



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。）

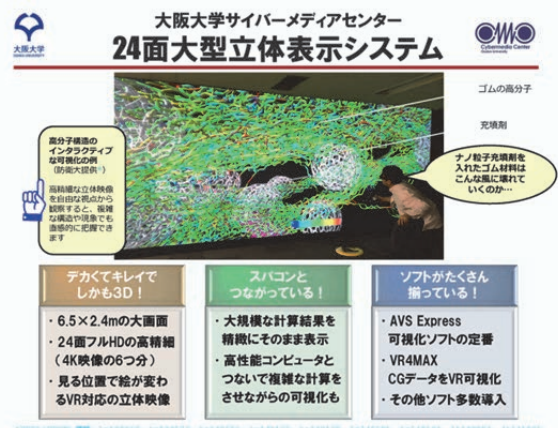


図 1：2014 年のいちょう祭でのデモンストレーション

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。

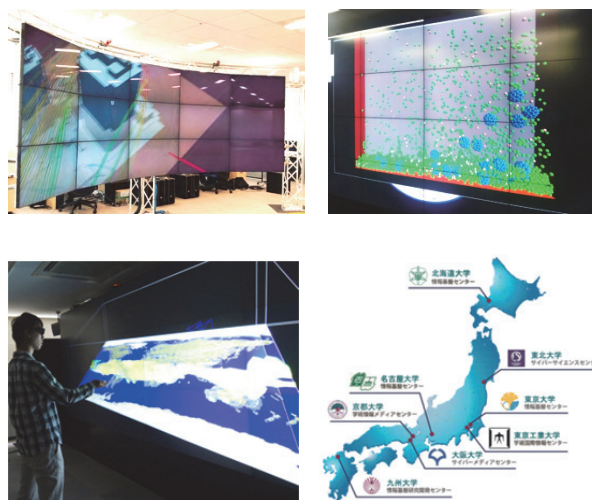


図 2：阪大（うめきた拠点）、名古屋大、東北大の高精細高解像度可視化装置と、JHPCN ネットワーク型研究拠点

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 3_1 ）を提案している（図 3 左）。

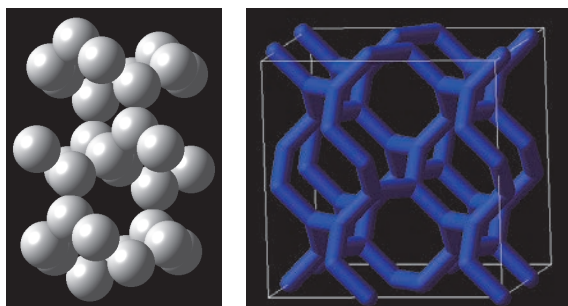


図 3 : Laves らが示した 3_1 グラフと、SRS 格子

結晶学の観点では、この構造をもつ SrSi_2 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_1 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、 $I4_1\bar{3}2$ 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 構造は、 $Ia\bar{3}d$ の対称性を持ち、空間群の 230 番目と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。

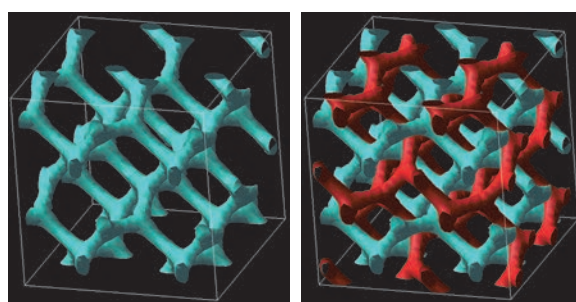


図 4 : single gyroid 構造と double gyroid 構造

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

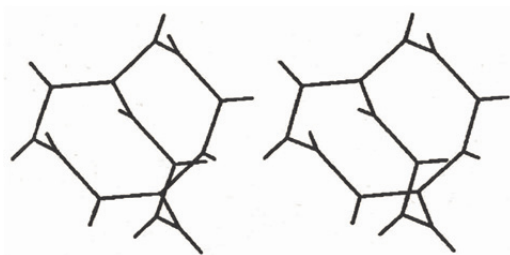


図5：Stereo pair of image of a portion of the net for the Heesch-Laves sphere packing 3_1 . (This picture is reprinted from book “New Geometries for New Materials” by E.A. Lord, A. L. Mackay, S. Ranganathan. The HPC journal received permission to the reprint from Cambridge University Press.)

中力が取られ、画像が飛び出す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が、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。

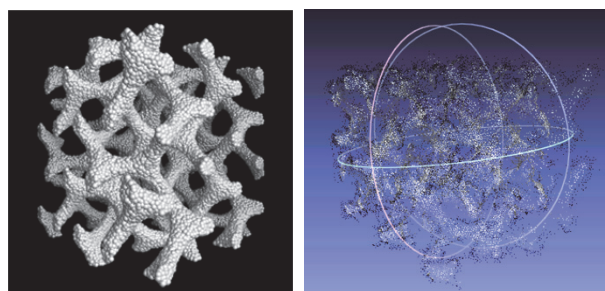


図6：入力画像の1例と再構成した立体構造のsnapshot

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。モデル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。

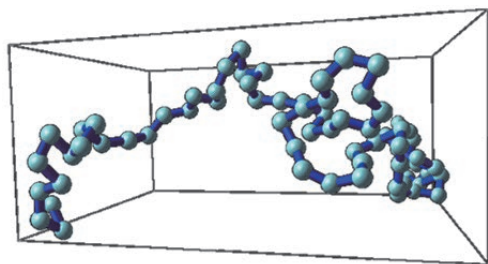


図 7：バネビーズ模型の高分子鎖の模式図

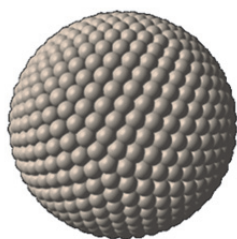


図 8：ナノ粒子の模式図

Zindaiji3 では、カメラパス付きの povray[8]用の入力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。

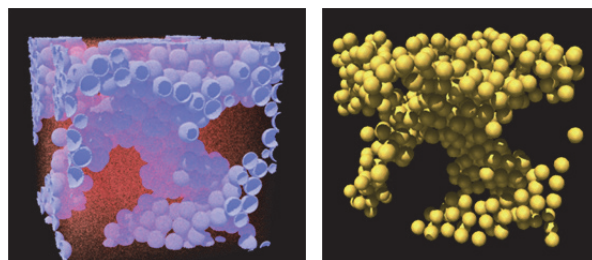


図 9：超多粒子系の高品位高解像度可視化の例（左図で、青色がナノ粒子を表し、茶色が高分子を表している。右図は、ナノ粒子 1 つを球で表現している。）

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 1 0 と図 1 1 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。

```
146,156c146
<                                     //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 1 0：vfe/unix/unixoptions.cpp の diff

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

図 1 1：source/frontend/processrenderoptions.cpp の diff

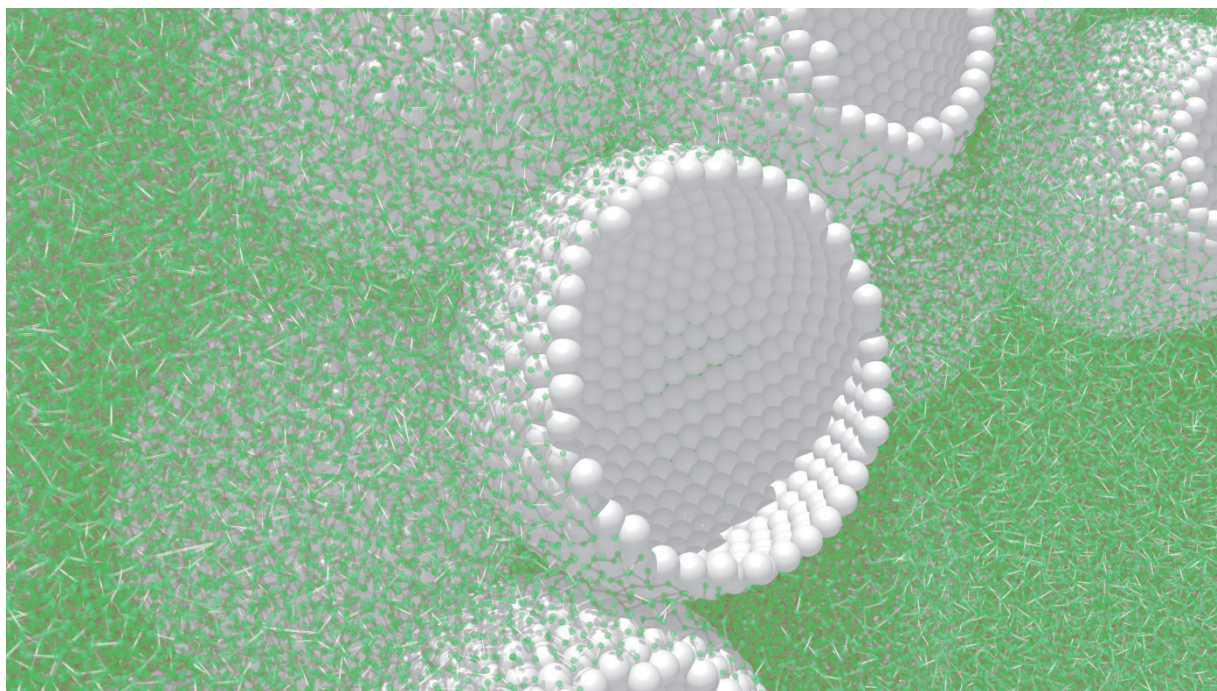


図 1 2 : 超多粒子系の高品位高解像度可視化の例 (600dpi で、4K 解像度 3840x2160 に対応。)

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

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 の大きさを 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 1 3 参照)

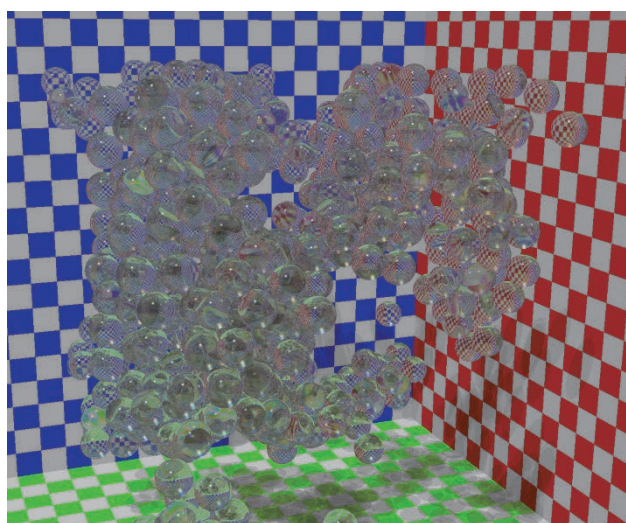


図 1 3 : povray でナノ粒子をガラス玉とした表現例

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勞に直面する。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、実際に目にとると、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

- (1) 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/Zindaiji3Top.html>
- (8) <http://www.povray.org/>