

Title	阪大の高解像度立体VR可視化システムの利用事例の紹 介
Author(s)	萩田, 克美
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2014, 4, p. 15-20
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70478
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

阪大の高解像度立体 VR 可視化システムの利用事例の紹介

萩田 克美 防衛大学校 応用物理学科

1. はじめに

誰もが知るとおり、一般社会における Visualization 技術は、ブラウン管から液晶パネルへの移行程度の 技術変化ではなく、一般生活に大きな影響を与えて いる。特に、CG (コンピュータ・グラフィックス) という視点では、ゲームや映画などが、発展の原動 力である。計算機を用いたシミュレーションにおい ては、その結果を可視化し、観察することは、重要 な研究手段とされてきた。最近のスーパーコンピュ ータ (High Performance Computing) では、演算能力 は飛躍的に向上し、生み出されるデータは爆発的に 増大している。この HPC の成長により、従来に比べ 近似の少ない計算が実現する研究分野や、従来より も大きなシステムサイズを扱う研究分野がある。大 規模可視化処理技術の視点では、後者に関し、深刻 な問題になりつつある。特に、愚直に可視化するこ とが困難になり、データを保存し転送することも難 しくなっている。この問題に対しては、データ転送 圧縮なども含むアルゴリズム的な改善の他に、(スパ コン性能に追従した経済的に合理的な範囲での)ハ ードウェアのアップグレードも、重要な要素である。

探索的な大規模可視化を実現できる高解像度表示 装置によって、仮想現実(VR)空間内で、自由に探 索し、シミュレーション結果、特に、複雑な3次元 構造の空間認知や挙動の把握が、促されると期待し ている。高精細高解像度表示装置においては、電子 顕微鏡や実写のカメラで撮影された広い空間の像 を、人間が前後左右に動きながら、じっくりと観察 することで、気づきを促されることが期待される。

大阪大学サイバーメディアセンターでは、可視化 に関するサービス・プロバイダーとしての活動(可 視化サービス http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp)を開始した と伺っている。2014 年 5 月の学園祭(いちょう祭) では、サイバーメディアセンターの施設見学を行い、 盛況であったと伺っている(図1参照)。(著者も、 VR コンテンツを提供し、協力させていただいた。)



図1:2014年のいちょう祭でのデモンストレーション また、我々のJHPCN(学際大規模情報基盤共同 利用・共同研究拠点)の公募課題(課題番号: 14-NA28)では、大阪大学、名古屋大学、東北大学 の高精細高解像度可視化装置(図2参照)を、シミ ュレーション結果や複雑な3次元構造についてのデ ィスカッション(探索的発見、理解共有)に活用す る計画である。特に、ネットワークを活用した連携 が実現するように、利用技術の検討を深めている。



図2:阪大(うめきた拠点)、名古屋大、東北大の高精細 高解像度可視化装置と、JHPCN ネットワーク型研究拠点

2. 複雑な3次元形状のVR可視化

物質材料系の研究や教育において、原子分子の3 次元空間中での複雑な形状が様々な物性に影響を与 えることから、その複雑な形状を観察し、空間認知 することは、一定の意味がある。

原子の結晶の3次元構造は、古くから研究され、 網羅的に知られている。多くの読者になじみのある ものは、立方晶の単純な結晶格子である、ダイヤモ ンド格子(配位数4)、単純立方格子(配位数6)、 体心立方格子(配位数8)などであろう。これらは、 立方晶で配位数を制約した下で、均等で等方的であ るという条件を課した場合に得られるものである。 配位数3でも同様な条件で、格子を定めることがで きる。1932年にLeavesら[1]が、このネットワーク 構造(Laves graph 3₁)を提案している(図3左)。



図3: Laves らが示した 3₁ グラフと、SRS 格子

結晶学の観点では、この構造をもつ SrSi2に由来した SRS 格子[2]や、Well's (10, 3)-a グラフ[3]と呼ばれて いる。一方で、離散微分幾何の観点では、K4 対称性 を持つ数学的意味から、K4 格子[4]と呼ぶ場合もあ る。(なお、SRS という呼称は、現在、IUPAC proposal として、その名称の登録が検討されており、今後、 名称が統一されていくのかも知れない。) Laves graph 3」において接触する2つの球の中心間を接続した線 で、図3右に示す SRS 格子を得ることができる。こ のグラフは、I4132の対称性を持ち、空間群 214 番と して分類されている。このような構造は、原子が粒 子の位置を占めるものだけではない。ブロックコポ リマーなどの高分子相分離系では、エネルギーが極 小状態での界面が、Triply Periodic Minimal Surface (立方晶での極小曲面)の G-surface (図4) と呼ば れる構造が、入れ子になった、double gyroid 構造と

いうものが観察されている。その片方のみを取り出 すと、single gyroid 構造になる。これらの構造の認識 においても、興味深い歴史がある。文献[5]などに基 づき、年代順に整理して紹介する。「Single gyroid 構 造は、Luzzati らが、1967 年に実験的に発見した。1969 年に、Alan Schoen は、この gyroid 面が、TPMS であ ることを、指摘した。また、Double gyroid 構造は、 Thomas らにより、1986 年に実験的に発見されてい たが、当時は、別の構造と認識していた。1994 年の Hajduk らと Shulz らの 2 つのグループによる独立な 実験で、double gyroid 構造の存在が確認された。」な お、この double gyroid 構造して分類されている。 double gyroid 構造の発見以降、格子状の形状から gyroid lattice という用語もよく用いられている。



図4: single gyroid 構造と double gyroid 構造

前段の説明が長くなったが、このような複雑に込 み入った形状(配置やネットワーク)が、同一の物 であることを直感的に理解する手段として、VR 援 用は1つの選択肢である。3 次元構造の VR を手軽 に行う手段として、AVS/Express で作られる gfa ファ イルを用いる方法がある。この形式のファイルは、 レンダリングの中間ファイルを保存しており、3D AVS Player というフリーソフトで再生することがで きる。(最近、Windows 版に加えて、Linux 版が配布 されている。)(同様のことは、AVS-Field 形式や PDB 形式などのデータを共有し、設定条件も共有すれば、 VMD でも実現できる。)

3 次元での幾何構造に関する研究書籍において は、下図のような Stereo Pair イメージが紙面上に掲 載される場合がある。個人的な感想ではあるが、 Stereo Pair イメージに適応するための目の動きに集



⊠ 5 : Stereo pair of image of a portion of the net for the Heesch-Laves sphere packing 3₁. (This picture is reprinted from book "New Geometries for New Materials" by E.A. Lord, A. L. Mackay, S. Ranganathan. The HPC journal received permission to the reprint from Cambridge University Press.)

中力が取られ、画像が飛び出ることは確認できるが、 じっくりと構造を観察することは難しい。なお、こ れへの簡単な処方は次の通りである。スキャナー等 で取り込み映像化し、Bino3d[6]と呼ばれる3次元動 画再生ソフトで、Nvidiaの3dVisionによる立体視で 観察することが簡単にできる。(これにより、参考文 献[5]とした「New Geometries for New Materials」に示 された多くのStereo Pair イメージをストレスなく観 察することが可能となった。)

いま、2 視点からの立体視について紹介したが、 多視点の画像から、複雑な立体構造の推定・再構成 についても、最近の進展は興味深い。建造物などの 立体構造物の自動的なモデリングを目的として、 Many multi-view stereo (MVS) algorithms $\mathfrak{D}^{\underline{s}}$, Google や Microsoft、Industrial Light & Magic などにより、勢 力的に検討されている。詳細は省くが、技術的ポイ ントは、画像中の特徴点抽出と3次元形状とカメラ の位置を同時に復元する手法 (Structure from Motion) である。Bundler (by Noah Snavely)やCMVS (by Yasutaka Furukawa and Jean Ponce)で、実際に、 double gyroid 構造(2unit cells) について、360 度を ぐるりと1度刻みで用意した360枚の画像からの再 構成を試みた所、図6右の結果が得られた。当たり 前ではあるが、内部ほど構造の再現は悪いが、表面 近くは再現できている。このような情報処理技術を、 材料研究の世界で、情報科学と計算科学の協働によ り、活用できる日が来ることを期待している。



図6:入力画像の1例と再構成した立体構造の snapshot

3. 高精細高解像度の大規模可視化

大阪大学サイバーメディアセンターの先端的な高 精細高解像度可視化装置では、11520 x 4320(豊中) や 6830 x 2304 (うめきた拠点)といった、研究室 レベルで対応可能な 4K ディスプレイよりも高解像 度な環境を共同利用することができる。このような 環境は、サイエンスのみならず、社会データのグラ フ関係の表示や文化財・美術品の鑑賞などでも、活 用されることが期待される。

本章では、大阪大学サイバーメディアセンターの 大規模可視化システムを用いて、高精細高解像度の 大規模可視化を行った事例を紹介する。

最近の粒子系シミュレーションでは、粒子数が、 数千万以上を扱う事が普通になり、愚直な可視化は 技術的に難しくなっている。あらかじめ、予想され る構造を取る場合や、粗視化の手続きが明確な場合 については、工夫した可視化を施すことが可能とな る。しかしながら、未知の構造をとるものを可視化 する場合、愚直な可視化と慎重な観察は、アプロー チの一つとして重要であると考えられる。また、高 精細高解像度の表示装置の最大解像度を活かした詳 細部分の観察も魅力的な機能の一つである。(過去に は、表示装置がなかったため、B0 で 300dpi のポス タープリンタの利用を念頭にした約 17000x12000 の 解像度の Bitmap 作成を AVS/Express やその派生品 で検討したことがある。)特に、部分部分の可視化で は見えなかった大域的な構造や挙動などの認知への 活用が期待される。加えて、超並列プログラム開発・ 改造時においても、可視化してしまえば一目で分か る誤りなどの気づきにも繋がると考えられる。

ここ数年、我々は、自然科学研究機構の若手連携

プロジェクトや、JHPCN 公募研究や名大 HPC プロ ジェクトの課題において、超多粒子系の可視化につ いて、分野横断的に検討してきた。これらでは、プ ラズマ・天文・材料などの粒子系シミュレーション 分野では、1 億を超えるような多数の粒子を扱うよ うになり、可視化が困難になってきたという背景が ある。異なる分野の若手研究者が、議論したり、ノ ウハウを交換したりすることで、可視化する技術の 研鑽を行ってきた。それらの枠組で、天文のシミュ レーション結果の可視化ソフト Zindaiji3[7]を用い て、高分子材料の粗視化 MD シミュレーション結果 の高品位な高解像度可視化動画の作成を試みた。こ こでは、約1千万粒子の系を試験的に扱った。模型 の詳細説明は避けるが、この系は、バネビーズ模型 の高分子(図7)と、ナノ粒子(図8)から構成さ れる系である。ここで、ナノ粒子の大きさは、高分 子の太さの約数十倍であり、高分子と大きさの差が ある。



図7:バネビーズ模型の高分子鎖の模式図



図8:ナノ粒子の模式図

Zindaiji3 では、カメラパス付きの povray[8]用の入 カファイルを作成することができる。ここでは、 Zindaiji3 を、色づけやオブジェクトの大きさを決め る可視化表現設定と、カメラパスの設定の2つの目 的で利用した。この系について、高分子とナノ粒子 を画面表示させると、図9左のようになる。GPU で 処理が加速されているものの、一度の描画に数分の 時間を要する。このレスポンスで、カメラパスの設 定作業を行うことは困難である。そこで、カメラパ スの設定時には、全てのオブジェクトのデータを用 いず、特徴点となる物体を粗視化したものを配置し た空間(図9の右)で作業した。図9右のデータで 作成したカメラパス情報を用いて、図9左に対応す る povray のシーンファイルをレンダリングした。



図9:超多粒子系の高品位高解像度可視化の例 (左図で、青色がナノ粒子を表し、茶色が高分子を表し ている。右図は、ナノ粒子1つを球で表現している。)

この povray 処理のシーンファイルは、約 1GB あ る。Povray3.7 では、rendering 時にスレッド並列化さ れ rendering の性能は向上している。しかしながら、 この系の場合、アプリケーションの全体性能として は、一時ファイルの出力が律速となる。改善には、 図10と図11に示すように、povray-3.7 のコード で2カ所の改造が必要である。また、バッチジョブ では、標準出力ファイルのサイズ軽減として、作業 状況を実況する出力の抑制も必要な改造である。

146.156c1	146
<	//path = "/tmp/";
<	char *tmpdir;
<	tmpdir=getenv("TMPDIR");
<	$if(tmpdir == 0) \{$
<	tmpdir = "/tmp";
<	} else {
<	printf("TMPDIR (2) is set to %s ¥n",tmpdir);
<	}
<	path = tmpdir;
<	path = path + "/";
<	
>	path = "/tmp/";

図10:vfe/unix/unixoptions.cppのdiff

116d115 < { "Create_Continue_Trace_Log", kPOVAttrib_BackupTrace, kPOVMSType_Bool }, 247d245 < { "CC", kNoParameter, kNoParameter, kPOVAttrib_BackupTrace },

 \boxtimes 1 1 : source/frontend/processrenderoptions.cpp \mathcal{O} diff



図12:超多粒子系の高品位高解像度可視化の例

VCC (大規模可視化システムの計算クラスター) の最初の大規模試験として、全56ノードを同時に利 用して、豊中の24面タイルドディスプレイの(ベゼ ル部を加えた)フル解像度 (11540x4332) での povray レンダリングを実施した。ここで、VCC の各ノード には 20Cores 搭載されていることから、1ノード毎 に 1 コマのレンダリングを行い、20 スレッドの SMP 並列として実行した。また、IO 処理を高速化するた めに、/dev/shm を利用した。(各ノードのメモリ使用 量は、約 52GB であった。)結果的には、滞りなく、 約 1000 コマの PNG ファイルをレンダリングするこ



図13: povray でナノ粒子をガラス玉とした表現例

(600dpi で、4K 解像度 3840x2160 に対応。)

とができた。(なお、一枚の PNG は、約 40~80MB であった。) その一例を図 12 に示す。なお、図 12 の大きさで 600dpi の印刷をした場合、4K の解像度 (3860x2160) となる。(印刷状況によっては困難か も知れないが、) 広い領域について、高分子を表す ball-stick を一つ一つ見ることができる。特に、高輝 度のディスプレイ環境では、高いコントラストによ り、鮮明に見ることができる。最後に、povrayでは、 ガラス玉のように、光が透過し屈折する可視化表現 を得意としている。(図13参照)

4. 今後と展望

高精細高解像度可視化装置と大規模可視化技術 は、大規模シミュレーションの時代においては、ナ ショナル・インフラとして、皆が利用できる共同利 用として整備されることが望ましいと考えられる。 観察の補助道具として利用する点でも、一般公開/ アウトリーチの場面でも、有効と想像している。ゲ ームや映画での CG の発達により、一般の人々にと っても、高品位な可視化は、当然のものになってい る。そのような一般目線を踏まえつつ、大規模シミ ュレーション研究の立場で可視化を考えると、大規 模可視化技術という苦労に直面する。超多粒子の系 の大規模 VR 可視化については、Computing として の力技と、効果的な簡易表現の、うまい組み合わせ が有効打となる。有志の若手研究者で模索をしてい るところであるが、この領域への可視化の専門研究 者の貢献を望んでいる。現在では、計算と可視化を リアルタイムで行う、interactive なシミュレーション も、(バックエンドの計算クラスターと連携し)大規 模かつ高解像度なものを扱うことが可能になり、活 用が望まれる。さらに、一般向けには、Compelling な可視化が望ましく、Human Interface Device 等との 連携を含め、情報技術分野のコモディティ技術・民 生品を利活用することも重要であると考えている。

5. 大阪大学サイバーメディアセンターへの期待

大阪大学サイバーメディアセンターに導入された 高精細高解像度可視化装置は、実際に目にすると、 確かに、研究室レベルのハイビジョン画質と比べ、 とても素晴らしい施設であることが分かる。観察の 補助道具という視点からすると、使いやすさが、重 要な要素となる。現実問題として、研究室レベルで も 3D VR 技術の活用は進んでおり、昔に比べて、技 術的優位性を示すことが難しくなってきている。

これまでの VR 可視化装置について苦言を呈する と、サービス提供の視点が大いに欠けていたと思わ れる。VR 可視化が一般化し、その大規模装置の恩 恵を一般的なユーザーが受けたいと考える時代を見 据えれば、大きな変革が必要である。かねてより、 筆者は、先端的な可視化装置において探索的可視化 での空間認知や新たな気づきなどを期待し、その利 用を試してきた。正直言えば、これまで、ユーザー が利用する共同利用装置としては、利便性が悪かっ た。今後、高精細高解像度可視化装置が、観察の補 助用具として、大いに活用されるためには、複数の 定番ソフトが、いつでも、確実に動く、安定したサ ービス提供が最低条件であると著者は思う。加えて、 この高精細高解像度可視化装置を活かすための大規 模可視化技術の提供も重要であると考えられる。

全国共同利用の大型計算機センターとして「可視 化サービス」(http://vis.cmc.osaka-u.ac.jp/)を、大々 的に標榜した大阪大学サイバーメディアセンターに は、大いに期待したいと考えている。

なお、本文章で紹介した多くのコンテンツは、大 阪大学の高精細高解像度可視化装置にて、デモとし て視聴していただけることを宣伝しておく。

謝辞

CAVE の利用をはじめとして、長年にわたり、大 阪大学 清川清准教授、下條真司教授には、VR の 利活用の検討に協力いただき、感謝しております。 ダブルジャイロイド構造(SRS 格子)に関する知見 については、著者の学生時代から、(同級生である) 旭川医大 寺本敬准教授には、多くのアドバイスを頂 きました。超多粒子系の可視化に関しては、自然科 学研究機構の若手連携プロジェクトなどを通じて、 核融合研 大谷寛明准教授、伊藤篤志助教、広島大 学 加藤恒彦特任助教、東工大 齋藤貴之准教授、 元国立天文台 武田隆顕博士 (Zindaiji3の開発者) に は、有益な議論をして頂きました。高分子粗視化 MD シミュレーションは、トヨタテクニカルディベ ロップメント(株)との共同研究の成果である。可 視化検討の全般において、サイバネットシステム (株) に、ご協力いただき、感謝いたします。

参考文献

- H. Heesch, F. Laves, Z. Kristallogr., 85, 443-458, (1933).
- (2) O'Keeffe, et. al. Acc. Chem. Res. A 41, 1782–1789
 (2008). (doi:10.1021/ar800124u)
- (3) A. F. Wells, Acta Crystallogr., 7, 535-544, (1954).
- (4) T. Sunada, Not. Am. Math. Soc. 55, 208–215 (2008).
 T. Sunada, Correction, Not. Am. Math. Soc. 55, 343 (2008).
- (5) E. A. Lord, A. L. Mackay, and S. Ranganathan, "New Geometries for New. Materials", Cambridge University Press (2006).
- (6) http://bino3d.org/
- (7) http://qcganime.web.fc2.com/ZINDAIJI3/Zindaiji3T op.html
- (8) http://www.povray.org/