

분자모형의 스테레오 HTD 시스템 적용

정동현, 송창근

한림대학교 컴퓨터공학과

e-mail : dhjeong@center.cie.hallym.ac.kr, cgsong@sun.hallym.ac.kr

Apply Molecular Modeling to Stereo HTD system

Dong-Hyun Jeong, Chang-Geun Song

Dept. of Computer Engineering, Hallym University

요 약

가상현실에서 사용되는 3 차원 디스플레이 방법은 크게 HMD 와 HTD 시스템으로 구분되어 연구/개발이 되고 있다. 그 중 HTD 시스템의 경우에는 일반적으로 Stereoscopic 디스플레이 방법과 흡사하다고 할 수 있다. 그러나, 그 적용면에 있어서 CRT 상의 적용은 사용자의 Perspective View 가 디스플레이 평면과 수평/수직인 것이 따라 발생하는 뒤틀림 현상과 한 사람의 사용자를 기반으로 생성된다는 점이다. 본 논문에서는 CRT 상에서 HTD 를 효율적으로 사용하기 위한 방안으로 한 사람의 사용자를 기반으로 하는 분자구조의 모델을 스테레오 HTD 시스템에 적용하여 보았다. 더불어 과학적인 데이터의 경우에 VRML 파일을 적용하였을 때의 효율성에 대하여 연구를 하였다.

1. 서론

가상 환경이란 사람으로 하여금 컴퓨터에 의해 생성된 3 차원 세계에서 활동할 수 있도록 하는 것이다. 3 차원 세계에서 사용자가 보는 방향의 모습을 디스플레이 장치에 생성을 하여줌으로써 가상환경의 모습을 볼 수 있도록 되어 있으며, 사용자의 위치 파악을 위해 Tracking device 를 사용한다.

가상환경에서 3 차원 이미지를 바라보는 경우의 디스플레이 방법은 크게 HMD(Head Mounted Display) 시스템과 HTD(Head Tracked Display) 시스템의 두 부분으로 구분될 수 있다. HMD 시스템의 경우에는 사용자가 화면 디스플레이 장치가 붙어있는 헬멧을 착용하고 가상환경의 내부를 살펴볼 수 있도록 되어있다. 그러므로 HMD 의 경우에는 눈의 위치(eye point)와 디스플레이 장치의 Refresh 가 동시에 작용을 한다. 반면에 HTD(Head Tracked Display)의 경우에는 CAVE, desktop VR, Workbench 와 같이 디스플레이 장치가 움직이지 않는 벽이나 테이블에 부착되어 있기 때문에 단지 사용자가 살펴보는 위치(eye point)가 바뀌는 것 뿐이다.[1]

대부분의 가상환경 시스템의 경우에는 각각의 눈(좌/우)에 따르는 다른 영상을 디스플레이 하는데, Stereoscopic 의 경우에는 가상의 오브젝트가 실제의 디스플레이 위치(스크린)보다 앞/뒤에 보여지게 함으

로서 보다 현실감 있는 3 차원 영상을 출력하여 준다.

3 차원 영상 디스플레이가 발전하게 되면서 또한 발전되어온 부분이 물리적인 환경에서의 실시간 모델링 기법들이다. 물리적인 환경들은 추의 진자운동이나 신체의 운동역학 혹은 화학적 원자 및 분자들을 3 차원 영상으로 보여주는 것이다. 실질적으로 그래픽 하드웨어와 컴퓨터의 성능이 발전함에 따라 사용자들로 하여금 현실감을 얻을 수 있도록 3 차원 영상을 표현하는 방법에서 물리적인 요소들을 집어 넣어 생성/표현을 하고 있다.

본 논문에서는 CRT 상에서 HTD 시스템으로 표현하는 경우에 있어서 원자나 분자의 모델을 적용하였다. 또한 효율적인 분자구조의 적용을 위하여 VRML 파일을 사용하였을 경우의 효율성을 살펴보았다.

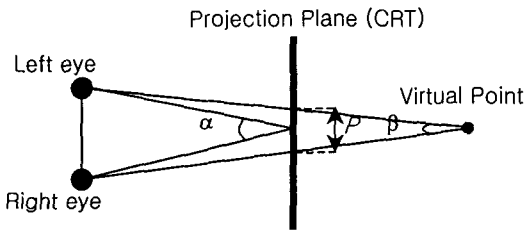
2. 기존 연구

2.1 스테레오스코픽(Stereoscopic) 디스플레이

Stereoscopic 디스플레이 방법에서는 사용자들에게 잘못된 3 차원 스테레오 영상을 보여주게 됨으로써 복시증(diplopia) 현상이 발생하는데, 이는 디스플레이 시스템의 물리적인 특징이나 혹은 디스플레이 시킬 3 차원 지형의 특성이 틀리기 때문이다. 3 차원 지형에 의해 발생할 수 있는 복시증(diplopia) 현상은 다음의 세 가지에 의해서 발생하는 것으로 분류될 수 있다[2].

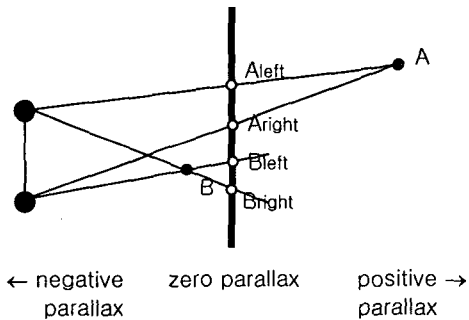
- 디스플레이 장치와 가상의 오브젝트와의 거리
- 두 눈 사이의 차이값 (eye separation value)
- 사용자의 위치와 디스플레이 장치와의 거리

[그림 1]은 가상의 오브젝트가 스크린(Projection Plane)에 보여지는 모습을 도식화 한 것이다. 사용자가 가상의 오브젝트를 바라볼 때 생기는 β 값과 스크린에 의해 생기는 α 값을 볼 수가 있는데, α - β 값이 제한된 범위를 넘게 되면 3 차원 이미지가 잘못 생성되어 복시증(diplopia) 현상이 발생하게 된다[2].



[그림 1] 프로젝션 모형

가상의 오브젝트와 왼쪽/오른쪽 눈에 의해 생성되는 스크린상의 점의 거리를 Parallax(P)라고 부르는데, 이 값에 의해서 Zero parallax, Positive parallax, Divergent parallax 와 Negative parallax 로 분류가 된다[3]. Positive parallax 의 경우에는 가상의 오브젝트가 [그림 2]의 A 처럼 스크린의 뒤에 생성이 되며, Negative Parallax 의 경우에는 가상의 오브젝트가 [그림 2]의 B 와 같이 스크린의 앞에 위치된다. 또한 Divergent parallax 의 경우에는 프로젝션 플레인(Projection Plane)에 생성되는 두 개의 점 사이의 거리 P 가 두 눈 사이의 거리 보다 큰 경우를 말하며 사용자로 하여금 불편함을 주게 된다($p > |lefteye - righteye|$).



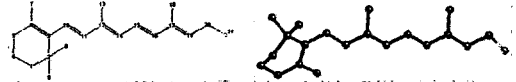
[그림 2] Parallax 효과

Stereoscopic 디스플레이 방법에서 발생하는 또 하나의 문제점은 뒤틀림(distortion)현상으로, 이것은 사용자의 eye position 이 틀려지는 경우에 수직선이나 수평선이 커브로 보여지는 문제이다[2].

Wartell 등은 [4][5][6]에서는 HTD 에서 발생하는 뒤틀림 현상을 해결하기 위한 방법과 원거리 오브젝트의 경우에 발생하는 fusion problem 의 개선방향에 대하여 제시하였다.

2.2 분자구조의 적용

그림 3 에서와 같이 기존의 2 차원 구조의 분자구조를 디스플레이 하는 방향에서 최근에는 컴퓨터의 성능 향상과 더불어 3 차원 디스플레이 방법을 통한 디스플레이 프로그램의 개발이 많은 부분에서 진행되고 있다.



[그림 3] 비타민(Vitamine)의 2 차원 구조(좌)와 3 차원 구조(우)

[7]에서 Leach 는 VRML97 을 이용하여 웹상에서 3 차원 분자구조를 디스플레이 하기 위한 방법에 대하여 논의를 하였다.

Surles 는 [9]에서 물리적인 환경에 맞게 분자를 모델링하는 Sculpt 를 개발하였으며, Bernstein 은 [10]에서 분자에 대한 3 차원 파일구조를 정립하여 현재에도 수많은 어플리케이션에서 3 차원 분자파일로 사용되고 있다.[11]

3. 3 차원 모형 디스플레이 및 측정

3.1 디스플레이 시스템 및 방법

본 논문에서는 3 차원 모델을 디스플레이 하기 위하여 [1]에서 개발한 시스템을 사용하였으며, CRT 상에서 HTD 를 구현하기 위하여 Headtracking Device 로서 InsideTrak 을 사용하였고 StereoGraphics 사의 CrystalEyes Wired(Stereo Glasses)를 사용하여 스테레오 이미지를 볼 수 있도록 하였다.

그리고 3 차원 영상을 CRT 상에서 디스플레이 하기 위하여 해상도를 640x480 으로 고정하였으며, 좌/우측에 디스플레이 되는 refresh rate(vertical sync)를 60Hz(전체 120Hz)로 맞추어 주었다. 또한 분자구조를 디스플레이 하는 경우에 바탕색을 회색으로 표시를 하여 고스트 현상이 발생하지 않도록 하였다.[8]

건물구조의 경우 [1]에서 개발한 시스템의 경우에는 wavefront 사의 obj 파일을 임포트 하는 방식으로 되어 있다. 그러나, 분자구조의 경우에는 분자의 구조 자체가 구형으로 디스플레이 된다는 점과 과학적 데이터를 시각화 시키는 데의 효율성[7]을 들어 VRML 파일을 임포트 하는 방식을 취하였다.

3.2 뒤틀림(Distortion) 현상

스테레오 HTD 시스템의 경우에 앞에서도 언급하였듯이 3 차원 오브젝트가 사용자가 바라보는 시각에 따라서 비틀려져 보이는 왜곡/뒤틀림 현상이 발생을 하게 된다. 본 논문에서는 이 문제를 해결하기 위하여

Wartell 등이 [5][6]에서 제안한 방법중 $\Delta shear^{-1}$ Predistortion 방법을 사용하였는데, 이는 sideway shifting 을 없애기 위하여 사용되었다.

[그림 4]은 실질적으로 World Coordinate 상에서 $\Delta shear^{-1}$ Predistortion 이 적용되는 방법에 대하여 보여주고 있다.

$$M_{Sm} = M_{Sw} \cdot [\Delta shear^{-1}]_{world} \cdot M_{Wm}$$

$M_{Sm} : ScreenModel$
 $M_{Sw} : ScreenWorld$
 $M_{Wm} : WorldModel$

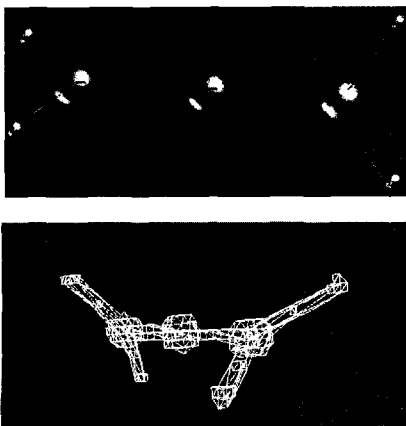
[그림 4] $\Delta shear^{-1}$ Predistortion 의 적용

$$\Delta shear^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{-(1-r)(IxIz + Dx Dzr)}{Dz^2 r^2 - Iz^2} & 0 \\ 0 & 1 & \frac{-(1-r)(IyIz + Dy Dzr)}{Dz^2 r^2 - Iz^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

[그림 5] $\Delta shear^{-1}$ Predistortion

[그림 5]은 $\Delta shear^{-1}$ Predistortion 의 Matrix 형태를 보여주고 있는데, 사용자가 바라보는 위치에서 머리(head)의 위치(왼쪽/오른쪽 눈의 중심) I(Ix,Iy,Iz)와 눈의 위치(Eye position)인 vector D(Dx,Dy,Dz)를 이용하여 다른 이미지를 계산/출력하여 준다. 여기에 사용된 r 값은 실제 두 눈(true eye)사이의 값과 가상의 눈(modeled eye)사이의 값의 비율(ratio)으로써 가상의 좌/우측 눈의 위치(modeled eye separation)를 생성하기 위한 값으로 사용된다.

3.3 분자 모형의 적용



[그림 6] VRML 파일을 이용한 분자구조(상) / OBJ 파

일을 이용한 분자구조(하)

그림 6는 VRML 과 OBJ 파일로 구성된 분자의 구조를 디스플레이 한 모습을 보여주고 있다. 두개의 이미지는 서로 같은 분자구조를 VRML 파일의 형식으로 로딩하는 경우와 OBJ 파일의 형태로 로딩하는 경우의

```
DEF DefaultTouchSensor TouchSensor { }
  Group {
    children Group {
      .
      .
      .
      textureTransform NULL
    }
    geometry Sphere {
      radius 0.231000
    }
  }
}
```

[그림 7] VRML 파일의 원자 생성 부분 (일부)

```
# Max2Obj Version 2.5, May 15th, 1999
#
mtllib ./atoom.mtl
g
# object VSph01 to come ...
#
v 1.3 0.0 0.2
v 1.3 0.1 0.2
v 1.3 0.1 0.2
v 1.3 0.1 0.2
```

[그림 8] OBJ 파일의 원자 생성 부분 (일부)

모습을 보여주고 있다. 아래 이미지는 실질적으로 각 점(Vertex)간의 구분을 뚜렷히 하기 위해 Wireframe 으로 보여주고 있는데, 구(Spear)를 생성하는데 있어서 OpenGL 의 함수를 사용하는 경우와의 차이를 보여주고 있다. 그림 7 과 8 에서와 같이 VRML 파일의 경우 분자를 단 하나의 구체로 정보를 포함하지만, OBJ 파일의 경우에는 구체에 대한 각각의 Vertex 를 정보를 가지고 디스플레이 하기 때문에 차이가 발생을 하게 된다.

스테레오 HTD 시스템에 적용이 되는 경우에 발생하는 왜곡/뒤틀림 현상을 막기 위해 $\Delta shear^{-1}$ Predistortion 방법을 적용하였을 경우, 본 논문에서는 [1]의 건물이나 지형과 같이 고정축으로 되는 부분이 존재하는 경우에 적용이 되는 것 보다 분자구조와 같이 고정축이 존재하지 않는 부분의 모델을 적용하는 것이 더 효율적임을 알 수 있었다.

또한 건물이나 지형을 기반으로 하는 경우에는 여러 사용자를 가정으로 Workbench 와 같은 장치를 사용하는데, HTD 시스템의 고유한 특성(Only one viewer) 때문에 CRT 상에서의 HTD 시스템에 3 차원 이미지를

디스플레이 하는데에는 단일 사용자를 배경으로 하는 데 더 효율적인 분자구조와 같은 모델을 적용하는 것이 좋을 수 있다.

4. 결론 및 향후 연구과제

본 논문에서는 3 차원 이미지를 디스플레이 하는 방법으로 CRT 상에서 스테레오 HTD 시스템상에서 분자구조를 적용하여 보았으며, 실질적으로 분자구조를 디스플레이 하는 방법에서는 VRML 파일의 사용하였다. HTD 시스템 자체가 한 사람의 사용자를 기반으로 개발되는 점을 착안하여 여러 사용자를 기반에 두는 건물외의 모습을 디스플레이 방법 보다는 분자의 구조를 디스플레이 하는 방법이 더 효율적임을 알 수 있었다.

본 논문에서 사용한 분자 구조는 간단하게 구성된 VRML 파일을 적용하였다. 그러나 실질적으로 많이 사용되는 PDB(Protein Data Bank) 파일 포맷[9][10]의 적용과 [7]에서 사용한 VRML 파일의 분자노드(Molecule node)와 Scrip 를 효율적으로 적용하는 방법에 대하여 고려할 필요가 있다. 또한 분자 구조의 효율적인 적용을 위하여 인터랙티브한 방법[12]의 적용을 통한 분자구조의 생성과 적용에 관한 연구가 필요하다.

참고문헌

[1] 정동현, 송창근, "CRT 상에서 스테레오 HTD 시스템의 구현", HCI2001 Conference, 제 10 회 한국정보과학회 인간과 컴퓨터 상호작용연구회 학술대회, Vol.10, No.1, pp720-724, 2001.

[2] Larry F. Hodges. "Tutorial: Time-Multiplexed Stereoscopic Computer Graphics," IEEE Computer Graphics and Applications. March 1992. pp20-30.

[3] Lenny Lipton, "Stereo3D Handbook," white paper, Available at <http://www.stereographics.com/>.

[4] Zachary Wartell, Larry F. Hodges, William Ribarsky, "An Analytic Comparison of α -False Eye Separation, Image Scaling and Image Shifting in Stereoscopic Displays," Georgia Institute of Technology, GVTU Technical Report, no.00-09, 2000.

[5] Z.Wartell, L.F.Hodges, and W.Ribaarsky, "Balancing Fusion, Image Depth, and Distortion in Stereoscopic Head-Trackled Displays," SIGGRAPH99 Conference Proceedings, 1999, pp. 351-357.

[6] Zachary Wartell, Larry F. Hodges, Williams Ribarsky. "The Analytic Distortion Induced by False-Eye Separation in Head-Trackled Stereoscopic Displays," Georgia Institute of Technology, GVTU Technical Report, no. 99-02, 1999.

[7] Geoff Leach, James Gilbert, "VRML Molecular Dynamics Trajectories", Proceedings of the fourth symposium on The virtual reality modeling language, pp.71-78, 1999.

[8] Bob Akka, "Writing Stereoscopic Software for StereoGraphics System Using Microsoft Windows OpenGL", June 7, 1999. Available at <http://www.stereographics.com/>.

[9] Mark Surles, "Interactive Modeling Enhanced with Constraints and Physics - With Applications in Molecular Modeling," to be published in the Proceedings of the 1992

Symposium on 3D Interactive Graphics. ACM, SIGGRAPH, Cambridge, MA., March, 1992.

[10] Frances C. Bernstein et al., "The Protein Data Bank: A Computer-Based Archival File for Macromolecular Structures", *Journal of Molecular Biology*, Vol. 112, pp.535-542, 1977.

[11] Protein Data Bank, Research Collaboratory for Structural Bioinformatics, <http://www.rcsb.org/pdb/>

[12] Thomas Ferrin, Conrad Huang, Gregory Couch, Eric Pettersen and Robert Langridge, "The MidaPlus Molecular Modeling System", Conference proceedings on Human factors in computing systems, pp.521-522, 1992.