

タイトル：粒子系可視化システムの開発

担当分野：融合可視化情報学

1. 研究目的

分子動力学や流体力学の分野において、粒子系を用いて数値計算することにより、現象の解析を行う研究が数多く行われている。これらの数値計算結果の解析には、広く可視化が用いられているが、計算結果が大規模になるにつれ、可視化に要する計算コストが膨大になり、対話的な解析が困難になってきている。そこで本研究では、描画精度を維持しながら対話的な操作が可能な、粒子系データのための可視化システムの開発を行う。さらに、粒子の初期配置をユーザが直感的に決定できるような、グラフィカルユーザインタフェース（GUI）を用いた粒子配置システムの開発も合わせて行う。

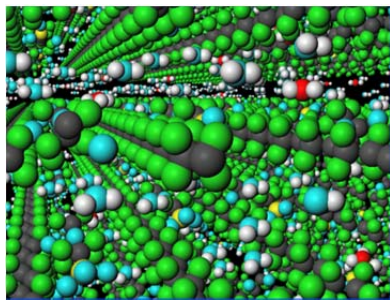
2. 研究成果の内容

1) 対話的可視化システムの構築

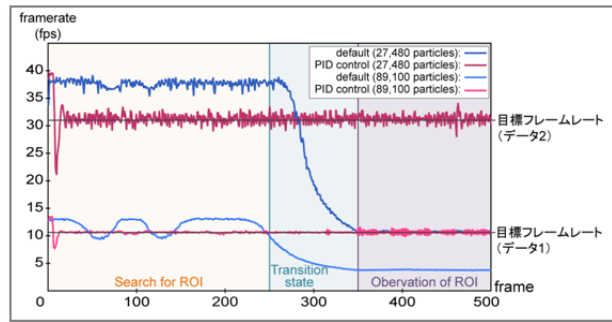
人間の視覚特性として、注目している領域では対象を精度よく認識できるのに対して、それ以外の領域では対象の光を認識することはできないものの精密な情報を認識できないことが知られている。そこで、本研究ではこの特性を考慮し、ユーザが注目している領域（視点に近い領域）は精度よく描画するが、それ以外の領域（視点から離れた領域）は精度を落として高速に描画することにより、全体の可視化処理に要する速度を調整する方法を提案した。また、PID 制御を用いて描画手法を切り替える距離を動的に制御することにより、安定した描画速度を維持することに成功した。図 1 に本システムを用いた可視化結果と、あるユーザが粒子系を解析したときの描画速度の時刻変化をグラフにしたものを示す。本システムにより、ユーザは対話的に操作をしながら、従来の全体を精密に描画した場合とほぼ同等の精度で解析を行うことが可能となった。

2) GUI を用いた粒子配置システムの開発

本研究では自己組織化単分子膜を対象として、プロトタイプシステムを作成した。汎用の 2 次元ディスプレイを用いて 3 次元空間内に分子を配置するのは困難であることから、2 次元空間上に膜分子を投影した楕円グリフを操作することにより、分子の位置や姿勢を制御できるようにした。このとき、分子の傾きを色にマッピングすることにより、2 次元平面上でも 3 次元的な配置を可能とした。また、同時に 3 次元空間上の粒子配置を可視化した結果を並置することにより、3 次元空間内での分子の様子を確認することができる。図 2 に本システムの操作画面を示す。本システムにより、膜分子の姿勢変化や削除、膜分子間の平均化などの操作を視覚的に行うことが可能となった。



(a) 粒子系可視化結果



(b) ウォークスルー実験による描画速度の変化

図1 粒子系のための対話的可視化システム

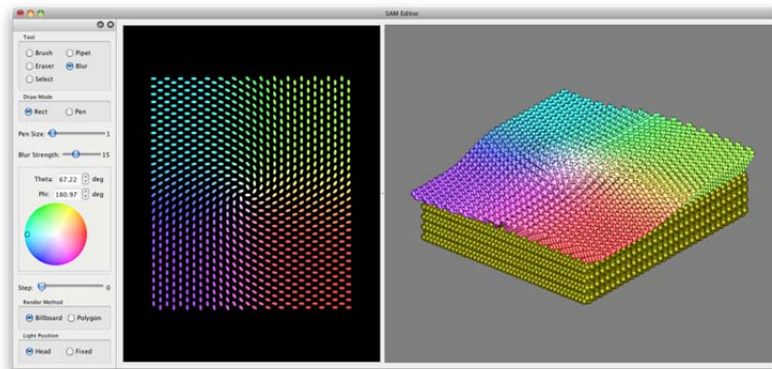


図2 自己組織化単分子膜のための分子配置支援システム

3. 研究成果

① 学術雑誌（査読付き国際会議，解説等を含む）

② 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等

- 1) 千葉 鉄也, 竹島 由里子, 徳増 崇, 藤代 一成, “大規模粒子系可視化における時間重視レンダリングの実現,” 日本機械学会 2009 年度年次大会講演論文集, Vol.6, (2009), pp.95-96.
- 2) 新坂 拓真, 竹島 由里子, 菊川 豪太, 小原 拓, 藤代 一成, “大規模粒子系の対話的可視化によるパラメータスタディ支援,” 情報処理学会創立 50 周年記念 (第 72 回) 全国大会講演論文集, (2010).
- 3) 竹島 由里子, 新坂 拓真, 菊川 豪太, 小原 拓, 藤代 一成, “自己組織化単分子膜のための粒子配置設計支援システム,” 第 38 回可視化情報シンポジウム講演論文集, (2010), pp.277-280.
- 4) 竹島 由里子, 徳増 崇, 藤代 一成, “大規模粒子系可視化における描画速度の安定化,” 日本機械学会 2010 年度年次大会講演論文集, Vol.6, (2010), pp.15-16.
- 5) Yuriko Takeshima, Issei Fujishiro, Takashi Tokumasu, “A PID Control-Based Scheme for Time-Critical Rendering of Particle Systems,” Pacific Visualization2011, Hong Kong, Mar. 2011.

③ その他（特許，受賞，マスコミ発表等）