

大規模粒子系の対話的可視化によるパラメータスタディ支援

新坂 拓真 竹島 由里子[†] 菊川 豪太[†] 小原 拓[†] 藤代 一成[‡]

東北大学 工学部 機械知能・航空工学科

[†]東北大学 流体科学研究所[‡]慶應義塾大学 理工学部 情報工学科

1 背景と目的

近年、金属やシリコンの表面に SAM(Self-Assembled Monolayer, 自己組織化単分子膜)(図 1) を修飾して、界面の熱抵抗を低減させるなどの、表面特性を改善する研究が進められている。そこでは、SAM の表面特性を理解する上で、膜分子の配置や局所的な揺らぎに対する膜構造への影響の解析が重要であることから、分子動力学法 (MD 法) に代表される、さまざまな分子シミュレーションが行われている [3]。膜分子の局所的な揺らぎに対する系の挙動を解析するためには、膜分子の位置・姿勢を適宜変更して、シミュレーションを行う必要がある。このような背景から、分子の配置操作を対話的に行うためのインタフェースが求められている。

そこで本稿では、MD 計算で得られた大規模粒子系データを効果的に可視化し、分子の配置操作を可視化画面上で効率的に行えるシステムを提案する。提案システムでは、SAM 吸着表面上の膜分子の位置・姿勢を 2次元可視化した画面と、粒子系の全体構造を 3次元可視化した画面とを並置することで、ユーザに SAM の構造を多角的に呈示する。これにより、ユーザは 3次元の空間位置を把握しながら、2次元可視化画面に対して画像編集インタフェースを利用して、分子の配置操作を効率的に行うことができる。さらに本稿では、実データを用いて分子配置操作および分子系可視化実験を行うことで、提案システムの有用性を評価する。

2 粒子系の可視化

本節では、膜分子の操作を行うための 2次元可視化と、粒子系全体の空間位置を表すための 3次元可視化について述べる。

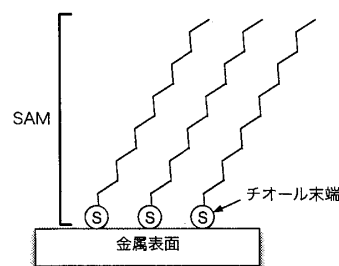


図 1: SAM の模式図

2.1 2次元グリフ表示

本項では、膜分子の特性を俯瞰するために、膜分子の位置と姿勢を、楕円グリフを用いて 2次元平面上に可視化する方法を述べる。まず、膜分子のチオール末端 (S 原子) の吸着表面上の xy 位置を、楕円グリフの xy 平面上の位置とすることで、膜分子の表面分布を可視化する。次に、膜分子の姿勢から、図 2 に示す球座標における 2つの角度 (θ, ϕ) を求める。ここで、傾き角 θ は、平面の法線ベクトルと、膜分子の炭化水素鎖の分子軸が成す角であり、方角 ϕ は、分子軸ベクトルを xy 平面上に射影したベクトルと x 軸のなす角である。そして、楕円の色を HSV 色空間において $(H, S, V) = (\phi, \theta/(\pi/2), 1.0)$ とすることで、膜分子の方角を色相で、傾き角を彩度で可視化する。

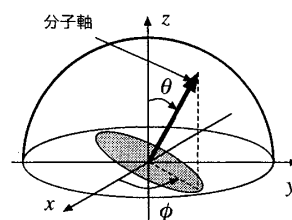


図 2: 楕円グリフマッピング

2.2 3次元モデル表示

大規模粒子系を 3次元描画する際、原子を球で幾何学的に描画してしまうと、ポリゴン数の積算により、描画コストが増大し、対話的な可視化が困難となる。こ

Interactive visualization of large-scale molecular systems to facilitate parameter study

Takuma Niizaka Yuriko Takeshima[†] Gota Kikugawa[†] Taku Ohara[†] Issei Fujishiro[‡]

Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Tohoku University

[†]Institute of Fluid Science, Tohoku University[‡]Department of Information and Computer Science, Keio University

の問題を解決するために、テンプレートテクスチャを部分的に用いて分子を描画する手法 [1] が提案されている。これにより、テンプレートテクスチャをビルボードに部分的にマッピングすることで、擬似的に陰影付けされた球を高速に描画することが可能である。しかし、この方法では、球同士の埋め込みを表現することができない。そこで本研究では、北山らの手法に、ビルボードの奥行きを補正する描画手法 [2] を適用することで、分子の立体構造をより高精度に描画する。

まず、分子の描画前に球のテンプレートテクスチャを生成する。テンプレートテクスチャの各色成分には、球のステンシル、奥行き値、拡散反射成分、および鏡面反射成分を計算し格納する。GPU における分子の描画処理は、主に 3 段階に分かれる。パーテックスシェードでは、原子の位置ベクトルを視野変換し、ジオメトリシェードに頂点情報として渡す。次に、ジオメトリシェードでは、パーテックスシェードから渡された頂点情報を元に、視線ベクトルに正対したビルボードの各頂点を生成し、射影変換を行う。続いて、フラグメントシェードでは、各画素においてテンプレートテクスチャからテクセルを取得し、球の陰影付けと奥行き値の補正を行う。ここで、奥行き値を補正する際、処理中の画素に対応するビルボードの部分領域を、視線方向に移動させ、射影変換を行って奥行き値を計算している。これにより、球同士の埋め込みを正しく表現することができる。

3 分子の配置操作

ユーザは 2.1 項で述べた 2 次元グリフ上で、画像編集の枠組みを利用して分子の配置操作を行う。以下に、本システムがサポートする画像編集コマンドと、対応する分子配置操作を挙げる。

- 色の選択: 分子の姿勢を、前節で定義した色空間から色として選択
- ブラッシング: 任意領域内のグリフに色を塗り、対応する分子の姿勢を変更
- 消しゴム: 任意領域内のグリフを削除し、対応する分子を除去
- ぼかし: 任意領域内のグリフに対応する分子の姿勢を、それぞれの近隣分子で平均化

これらの操作により、分子の配置を効率的かつ効果的に行うことができる。

4 実装と実験

提案システムは、開発言語に C++ 言語、GUI ライブラリに Qt を用いて実装した。実験環境には、OS: Mac OS X 10.6, CPU: Intel Xeon Quad-Core 2.66GHz, メモリ: 8GB, GPU: NVIDIA Quadro FX 4800 を用いた。

システムのインタフェースを評価するために、SAM 界面の分子系データ (Au(111) 固体層に 1-dodecanethiol を SAM として用いた系) に対する可視化実験と、分子配置操作のユーザビリティ評価を行った。図 3 は、文献 [3] の MD 計算プログラムによって得られたデータの可視化結果である。図 3 より、吸着表面上の膜分子の方向と、分子系の 3 次元構造を同時に把握できることがわかる。また、分子配置操作においては、膜分子の姿勢をリアルタイムに変更できることが分かった。

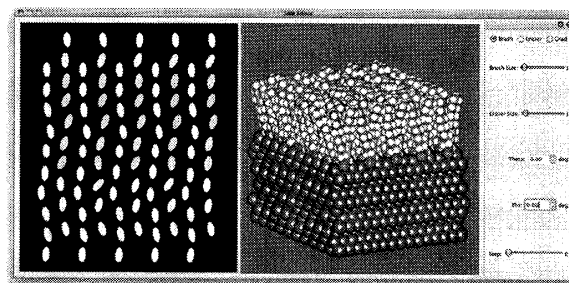


図 3: 提案システム

5 まとめと今後の課題

本稿では、粒子系を対話的に可視化し、分子配置を効率的に行うことで、パラメータスタディを支援するシステムを提案した。SAM の解析においては、膜分子の効率的な配置操作が可能となった。今後の課題として、膜分子を追加する機能の実装、ユーザテストの実施、および他の分子系を用いた提案システムの検証などが挙げられる。

参考文献

- [1] 北山暁子, 藤代一成, 平野恒夫. 大規模球群リアルタイムアニメーションのためのテンプレートテクスチャの部分マッピング. 情報処理学会研究報告「グラフィクスと CAD」, 1998-CG-091, pp. 17–22, 1998.
- [2] S. Gumhold. Splatting illuminated ellipsoids with depth correction. In *Proceedings of Vision, Modelling, and Visualization*, pp. 245–252, 2003.
- [3] 菊川豪太, 小原拓, 川口暢, 鳥越栄一, 萩原康正, 松本洋一郎. SAM-溶媒界面の界面熱抵抗に関する分子動力学的研究. 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 75, No. 749, pp. 146–154, 2009.