

AVS を手軽に使うための 可視化システム VisPlus

名古屋大学情報連携基盤センター

高橋 一郎

ichiro@cc.nagoya-u.ac.jp



はじめに

Visualization (ビジュアライゼーション, 以後「可視化」) という言葉は, コンピュータによる数値シミュレーションの計算結果や実験データ等の数値情報を, コンピュータグラフィクス (CG) を使って図-1 に示すように「目に見える形」でコンピュータディスプレイに分かりやすく表現する手法であるが, そのためには, グラフィクス・アプリケーションが必要となる。

現在, 米国の AVS 社が開発したグラフィクス・アプリケーションの開発および可視化を行うためのツール「AVS (Application Visualization System)^{☆1}」を使うと, 図-1 に示すようなものが, AVS の知識のある研究者なら簡単に作れる。この AVS の後継ソフトウェアとして提供されている AVS/Express は, AVS で利用できた可視化技術に加え, さまざまなデータの表現手法を持っており, UNIX, Linux, Windows 共通の可視化環境で利用できる。

本センターでは, この AVS/Express (以後 AVS と呼ぶ) を可視化ツールとしてサービスを行っているが, 具体的な課題に適用するには, AVS に関する専門知識が必要となり, 使いこなすのが難しい。そこで筆者は, AVS の知識のない研究者でも, AVS の豊富な機能を使ってさまざまな可視化処理を行える数値データ可視化システム「VisPlus」を開発した。

VisPlus は, AVS 上で動作し, 主に 3 次元時系列データや各種のシミュレーション計算データの可視化を目的としたシステムで, 可視化するオリジナルデータを基に,

入力データファイルの生成から, 可視化処理, 結果の保存 (静止画, 動画 (2D/3D)) までを一貫してサポートする。

本稿では, 開発した数値データ可視化システム VisPlus について述べる。

可視化処理の流れ

一般的なアプリケーションを使った可視化処理の流れを考えると, 次の 4 つのプロセスを経てディスプレイに結果を表示することになる。

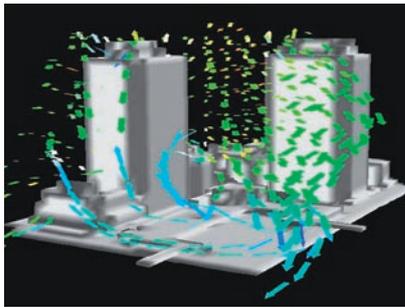
- アプリケーションへの可視化データの読み込み
- 可視化データの選択/加工
- 表示手法の選択
- ディスプレイへの表示

たとえば, 3 次元解析データの 2 次元の断面表示を考えると, まず, 独自のフォーマットで書かれた可視化の基となるオリジナルデータを, 変換プログラム等を作成して可視化アプリケーションに入力可能な形式に変換する。そして, 変換したデータを可視化アプリケーションに読み込み, その大量の数値データの中から表示する物理量と表示断面の場所 (スライス表示軸と軸上の表示場所) の可視化データを選択する。最後に, 選択したデータをベクトル図やコンター図といったグラフィクス・オブジェクトに変換してディスプレイに表示する。

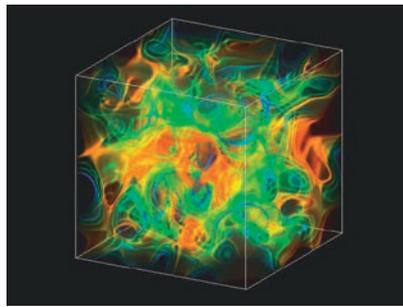
VisPlus の可視化アプリケーションの開発方法

VisPlus では, 可視化の基となるオリジナルデータを AVS へ入力可能なフォーマットに変換するプログラム

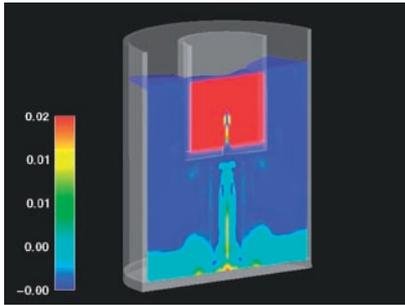
^{☆1} AVS は, 米国 Advanced Visual System 社の登録商標です。



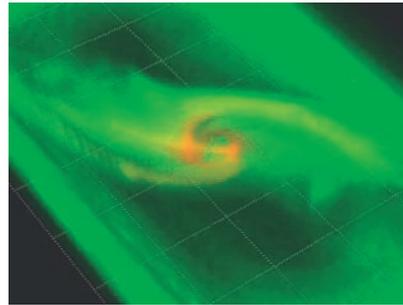
ビル周りの流れのシミュレーション
CRCソリューションズ (株) 提供



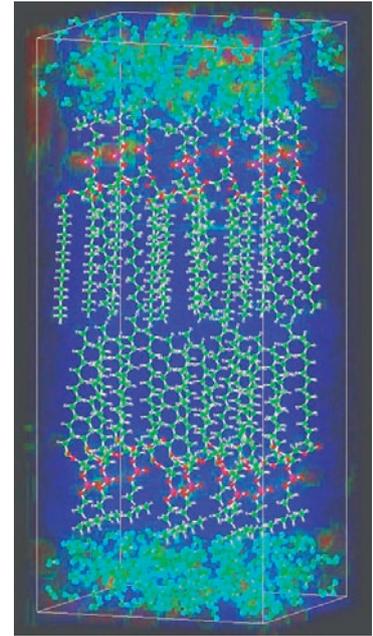
乱流のシミュレーション
名古屋大学工学研究科 石原卓氏提供



塩水と真水の拡散対流シミュレーション
名古屋大学人間情報学研究科 岡村実奈氏提供



惑星周りのガスの流れのシミュレーション
名古屋大学理学研究科 谷川享行氏提供



細胞膜のシミュレーション
富士通計算科学研究センター提供

図-1 可視化事例

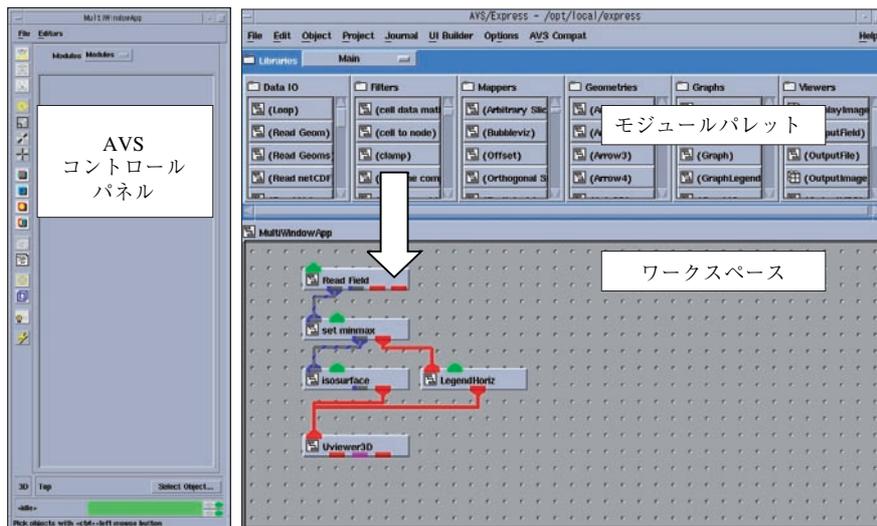


図-2 ネットワークエディタの使用例

を作成する手間を省くために、一般的な CSV (Comma Separated Value format) データや本センターの利用者の多いアプリケーション (Gaussian, α -FLOW, MASPHYC, MASPHYC-SP) の出力データから、AVSの入力データを生成するプログラムを作成した。また、可視化アプリケーションに関しても、雛型を作成してライブラリ化し、ライブラリ名を可視化アプリケーション起動コマンドに指定することで、ノンプログラミングでアプリケーションの利用ができるようにした。

VisPlusの可視化アプリケーションは、AVSを起動し

て表示されるネットワークエディタ (図-2) というビジュアルプログラミングツールを使って開発している。ネットワークエディタのモジュールパレットには、数百を超えるモジュールと呼ばれる機能 (プログラム) を部品化した小さな箱がある。この AVS モジュールは、オブジェクト指向に基づいて開発されており、1つのモジュールは複数のオブジェクトやモジュールで構成される。そして、AVSのカーネルの中間言語である V 言語で記述されている (図-3)。

VisPlusの可視化アプリケーション開発に使用した

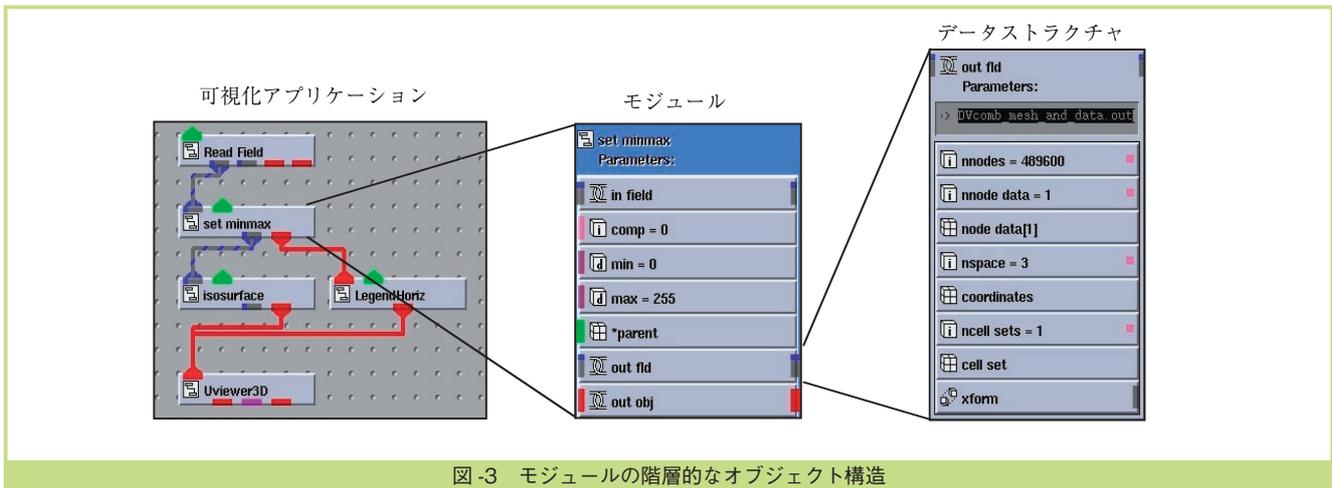


図-3 モジュールの階層的なオブジェクト構造

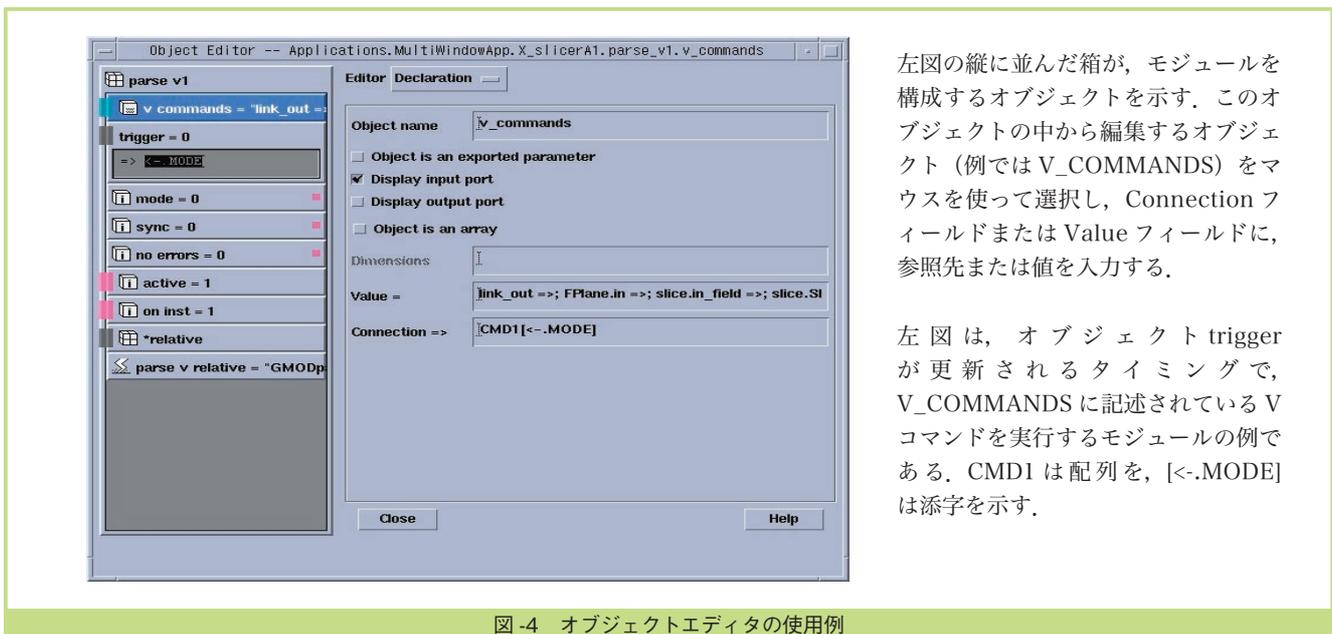


図-4 オブジェクトエディタの使用例

左図の縦に並んだ箱が、モジュールを構成するオブジェクトを示す。このオブジェクトの中から編集するオブジェクト（例では V_COMMANDS）をマウスを使って選択し、Connection フィールドまたは Value フィールドに、参照先または値を入力する。

左図は、オブジェクト trigger が更新されるタイミングで、V_COMMANDS に記述されている V コマンドを実行するモジュールの例である。CMD1 は配列を、[-.MODE] は添字を示す。

AVS のプログラミング方法を、以下に示す。

■ネットワークプログラミング

ネットワークプログラミングは、ネットワークエディタ上のモジュールパレットからモジュールをワークスペース上に配置し、フローチャートを描くようにデータの流に沿ってモジュール同士を接続してプログラミングを行う方法である。

■Vプログラミング

V プログラミングは、AVS の V 言語を使ったプログラミング方法で、次に示す V 言語の要素を使って、モジュールを構成するオブジェクトに対してプログラミングを行う方法である。

- V ステートメント（オブジェクトの作成／変更／接続／切断／消去など）
- V コマンド（情報の入手や実行の制御など）
- V 組込み関数（数学関数や論理演算など）

実際の操作は、ワークスペース上のモジュールまたはオブジェクトを示すアイコン上でマウスの右ボタンを押して起動するオブジェクトエディタ（図-4）を使ってプログラミングを行う。

VisPlus では、データの入力や加工、表現手法（グラフィクス・オブジェクトへの変換）などを行う可視化モジュールのほかに、変数や配列といったプリミティブなモジュールやマクロモジュール、連続処理を行う LOOP モジュール、トリガ設定を行ってコマンドを実行するモジュール、アプリケーションの操作パネルを作成する GUI モジュール等を使って、次の点を考慮して可視化アプリケーションのプログラミングを行った。

- アプリケーションの構造化（マクロ化）
- ダイナミックなモジュールの組替え操作（柔軟性）
- 時系列データや複数データ（通番付き）が扱える
- 可視化領域の絞り込み機能（全領域とターゲット領域を BOX で表示）
- 市販のソフトウェアにない可視化手法

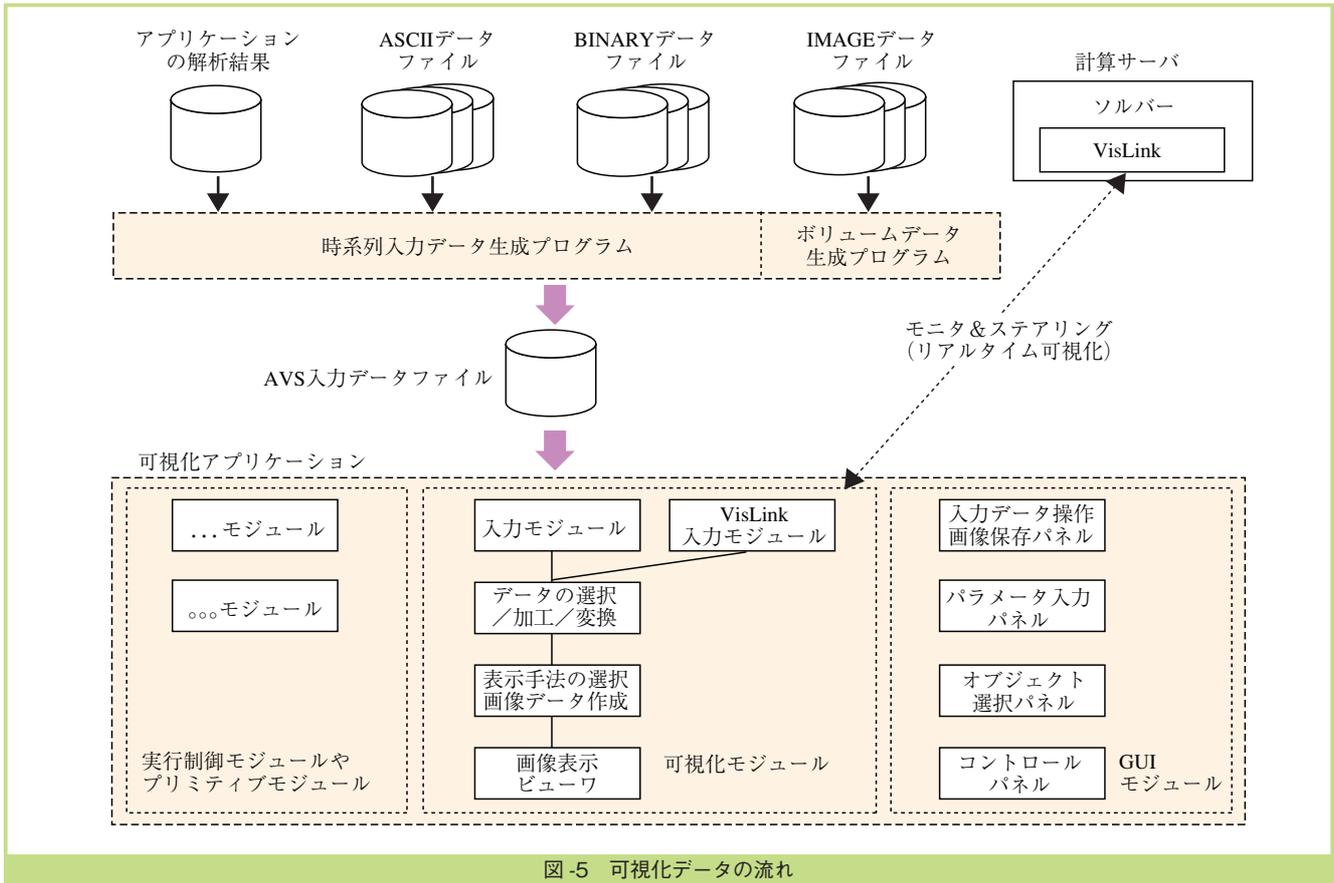


図-5 可視化データの流れ

• アプリケーション間の操作パネルの共通化 (操作性)

このように作成した VisPlus の可視化アプリケーションは、ネットワークエディタのアプリケーションの保存メニューでファイルに保存できる。このファイルに保存したアプリケーション (V ファイルと呼ぶ) は、AVS のテキストタイプのインタープリタ言語である V 言語で記述されているため、オープンプラットホームで動作する。

Linux, Windows でも利用できる。本センターでは、この VisPlus は汎用計算サーバとグラフィックボード (OpenGL, XGL) を搭載した画像処理サーバで利用できる。研究室のワークステーションから可視化するときには、ネットワーク経由で汎用計算サーバに接続して利用する。図-6 に本センターのシステム構成を示す。

VisPlus システムの概要

VisPlus は図-5 に示すように、前章で説明したビジュアルプログラミングを使って開発した可視化アプリケーション・ライブラリと、その入力となる AVS の時系列入力データファイルを作成する AVS 入力データ生成ライブラリからなる。

VisPlus の動作環境

VisPlus の AVS 入力データ生成ライブラリは FORTRAN 言語で、可視化アプリケーションライブラリは AVS の V 言語で、可視化コマンドはシェルスクリプトを使って開発している。したがって、VisPlus の動作環境としては、基本的には FORTRAN と AVS がインストールされている UNIX システムで動作する。なお、可視化アプリケーション・ライブラリについては、

VisPlus での可視化手順

VisPlus を使って可視化処理を行う場合は、まず、表-1 に示す可視化アプリケーション・ライブラリの中から可視化に使用するアプリケーションを選択する。そして、そのアプリケーションの入力フォーマットに記述されている形式の AVS 入力データを作成する。このとき、VisPlus の AVS 入力データ生成ライブラリが対応しているアプリケーションの出力ファイルやデータについては、その AVS 入力データ生成ライブラリを使用する。次に、可視化アプリケーション起動コマンドのオペランドに、ライブラリ名と入力データファイルの名前を指定する。可視化アプリケーションが起動されると、画面にアプリケーションの操作ウィンドウが表示される。利用者は、この表示された操作ウィンドウを使って可視化処理を行う。

また、起動コマンドに「-ne」オプションを指定すると、ネットワークエディタを同時に表示して、可視化アプリ

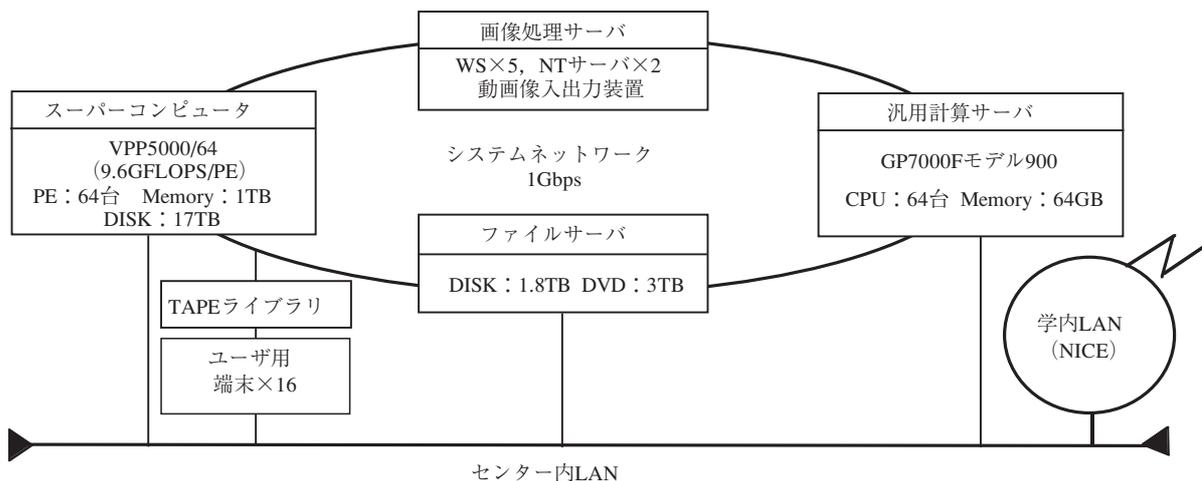


図-6 名古屋大学情報連携基盤センターのシステム構成図

FORMATおよび表示手法	入力データ FORMAT		ベクトル	コンター	等値面	ポリューム	ポリュームR	流線	パーティクル	鳥瞰図	マーカー	グラフ	説明
	数値データ	形状データ											
bubble ^{#S_G}	F S			○	○	○	○				○		バブル表示
fcomp ^{#D}	F			②	③	②	②						2つのデータの比較表示 ^{※1}
flow ^{#2_G}	F	G	○	○	○			○					流体用データ表示
:													:
mo ^{AS_C}	F S	S	○	○	○	○	○						化学データ表示
mocomp ^{AD}	F	S		②	⑥		②						2つの化学データの比較表示 ^{※1}
movol ^{AS_C}	F S	S			○	○							化学データポリューム表示
particle [#]	F S	G	○	○		○			④				4つのパーティクルトレース
read_field ^{#D_D}	F S												Fieldデータの読み込み
read_ucd ^{#D_D}	U												UCDデータの読み込み
:													:
streamline [#]	F S	G	○	○		○		④					4つの流線図表示
surface [#]	F S	G	○		⑤	○							5つの等値面表示
vector	F		⑤	○	○	○		○		○			5つのベクトル図表示
volume ^{DSU_D}	F S	G	○		○	○	○				○		ポリューム表示

備考) 表示手法のポリュームは、レイトレーシング法を使ったポリュームレンダリング表示を示す。

※1) 1つの画像表示ウィンドウに2つのデータを並べて表示し、図の間隔を調整して可視化できる。
2つのデータ (変数名: #1と#2) を使った数式を指定して、任意の演算結果を可視化できる。

【例】2つのデータの差分値を10倍して表示する場合: (#1-#2) *10

<入力データFORMAT>

- F: Field (構造格子型データ) フォーマット
- S: Field (離散型データ) フォーマット
- U: UCD (非構造格子型データ) フォーマット
- I: イメージフォーマット (GIF, JPEG, TIFF等)
- G: ジオメトリフォーマット
- A: ジオメトリASCIIフォーマット

表-1 可視化アプリケーション・ライブラリー一覧

ケーションを編集しながら可視化することもできる。

解析プログラムのモニタやステアリング操作を行う場合は、富士通製の AVS 連携のリアルタイムビジュアルライゼーション・ソフトウェア VisLink を使用する (図-5, 図-7)。この場合は、サーバ側の利用者プログラムに VisLink のサブルーチン・ライブラリ (VisLib) を組み込んで実行する。そして、クライアント側は、VisPlus の可視化アプリケーション・ライブラリから VisLink モ

ジュール (入力モジュール) を使ったアプリケーションを起動し、GUI を使ってモニタやステアリング操作を行う。本センターでは、スーパーコンピュータ上にこの VisLink がインストールされているため、スーパーコンピュータと他のサーバをソケット接続して解析プログラムのモニタやステアリング操作を行うことができる。

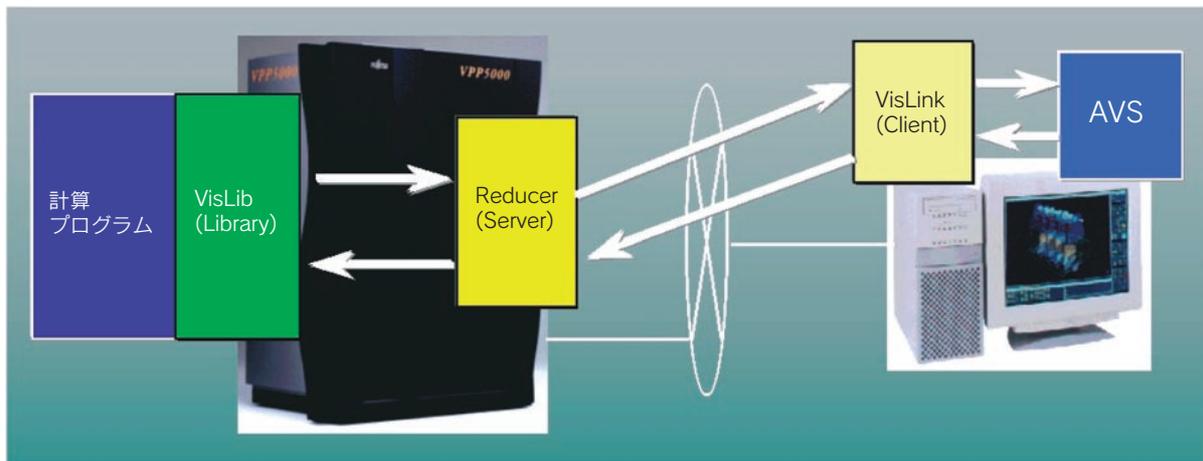


図-7 VisLink システムの構成



図-8 可視化アプリケーションの表示例

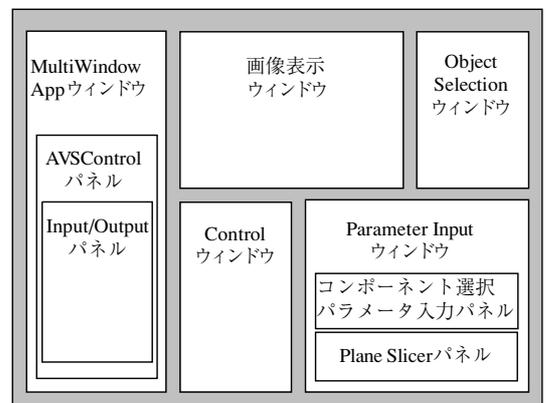


図-9 操作ウィンドウの形式

VisPlus の操作ウィンドウ

VisPlus の可視化アプリケーションを起動すると、次の5つのウィンドウが画面に表示される (図-8, 図-9 参照)。

- MultiWindowApp ウィンドウ
- Control ウィンドウ
- Object Selection ウィンドウ
- Parameter Input ウィンドウ
- 画像表示ウィンドウ

MultiWindowApp ウィンドウは、AVS 起動時に表示されるウィンドウで、ウィンドウ上のプルダウンメニューを使って AVS コントロールパネルに AVS の機能を表示して利用することができる。VisPlus では、このプルダウンメニューの Module メニューの先頭に Input/Output パネルを作成して組み込んだ。この操作パネルを利用すると、入力データの読み込み操作や表示画像の保存操作を容易に行うことができる。

Control ウィンドウは、アプリケーションと画像表示ウィンドウを制御するウィンドウで、パネル上に配置されたボタンを押して、アプリケーションの実行制御 (一時停止や終了) や可視化作業に必要な機能 (Module 操作, 描画 Object 操作, View 操作, Light 操作, Camera 操作, Capture 操作 (動画の再生/保存) 等) を Multi WindowApp ウィンドウに表示して利用することができる。また、SAVE ボタンを押して、画面に表示されている状態をファイルに保存し次回利用することもできる。

Object Selection ウィンドウは、表示手法を選択するウィンドウで、画像表示ウィンドウ上に表示される描画オブジェクトの表示/非表示を行う。

Parameter Input ウィンドウは、描画オブジェクトの実行パラメータの操作を行うウィンドウで、物理量の選択等を行うコンポーネント選択パネルと、描画オブジェクトの実行パラメータを入力するパラメータ入力パネルと、描画オブジェクトの断面表示の場所を指定する Plane Slicer パネルから構成される。この Plane Slicer パネル

上付き文字	インタフェース
#	通番付き複数データファイル test.001.fld, test.002.fld, ...
@	VisLink
2	2次元座標入力データ
A	ASCII形式の入力データ
D	2つの入力ファイルの同時入力
S	離散データ (補間機能有り)
U	Uniform形式のFieldデータ

表-2 入力インタフェース一覧

下付き文字	インタフェース
C	描画オブジェクトの2色表示
D	2つの画像表示ウィンドウ
G	描画オブジェクトのグレースケール表示
L	大規模データ表示

表-3 出力インタフェース

を利用すると、コンター図やベクトル図を格子断面や任意断面でスライスしてアニメーション表示することもできる。

VisPlus は、主にこの5つのウィンドウを使って可視化処理を行うが、MultiWindowApp ウィンドウの Input パネルと、Object Selection ウィンドウおよび Parameter Input ウィンドウについては、幅広い可視化処理に対応するために可視化アプリケーションごとに表示メニューは異なる。たとえば、入力データを読み込む Input パネルは、時系列データ用、複数ファイルで構成される時系列データ用 (通番付きファイル)、分子モデルデータ用がある。

VisPlus の可視化アプリケーション・ライブラリ

VisPlus の可視化アプリケーション・ライブラリは、AVS のネットワークエディタを使って作成した V ファイルのライブラリである。表-1 にライブラリ名、入力データ FORMAT、利用可能な表示手法を示す。ライブラリ名の上付き文字は入力インタフェースを、下付き文字は出力インタフェースを示す。

ライブラリの入力インタフェースは、すべて時系列 3次元データに対応しており、その他の入力インタフェースを利用する場合は、ライブラリ名の最後に上付き文字を付加して表す (表-2)。たとえば、ライブラリ名 flow で、通番付きの複数 2次元データを可視化する場合は flow^{#2} となる。ライブラリの出力インタフェースについては、ライブラリ名の最後に下付き文字を付加して

表す (表-3)。たとえば、ライブラリ名 volume で 2つの物理量を別々の画像表示ビューワに表示する場合は、Dvolume となる。

また、このライブラリには、アプリケーション開発用として read_field や read_ucd のようにデータの読み込み、結果の保存、ウィンドウの制御を行う基本的な機能 (Input/Output パネルと Control ウィンドウ) のみを提供するライブラリや、通番付きの複数イメージファイルや AVS のキャプチャ機能を使って作成した 3次元の動画ファイル (GFA ファイル) を再生表示するものもある。

AVS 入力データ生成ライブラリ

VisPlus の AVS 入力データ生成ライブラリは、次の 3種類のソフトウェアからなる。

- アプリケーションの出力データを基に、AVS の時系列入力データを作成するソフトウェア
- ASCII データを基に、AVS の時系列入力データを作成するソフトウェア
- 可視化するオリジナルデータに対して、AVS の時系列入力データのヘッダファイルとステップファイルを作成するソフトウェア

VisPlus が使用する AVS の時系列入力データは、ヘッダ、データ、ステップの 3つのファイルで構成される。ヘッダファイルは、データ属性やファイルフォーマットおよび各ファイルの関連付けを行う ASCII 形式のファイルである。データファイルは、格子座標データと物理量データを格納するファイルで、このライブラリを使って作成したファイルはすべて単精度バイナリー形式の Fortran の unformat 形式に変換して出力する。たとえば、化学データの原子データ (原子名、原子座標) の場合は、原子半径、van der Waals 半径、原子番号、原子座標に、結合データ (2つの原子座標) の場合は、ベクトルデータと結合番号といった感じで入力データはすべて数値データに変換して出力する。ステップファイルは、時系列または複数データのステップ情報を設定する ASCII 形式のファイルで、データを可視化するとき可視化データと一緒に表示することができる。

アプリケーションの出力ファイルを AVS の入力データに変換する場合は、アプリケーションごとに作成した専用の変換プログラムを使用する。現在、流体解析ソフトウェア α -FLOW、分子軌道計算ソフトウェア Gaussian、分子動力学計算ソフトウェア MASPHYC、MASPHYC-SP の解析結果が利用できる。たとえば、Gaussian の解析結果については、分子軌道および電子密度表示、振動解析表示、化学反応表示のための変換プログラムが利用できる。この変換プログラムは、複数の異なった分子軌道解析データを時系列データに見立てて変

avsfldの入力フォーマット「case.data またはcase.nnn.data」	
物理量データ1	物理量データ2 ...
:	:
avsfld1の入力フォーマット「case.data またはcase.nnn.data」	
格子座標データ (XYまたはXYZ)	物理量データ1 物理量データ2 ...
:	:
avsfld2の入力フォーマット「case.grid またはcase.nnn.data」と「case.dataまたはcase.nnn.data」	
格子座標データ (XYまたはXYZ)	物理量データ1 物理量データ2 ...
:	:
avsfldmの入力フォーマット「case.atom またはcase.nnn.atom」と「case.bondまたはcase.nnn.bond」(省略可)	
原子名 座標データ (XYZ) 物理量データ1 ...	原子の通番 原子の通番 カラー番号 (省略可)
:	:

備考) 「」内は、入力ファイル名の形式を示す。

表-4 CSV変換プログラムの入力ファイルの形式

換し、専用の可視化アプリケーション・ライブラリを使って可視化することができる。

CSV形式のASCIIデータをAVSの入力データに変換するプログラムが扱えるデータタイプを以下に示す。

- 2次元および3次元データ
- 時系列または複数データ (通番付きファイル)
- 構造格子データ
- 分子モデルデータ
- 移動格子データ
- 離散データ (計算空間は1次元, 物理空間は多次元)

このCSV変換プログラムは、CSVデータの項目を並び替えたり、必要な項目を指定して新しいCSVデータを作成するプログラムと、CSVデータを基にAVSの入力データを作成する4つのプログラムからなる。

- 物理量が1つのファイルに存在する (プログラム名: avsfld)
- 物理量と格子座標データが1つのファイルに存在する (プログラム名: avsfld1)
- 物理量と格子座標データが別々のファイルに存在する (プログラム名: avsfld2)
- 分子データと結合データが1つのファイルに存在する (プログラム名: avsfldm)

表-4に、このCSV変換プログラムに入力するCSVデータファイルに付ける名前とそのデータフォーマットの形式を示す。なお、このCSV変換プログラムを利用する場合は、利用する変換プログラムに応じた形式の入力ファイルを作成する必要がある。

上記の方法で対応できない複雑なフォーマットのデータやBINARYデータを可視化するときは、可視化するオリジナルデータに対して時系列Fieldデータのヘッダファイルとステップファイルを作成するヘッダ生成プロ

ラムを利用する。このプログラムは、対話形式で物理量や格子座標データに関するファイルフォーマットや属性等を入力して利用する。

今後の展望

3次元時系列データを可視化する数値データ可視化システムVisPlusについて紹介した。本システムは、現在、新しい可視化アプリケーション・ライブラリの開発や、ドキュメントおよびサンプルデータ等の整備を行っている。今後は、可視化アプリケーション・ライブラリの種類を増やして適用範囲を広げ、大規模データや非構造格子データの可視化についても順次サポートしてゆく予定である。また、VisPlusの公開等についての情報は、本センターのWebページ (<http://www.cc.nagoya-u.ac.jp>) で知らせる予定である。

なお、Gaussianの解析結果の可視化にあたっては、岐阜大学地域科学部の和佐田裕昭氏が作成したMOPLOTという分子軌道関数値計算ソフトウェアと連携をとっている。

参考文献

- 1) 高橋一郎: 数値データ可視化システムVisPlusについて, 全国共同利用大型計算機センター開発論文集, No.23 (Nov. 2001).
- 2) 高橋一郎, 和佐田裕昭, 和佐田祐子: AVS Expressを使った分子軌道可視化システム, 全国共同利用大型計算機センター開発論文集, No.21 (Nov. 1999).
- 3) 高橋一郎: AVSを使った解析結果可視化システム, 全国共同利用大型計算機センター開発論文集, No.19 (Nov. 1997).
- 4) 高橋一郎: リアルタイム可視化ツールVisLinkの紹介, 名古屋大学大型計算機センターニュース, 第120号 (Feb. 2002).
- 5) 高橋一郎, 和佐田裕昭, 和佐田祐子: 分子軌道可視化プログラムmoplotおよびmoviewの紹介, 名古屋大学大型計算機センターニュース, 第133号 (Nov. 1998).
- 6) AVS/Expressに関するマニュアル
<http://www.kgt.co.jp/library/manual/avs.html>
- 7) VisLinkに関するWebページ
<http://venus.netlaboratory.com/hpc/messe/viz/viz.html>

(平成14年3月31日受付)