

## 没入型 3次元仮想現実体感システム CAVE と AVS を用いた ナノテク用新材料の電子状態の可視化

林 亮子<sup>†1</sup> 堀井 洋<sup>†2</sup> 井口 寧<sup>†3</sup> 川添 良幸<sup>†4</sup> 堀口 進<sup>†1,†5</sup>

<sup>†1</sup> 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

<sup>†2</sup> 北陸先端科学技術大学院大学 知識科学研究科

<sup>†3</sup> 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学センター

<sup>†4</sup> 東北大学 金属材料研究所

<sup>†5</sup> 東北大学 大学院 情報科学研究科

本稿は、ナノテク用新材料設計を支援するため、可視化ソフトウェア AVS を用いて電子状態を可視化し、没入型 3次元仮想現実体感システム CAVE に出力した事例を報告する。CAVE は立方体型のスクリーンを持ち、ユーザが内部に入って投影された立体視画像を見て、さらに視点制御やオブジェクト制御することで、仮想現実への高い没入感を得る装置である。可視化ソフトウェア AVS は、この CAVE に可視化画像を出力することができる。そこで、AVS を用いてシミュレーション結果として得られる電子状態の可視化画像を CAVE に出力した。大規模データでは、可視化画像は多数のポリゴンで構成されるオブジェクトとなり、対話処理の操作性が問題となる。いくつかのタイプの可視化を行なった結果、効果的な可視化のためには、データの中で注目すべき数値を自動決定する必要があることがわかった。

### Visualization of electronic state in new materials for nano-technology on an immersive 3-dimensional virtual reality system CAVE and AVS

Ryoko Hayashi<sup>†1</sup> Hiroshi Horii<sup>†2</sup> Yasushi Inoguchi<sup>†3</sup> Yoshiyuki Kawazoe<sup>†4</sup>  
Susumu Horiguchi<sup>†1,†5</sup>

<sup>†1</sup> School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

<sup>†2</sup> School of Knowledge Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

<sup>†3</sup> Center of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

<sup>†4</sup> Institute for Materials Research, Tohoku University

<sup>†5</sup> Graduate school of Information Science, Tohoku University

This report addresses a case study about visualization of charge density in new materials for nano-technology on an immersive 3-dimensional virtual reality system CAVE. CAVE has a screen booth of cube and users can get a high immersive feelings with staying booth, changing their viewpoints and controlling visualized objects. One of the famous scientific visualization software AVS can output its visualized computer graphics to the CAVE. Thus we use AVS to visualize electronic state as charge density and output it on CAVE. With large-scale data, visualized graphics include objects constructed with many polygons and it cause problem of operation in interactive control. From a result of several types of visualization, we found that we require auto-estimation of remarkable value within the data for an effective visualization.

## 1 はじめに

近年の大規模科学技術計算のプラットフォームは並列計算機に完全に置き換えられ、数十～数万個のプロセッサ要素を使用した並列大規模数値シミュレーションが現実のものとなっている。しかし、大規模シミュレーションで得られる結果は大量のデータであり、データ解析の実行、さらにデータの意味する

ものを認識することが困難である。そこで本稿では、ナノテクノロジー分野での大規模シミュレーション結果データを前提とし、可視化を行なった結果を報告する。複雑な大規模データの可視化では、可視化した画像の内部の情報を見ることが有効であると考えられるため、没入型 3次元仮想現実体感システム CAVE への可視化出力を行なう。

近年の科学技術計算の大規模化に伴って、得ら

れたデータの可視化やその自動処理，データマイニングは注目されている．Moritz と Meyer は Protein Data Bank のデータから得たたんぱく質分子の構造を CAVE に出力した [1]．彼らの扱ったデータは大変複雑であったので，リアルタイムでの対話処理は不可能であった．Sharma らは材料設計シミュレーションの大規模データの可視化で，階層構造を利用し，注目している領域のみを詳細に描画して残りの空間を省略することで，可視化の高速化を行なった [2]．また，Thompson らは，流体力学計算の分野で，注目すべき現象の自動抽出を行なった [3]．しかし，大規模データの可視化手法および自動処理は扱う実問題への依存性が高く，まだ研究段階である．

本稿の構成は以下の通りである．第2節では，本稿で利用した没入型3次元仮想現実体感システム CAVE の概要を示す．第3節では，本稿で可視化するデータを生成した第一原理シミュレーションプログラム TOMBO[4] を紹介する．本稿では，科学技術分野で広く使われている可視化ソフトウェア AVS[5] を用いて可視化画像を作成する．第4節は AVS によって作成した可視化プログラムの概要と，可視化画像を CAVE に出力した例を示し，CAVE を用いた可視化における問題点をまとめる．第5節はまとめである．

## 2 没入型3次元仮想現実体感システム CAVE

CAVE はイリノイ大学で開発された仮想現実体感システムであり，立方体型の立体スクリーンとホスト計算機で構成される．立体スクリーン中には3D マウス，液晶シャッタ眼鏡およびそれらの位置と方向を検出するトラッキングシステムが設置されている．それらの機能を利用すれば，ユーザは CAVE 中に表示した立体視グラフィックス中を自由に移動でき，さらに，可視化オブジェクトをマウスで制御することができる．さらに，可視化ソフトウェア AVS で作成した画像は，CAVE 出力用モジュールを利用して，CAVE に出力可能である．

CAVE は画像を投影するスクリーンを立方体状に組み合わせたブースを持つ．北陸先端科学技術大学院大学の CAVE の外観を図1に示す．CAVE のスクリーンは最大で6面であるが，北陸先端科学技術大学院大学で現有する CAVE は，前面，左右面，床面の4面のスクリーンを有し，各スクリーンに画像を投影するための，4台のプロジェクタがある．なお，前面，左右面は透過スクリーンである．



図1: 没入型3次元仮想空間体感システム CAVE

CAVE には，立体視用眼鏡と3D マウスが備えられている．CAVE は，右目用画像と左目用画像を投影でき，高速で液晶シャッタを切り換えてそれぞれの目のための画像のみが見えるようにする液晶シャッタ眼鏡 CrystalEyes を使用すれば，立体視が可能である．さらに，図2に示すように，CAVE 内部には1台の CrystalEyes があり，つる部分にセンサが取り付けられていて，それを装着したユーザの頭の位置と向きの6自由度のデータを取得する．そして，ユーザから正確な立体に見えるように，表示するステレオ画像をリアルタイムで更新する．CAVE 内では，ユーザは実際に動くことによって視点を変えることができるが，CAVE 内にはさらに3D マウス WAND が備えられており，ウォークスルーのように視点を変え，表示されているオブジェクトを制御することができる．WAND は，図3のように，トラックボールと3つのボタンがある．

CAVE のホスト計算機は高性能グラフィックスシステム SGI Onyx 3200 である．Onyx 3200 の詳細は表1に示す．Onyx 3200 では，CAVE を使用するために必要な3次元ステレオコンピュータ・グラフィックス生成，および位置センサ情報に基づく位置および視点の移動処理を行なう．また，高品質のコンピュータ・グラフィックスをリアルタイムで作成するため，グラフィックス作成専用のパイプラインハードウェアである InfiniteReality3 グラフィックスパイプラインを使用している．

## 3 全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO

全電子混合基底法第一原理計算プログラム TOMBO は，電子にはたらくポテンシャルの形状に近似を行なわない，フルポテンシャルの方法による

表 1: SGI Onyx 3200 システム諸元

プロセッサ	(MIPS R12000 400MHz, 8MB レベル2 キャッシュ) × 4 個
メモリ	4GB, 共有メモリ
グラフィックス	InfiniteReality3 パイプライン × 2 個, 256MB Texture Memory Raster Manager × 4 個, 2-channel display generator × 2 個
ソフトウェア	・ IRIX 6.5 Advanced Workstation Environment with WorldView Japanese ・ IRIX Performer ・ IRIX C Compiler/C++ Compiler その他, World Tool Kit, OpenGL 等を利用可能である.



図 2: CAVE の立体眼鏡 CrystalEyes



図 3: CAVE の 3D マウス WAND

第一原理計算プログラムである。近年広く用いられている多くの第一原理計算プログラムでは、価電子の固有状態のみを扱う擬ポテンシャル法を用いて高速に計算が行なわれている。しかし、擬ポテンシャル法では、芯電子状態と価電子状態の間の結合を無視しているので、超微細構造や芯電子状態の歪みなどを扱うことができない。さらに、小さいクラスターや高圧下、高速原子衝突などのシミュレーションにおいて、原子間距離が小さくなった場合は、擬ポテンシャルの有効性が問題となる。そこで、そのような問題

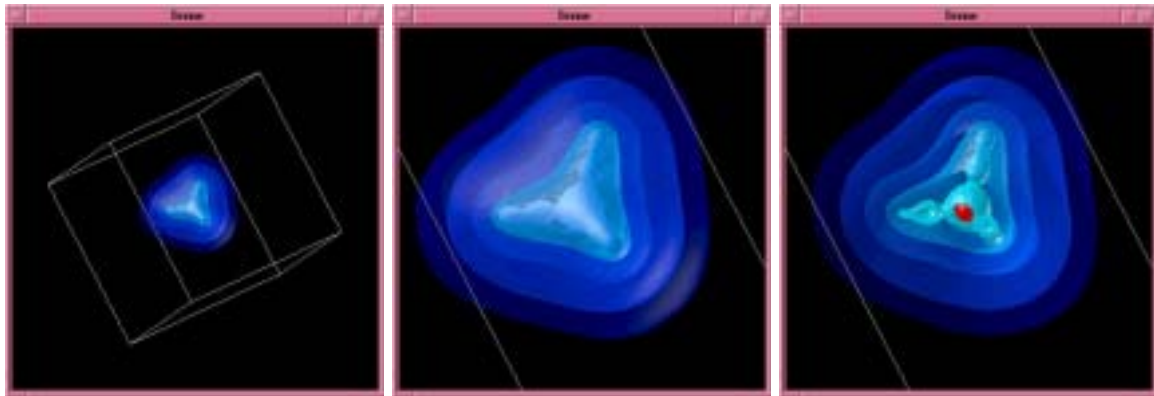
に対しては、全ての電子の固有状態を扱う全電子法が有効であると考えられている。しかし、全電子法は計算量が大きいため開発例が少なく、TOMBO プログラムはパッケージ化などの整備が行なわれた数少ないプログラムの 1 つである。

TOMBO プログラムは、1990 年代初めから、東北大学 金属材料研究所 川添教授グループによって開発され、構造最適化、第一原理分子動力学法といった標準的な機能に加え、現在では時間依存シュレーディンガー方程式などの特徴的な機能を持つようになってきている。TOMBO は平成 10～12 年度に原子力研究所の計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)プロジェクトの課題として採択され、パッケージ化されて日立東日本ソリューションズによって商品化されている。この TOMBO を用いて、燃料電池への応用が期待される水素吸蔵過程をはじめとする、ナノテクシミュレーションが実行されている。また、TOMBO プログラムは最大 10Gbps のネットワーク SuperSINET を利用したナノテクノロジー VPN(Virtual Private Network) 上で超分散化されており、将来的には、GRID の基盤ソフトウェア整備の成果を利用して、GRID 利用環境への拡張も可能である。

## 4 電子状態の可視化

### 4.1 AVS を用いた電荷密度の可視化プログラム

可視化すべき重要な物理量はいくつかあるが、本稿では、まず電荷密度を可視化する。TOMBO では、指定したレベル、指定したスピン量子数の電子による全電荷密度を出力する。電荷密度は、データ形式の観点から見ると、計算する対象となる空間の格子点上のスカラーデータである。科学技術分野で広く使われている可視化ソフトウェア AVS を用いて、この

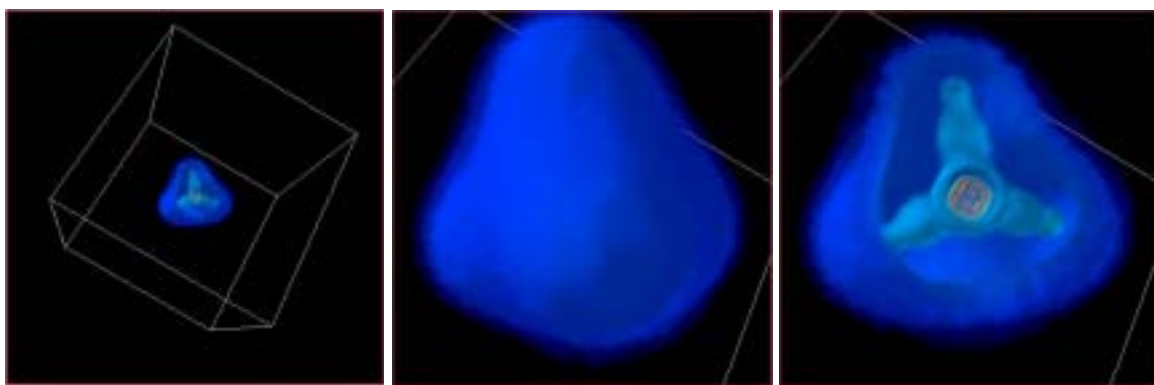


全体図

拡大図

切断図

図 4: 半透明等値面の重ね合わせ, コンター図, 等値ボリュームによる表現



全体図

拡大図

切断図

図 5: ボリュームレンダリング (レイトレーシング法) による表現

電荷密度を可視化するプログラム群を開発した。これらのプログラムは、データの形式さえ同じであれば、どのような物質のデータであっても可視化できる。以下は、メタン  $\text{CH}_4$  の電荷密度を例に、これまで開発したプログラムによる可視化画像を示す。メタンはテトラポッドのように、中心に炭素原子がある正 4 面体の構造を持ち、正 4 面体の各頂点に相当する位置に水素原子がある。電荷密度データは単精度で  $96^3$  個であり、データ量は約 3M バイトである。

1. 半透明等値面の重ね合わせ, コンター図, 等値ボリュームによる表現

図 4 にこのプログラムを利用した可視化例を示す。この可視化表現は、断面などを用いずに内部構造を把握することを目的として実装した。半透明等値面を複数重ねているため、内部構造の概略が外側からでもわかり、およその構造把握が可能である。この例では、半透明等値面を 4 枚重ね、さらに内側の構造を、コンター図と等値ボリュームにして 1 つずつ作成した。コンター

図と等値ボリュームにした理由は、等値面を透かした上で明確に見るためである。コンター図と等値ボリュームは半透明にできないため、切断図との組み合わせによって、内部構造を見ることができる。

これらの図からわかるように、各等値面を明瞭に見るためには、半透明等値面の重ね合わせは、4~5 枚程度が限界である。この表現は多くの面を描画し、描画処理に時間がかかるため、静止画に適している。一方、等値面を 1 つにして描画処理を軽減し、操作性を向上させることができる。また、この表現では輪郭が明確であるため、立体視画像が作成でき、CAVE などの立体表示デバイスへの出力が可能である。

2. ボリュームレンダリング (レイトレーシング法) による表現

図 5 にこのプログラムを利用した可視化例を示す。この可視化表現は、断面などを用いずに内部構造を把握することを目的として実装したが、



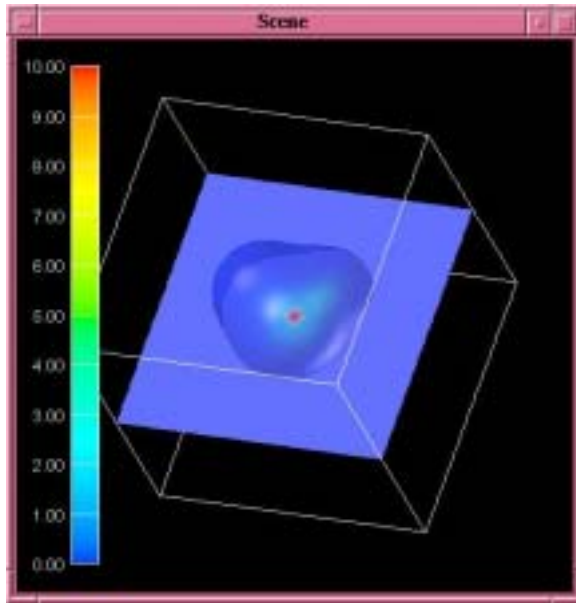


図 6: 半透明等値面と断面図の組み合わせ

実際には透明度と厚みの関係 (透明度が高い場合に厚みを薄くすると、等値面の存在がわかりにくい) の調整が困難であったため、断面を併用しないと内部構造が見えない。この表現は、電荷密度値ごとに透明度を設定できるため、内部構造の把握もしやすい。ただし全体に淡い表現となるため、多くの面の重ね合わせは難しい。また、輪郭が明確でないことから立体視が困難であり、CAVE などの立体表示デバイスへの出力ができない。

### 3. 半透明等値面と断面図の組み合わせ

図 6 にこのプログラムを利用した可視化例を示す。この表現は等値面で概形を理解し、ユーザが等値面を移動して見ることで詳細な理解を得る。等値面は 1 つにして描画処理を軽減し、操作性を向上させている。

AVS は、さらに没入型 3 次元 VR 体感システム CAVE をサポートしており、出力部分を CAVE 専用のモジュールに置き換えるだけで、没入型 3 次元 VR 体感システム CAVE への出力が可能である。CAVE を利用することで、物質の内部構造への理解を深めることができる。図 7 に可視化画像を CAVE に出力した例を示す。この例は操作性を向上させるため、図 4 の半透明等値面の重ね合わせによる可視化で、等値面を 1 つだけにしている。しかし、その状況でも対話処理のための WAND データの更新周期を小さくするとハングアップしてしまうため、更新周期を



図 7: 可視化画像の CAVE への出力例

0.5 秒程度にする必要があった。この程度の大きさの更新周期では、微妙な視点位置の調整が困難である。今回利用した電荷密度データは  $96^3$  個、つまり約 3M バイトのデータであり、可視化画像中の描画オブジェクトのポリゴン数も多いため、描画に時間がかかることがその理由であると考えられる。

## 4.2 可視化プログラムの発展

4.1 で示した可視化結果から、いくつかの問題が明らかになったため、それらを解決するための今後の課題を以下に挙げる。

**可視化するべき数値の自動抽出** 4.1 で述べたように、視覚的な問題と CAVE における操作性の問題から、多くの等値面やコンター図は描けないことがわかった。現在は等値面やコンター図を試行錯誤により決定しているが、特にデータサイズが大きくなると操作性が悪くなり、見落としが起こることも考えられる。そのため、等値面やコンター図を作成すべき、適切な数値の自動抽出を行なう必要がある。ここで適切な数値とは、領域内での分布が急変している数値と考えられるため、画像処理分野におけるエッジ抽出や特徴量の議論が応用できると考えられる。

**簡略化オブジェクト** 現在の可視化画像では、描画に時間がかかることから対話処理が困難である。そこで重要度の低い部分は簡略化したオブジェクトで表現できる機能があると、描画処理時間を軽減できると考えられる。

**対話処理クローズアップ** 大規模データでは、細部の情報が埋もれてしまう。そこで、データを階層的に処理して複数スケールのデータを生成し、対

話処理によって可視化に使用するデータを選択して、注目した領域をクローズアップする機能を実装すると、描画処理時間の軽減と細部情報の可視化が両立できると考えられる。

#### 4.3 AVS の CAVE 表示機能の発展

CAVE は可視化画像内部に入れるのが大きな特徴なので、内部に入ることを前提とした可視化画像を作成する。CAVE への表示を前提とした可視化では、以下のような機能が必要であると考えられる。

- 材料設計では、可視化結果を回転して見る人が多い。3D マウスで可視化画像を回転させることも可能ではあるが、現状では操作性に問題があるので、自動回転機能が必要である。
- ナノテクシミュレーションの計算結果として、電子状態、原子位置をはじめとする種々の物理量が得られるため、3D マウスのボタン操作により、表示する物理量の種類を変える。
- 特にグラフィックス内部にいるとき、ユーザは現在自分が空間のどこにいるのかわからなくなりやすいので、可視化画像中でのユーザの存在位置を、常時あるいは必要なときにグラフィックス表示する。
- 全体の可視化だけでなく細部を見たい場合に対応するため、対話的なクローズアップ機能を追加する。

これらは、CAVE で特に必要な機能であるが、CAVE 以外のプラットフォームでの、通常の AVS でも利用可能でかつ可視化に有効である。これらの機能を実現するためには、少なくとも、以下のような AVS モジュールが必要である。

1. 3D マウスによる AVS の制御（ボタン信号と位置情報の出力）
2. 可視化オブジェクトのセレクト
3. 可視化画像の回転アニメーション
4. 現在位置表示

上記の内 1., 2., および 3. の機能または一部機能を実現する AVS モジュールを（株）ケイ・ジー・ティーに開発委託し、納入済みなので、今後はそれらを利用した可視化プログラムを実装する予定である。

## 5 まとめ

本稿では、没入型 3 次元仮想現実体感システム CAVE と可視化ソフトウェア AVS を用いた、ナノテク用新材料の電子状態の可視化を行なった結果を報告した。まず電荷密度を可視化し、いくつかの可視化プログラムを開発した。その結果、AVS による可視化プログラム、および AVS の CAVE 表示機能に関するいくつかの問題点が明らかになった。

シミュレーション結果の大規模データを扱うためには、ある程度の自動化機能が必要である。今後は、自動化をキーワードに可視化プログラムを発展させる予定である。

### 謝辞

本研究の一部は Super SINET ナノテク部会課題として行なわれた。また本研究の一部は北陸先端科学技術大学院大学 学内プロジェクトとして、および北陸先端科学技術大学院大学 助手研究奨励金によって行なわれ、さらに科学研究費補助金（若手研究 (B) 課題番号 16700091）によって行なわれた。関係各位に感謝する。

### 参考文献

- [1] E. Moritz, J. Meyer, “Virtual exploration of proteins”, Proceedings of Second IASTED International Conference Visualization, Imaging, and Image Processing, pp. 757-762, (2002).
- [2] Ashish Sharma, Rajiv K .Kalia, Aiichiro Nakano and Priya Vachishta, ”Large Multidimensional data Visualization for Material Science ”, Computing in Science & Engineering, Vol .5, No .2, pp.26-33, (2003).
- [3] David S. Thompson, Jaya Sreevalsan Nair, Satya Sridhar Dusi Venkata, Raghu K. Machiraju, Ming Jiang, and Gheorghe Craciun, “ Physics-Based Feature Mining for Large Data Exploration ”, Computing in Science & Engineering, Vol. 4, No. 4, pp.22-30, (2002).
- [4] <http://www-lab.imr.tohoku.ac.jp/%7EEmarcel/tombo/tombo.html>
- [5] “AVS/Express ユーザーズ・ガイド”, 株式会社ケイ・ジー・ティー, (2002).