

分子の世界を見る

— コンピューターグラフィックスによる分子とその運動

矢野敬幸

81 はじめに

化学の授業に於て分子の形とその運動を三次元的に理解するのは重要である。しかし教科書等に示される分子構造は紙面という二次元的制約の為必ずしも充分にその立体感を表現する事ができない。従来から補助教材として分子の立体模型が幾種類か工夫されている。立体模型は学生が実際にそれを手にとってみる事が出来るという秀れた利点を持っているが、本質的にそれは分子の剛体としての形を与えるのみで千変万化する分子の運動についての知見は何等与える事はできない。

最近、マイコンはその性能が一層強化されてきた。グ

ラフィックス機能もその一つである。てごろの価格で640×400ピットの高分解能画面で且つカラー表現ができる。この程度の分解能だとかなり精細な絵も表現できる。分子の形は幾何学的であるから、分子を構成する原子の空間的位置やその変位の計算は、コンピューターのお得意分野である。また分子の運動、すなわち分子の回転運動やとりわけ分子の振動運動は力学的計算をする事で与えられる。しかし三原子分子以上になるとその振動運動は三次元的であるが故に複雑で、とても静的な絵では表現が難しい。さらにその分子に固有の幾つかの振動運動(基準振動)をかさね合わせた複合運動は想像するのも困難である。コンピューターグラフィックスを利用

する事によって分子の形はもとより、これ等の分子運動を本来の動的姿で表現する事が可能である。

著者の研究室では過去数年に亘って、分子の形やその運動を、学生に感覚的に理解させる為にマイコンを利用したアニメ制作を、前期ゼミ出身の学生達と共同で行なってきた。本論文はその報告でもある。

8.2 装置の概要

マイコンはかなり性能が向上したとはいえ、CRTディスプレイ上に瞬時にして必要な計算をして画をつくる事はできない、従ってどうしても8mm映写機あるいはビデオを併用せざるを得ない。

このプロジェクトは既に4年に亘っており初期の作品(「分子の構造と運動」)はSHARP MZ 80 B と 8 mm 映写機による白黒の15分間のアニメとして完成している。撮影の方法は、例えばメタン(CH₄)を例にとると、この分子は四面体で各頂点に水素原子が位置し炭素原子は四面体の中心に位置する。或る位置でのメタンの画を表示し終ると、マイコン側からパルス信号を出す。この信号を利用して8mmを一コマだけ撮影する。適当な

タイミンゲの後、画面を消去して、そこには特定のCH軸まわりに一定角度(5°が適当)回転したパターンを描く。これを撮影する。このような方法によってコマ取りを行なった。回転角5°の場合、1回転分の運動は72個のコマとして記録される。付言すると一回の回転角が小さいと、映写した場合、回転運動はゆっくりになると同時に滑らかともなる。逆に大きいと、スビーデいな回転になっていく。

現在は、SHARP MZ 2200 を使用している。本機は画面が640×400ドットで且つカラー表現できるので一層豊かな画面を構成できる。8mmカメラに代えて現在はビデオ(Sony SL-F1)を用いている。8mmの場合、うまく撮れたかどうかは現像するまで分らないし、現像代金も馬鹿にならないからである。ビデオではコマ撮り風にする為大変苦労したがこの機種の場合、録画開始と停止の二つのパルス信号間のタイミンゲを最適に調整する事で、1フレームに1ショットの画面をとる事ができた。但しこの条件は不安定で時々調整し直す必要がある。現在は1ショットの回転角を1°にしている。この条件では1秒間に約30°だけ分子は回転するように見える。

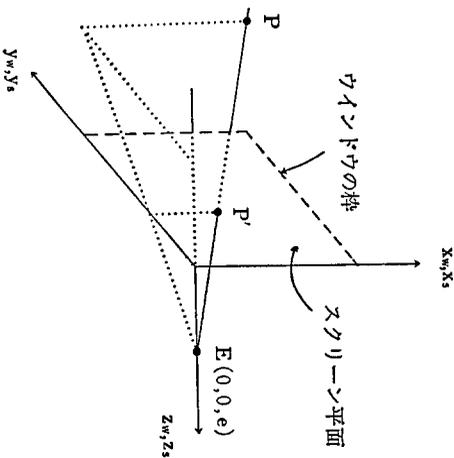
8.3 透視法

3.1 透視法と各種座標系

対象物は三次元であるのに、画面は二次元であるから、これにいくらかでも奥行き感を持たせる為に透視法を採用する。その為、空間内の一定点を視点とし、それと対象物体間にスクリーン平面を設定する。対象物体上の点と視点とを通る直線がスクリーン平面と交わる点を、対象物体上の対応する点の透視点とする。例えば図1によると点 P は点 P' に透視される。このようにしてスクリーン上に対象物体の透視図を描く事ができる。マイコン画面は、このスクリーン上に映ったパターンに適当な倍率をかけたものである。

以上述べたような計算をするにあたって、幾つかの座標系を使いわけるのが便利である。対象物体は、観察する者とは独立に空間上に浮かんでいるから、この位置を示す座標は不動の世界座標系 (x_w, y_w, z_w) で表わしておく。スクリーン平面と視点との相対的位置関係は常に一定に保っておく。観察者が空間内の一定点について動かない場合は、スクリーン平面は世界座標系の x_w, y_w 平面に

図1 透視法説明図



とる。また視点 E は z_w 軸上の一定点においておく(図1参照)。しかし後述するように観察者が空間内を移動する事もあるので、スクリーン座標系 (x_s, y_s, z_s) を定義しておく方がよい。スクリーン座標系は従って観察者の動きが無い限り世界座標系と一致している。またスクリーン平面にはマイコン画面に相似な長方形のワイントウ

ウを設定する (図 1 の点線). 対象物体の透視点がウインドウ内にある場合だけ画面に表示される.

3.2 透視図と実際の視覚とのつれ

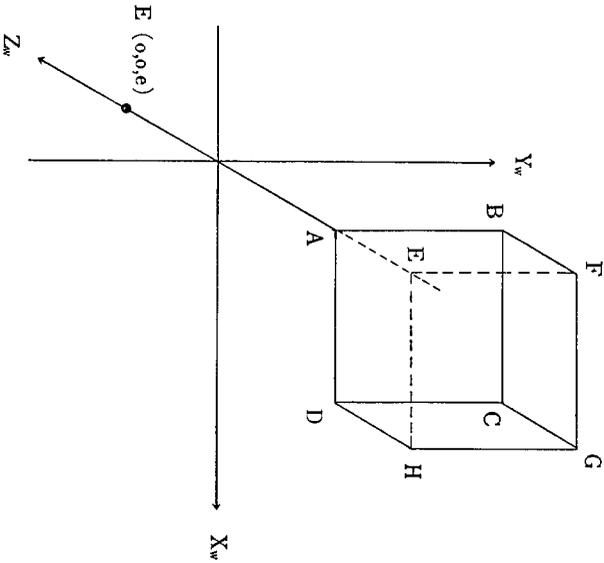


図 2

対象物体を図 2 に示すような xy 平面上にのった立方体とする. スクリーン面は xy 平面, そして視点 E は z 軸上にあるとする. 立方体が充分に大きいとするとその視覚的印象は次のようになるう, 視点からの距離が離れるにつれ小さくみえるから, $AB > DC, EF > HG$ また $AD > BC$ のように見える.

しかしここで採用した透視法によると, $AD \parallel BC$ (平行) 及び $AB \parallel DC$ であり視覚とは異なる. 但し奥行きについては $AB > EF$ や $DC > HG$ となり視覚と合致する.

参考までにこのケースにつき, 透視図がどうなるかを数式的に確認しておく. 対象物体上の任意の点を P とする時, 直線 EP の式は,

$$\frac{x}{x_p} = \frac{y}{y_p} = \frac{z-e}{z_p-e} \quad 3-1$$

点 P のスクリーン上の透視点座標はこの式で $z=0$ とおいて得られる.

$$\left. \begin{aligned} x &= \frac{-ex_p}{z_p-e} \\ y &= \frac{-ey_p}{z_p-e} \end{aligned} \right\} 3-2$$

直線 AE に平行な直線群は、 x_0 と y_0 は定数で z_0 のみを変数とするから、(2) より z_0 を消去して、

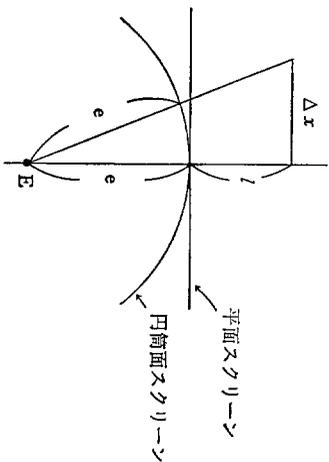
$$y = \left(\frac{y_0}{x_0}\right) \cdot x \quad 3-3$$

すなわちこれ等直線群はスクリーン平面の原点からの一次直線群に透視される。無限遠点 ($z_0 \rightarrow \infty$) の対応点は (2) 式より原点そのものである事も分る。

一方、 AD に平行な直線群は、 y_0, z_0 を定数とし x_0 を変数とするから、スクリーン上では x 軸に平行な直線群になる。よって無限遠点による収束点はない、同様に AB に平行な直線群は y 軸に平行な直線群に写される。

感覚とづれるもう一つのより重要な例は球体の時に起る。球体が空間内に浮んでいる場合、視覚には球体などの方向にあって、これは円の形に見える。しかし透視法によると、特別な場合を除き、スクリーン上には楕円として写ってしまう。視点 E から球への接線の集合を考えると、これは底面を円とし頂点を E とする円錐の母線となる。スクリーン平面は一般に円錐を斜に切断する為はその切断面は楕円となるからである。円錐の軸がスクリーン面に直交する時にのみその断面は円となる。

図3 スクリーン面を真上からみた図



3.3 その原因と対策

以上詳しくみてきたように視点からスクリーン面に垂直な方向については、視覚と一致するが、左右(上下)方向については少しづれが生ずる事が分る。

この原因は、透視法の場合、スクリーン面は平面であるのに対し、視覚の場合は眼球の構造そのものや見ようとする方向に自然に眼球を動かす事の為に、そのスクリー

ーン面は球面をなしている為であると考えられる。従ってスクリーン平面に垂直な方向については、視覚との差が生じなかった訳である。

しかしこの横方向のづれは、次の議論から分かるようにそれ程大きい訳ではない。図3に示す例につき少し検討を加える。高さ H の棒が xy 平面上に、スクリーン面 (S 面) の正面に l の距離をおいて立っているとす。視点は z 軸上にあつて S 面まで e の距離があるとす。この時の透視図上での棒の高さ h は、

$$h = \frac{e}{e+l} \cdot H \quad 3-4$$

この棒を S 面に平行に x 方向に Δx だけづらした場合の透視図上の棒の高さは、前節より h' に等しい。しかし視覚によると球面スクリーンの為には棒の高さは h とは違つて h' となる。今、 H は余り大きくないとすれば、球面スクリーンは円筒スクリーンに置換えてもさしつかへあるまい。円筒面スクリーンに写る棒の高さを h' とすると、

$$h' = \frac{e}{e+l} \times \left(H / \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta x}{e+l} \right)^2} \right) \quad 3-5$$

Δx が e や l に較べて充分に小さい時は、次式のように

近似される。

$$h' = \frac{eH}{e+l} \times \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{e+l} \right)^2 \right) \quad 3-6$$

よつてづれを $\Delta h = h - h'$ とすると、

$$\Delta h = \frac{1}{2} \cdot eH \cdot \frac{\Delta x^2}{(e+l)^3} \quad 3-7$$

つまり、づれは、 Δx が小さい限りその二乗で大きくから非常に小さくなる。また e や l が大きい程、づれは無視できる事が分る。これに対し、縦方向に Δz づらした時は、づれ Δh_z は Δz の一次に比例するから、無視できないのである。

同様の議論から、球体を透視して楕円となる場合も、その程度はそれ程大きくないと云える。しかし如何にその程度は小さいとはいへ、球体を楕円として描くのは、我々の感覚とはなじみ難い。さらに技術上でいいうと、楕円の作画は円のそれに較べ、はるかに時間効率が悪い。

以上の理由から、球体を透視図上に表現する時は、以下の手続きによつて円として表わすのが妥当と考えられる。すなわち、円の中心は球体中心 O と視点 E を結ぶ直線と S 面の交点とし、その半径 r' は (8) 式で与えるものとする。

$$r' = e \cdot r \times (1/\sqrt{l^2 - r^2})$$

3—8

但し e は視点と S 面との垂直距離、 l は球中心 O と E 点との距離、 r は球体の半径である。もし l が十分に r よりも大きいならば、次式のように近似できる。

$$r' = r \times (e/l)$$

3—9

§ 4 分子の形と運動の動的立体表現

4.1 分子の形の動的立体表現

分子の形の表現は分子運動のそれに較べれば非常に簡単である。まず、分子を構成する各原子の位置座標を、結合距離や結合角等の構造データから計算する。簡単な分子なら手計算で充分だし、複雑な分子の時は「自然科学研究」に発表した方法で求める。座標の単位はオンゲストローム単位にとる。こうして得られる位置座標は、分子内の特定の原子を座標原点としているので、世界座標系 (W 系) にする為に、 W 系の原点から特定の原子までのヴェンクターを各座標値に加える。

動的立体感を出す為には或る軸まわりに分子を回転させるが、通常その軸は y 軸にとる。座標系の回転と分子の回転は相対的関係にあるから、分子回転を演出する

為に座標系の方を回転させる。例えば y 軸まわりに分子を θ だけ時計まわりに回転させたい時は、座標系を反時計まわりに θ だけ回転させればよい。回転の前後での或る点の座標をそれぞれ r 、 r' で表わすと、 r と r' には次の関係がある。

$$r' = A \cdot r \quad 4—1$$

但し A は座標系の回転変換行列である。

$$A = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \quad 4—2$$

座標回転後の新座標 r' を、分子回転後の座標というように考えれば、回転する効果がでてくる。

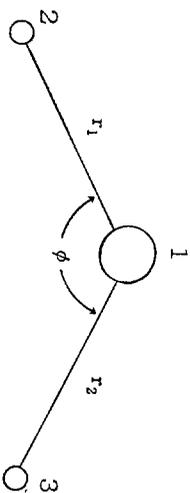
4.2 分子の運動

分子の運動には分子全体の移動や回転の他に、その分子に固有の分子内運動、すなわち振動運動がある。ここでは特に振動に注目する。 N 原子分子の場合、一般には $3N-6$ 個、直線分子の時には $3N-5$ 個の振動形や振動数の異なる振動運動があつてこれを分子の基準振動と呼ぶ。実際の運動は、これ等の基準振動の重ね合せで表わされる。周期的運動である一つの基準振動であつても、

多かれ少なかれ全ての原子が、その平衡位置から三次元的変位をするので、その運動は仲々イメージしにくい。だから実際にその動きを眼でみるといふ事は大いに価値ある事である。

4.3 基準振動の計算法

二原子分子は二個の質点間を1個のバネで結んでいるとする簡単な力学計算によって容易に計算できるが、三原子分子以上になると計算は一挙に複雑になる。しかしその計算手法はすでに確立されていて²⁾、GF行列法と呼ばれている。これについて若干の説明をしておく。



1:酸素(O) 2,3:水素(H)

図4 水分子の分子内座標

ポテンシャルエネルギー V と運動エネルギー T をそれぞれ各原子の位置座標と、その時間微分の関数として表わす事ができれば、ラグランジュ運動方程式が得られ、原理的には解ける。一般には位置座標として分子内座標が選ばれる。分子内座標とは、例えば水分子を例にとると(図4参照)、2個のOH距離の変位 Δr_1 と Δr_2 及びH—O—Hの結合角変位 $\Delta\phi$ である。分子内座標をジエクター $\mathbf{R} = (\Delta r_1, \Delta r_2, \Delta\phi)$ で表わし、直角座標を \mathbf{X} で表わすと(\mathbf{X} の成分は x_i, y_i, z_i 等計9個)、次式の関係がある。

$$\mathbf{R} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{X} \quad 4-3$$

\mathbf{B} は長方形行列で、幾何学的考察から求まる。 V は力の定数表から容易に \mathbf{R} の二次形式として得られるが、

$$V = \tilde{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{F}_R \cdot \mathbf{R} \quad 4-4$$

T を \mathbf{R} の時間微分の二次形式として表わすのは容易でない。しかし幸いにもGF行列法の理論によると \mathbf{R} に対応する運動量 \mathbf{P} の二次形式として T が表わせる。

$$T = \tilde{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{G} \cdot \mathbf{P} \quad 4-5$$

但し、

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{B}} \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad 4-6$$

\mathbf{M}^{-1} は(9×9)次の対角行列でその成分は各原子の質量

(8) の逆数を 3 個ずつ並べた行列である。さらに特性方程式、

$$|G \cdot F_R - E \cdot \lambda| = 0 \quad 4-7$$

を解く事によって固有値 $\lambda_1 \sim \lambda_n$ が得られる。i 番目の基準振動の振動数 (波数で表わす) ν_i は、

$$\nu_i = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\lambda_i} \quad 4-8$$

として計算される。(7) 式は λ に関して一般に $3N-6$ 次方程式となる。ニュートンの逐次近似法を次々と適用し、最後に二次方程式として全ての根を求めた。これで分子アニメ用として充分の精度が得られる。例えば NH_3 の場合、計算の簡便化の為、力の定数行列 F_R の非対角要素を全てゼロとしたが、振動数は文献値と約 100 cm^{-1} 以内で一致した。

各固有値 λ_i に対応する固有ベクトル l_i は固有値 λ_i が分ると次式より決定される。

$$(G \cdot F_R) \cdot l_i = \lambda_i l_i \quad 4-9$$

$l_1 \sim l_{3N-6}$ を縦にならべた行列 L は、(4) や (5) 式のクロスタームを含んだ二次形式を対角化する座標 Q (基準座標と呼ばれる) への、変換行列となる。

$$R = L \cdot Q \quad 4-10$$

4.4 振動形の決定

(10) 式の内容を各成分に分けてみると

$$\left. \begin{aligned} R_1 &= L_{11}Q_1 + L_{12}Q_2 + \dots + L_{1n}Q_n \\ R_2 &= L_{21}Q_1 + L_{22}Q_2 + \dots + L_{2n}Q_n \\ &\vdots \\ R_n &= L_{n1}Q_1 + L_{n2}Q_2 + \dots + L_{nn}Q_n \end{aligned} \right\} \quad 4-11$$

今、基準座標 Q_i のみが振動数 λ_i で伸縮 (振動) しており、他の振動は停止していると $Q_j = 0$ (for $j \neq i$) としてよい。上の関係から Q_i の振動時の分子内座標の変位の割合は、

$$R_1 : R_2 : \dots : R_n = L_{1i} : L_{2i} : \dots : L_{ni} \quad 4-12$$

我々にとつては、この関係から振動の様子がある程度想像できるが、アイコンにその動きをさせるには、直角座標での変位 X に変換する必要がある。その為には次式の関係を用いる。

$$X = L_\sigma \cdot Q \quad 4-13$$

但し、

$$L_\sigma = M^{-1} \cdot \tilde{B} \cdot G^{-1} \cdot L \quad 4-14$$

(14) 式の右辺の各行列は全て既知なので L_σ は決定する事が出来る。

4.5 振動運動の表示

(13) 式の関係から Q_i が決まっていれば、 X を計算できる。そこで Q_i の i 番目の成分としては次式のような振動式を設定する。

$$Q_i = Q_{i0} \cdot \sin(2\pi\omega_i T) \quad 4-15$$

ω_i は振動数に比例したパラメータで通常、基準振動中の最少振動数の ω が 1 となるようにする。 T は時間に対応するパラメータで 0 から例えば 15 までを、ステップ幅 1/120 で進めていくものとする。また動的立体表現も同時に実行する為、振動処理の各ステップ毎に、1°だけ回転を進めるものとする。以上のような処理内容は次のような意味をもつ。 $\omega=1$ の振動の場合、120 回目の振動処理、すなわち $T=120/120$ の時、振動はその 1 周期を終る。また丁度この時、分子は 120° 回転している。つまり、分子が 1 回転 (360°) する間に 3 回の振動を完了している事になる。分子が 1 回転するのは $T=3$ であるから、 $T=15$ の時は 5 回転し且つ 15 回振動している事になる。最少振動数以外の振動の場合 ($\omega > 1$)、分子が 1 回転する間に振動数に応じて 3 回以上の振動をしている事になる。 Q_{i0} は i 番目の振動の振幅を決めるパラメータで、画面を見て適当な数値にセットする。 Q_{i0} を

0 にすると、それはその振動運動の停止を意味する。

振動処理の各ステップ毎に (13) 式より計算される X は、各原子の平衡位置からのつれを示すから、 W 系に於ける原子座標に変換するには、平衡位置を示す座標値をこれに加える。回転処理に用いるのは W 系に変換し終えた座標値である。

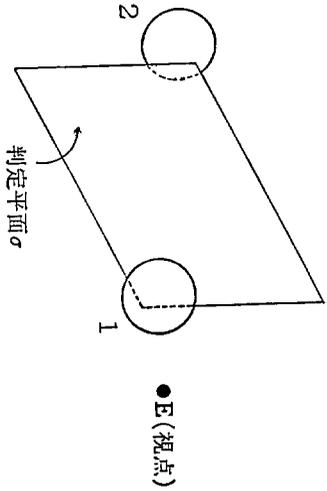
§ 5 隠線消去

5.1 その必要性

白黒画面で原子を白一色の塗りつぶしで描くとすれば、原子同志あるいは原子と化学結合軸等が透視図でたとえ重なり合っても、別に何の問題もない。実際、作品「分子構造とその運動」では、複雑な分子は全てこの方法で撮影した。

しかしカラー表現を駆使して、異なる原子は異なる色で、また結合軸もその存在を強調する為、違った色を用いるとすると、かなり複雑な処理が要求される。→アイコン画面では最も新しい作図命令が優先する為に、透視図で重なりが生ずる場合、その前後関係を適切に判断する必要がある。前後関係が分っている時、画を常に後方の

図5 判定平面

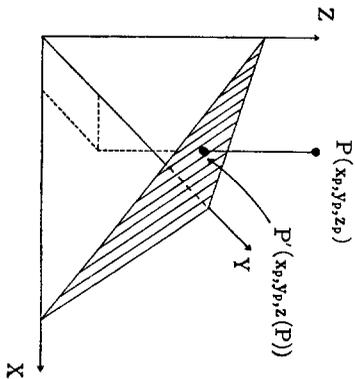


物体から描くようにすれば画面上で自然に隠し隠される様子を描く事ができる。

5.2 前後関係判断の基本原則

空間内に2個の図形があり、透視図でこれ等が重なり合うとする時、その前後関係は次のようにして判断される。本文で取扱う図形は球や線分だけで、すべて凸な図形で且つ互いに貫入し合う事はない。従って比較すべき2個の図形の間を通る平面によってこれ等の図形は、視点を含む空間と含まない空間にそれぞれ分離する事がで

図6 点Pの所属空間の判定



きる(図5参照)。視点と図形1が同じ空間に属する時、重なりが生ずるとするなら図形1は図形2を隠す事が分かる。すなわち図形1は前方に、図形2は後方にあると結論できる。従ってこのような平面をみつける事ができれば前後関係は容易に判定できる。このような平面を判定平面σと呼ぶ事にしておく。

判定平面σに関して任意の点Pがいずれの空間に属するかは次のようにしてできる。平面σを次のような一般式で表わしておく。

$$ax+by+cz=d$$

5-1

この平面は図6でハッチした平面である。点 P から例えば z 軸に平行な直線をひいてこの平面との交点を $z(P)$ とする時、 $z(P)-z_0 < 0$ なら点 P は平面 σ について z 軸に関して上方にあり、 $z(P)-z_0 > 0$ なら下方にある。

但し
$$z(P) = |a x_0 + b y_0| / l \quad 5-2$$

すなわち図形1の代表点 P について $z(P)-z_0$ の符号が視点 E に関する $z(E)-z_E$ の符号と等しいか否かが判定の基準になる。

次節で個々のケースにつき適切な判定平面 σ の選定方法も含め具体的に論ずる。

5.3 具体例

分子アニメに出てくる図形としては、原子を表わす球及び原子と原子を結びつける結合軸、すなわち線分(端点は原子球の表面上にある)しかない。従って次の三つの組合せについて前後関係が判定できればよい。すなわち、球と球、球と線分、線分と線分である。

(1) 球と球

一般には判定平面 σ は無数に存在するので、そのなから特定の一意的に定まる平面を選び出す事が眼目と

なる。二つの球が接触しているという特殊ケースでのみ平面 σ はその接点を通る接平面として一意的に定まる。接点を持たない一般の球同志の場合には次のような平面を選ぶ。球 O_1 と球 O_2 を結ぶ直線と球 O_1 との、球 O_2 に近い方の交点を通り、直線 O_1O_2 に直交する平面を判定平面 σ とすればこの平面は一意的に定まる。直線 O_1O_2 と球 O_1 との交点 I の座標は、

$$\left. \begin{aligned} z_I &= \frac{(x_2 - x_1)}{l} \cdot r_1 + x_1 \\ y_I &= \frac{(y_2 - y_1)}{l} \cdot r_1 + y_1 \\ z_I &= \frac{(z_2 - z_1)}{l} \cdot r_1 + z_1 \end{aligned} \right\} \quad 5-3$$

但し $l = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}$, r_1 は球 O_1 の半径。

平面 σ 上の任意の点を P とし、点 I から点 P へ向うベクトルを \vec{P} とし、 O_1O_2 上ベクトルを \vec{r} とすると、 \vec{P} と \vec{r} は定義から直交するから

$$\vec{r} \cdot \vec{P} = 0 \quad 5-4$$

これを成分で表わすと

$$(x_2 - x_1) \cdot P_x + (y_2 - y_1) \cdot P_y + (z_2 - z_1) \cdot P_z = 0$$

空間上に於ける点 P の座標を x, y, z とすると

5-5

$$\left. \begin{aligned} x &= P_x + x_i \\ y &= P_y + y_i \\ z &= P_z + z_i \end{aligned} \right\}$$

5-6

(5) と (6) 式より $P_{a_1}, P_{b_1}, P_{c_1}$ を消去すると,

$$(x_2 - x_1)(x - x_1) + (y_2 - y_1)(y - y_1) + (z_2 - z_1)z = 0$$

(2-21) = 0

5-7

これが平面 σ の式である.

(ii) 球と線分

二通りに分類して論ずるのが便利である. その一つは, 原子同志が化学結合している時の原子と結合軸の場合である. 結合軸はその端点を球面上にもつ線分である. 球同志の前後関係の判定は前項の方法によってつけられる. 今, 球 O_1 が球 O_2 の前方にあるとすれば, 明らかに後方から順に球 O_2 , 線分, 球 O_1 という関係になる.

その二は, 化学結合で直接繋がっていない原子と結合軸との場合である. この場合は, 判定平面 σ は以下の手続きで定める. 線分の端点座標をそれぞれ (x_1, y_1, z_1) , (x_2, y_2, z_2) とすると, 線分を含む直線 l の式は次式とな

る.

$$\frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} = \frac{z - z_1}{z_2 - z_1}$$

5-8

比較すべき球 O の中心座標は (x_0, y_0, z_0) とする. 中心 O から直線上の任意の点までの距離が最少となるような点を求める. この最少距離を半径とする球を描けば, この球はこの点でのみ直線と交わる. すなわちこの球は直線 l と接する. よってこの接点を I とすると直線 OI は直線 l と直交する. \vec{OI} ヴェクターを V とすると

$$V = (x_i - x_0, y_i - y_0, z_i - z_0)$$

5-9

線分をヴェクター r とすると,

$$r = (x_2 - x_1, y_2 - y_1, z_2 - z_1)$$

5-10

直交関係より

$$r \cdot V = 0$$

5-11

成分に分けて書くと,

$$(x_2 - x_1)(x_i - x_0) + (y_2 - y_1)(y_i - y_0) + (z_2 - z_1)z_i = 0$$

$$(z_i - z_0) = 0$$

5-12

接点 I は直線 l 上の点でもあるから, (8) より

$$\frac{x_i - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{y_i - y_1}{y_2 - y_1} = \frac{z_i - z_1}{z_2 - z_1}$$

5-13

(13) 式より y_i, z_i を x_i で表わして (12) 式に代入す

る事で x_4 が求まる。

$$x_4 = x_1 - \frac{(x_2 - x_1)^2}{L^2} [(x_1 - x_2)(x_2 - x_1) + (y_1 - y_2) \cdot$$

$$(y_2 - y_1) + (z_1 - z_2)(z_2 - z_1)] \quad 5-14$$

但し, $L^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2$

(14) 式を (13) 式に代入して y_4, z_4 も得られる。

$$y_4 = y_1 - \frac{(y_2 - y_1)}{L^2} [(x_1 - x_2)(x_2 - x_1) + (y_1 - y_2) \cdot$$

$$(y_2 - y_1) + (z_1 - z_2)(z_2 - z_1)] \quad 5-15$$

$$z_4 = z_1 - \frac{(z_2 - z_1)}{L^2} [(x_1 - x_2)(x_2 - x_1) + (y_1 - y_2) \cdot$$

$$(y_2 - y_1) + (z_1 - z_2)(z_2 - z_1)] \quad 5-16$$

接点を I とする平面 σ の式は, 前項と同様のやり方で得られる。

$$(x - x_1)(x_4 - x_0) + (y - y_1)(y_4 - y_0) + (z - z_1) \cdot$$

$$(z_1 - z_0) = 0 \quad 5-17$$

(Ⅱ) 線分と線分

前後関係を判定すべき線分をその端点をとって 1—2 及び 3—4 とする。線分 1—2 を含み, 線分 3—4 に平行な平面 σ を考える。線分 1—2, 3—4 をそれぞれ P_1, P_2 で表わすと, 端点 1 から平面 σ 上の任意

P に向うベクターを P とすれば,

$$P = o_1 P_1 + o_2 P_2 \quad 5-18$$

但し, o_1, o_2 は点 P に対応する任意の係数。点 P の座標を (x, y, z) とすると

$$x = o_1(x_2 - x_1) + o_2(x_4 - x_3) + x_1$$

$$y = o_1(y_2 - y_1) + o_2(y_4 - y_3) + y_1$$

$$z = o_1(z_2 - z_1) + o_2(z_4 - z_3) + z_1$$

(19) 式で o_1, o_2 を消去すると,

$$(x - x_1) \begin{vmatrix} y_2 - y_1 & y_4 - y_3 \\ z_2 - z_1 & z_4 - z_3 \end{vmatrix} + (y - y_1) \begin{vmatrix} z_2 - z_1 & z_4 - z_3 \\ x_2 - x_1 & x_4 - x_3 \end{vmatrix}$$

$$+ (z - z_1) \begin{vmatrix} x_2 - x_1 & x_4 - x_3 \\ y_2 - y_1 & y_4 - y_3 \end{vmatrix} = 0 \quad 5-20$$

これが平面 σ の式となる。(20) 式は次のように表わす事もできる。

$$\begin{vmatrix} x - x_1 & x_2 - x_1 & x_4 - x_3 \\ y - y_1 & y_2 - y_1 & y_4 - y_3 \\ z - z_1 & z_2 - z_1 & z_4 - z_3 \end{vmatrix} = 0 \quad 5-21$$

特別の場合を除き平面 σ は, 線分 3—4 を含まない。従って平面 σ に関して視点 E と線分の端点 3 又は 4 が共通の空間に属すか否かを判定すれば前後関係が判

る。

特別のケースとは平面 σ が線分 1—2 と 3—4 を同時に含んでしまう場合である。既に述べた手続きによって得た平面の式に關して、端点 3 (又は 4) がいつれの空間に属するかを調べる時の $z(3) - z_0$ の値がゼロになる事で分る。この場合は、ヴェクター P_1 と P_2 の外積 ($V = P_1 \times P_2$) をとり、 P_1 と V によってつくられる平面を σ とする。もう一つの特別なケースは P_1 と P_2 が平行な場合で、この時は (20) 式の各行列式係数が全てゼロになる。そこでヴェクター P_1 と線分 1—3 をヴェクターと考え、この両者の外積 V をとる。前述のケース同様に P_1 と V によってつくられる平面を σ とする。

§ 6 観測者の側の運動の導入

6.1 観測者も動く

いままでは暗黙のうちのスクリーン平面や視点は空間内で固定されているものとしてきた。しかしこれ等が空間内で移動するものとしても従来の記述はその一般性を失う訳ではない。感覚的に言えば、スクリーン平面は宇宙船の正面の窓で、視点は操縦席にいるパイロットの眼

に相当する。パイロットは、星のように空間に散りばめられた分子の世界に、自己の意志によって進入し、自由にその向きを定め、好みの分子を観察し、そしてまた新たな未知の分子への旅をするに違いない。分子空間探索船が空間を移動するにつれて、その正面の窓に展開される景色は次々と変化するだろう、このような、観測者の側の運動をも取込む事によって、アニメは一層豊富な表現を与えられる事になる。

本章では、その基本的な方法及び若干の例を示す事とする。

6.2 世界座標系 (W 系) とスクリーン座標系 (S 系) の変換関係

今までの議論では、 W 系と S 系には本質的な違いは無かったが、探索船が運動するものとする、一般にその原点も座標系の向きも異なってくる。 W 系の原点から S 系のそれに向かうヴェクターを R_W とする。また W 系を R_W だけ平行移動した座標系を W' 系とする。 W 系と W' 系の関係は、空間上の一点 P を定めそれぞれの座標系で記述したヴェクターを $X_W, X_{W'}$ とすれば、次式より定まる。

$$X_W = X_{W'} + R_W \quad 6-1$$

原点を共有する S 系と W' 系との関係は、共に直交座標系なので、一般に次式が成立する。

$$X_S = A \cdot X_{W'} \quad 6-2$$

但し X_S は S 系の原点から定点 P へ向かうヴェクタを S 系で記述したものである。

(1), (2) 式より,

$$X_S = A \cdot (X_{W'} - R_W) \quad 6-3$$

行列 A や R_W が知られているとするなら, $X_{W'}$ が与えられれば X_S が計算できる. つまり観測対象物は全て W 系で記述されているが, A や R_W がわかっている限り, これ等全ての座標値は, S 系の座標値に変換できる. 従って, 前章までに述べてきた計算処理は全て, この S 系で行なう事とすれば, 観測者の運動をも取込んだ表現が可能となる.

6.3 S 系の運動と変換関係

S 系の運動 (すなわち探査船の運動) は, 与えられているとすると, t 時間内にその原点が移動する距離 r_s ヲクター r_s と, 座標系の回転は決まる. $t=0$ における S_1 系, r_s だけ平行移動した系を S_2 系, そして S_2 系を

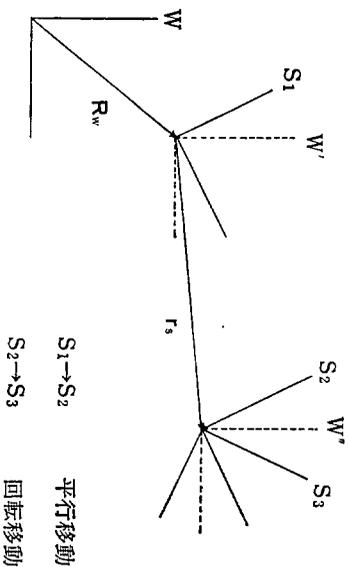
回転した系を S_3 系とする. 従って, 運動後の S 系は S_3 系である. 運動による S 系の変換の様子を模式的に図7で示す. W', W'' 系は W 系を平行移動した系である. 我々が知りたいのは W と S_3 系との関係であるが, それは順次以下の手続きで得られる.

S_1 と S_2 系の関係

任意の定点を P とし, S_1, S_2 系からそこへ向かうヴェクターを X_{S1}, X_{S2} とすると,

$$X_{S1} = X_{S2} + r_s \quad 6-4$$

図7 運動による S 系の変換の様式図



S_2 と S_3 系の関係

同様に S_3 系からそこへ向かうヴェクターを X_{S_3} とすると、

$$X_{S_3} = B \cdot X_{S_2} \quad 6-5$$

但し、 B は S 系の回転運動によって定まる行列である。また B も r_s も、運動の性質と時間 t の関数になっている。

(3), (4), (5) 式より、

$$X_{S_3} = B \cdot A (X_W - R_W) - B \cdot r_s \quad 6-6$$

(6) 式は $A \cdot R_W$ 、及び $B \cdot r_s$ が定まれば、 W 系で表される任意の点を新しいスクリーン座標系 (S_3) で表現できる事を示している。

S_3 系は、次の新しいスクリーン系の運動に対しては、 S_1 として位置づけられる。実際、(6) 式を書き直すと、

$$X_{S_3} = B \cdot A \cdot (X_W - (R_W + A^{-1} \cdot r_s)) \quad 6-7$$

これを (3) 式と比較すれば、 A には $B \cdot A$ が、 R_W には $R_W + A^{-1} \cdot r_s$ が対応する事が分る。

6.4 スクリーン系の運動の具体例

スクリーン系の運動は、その原点が通過する軌跡の時間変化と同時に、軌跡の各点での姿勢を表す座標系の向

きが必要である。向きを示す為には、2 個のヴェクターが要る。これを姿勢ヴェクターと呼ぶことにする。姿勢ヴェクターとしては、1 個は常に原点の進行方向が e_3 軸の負方向となるように選ぶ。他の 1 個は e_2 軸の単位ヴェクターに選んでおく。以下二つの例について述べる。

(i) 最も簡単な動き——直進運動

原点の動きは、 e_3 軸に沿って常に負方向に進める。姿勢は常に一定としておく。この場合は座標軸回転が無いため、 $B = E$ (単位行列) になる。 S 系の初期位置を W 系と重ねておくなら、 $A = E$ でかつ S 系の原点は W 系の e_w 軸上を負方向に進行する。さらに等速運動とすれば、

$$R_W = \begin{pmatrix} 0 & & \\ & 0 & \\ & & -\omega t \end{pmatrix} \quad 6-8$$

但し、 t は時間パラメータ。

よって、変換関係は (3) 式より、

$$X_S = X_W - R_W \quad 6-9$$

加速・減速が加わったとしても本質的に同じで、単に、

$$R_W = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\omega t + a_0^2 \end{pmatrix} \quad 6-10$$

t^2 の項を加えるだけでよい。

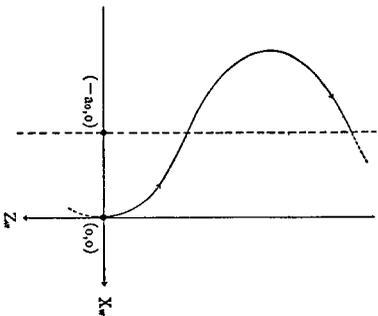
(ii) サイン軌道

図 8 に示すような、 W 系の $x_w z_w$ 平面上にあるサイン軌道上を動く場合を考えてみる。この軌道は次式で表される。

$$x = a_0 \cdot \cos(kz) - a_0 \quad 6-11$$

W 系に於る S 系の原点位置は、

図 8 サイン軌道



$$R = (x, 0, z) \quad 6-12$$

但し、 x, z は (11) 式を満たす。時間との関係は、 z_w 方向に等速運動しているとすれば、 $z = -\omega t$ となる。

S 系の姿勢を表す行列は以下のようにして求める。探索船がサイン軌道に沿って進路を変える時、バンク角は無しとしておく。つまり常にその y_w 軸は y_w 軸に平行としておく。よってもう 1 個の船の進行方向を示すヴェクターを定めれば、姿勢は決まる。

船の dt 時間内の進行を示すヴェクターを V とすると、

$$V = (Az_w, 0, Az_w) \quad 6-13$$

ヴェクターの大きさは関係ないから、 Az_w を括り出して、

$$V = Az_w \left(\frac{dz_w}{dz_w}, 0, 1 \right) \quad 6-14$$

ここで、ヴェクターの係数 Az_w は常に負である。 z_w 軸は常に船の進行方向と反対方向に向いているから、その方向のヴェクターを V_- とすると、大きさを示す係数を除いて、

$$V_- = \left(\frac{dz_w}{dz_w}, 0, 1 \right) \quad 6-15$$

単位ヴェクター化すると、

$$e_{zs} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{dx_w}{dz_w}\right)^2}} \left(\frac{dx_w}{dz_w}, 0, 1 \right) \quad 6-16$$

y_s 軸は常に y_w 軸と平行と仮定しているから

$$e_{ys} = (0, 1, 0) \quad 6-17$$

二軸が決まると、他の軸、すなわち e_{xs} も次の関係式から決まる。

$$\left. \begin{aligned} e_{xs} &= -e_x \times e_y \\ e_y &= -e_x \times e_y \\ e_{zs} &= e_x \times e_y \end{aligned} \right\} \quad 6-18$$

第1の関係式より、

$$e_{xs} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{dx_w}{dz_w}\right)^2}} \left(1, 0, -\frac{dx_w}{dz_w} \right) \quad 6-19$$

(16), (17), (19) の3式は S 系の各単位ベクトルを、 W 系 (あるいは W' 系と考えてもよい) を用いて表している。(2) 式を書き換えた $\mathbf{X}_{W'} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{X}_S$ の関係式で、 \mathbf{X}_S として S 系の例えば xs 軸の単位ベクトルを選ぶ。すなわち

$$\mathbf{X}_{W'} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2}} \left(1, 0, -\frac{dx}{dz} \right) \quad 6-20$$

$$\mathbf{X}_S = (1, 0, 0) \quad 6-21$$

この関係から \mathbf{A}^{-1} 行列の縦の第1列成分は、(19) 式で示された成分そのものである事が分る。同様に第2列は(17) 式、第3列は(16) 式の成分である。すなわち、

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} & 0 & \frac{dx}{dz} / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} \\ 0 & 1 & 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} \\ -\frac{dx}{dz} / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} & 0 & 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} \end{pmatrix} \quad 6-22$$

行列 \mathbf{A}^{-1} は直交変換行列であるからその逆行列 \mathbf{A} は、 \mathbf{A}^{-1} の転置行列 \mathbf{A}^{-1} に等しい。³⁾ よって、

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} & 0 & -\frac{dx}{dz} / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{dx}{dz} / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} & 0 & 1 / \sqrt{1 + \left(\frac{dx}{dz}\right)^2} \end{pmatrix} \quad 6-23$$

但し、 dx/dz は軌道方程式 (11) から定まる。すなわち、

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dz} &= -a_0 k \cdot \sin(kz) \\ &= a_0 k \cdot \sin(kw) \end{aligned} \quad 6-24$$

以上より、各時刻に於る(3) 式中の \mathbf{A} , \mathbf{R}_W が計算できるので、 W 系で示される点は、全てこの関係式によ

って、S系の座標値に変換できる。

最後に、具体例の展開に於いては6.2節の關係だけでなく6.3節の結果は利用しなかった。しかし6.3節の關係は、探索船の位置や姿勢をベクトルにキーボードからの操作によって変えていく場合に有効である。何故なら、その場合の位置や姿勢の変化は変更前のS系に対して相対的に決まるからである。

§7 おわりに

このプロジェクトは著者の前期ゼミ経験者の中から有志を募って始めたものである。化学を専門とする教員として、何等かの形で文系大学である本学の学生との繋がりを求めた一つの結果である。第2期プロジェクトは未だ完成するに至っていないが、すでに完成した第1期プロジェクトも含め、その原理と方法について、岩城先生の退官記念号出版を良い機会に発表することにした。

プロジェクトに参加しているメンバーは、週に一度研究室に集まってミーティングを持った。夏休みには強化合宿を行った事もある。ミーティングでは著者が一定の講義と課題の提起を行い、これについて議論をする。そ

して方針が出るとそれぞれ分担したプログラムを複製し、

テキストする。うまくいけばそれを撮影するというようにして進めてきた。学生諸君は単位も出ないというのに大変に熱心で、ゼロから出発したにしては高度のテクニクを駆使するようになるのを見て感心もし、また嬉しくも思った。後期ゼミを持っていない著者にとって、それは非常に楽しい経験でもあった。先輩格になる学生諸君の場合、初歩的段階から自然に訓練できたが、最近では取扱う課題が幾分高度化してきた為、新人の教育をそういう課題とどう両立させていくかで若干の悩みも生じている。

本稿を終わるにあたり、このプロジェクトに参加した学生諸君の名を年代順に列記し、感謝の意を表したい。
大塚成男 吉田元永 田井公一 角田順子 高村 真
本間 学 内田高弘 椎原国治 高見浩和

引用文献

- 1) 矢野敬幸 自然科学研究 22 89 (1983)
- 2) 水島三一郎, 島内武彦『赤外線吸収とラマン効果』共立
全書 共立出版 (1968)
- 3) 佐武一郎『行列と行列式』裳華房 (1968)

(一橋大学助教授)