

## 没入型3次元仮想現実体感システム CAVE と AVS を用いた ゼオライトの電子状態の可視化

林 亮子<sup>†1,†2</sup> 井口 寧<sup>†3</sup> 川添 良幸<sup>†4</sup> 堀口 進<sup>†5</sup>

<sup>†1</sup> 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 <sup>†2</sup> 金沢工業大学 工学部 情報系 情報工学科

<sup>†3</sup> 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学センター

<sup>†4</sup> 東北大学 金属材料研究所 <sup>†5</sup> 東北大学 大学院 情報科学研究科

本稿は、ゼオライトや水素吸蔵クラスレートなどのナノテク材料設計を支援するため、可視化ソフトウェア AVS を用いて電子状態を可視化した事例を報告する。ゼオライトや水素吸蔵クラスレートは、分子が作る構造体中での吸着現象なので、没入型 VR 体感システム CAVE での可視化が効果的である。これらの物質の可視化に必要な AVS モジュール開発をいくつか行なったので、その内容を紹介し、今後の課題を述べる。

### Visualization of Electronic State for Zeolite on An Immersive 3-dimensional Virtual Reality System CAVE and AVS

Ryoko Hayashi<sup>†1,†2</sup> Yasushi Inoguchi<sup>†3</sup> Yoshiyuki Kawazoe<sup>†4</sup> Susumu Horiguchi<sup>†5</sup>

<sup>†1</sup> School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

<sup>†2</sup> Department of Information and Computer Science, College of Engineering,  
Kanazawa Institute of Technology,

<sup>†3</sup> Center of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

<sup>†4</sup> Institute for Materials Research, Tohoku University

<sup>†5</sup> Graduate school of Information Science, Tohoku University

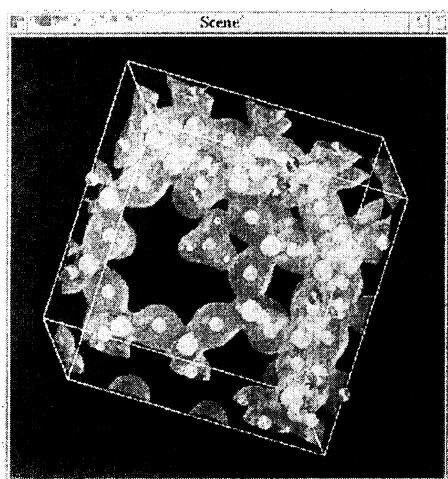
This report addresses a case study about visualization of charge density in zeolite and clathrate hydrates on an immersive 3-dimensional virtual reality system CAVE. Those materials suck various kinds of gas and keep the gas molecule within their molecular structures so that our CAVE system is suitable for visualization of them. Since we developed a few AVS modules for the visualization of those materials, we introduce the outline of those modules and we describe our future problems.

#### 1 はじめに

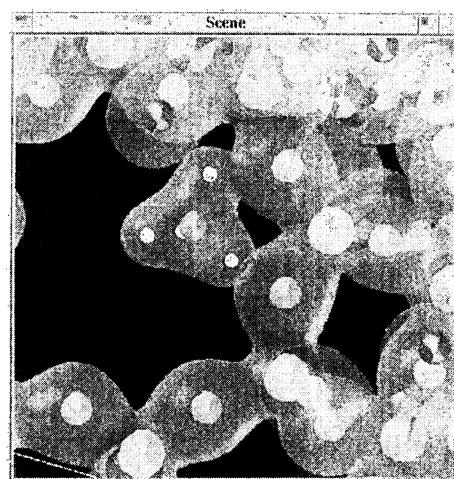
近年の科学技術計算は大規模化が進み、数十～数万個のプロセッサ要素を使用した並列計算機、さらには複数の並列計算機を高速ネットワークで結合した超分散計算環境によって大規模シミュレーションが行なわれるようになってきている。しかし、大規模シミュレーションで得られる結果は大量の数値データであり、データ解析の実行、さらにデータの意味を認識することが困難である。そこで本稿では、ナノテクノロジー分野での材料設計を行なう大規模シミュレーション結果データを可視化した事例を報告する。複

雑な大規模データの可視化では、可視化した画像の内部の情報を見ることが有効であると考えられるため、没入型3次元仮想現実体感システム CAVE への可視化出力を前提とする。

近年の科学技術計算の大規模化に伴って、大規模データの可視化やデータマイニングが注目されている。Sharma らは材料設計シミュレーションの大規模データの可視化で階層構造を利用し、シミュレーション空間内部でその時見えている領域のみを詳細に描画して隠れた空間を省略することで、可視化の高速化を行なった [1]。また、Takahashi らは位相解析を3次元のボリューム



全体図



メタン付近の拡大図

図 1: ゼオライト中のメタン吸着状態

( $\alpha$  ゼオライトケージ: Si 原子 24 個, 酸素原子 48 個, メタン分子:  $\text{CH}_4$  1 個, フェルミ温度: 1.0K, 等値面: 電子の全電荷密度 $=0.32e^-/\text{\AA}^3$ , 単位セルサイズ:  $12.2775\text{\AA}$ , 格子の節点数:  $160^3$ )

データに適用し, 可視化すべきデータを抽出している [2]. しかし, 大規模データの可視化手法および自動処理は扱う実問題への依存性が高く, まだ研究段階である. 我々の研究グループでは, ゼオライト [3] や水素吸蔵クラスレート [4] の材料設計を目的とした研究支援システムを目指して研究開発を行なっている [5].

本稿の構成は以下の通りである. 第 2 節では, 本稿で可視化するデータを生成した第一原理シミュレーションプログラム TOMBO [6] を紹介し, TOMBO の結果データを可視化した事例を報告する. 第 3 節では, 本稿で使用した可視化ソフトウェア AVS [7] による可視化プログラムの概要を述べる. さらに, 本稿が目的とする可視化のために, いくつかの独自の開発を行なったので, その概要を紹介する. 第 4 節は本稿の内容をまとめ, 今後の課題を述べる.

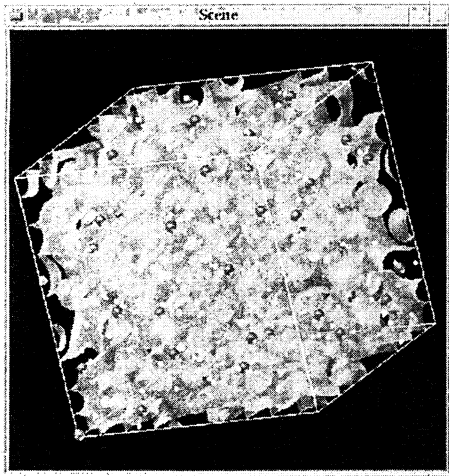
## 2 電子状態の可視化

### 2.1 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO

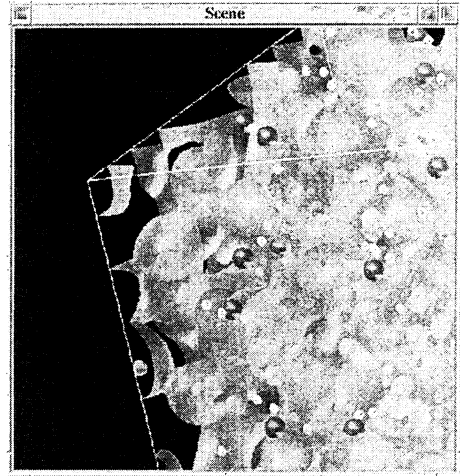
本稿では, 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO の計算結果を可視化する. この TOMBO は, 1990 年代初めから東北大学金属材料研究所 川添教授グループによって開発さ

れた, 電子にはたらくポテンシャルの形状に近似を行なわない, フルポテンシャルの方法による第一原理計算プログラムである. TOMBO は, 全ての電子の固有状態を扱う全電子法を使用しているため, 超微細構造や芯電子状態の歪みなどを扱うことができ, 小さいクラスターや高压下, 高速原子衝突などのシミュレーションにおいて, 原子間距離が小さくなった場合に対して有効であると考えられている. この TOMBO を用いて, 燃料電池への応用が期待される水素吸蔵過程をはじめとする, 先端的な材料を設計するナノテクシミュレーションが実行されている.

可視化すべき重要な物理量は種々のものがあるが, 本稿では, まず電荷密度を可視化する. TOMBO では, 指定したレベル, 指定したスピン量子数の電子による全電荷密度を出力する. さらに TOMBO では, 本稿で使用する可視化ソフトウェア AVS での利用を前提とした形式で, データを出力可能である. 電荷密度は, データ形式の観点から見ると, 計算する対象となる空間の格子点上のスカラーデータである. 本稿で示す可視化画像の電荷密度データは, 単精度で  $160^3$  個であり, データ量は約 16M バイトである.



全体図



拡大図

図 2: 水素吸蔵過程

(クラスレート：水分子 136 個，水素分子 59 個，フェルミ温度：1.0K，  
等値面：電子の全電荷密度 $=0.07e^-/\text{\AA}^3$ ，単位セルサイズ：15.90 $\text{\AA}$ ，格子の節点数：160<sup>3</sup>)

## 2.2 ゼオライトと水素吸蔵過程の可視化

科学技術分野で広く使われている可視化ソフトウェア AVS を用いて，ゼオライトと水素吸蔵クラスレートの電荷密度を可視化するプログラムを開発した。このプログラムは，データの形式さえ同じであれば，どのような物質のデータであっても可視化できる。本小節では，このプログラムによる可視化結果を示す。

図 1 は，ゼオライトにメタン分子 ( $\text{CH}_4$ ) が吸着している様子の可視化画像である。全体図と，メタン分子付近の拡大図を示す。ゼオライトは多孔質の物質で，気体分子などを吸着する性質を持ち，除湿機などにも使われている。メタンはテトラポッドのように，中心に炭素原子がある正 4 面体の構造を持ち，正 4 面体の各頂点に相当する位置に水素原子がある。これらの画像中では，原子は球で表され，1つの電荷密度値で等値面を描画している。図 1 では，メタンとゼオライトの等値面がつながっており，籠状になったゼオライト中の 2 個の酸素原子とメタン分子の 2 個の水素原子が結合していることがわかる。この可視化画像では，ゼオライトにメタンが吸着している様子がわかるように，ゼオライトとメタンの等値面がつながった状態になる

ような数値を設定する必要がある。

図 2 は水素吸蔵過程の可視化画像である。水素吸蔵過程は，近未来のエネルギー源として脚光を浴びている燃料電池において，水素を安全に取り扱う基礎技術になるものとして注目されている。図 2 では，水分子のつくる水の一種に水素分子が吸着している様子を可視化している。全体図と，結合の様子がある程度わかる部分の拡大図を示す。これらの画像中でも，ゼオライトと同様に，原子は球で表され，1つの電荷密度値で等値面を描画している。図 2 は多くの原子のデータを可視化しているため，複雑な可視化画像になっており，細部をよく観察することが難しい。しかし，実際に AVS を使用し，カラー表示で対話処理的に等値面の数値を変化させたり向きを変えたりすると，水分子と水素分子の等値面がつながっており，水分子と水素分子が結合していることがわかる。

## 3 AVS を用いた可視化プログラム

### 3.1 可視化プログラムの概要

以上の 2 つの可視化画像を作成した AVS のプログラムであるモジュールネットワークを図 3 に示す。このネットワークでは，原子の位置に球を描く。球の大きさは，現段階では AVS のパラ

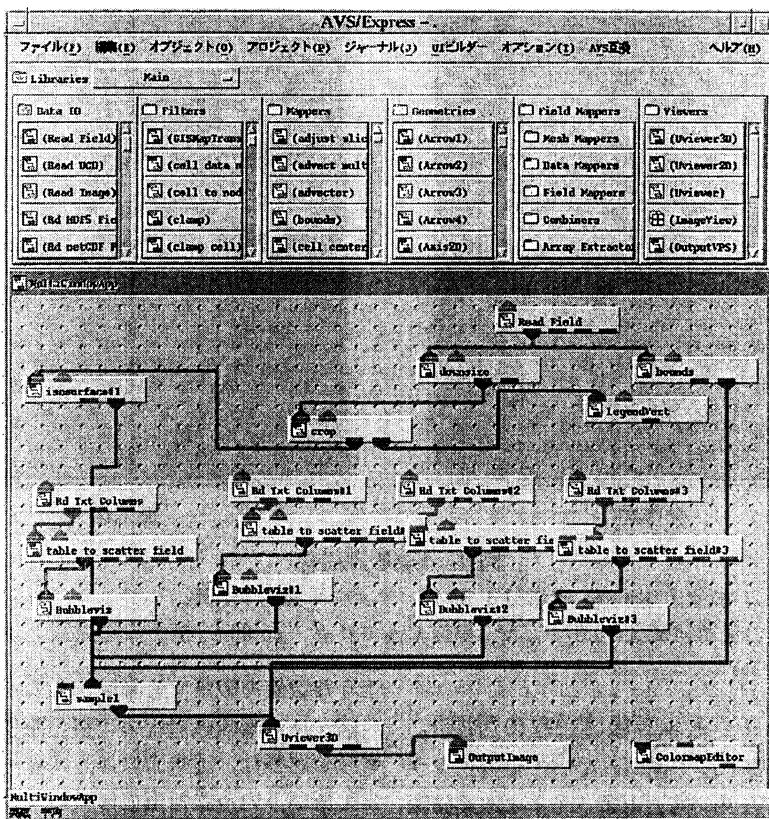


図 3: ゼオライトを可視化する AVS のプログラム

メータ指定で手動で設定している。そして、電荷密度の等値面を1つの数値で描画している。これも、今回は手動で設定している。ゼオライトでも、水素吸蔵過程でも、2種類の分子間で電荷密度の等値面が接続した状態を可視化する必要があり、可視化画像上で等値面が接続した状態を見つけるよりも、本来はデータ中から結合している電荷密度値を求める必要がある。

### 3.2 色・透明度指定モジュール

材料設計の可視化では、表示に使うオブジェクトの色と透明度をユーザが自由に変更する機能が必要である。原子を表す色はある程度標準が決まっている。例えば、炭素は黒、水素は白、酸素は赤で表すことが多い。一方で、見てわかりやすくするために、同じ元素でも色を変化させることがある。例えば本稿では水素吸蔵過程の可視化で、水分子中の水素原子と水素分子中

の水素原子を区別するため、同じ水素原子ではあるが色を違えている。さらに等値面は、数値の大きさだけでなく、同時に表示する原子の色と区別しやすい色にする必要があり、透明度も調整する必要がある。このように、材料設計の可視化では、描画したオブジェクトの色と透明度を自由に変更できる必要がある。

AVSでは、可視化したオブジェクトの色、透明度を自由に変化させることが可能であるが、設定方法が複雑であるため、実際にはエンドユーザにはわかりにくい。そこで、(株)ケイ・ジー・ティーに、色と透明度を指定するモジュールである「簡易カラーマップエディター」を開発委託した。図3に示した本稿の可視化プログラムでは、このモジュールを利用している。この簡易カラーマップエディターは、球や等値面などのように、単一色、単一透明度の設定をする場合と、コンター図などのように、色範囲を指定す

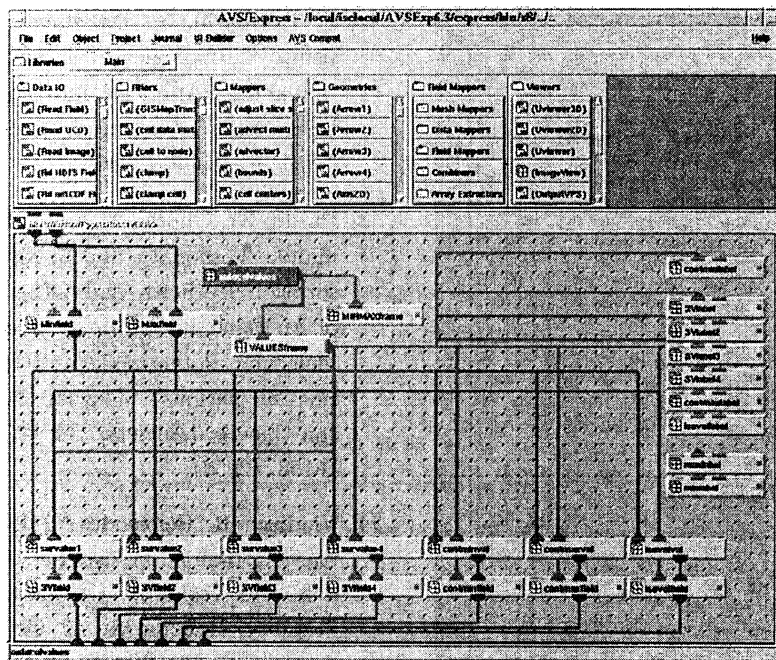


図 4: データ範囲から等値面数値を自動計算する AVS のモジュール

る場合の 2 つの状況に対応できるように、インターフェースの切換えが可能である。この簡易カラーマップエディターを使用することによって、容易に可視化画像の色と透明度を適切に設定することができた。

### 3.3 数値自動計算モジュール

本稿の可視化プログラムではまだ使用していないが、将来的には可視化する数値の半自動決定に取り組む予定であるため、そのプロトタイプとなる、数値自動計算モジュールを開発した。この数値自動計算モジュールの概要を図 4 に、パラメータ確認・指定インターフェースを図 5 に示す。このモジュールでは、データの最大値と最小値を、ユーザの指定する数式に代入して数値を計算し、等値面やコンター図を作成するモジュールに数値を出力する。現在このモジュールには、計算する数式は簡単な四則演算程度のものであるが、将来的には、データ処理を行なう他のプログラムなどで計算した数値を AVS のモジュールに渡すためのインターフェースとなる。また、このモジュールで計算した数値がユーザの希望にあわない場合は、ユーザがこの画面

から数値を直接代入することによって、希望の数値で等値面等を作成することができる。

## 4 まとめ

本稿では、可視化ソフトウェア AVS を用いて、ナノテク用新材料であるゼオライトと水素吸蔵クラスレートの電子状態の可視化を行なった結果を報告した。ゼオライトと水素吸蔵クラスレートは、分子が作る構造体内部に他の分子が吸着する現象であるため、本研究で使用を前提としている CAVE システムでの可視化が有効な物質である。本稿の可視化では、(株) ケイ・ジー・ティーに開発委託した簡易カラーマップエディターを利用し、色と透明度をユーザが自由に指定することができた。さらに、将来の可視化数値の自動決定のプロトタイプとなる、数値自動計算モジュールを開発した。

ゼオライトと水素吸蔵クラスレートのいずれの可視化画像でも、分子間で等値面が結合している電荷密度値を求める必要があった。これは、可視化する元のデータファイルから計算する必要がある。そこで今後は、データファイルから

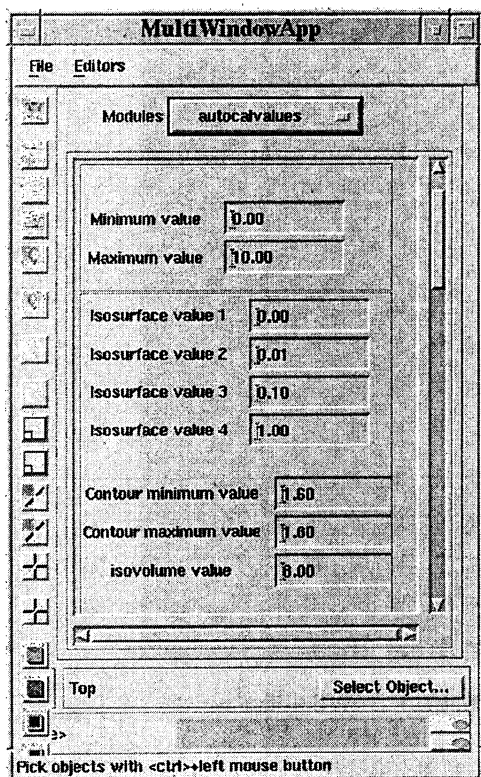


図5: 自動計算モジュールのパラメータ設定確認画面

自動的に、可視化すべき電荷密度値を計算するプログラムを開発する予定である。

#### 謝辞

本研究の一部は Super SINET ナノテク部会課題として行なわれた。また本研究の一部は北陸先端科学技術大学院大学 学内プロジェクト、および北陸先端科学技術大学院大学 助手研究奨励金、科学研究費補助金 (若手研究 (B) 課題番号 16700091) によって行なわれた。関係各位に感謝する。

#### 参考文献

[1] Ashish Sharma, Rajiv K .Kalia, Aiichiro Nakano and Priya Vachishta, "Large Multidimensional data Visualization for Material Science", Computing in Science & Engineering, Vol .5, No .2, pp.26-33, (2003).

[2] S. Takahashi, Y. Takeshima, and I. Fujishiro, "Topological Volume Skeletonization and Its Application to Transfer Function Design", Graphical Models, Vol. 66, No. 1, pp.24-49, (2004).

[3] Pradip Kr. Ghorai, Marcel Sluiter, Subramanian Yashonath, and Y. Kawazoe, "Adsorption Isotherm and Other Properties of Methane in Zeolite A from an Intermolecular Potential Drived from ab Initio Calculations", Journal of the American Chemical Society, Vol. 125, pp.16192-16193, (2003).

[4] Vladimir R. Belosludov, Talgat M. Inerbaev, Rodion V. Belosludov, Jun-ichi Kudoh, and Yoshiyuki Kawazoe, "Absolute Stability Boundaries of Clathrate Hydrates of Cubic Structure II", Journal of Supramolecular Chemistry, Vol. 2, Issues 4-5, pp. 377-383, (2002).

[5] 林, 堀井, 井口, 川添, 堀口, "没入型3次元仮想現実実体感システム CAVE と AVS を用いたナノテク用新材料の電子状態の可視化", "情報処理学会研究報告", 2004-HPC-99-19, (2004).

[6] <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/%7Emarcel/tombo/tombo.html>

[7] "AVS/Express ユーザーズ・ガイド", 株式会社ケイ・ジー・ティー, (2002).