

2N-8 Volume Visualizationのイオン・原子衝突問題への応用(2) - Volume Rendering -

石川 民子 °戸田 直美 佐藤 浩史 藤代 一成 (お茶の水女子大学 理学部)

1. はじめに

近年、計算資源の著しい発達を受けて、科学技術計測/計算から得られる3次元ボリュームデータを可視化するためにVolume Visualizationが注目され始め、活発に研究・開発が行われている[1]。主な応用分野としては、医学・生物学、地球科学、流体力学、気象学、機械工学等が挙げられる。また量子化学は、3次元の電子雲の内部状態を詳しく観察することが要求されるので、本質的な応用分野の一つとして重要な位置を占めている。さらに、我々が研究を進めているイオン・原子衝突問題においては、静的な電子雲状態だけでなく、イオン・原子の相対的な位置関係が変化したときの電子雲の時系列変化をも可視化の対象とするため、まだ研究報告の少ない動的なVolume Visualizationが有用であると考えられる。

そこで本研究では、まず報告の前半に当たる文献[2]で求めた陽子・水素原子衝突の計算に基づき、3次元離散空間内の電子分布の時系列データを作成する。次にそのデータに対し、典型的なVolume Rendering技法を用いてアニメーション化を行う。

なお、本研究で使用した計算機はStardent社のミニスーパーコンピュータTITAN3000Vシステムで、可視化ソフトウェアは、AVS (Application Visualization System) Vers. 3 [3]である。

2. ボリューム時系列データの作成

文献[2]より、波動関数 Ψ の一般形と展開係数ベクトルの時系列を格納したファイルがすでに与えられている。したがって、可視化の対象となるボリューム時系列データを得るには、この展開係数ファイルを読み込み、3次元離散空間内の各点(等間隔)・各時刻における電子分布 ρ ($=|\Psi|^2$)を算出するプログラムを作成すればよい。

後述するAVSを用いてアニメーションを実行するには、このプログラムに対応するようなデータ生成モジュールを、可視化ネットワークの入力部に用意すればよい。

3. 2つのVolume Rendering技法

Kaufman[1]によれば、Volume Rendering技法は:

[a] Isosurfacing法: ボリュームデータを中間的な幾何表現である等値面に変換し、既存のレンダリング手法を用いて表示を行う間接的技法

[b] Volume Ray-Tracing法: ボリュームデータに対して光線追跡を行い、中間的データ構造を介さずにダイレクトに描画する直接的技法

の2つに大別できる[1]。

Isosurfacing法では、ボリュームデータを幾何プリミティブに変換する。そのために対象データの空間コヒーレンスが高い場合には、データの圧縮が可能であり、処理時間も節約できる。しかしながら、対象のフィールドデータ分布の全体像を同時に確認できないことが最大の難点である。

一方、Volume Ray-Tracing法では、半透明のゲル状の形状モデルに基づき、フィールド値を空間中に漂う微粒子の密度分布に変換し、その微小面の光学的性質を視光線方向に混合していくことによって2次元ピクセル空間に射影を行う。脳や臓器などは現実には不透明なものであるが、この方法を使えばこれらを半透明表示してその内部構造を探ることが可能となる。また、時空間の効率は対象データの空間コヒーレンスにほとんど左右されないが、通常はIsosurfacing法よりもかなり低くなる。

本研究では、AVSの標準モジュールを組合せ、両者のアニメーションを作成・比較することにする。

Application of Volume Visualization to Ion-Atom Collisions 2: Volume Rendering

Tamiko ISHIKAWA, Naomi TODA, Hiroshi SATO, and Issei FUJISHIRO

Faculty of Science, Ochanomizu University

4. A V Sを用いた可視化アニメーション

本研究に用いた商用可視化システムA V Sでは、モジュール（基本機能）を画面上で組み合わせることによって、ネットワーク（複合的な可視化プログラム）を対話的に構築することができる。

図1は、原点に置かれた水素原子核に対して離れた場所に置かれている陽子に、ある初速度を与えて、その軌跡を画像化したものである。また図2に、単一の水素原子の電子分布のIsosurfacing法による画像(a)とVolumeRay-Tracing法による画像(b)を示す。

当日の発表では、図1に示すような軌跡に沿って陽子が移動するにつれて、図2に示すような水素原子の電子分布がどのように変化するかをアニメーションで示す予定である。

5. 今後の研究方向

今回のVolume Ray-Tracing法で用いた光学的パラメータは10種類である。微小面の不透明度、鏡面反射係数、拡散反射係数、光沢度、背景光強度、光源の位置決めは2種類、そしてカラーマップに関するものが3種類であり、これらのチューニングにかなりの労力をそそいだ。複数のパラメータ値を半自動的にチューニングする方法については以後の重要な研究課題の一つである。

また、今後さまざまなケースの可視化実験を繰り返し、イオン・原子衝突問題におけるVolume Visualizationの有用性をさらに検討していく予定である。

謝 辞

本研究において、プログラミングおよび写真撮影にご協力いただいたお茶の水女子大学理学部の市川哲彦助手に感謝の意を表します。

参考文献

- [1] A. Kaufman (Ed.): *Volume Visualization*, IEEE Computer Society Press, 479pp., 1991.
- [2] 佐藤、吉垣、佐藤、藤代:「Volume Visualizationのイオン・原子衝突問題への応用(1)-Volume Modeling-」、情報処理学会第44回全国大会予稿集、2N-8、1992

- [3] 吉川、杉野、吉川:「ビジュアル・プログラミング技術を使った可視化ツールA V S」、日経C G、91-4月号、pp.193-203、1991

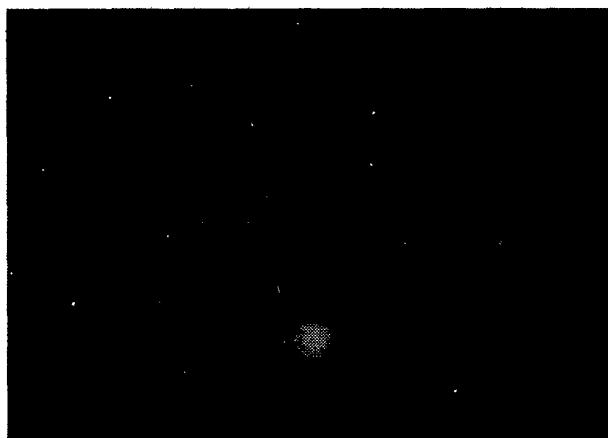
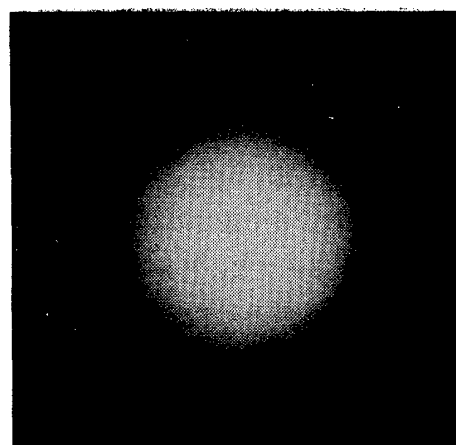
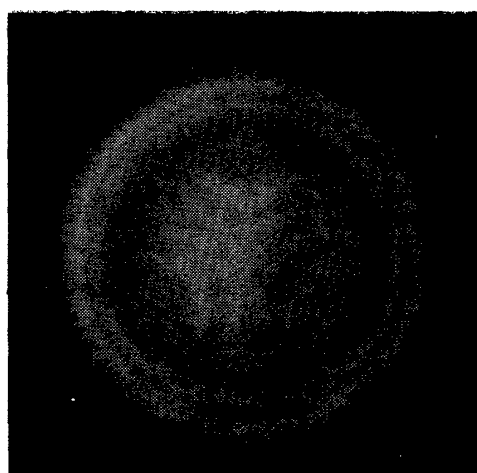


図1 陽子・水素原子衝突における軌道シミュレーション



(a) Isosurfacing法



(b) VolumeRay-Tracing法

図2 水素原子の電子分布のVolume Rendering画像