

3T-2

等関数値曲面の半透明表示

小出 昭夫, 宮田 一乗

日本アイ・ビー・エム株式会社 東京基礎研究所

1. はじめに

科学技術計算における3次元シミュレーションの急激な普及とシステム化とともに、最近、そのグラフィックス表現技法の開発が重要になってきている。我々は、このために3次元関数を等関数値曲面で表現することを研究してきた。ここで、等関数値曲面とは、3次元関数 $F(x,y,z)$ と定数 C に対し、 $F(x,y,z) - C = 0$ を満たす点 (x,y,z) の集合である。シミュレーション手法によって、格子点上の関数値かまたは関数を定めるパラメータの組で、関数 F は与えられる。対話的グラフィックス環境における等関数値曲面表示のために、我々は、その曲面の高速で安定した多面体近似データ作成アルゴリズム、成長法と四面体格子法^{1,2,3)}を開発し、ドット表示や陰影表示に用いてきた。実際の問題に応用する内に、多数の等関数値曲面を同時に表示し、しかも曲面相互の関係、例えば衝突などを表現したい応用が多いのに気付いた。従って、本稿では、曲面の半透明表示の実際のグラフィックス技法を提起し、多数の等関数値曲面の同時表示を試みる。まず半透明の光学モデルを定め、次にそのインプレメンテーションとしてリストソートとZバッファ⁴⁾を併用した技法を与える。応用例として、分子軌道計算を取り上げる。本稿を通して、等関数値曲面は多面体データに近似され、三角形をなす頂点の組と頂点の座標とそこでの曲面の法線と与えられるとする^{1,2,3)}。また、曲面は常に物体を囲み、法線の向きは物体の外側と仮定する。

2. 半透明表示のための光学モデル

曲面の透明感をだすには一般には光の面透過性と屈折を扱えばよい^{5,6)}。この内、屈折は、視点からみて曲面の縁で曲面の厚さのスケールでしか起きないので、シミュレーションで得られる仮想曲面の表示では無視できる。半透明属性のモデル化に、我々は、

$$B_{n-1} = I_n + t_n B_n \quad (1)$$

を用いる。ここで、 I_n は面 n の輝度、 t_n は面 n の透過率、 B_n は面 n の後ろからくる光の強度である。通常モデルでは、式(1)の I_n に係数 $(1 - t_n)$ がかかるが、その物理的な根拠があると思えず、我々は採用しない。

次に面の輝度、透過率をモデル化するために、図1のように、面の法線ベクトルを \underline{N} 、視線への単位ベクトルを \underline{V} 、光源への単位ベクトルを \underline{L} 、直接反射の単位ベクトルを \underline{R} であらわす。このとき、

$$\underline{R} = 2(\underline{N} \cdot \underline{L})\underline{N} - \underline{L} \quad (2)$$

が成立する。環境光は光源が物体の周りを一様に取り囲むためとし、 \underline{N} 、 \underline{L} 、 \underline{V} 、 \underline{R} に関する光学モデルから \underline{L} の積分で導くものとする。輝度 I は、入射光に比例する成分とそれに独立な成分とに分け、前者を反射光、後者を発光と呼ぶ。通常の反射のモデルに従って、反射光の比例係数を拡散反射と鏡面反射に分け、それぞれ、 $a \underline{N} \cdot \underline{L}$ と $W(\underline{N} \cdot \underline{V}) D(\underline{R} \cdot \underline{V})$ の形にとる。 $D(x)$ の関数形として正の x にたいし Phong のモデル⁷⁾ x^n を、 $W(x)$ の関数形として $b/(1 + cx)$ を、我々は用いた。発光のモデルとして、もし面に発光体が一様に分布していれば、中前ら⁸⁾ のモデル $1/|\underline{N} \cdot \underline{V}|$ を得る。我々は、この一般化として、 $d/(1 + f|\underline{N} \cdot \underline{V}|)$ を用いた。以上をまとめると、輝度 I は、

$$I = S \{ a \underline{N} \cdot \underline{L} + [b/(1 + c \underline{N} \cdot \underline{V})] (\underline{R} \cdot \underline{V})^n \} + d/(1 + f|\underline{N} \cdot \underline{V}|) \quad (3)$$

で与えられる。ここで、 S は入射光の強度である。 S の値は面で囲まれる領域の外と内では異なるべきである。我々はレイトレーシング手法を用いていないのでその正確な値を評価できない。従って、 $\underline{N} \cdot \underline{L}$ または $\underline{N} \cdot \underline{V}$ が負のとき、 $S = 0$ と単純に仮定した。環境光のモデルは、式(4)で $\underline{N} \cdot \underline{L}$ と $(\underline{R} \cdot \underline{V})^n$ を定数に置き換えれば得られる。

面の透過率のモデルは、仮想曲面が無限小の厚さをもつとすれば、得られる。光は透過距離 d に対し $\exp(-\lambda d)$ で減衰する。一方、傾いた面での透過距離は $1/|\underline{N} \cdot \underline{V}|$ に比例する。従って、透過率 t は

$$t = \exp(-g/|\underline{N} \cdot \underline{V}|) \quad (4)$$

で与えられる。

式(3)や(4)にあらわれる光学特性係数 a, b, c, d, f, g は、すべて、波長 R, G, B によって異なるとする。面の衝突のグラフィックス表現は、面の包含関係によって面の光学的特性が変わるとすればできる。

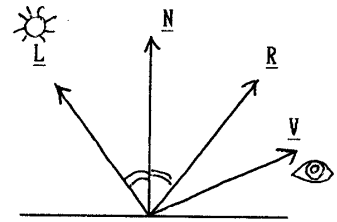


図1. ベクトル $\underline{N}, \underline{L}, \underline{V}, \underline{R}$ の定義

Semi-Transparent Display of Equi-Valued Surfaces

Akio Koide and Kazunori Miyata

IBM Research, Tokyo Research Laboratory

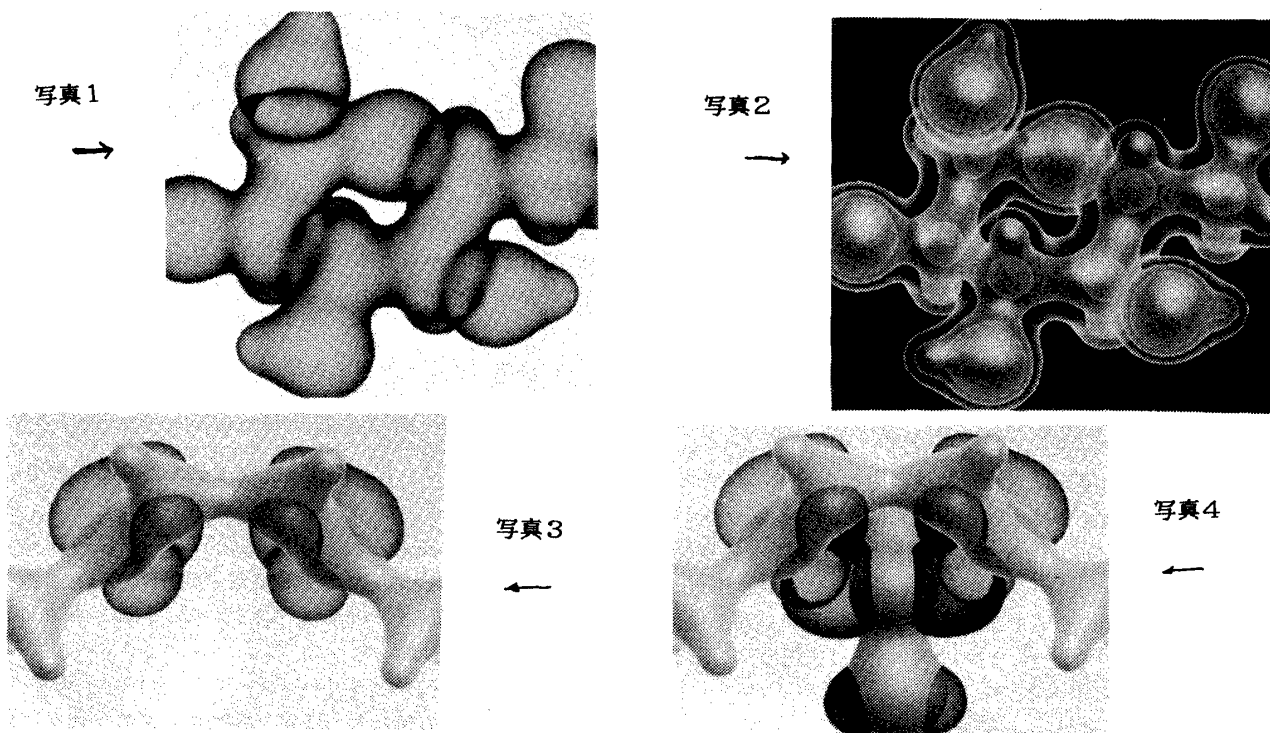
3. リストソート・Zバッファ併用技法

半透明表示では、前章の光学モデル(1)から明らかのように、各画素点で面が奥から順に書かれる必要がある。Newellら⁹⁾の手法では、奥行ソートされた多面体データを交差しないように再分割し、再びソートして式(1)を実行する。又、Zバッファを用いるKayら¹⁰⁾の手法は、透明な面が反射特性をもっているとき、正しくない。従って、三角形の再分割の不要な手法として、リストソート・Zバッファ併用技法を我々は提案する。この技法は、半透明属性をもつ三角形がそれぞれ最大1個しか交差しないとき、正確なものとなる。また、その条件が破られても、最上面は最上面として描かれる。

バッファとして、各画素点の式(1)のB、Iと奥行Zと $\underline{N \cdot V}$ と曲面識別子のバッファを用意する。大きな画像のときはウィンドウを分割して実行する。各分割されたウィンドウについて、それを覆う三角形を集め、奥行ソートを行う。奥から順に各三角形で式(3)にもとづいて、反射光の計算を行う。このとき、Zバッファを用い、各画素点で前に処理した面の奥行と比較し、新しい面が奥にあれば式(1)の計算を実行し、手前にあれば、その値をIバッファに入れ、以前のIと $\underline{N \cdot V}$ と曲面識別子バッファの値で、式(1)の計算を実行する。また、面識別子の組、 $\underline{N \cdot V}$ の符号から曲面の包含関係を推定し、発光、透過の光学特性係数を変える。すべての三角形が処理されたとき、バッファの値にもとづいて式(1)を実行する。必要な法線の値、奥行は各画素点で三角形の頂点の値から計算される。

4. おわりに

写真1と2はブドウ糖の電子密度への応用例である。写真3はジェンC8H10の電子密度と分子軌道HOMOの表示例で、写真4はそれに反応している亜硫酸ガスSO₂の電子密度と分子軌道LUMOを同時表示したものである。HOMOとLUMOの衝突部分に対し、発光体モデルが使用されている。使用された三角形の数は、1万から3万である。化学的に興味ある情報が半透明表示で得られた。



参考文献

1. Koide A, Doi A, and Kajioka K: J.Molecular Graphics, Vol.4, pp149-155(1986).
2. 土井章男,小出昭夫: 情報処理学会第33回全国大会 pp2129-2130(1986), 小出昭夫,土井章男: 情報処理学会第35回全国大会 pp2335-2336(1987).
3. Koide A and Doi A: TRL Research Report, TR87-1017, IBM東京基礎研究所(1987).
4. Sutherland I E, Sproull R F, and Schumacker R A: ACM Comput.Surv., Vol.6, pp1-55(1974).
5. Rogers D F: 'Procedural Elements for Computer Graphics,' McGraw-Hill(1985).
6. 中前栄八郎,西田友是:『3次元コンピュータグラフィックス』昭晃堂(1986).
7. Phong B-T: Comm.ACM, Vol.18,No.6, pp311-317(1975).
8. 中前栄八郎ら: 情報処理学会論文誌, Vol.26,No.1, pp181-188(1985).
9. Newell M E, Newell R G, and Sancha T L: Proc.ACM Nat.Conf. p443(1972).
10. Kay D and Greenberg D: SIGGRAPH '79 Computer Graphics, Vol.13,No.3, pp158-164(1979).