



3.8 静電場トポロジーによる分子の可視化とその応用

A Technique for Visualizing Electrostatic Fields Based on Their Topological Structures

半田 享

NEC 情報システムズ 基盤ソフトウェア事業部
〒305-8501 茨城県つくば市御幸が丘34番地

Susumu HANDA

Platform Software Division, NEC Informatec Systems, Ltd.
34 Miyukigaoka, Tsukuba, Ibaraki 305-8501 Japan

In molecular science, visualization techniques based on computer graphics are now well established as a tool to interpret simulation results, since molecules are complicated in the structures and mutual interactions. As a probe to study such molecular interactions, electrostatic fields are considered to be useful. However, since they are given as 3D vector fields having complicated distributions, conventional drawing techniques are inadequate. In this article, a new approach based on topological structures in vector fields is presented to visualize the electrostatic fields of molecules. The scheme is to select regions of interest only from the topological structures of the fields. An example in applications to chemical reactions of an amino acid complex is presented to show how the scheme is used.

Keywords: Computer Graphics, Visualization, Topological Structure, Electrostatic Fields

1. はじめに

計算機の急速な発展により、シミュレーションや理論計算からは大量の数値データが出力されるようになった。この数値データの物理的・化学的意味を解析する手段の一つに、コンピュータグラフィックスを用いた可視化がある。数値データを映像化して、その特徴を視覚的に捕らえようとする技術である。出力される数値データは日々複雑化・大型化しており、可視化は解析手段のひとつとして益々重要になってきた。分子科学においても理論計算の規模は大型化している。最近では蛋白質のような生体高分子もその対象となりつつあり、この分野でも可視化は、計算結果の解析のために広く用いられるようになった。また同時に、的確にかつ直感的にデータの特徴を捕らえるための新しい可視化方法の研究も盛んになっている。

生体高分子の振る舞いを理解するには、その分子が持っている静電的な特徴を知ることが重要である。そもそも電荷を帯びた原子は静電場の向きと大きさに従った力を受ける。そこで、分子周囲の静電場を対象とした可視化方法について検討することにした。

分子周囲の静電場は3次元の広がりを持ったベクトル場である。例えば、2次元ベクトル場の表示に用いられていた矢印や流線を描く従来の方法をそのまま応用しても図形同士が重なりあってしまうため、複雑な形状をした分子の特徴を直感的に捕らえることは難しい。そこで、私たちはまず静電場を幾何

学的に考察した。そして、ベクトル場が持っている幾何学的特徴の一つ「トポロジー」に着目し、3次元ベクトル場の新しい可視化方法を考案した。さらに、これを分子周囲の静電場に応用することで、分子が持っている静電的な特徴を明らかにすることを試みた[1]。

2. 静電場トポロジー

静電場に限らず、一般にベクトル場はトポロジー構造を持っている。「ベクトル場がゼロ」の点を出発点にした流線が、このトポロジー構造を表す「ベクトル場の骨組み」となることが知られている[2]。もし分子周囲の静電場に対してこれを応用したのなら、分子の静電的な特徴、特に各原子と周りとの相互作用を明らかにできると期待した。ところが、実際には不十分な情報しか得られなかった。つまり、同符号の電荷を持った原子間の相互作用のみが表示され、異符号の電荷間にある静電的相互作用が全く現れなかったのである。そこで、私たちは静電場を幾何学的に考察し、骨組みの出発点を拡張して「ベクトル場を流線に沿って微分したときにゼロ」を満たす特異点を用いることとした[1]。これより、同符号に加えて異符号の静電的相互作用を表す「骨組み」を描くことができた。以上のことから、幾何学的に拡張された特異点が、静電場の特徴と強く相関していることが分かる。そこで、この特異点とそれに基づく静電場の骨組み構造から明らかになる幾何学的特徴のことを「静電場トポロジー」と呼ぶこととした。この静電場トポロジーを調べれば、各原子が周りの原子とどのように静電的相互作用しているのかを明確に把握できる。

3. 静電場の新しい表示方法

静電場などの3次元ベクトル場を可視化する難しさは、矢印や流線などの描いた図形同士が重なりあって、その位置関係が分かりにくくなることにある。これは単純だが、人間が目で見ると理解する上でも本質的な問題である。そこで、この分かりにくさを軽減するために、必要な領域だけを選択して表示することにした。その際、表示領域の選択に静電場トポロジーを利用することで、静電場の特徴を的確に捕らえた可視化が可能だと考えた。

先に述べた通り、静電場トポロジーは「静電場を流線に沿って微分したときにゼロ」になる特異点の位置と強く相関している。この流線に沿った微分は、静電場を v 、流線に沿ったパラメータを t とすると次式のように表すことができる。

$$\frac{dv}{dt} = \frac{d|v|}{dt} e_1 + |v|^2 \kappa e_2 \quad \dots\dots (1)$$

ここで、 $|v|$ は静電場の大きさ、 κ は流線の幾何学的な曲率、 e_1 と e_2 はそれぞれ流線の接線方向と法線方向を向いた単位ベクトルを表している。この二つの単位ベクトルが直交していることから、静電場トポロジーを決めた「流線に沿った微分がゼロ($dv/dt = 0$)」の条件を満たす特異点では(1)式の e_1 と e_2 のどちらの項の係数もゼロでなければならないことが分かる。そこで、この特異点と静電場との関係をより明らかにするために、片方の「 e_1 の係数だけがゼロ($d|v|/dt = 0$)」を満たす場合について調べた。すると、この条件を満たす点は、電荷を持った原子を区分けするような曲面を成していた。さらに、この曲面上に e_2 の項の係数 $|v|^2$ と κ をプロットしたところ、その分布が特異点の位置と強く相関していた。図1にこの曲面と $|v|^2$ の分布の様子を示す。前節で述べた通り、特異点の位置は静電場の特徴と強く相関している。そこで、私たちは、この曲面上の $|v|^2$ と κ の分布を用いて表示領域を選択することを採用し

た。

4. 応用例 – モデル分子 Mg-glycine-glycinemethylester 周囲の静電場–

以上に述べた新しい表示方法の有効性を確かめるため、モデル分子 Mg-glycine-glycine methylester 周囲の静電場の可視化に応用した。この分子は、マグネシウムを中心にして、グリシンとグリシンメチルエステルが配位している。グリシンメチルエステル側のメチル基を除けば、ほぼ左右対称な形をしている(図2a)。ところが、実験結果などから、この分子のグリシンメチルエステル側だけが OH⁻と反応し、加水分解することが知られている[3]。そこで、この化学反応の選択性を静電場の様子から説明することを試みた。理論計算によって見積もられた電荷には、反応選択性を支持するような差異は見つからなかった。つまり、グリシンメチルエステル側の炭素(反応部位)とそれと対称な位置にあるグリシン側のカルボニル炭素を比べてもそれぞれが持っている電荷に大きな違いはなかった。

ところが、今回の新しい表示方法を用いて分子周囲の静電場を可視化したところ、グリシン側とグリシンメチルエステル側とで静電的に大きく異なっている様子を捕らえることができた。図2b を見ると、グリシン側の静電場の向きは分子面にほぼ平行であり、近づこうとする OH⁻が加水分解反応を起こすグリシンメチルエステル側へ横向きの力を受けることが分かる。このため OH⁻はグリシン側のカルボニル炭素には近づきにくく、加水分解反応が抑制されていることが示唆される。一方、グリシンメチルエステル側の様子を見ると、静電場が反応部位の炭素から分子の外側に向いていることが分かる。そもそも電荷は電場の向きに力を受けることから、OH⁻は正の電荷を帯びたこの炭素に向かって求核的に近づくことができ、加水分解反応が起こると推察される。このように、静電場トポロジーに基づいて表示領域を選択する新しい方法では、従来は捕らえにくかった分子の静電的な特徴を明確に表示することが可能になった。

5. おわりに

蛋白質などの生体高分子の振る舞いは、その分子の静電的な特徴が大きく関与している。今回提案した可視化方法を蛋白質周囲の静電場へ応用すれば、その性質や機能を解明する有用な情報を得ることができるであろう。

今回の結果は、静電場など数値計算から得られた物理量の特徴と、それを幾何学的に解析することで得られるトポロジーなどの幾何学的な情報の間には強い相関関係があることを示している。静電場に限らず他の物理量についても幾何学的な解析を施すことによって、従来の方法では見落としていた重要な特徴を捕らえ得ることを示唆しており、今後の研究が期待される。

参考文献

- [1]S.Handa, H.Kashiwagi, T.Takada. J.Vis. & Comp. Anim. 12,3, (2001) 167-180.
- [2]J.Helman, L.Hesselink. Computer 22,8, (1989) 27-36.
- [3]S.Ina, Y.Hatano, H.Kashiwagi. Bioimages. 1,1. (1993) 37-40.

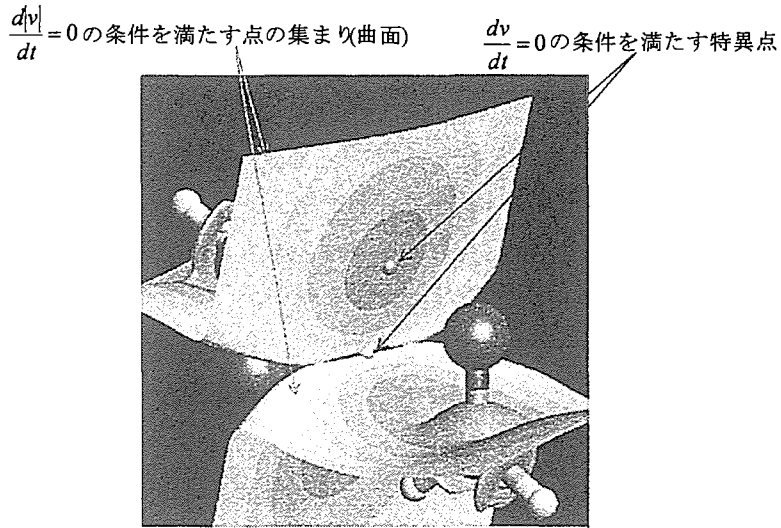


図1 ホルムアルデヒド二量体の静電場

静電場の大きさ $|v|$ の流線に沿った微分がゼロ ($d|v|/dt = 0$) の条件を満たす点の集まりは、ちょうど電荷を持った原子を区別するような曲面をなす。この面上に $|v|^2$ の分布の様子をコントアマップで描くと、静電場トポロジーを表す特異点 ($dv/dt = 0$) の位置と強く相関していることが分かる。

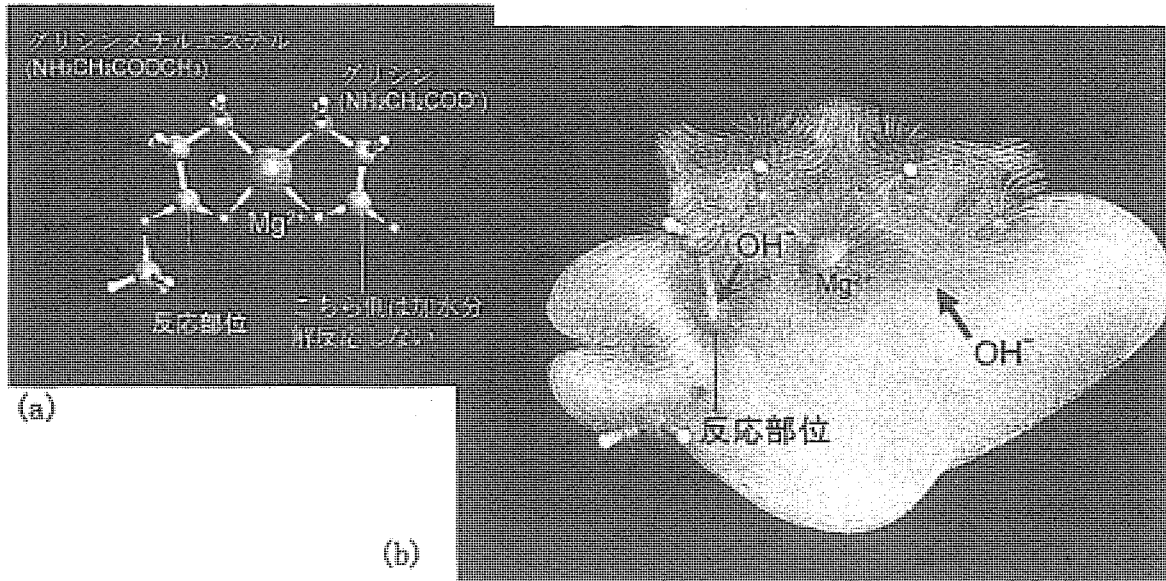


図2 Mg-glycine-glycinemethylester 周囲の静電場

- (a) この分子は、中央の Mg を挟むようにグリシンとグリシンメチルエステルが配位している。メチル基を除くとほぼ左右対称な形をしているが、グリシンメチルエステル側だけが OH⁻ と加水分解反応することが知られている。
- (b) 周囲の静電場の様子を描いてみると、加水分解反応しないグリシン側の静電場の向きは OH⁻ が近づくのを邪魔するように向いている。一方、グリシンメチルエステル側では OH⁻ が求核的に反応部位の炭素に近づくことが出来る様子が一目で分かる。