイレクト表示したものである。この手法によって得られた画像は、インダイレクトアプローチによる画像(A)の持つ精密さと、ダイレクトアプローチによる画像(B)の持つ直感性の双方の利点を兼ね備えていることがわかる。特に時間変化を追う場合には、この疑似ダイレクトアプローチを用いることによって、個々の等値面の位置変化だけでなく、等値面同士の相対的な位置変化も容易に読み取れるので、この種の現象の解析には最適であると考えられる。ただし課題の一つは、適切な情報を得るために、可視化のパラメータである等値面の枚数、フィールド値、色、半透明度等をどのように選択し、組み合わせるかという点である。ユーザのこの作業を効果的に支援するインターフェイスの作成が急務である。

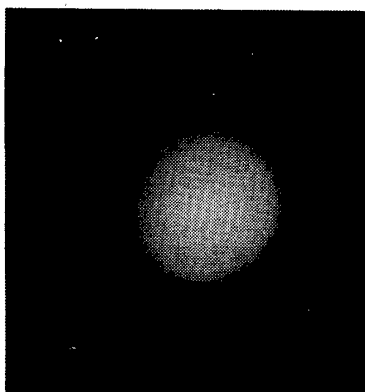
当日の発表では、図1に示したような水素原子の電子分布がどのように時間変化するかを、現象のパラメータ値を変えた様々なケースのアニメーションによって示し、その解析結果を報告する予定である。

#### 参考文献

- [1] 佐藤, 吉垣, 藤代, 佐藤: Volume Visualizationのイオン・原子衝突問題への応用(1) - Volume Modeling-, 情報処理学会第44回全国大会, 2N-8 (1992)
- [2] 石川, 戸田, 佐藤, 藤代: Volume Visualizationのイオン・原子衝突問題への応用(2) - Volume Rendering-, 情報処理学会第44回全国大会, 4N-3 (1992)
- [3] 川田, 佐藤, 藤代: 疑似ダイレクトボリュームビジュアライゼーション, 情報処理学会第46回全国大会, 2L-2 (1993)



(A)インダイレクトアプローチ  
(等値面化)



(B)ダイレクトアプローチ  
(ボリューム光線追跡)



(C)疑似ダイレクトアプローチ  
(半透明等値面の重ね合わせ)

図1 水素イオン・原子衝突シミュレーションのボリュームビジュアライゼーション画像