

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 10 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23700100

研究課題名(和文) 粒子系解析のためのライフサイクル支援環境の構築

研究課題名(英文) Lifecicle Management Environment for Analysis of Particle System

研究代表者

竹島 由里子 (TAKESHIMA, Yuriko)

東北大学・流体科学研究所・講師

研究者番号：20313398

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円、(間接経費) 990,000円

研究成果の概要(和文)：本研究計画では、粒子系解析に必要となる粒子配置初期システムおよび粒子系解析のライフサイクル支援環境の構築を行った。粒子初期配置システムでは、3次元空間内を2次元平面に投影し、色で3次元空間内の傾きを表現することで、より精密に粒子を配置できる機能を構築した。また、ライフサイクル支援環境では、可視化結果に加えて、対象データ、可視化処理の履歴、得られた知見に関するメモなどを一括管理することにより、統合的に粒子系解析を扱える環境を実現した。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we proposed an initial particle placement system and a life cycle management system for analysis of particle system. In the initial particle placement system, the user can locate the particles more precisely by using the two-dimensional projected image colorized by the corresponding three-dimensional angle. In addition, the life cycle management system provides a mechanism that manages the visualization results, the target datasets, the analysis process, and memos of the acquired knowledge, consistently.

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・メディア情報学・データベース

キーワード：可視化 粒子系

## 1. 研究開始当初の背景

現在、対象データをコンピュータ上で画像として表現するコンピュータ可視化(以下、可視化とする)は、計測や数値計算の結果の解析に必要なものとなっている。一般的な解析処理では、数値解析を行った後に視覚解析を行い、そこから得られた知見をもとに、ユーザが新たに数値計算のパラメータを変更して再計算を行うという流れで進められ、数値解析と視覚解析は切り離すことができないものになってきている。しかし、現在、ほとんどの科学者は数値解析だけを単独で行い、その終了後に視覚解析をするため、数値計算の途中で誤りがあったとしても、最終的な結果を得て可視化を行うまで誤りに気付かず、計算資源や時間を浪費してしまう例も少なくない。この原因として、数値解析を専門とする科学者と視覚解析を専門とする科学者が異なることが考えられる。

一方、さまざまな複雑な現象の解析において粒子シミュレーションが行われているが、可視化分野における主流な研究対象は格子構造をもつデータであり、格子構造をもたない粒子系の可視化技法の開発はあまり行われていない。そのため、多くの場合、粒子を可視化するには球を描画する方法が用いられている。しかし、一般的に球は複数の三角形パッチの集まりとして描画されるため、粒子数が増加するにつれ、描画するパッチ数も増え、対話的な処理が可能な時間内に描画を行うことが困難になってくる。そのため、対話的な処理時間を確保しつつ、大量の粒子を高速に描画することが必要となる。

さらに、粒子の初期配置などは数値として入力されることが多く、実際の3次元空間位置を解析者が想像して設定しなくてはならない。そのため、試行錯誤的に数値を変更して、最適な位置を決定する必要がある。不慣れた解析者では適切な位置を必ずしも決定できるとは限らない。このような問題は、3次元空間内の位置を直感的に利用できる可視化を用いることが有効であるが、そのような研究はなされていない。

## 2. 研究の目的

本研究計画では、背景で述べた問題を解決するために、粒子系解析に必要な粒子初期配置システムおよび計算結果を解析するための大規模粒子系可視化環境を開発し、それらを粒子系解析プログラムと統合することにより計算から解析までの全プロセスを統合した統合解析環境を構築する。さらに、解析の履歴を管理する機能をもたせることにより、粒子系解析のライフサイクル支援環境の実現を目的とする。これにより、数値解析後だけでなく解析の途中経過をも視覚的に確認することができる。

まず、大規模粒子系に対応するための高速な可視化環境を構築し、直感的な粒子配置を実現する視覚と力覚を併用したシステムを開発する。また、数値計算部分をモジュール化することにより、研究者独自の数値計算プログラムの組み込みが可能となり、個々の研究者用粒子系解析環境が構築できる。

## 3. 研究の方法

本計画では、「粒子系統合環境の構築」と「粒子解析におけるデータの一括管理」の大きく2項目に分けて研究を進める。

「粒子系統合環境の構築」では、数値解析処理および可視化処理を統一的に扱う必要がある。そこで、これを実現するための個々の技術として、粒子の初期配置システムおよび大規模粒子系可視化環境を構築する。続いて、それらの個々のシステム間のインタフェースを統一することにより、数値解析および可視化処理を一連の処理として実行できる環境を構築する。まず、粒子の初期配置システムでは、より直感的な粒子配置を実現するために、グラフィカルユーザインタフェースを用いたシステムを構築する。特に、3次元空間内への配置を考慮し、通常の2次元ディスプレイおよびマウスという環境だけではなく、3次元力覚装置の利用も考慮する。大規模粒子系可視化環境では、従来の球を三角形パッチで表現し描画する方法ではなく、GPUを用いて球を円盤として描画する手法を採用することで高速化を図る。また、可視化処理におけるユーザの負荷を軽減するために、フレームレートの安定化を実現する。数値解析環境と視覚解析環境の統合では、粒子の初期配置、数値計算、視覚解析処理の一連の流れを一括して実現する機能をもたせる。なお、視覚解析の特性から、何度も可視化パラメータ値を変更して視覚解析処理だけを行うことも考えられることから、それぞれの処理を独立して実行することも可能にする。

「粒子解析におけるデータの一括管理」では、対象データ、計算パラメータ、最終的な可視化結果など、従来個別に管理されていた粒子解析に関するデータを一元管理する機構を構築する。各データを、データベース上に関連付けて保存することにより、対象データおよび可視化結果から、行った視覚解析処理や計算パラメータなどをたどれるようにする。また、可視化処理の履歴を木構造として表示することにより、どのように可視化処理をおこなったかの履歴を一瞥できるようにする。また、パラメータスタディなど類似のデータの可視化結果を並置して表示することにより、個々の結果の比較が容易にできる環境を構築する。

#### 4. 研究成果

粒子系数値解析における粒子の初期配置問題を解決するために、粒子配置インタフェースを構築した。まず、3次元数値計算では3次元空間内に粒子を配置する必要があることから、一般的に利用されている2次元ディスプレイおよびマウスの利用を考え、3次元空間内の情報を2次元平面に投影することとした。3次元空間の可視化結果から正確な3次元位置を把握しようとした場合、ユーザ自身の空間認識能力に依存してしまうが、2次元平面に投影することにより、正確な位置を把握しやすくなる。一方、投影した可視化結果では3次元空間内での関係が分かりにくくなるため、3次元空間内での可視化結果を並置した。図1に自己組織化単分子膜の分子の初期配置システムのプロトタイプを示す。自己組織化単分子膜では、膜の上に分子が配置されることから、膜上の分子の位置とその傾きがわかれば、分子を3次元空間内に配置することができる。そこで、3次元空間における傾きを色（色相）で表現することにより、3次元空間内での粒子配置を容易にした。さらに、力覚装置を利用することにより、粒子同士が重ならないよう、直感的に配置できるようになった。

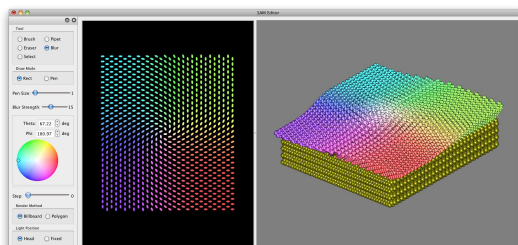


図 1：自己組織化単分子膜のための分子配置支援システム

大規模粒子系の可視化に対応するために、粒子の高速描画手法を構築した。従来手法である、粒子を球として描画する方法では、描画処理に時間がかかる。そこで、人間の視覚特性から注視点から離れた領域は明瞭に捉えることができないことや、球を2次元ディスプレイに投影すると円盤と同等に見えることなどを利用して、注視している領域は球として、それ以外の領域は円盤として描くことにより、高速な描画を実現した。これにより、人間が視覚的に捉えにくい領域の描画精度は落ちていくものの、注視している領域は球として精密に描画されているので、視覚的な解析自体には支障が出ない。また、精密に描画する領域の範囲を変化させることにより、描画速度が調節可能となり、安定したフレームレートを維持することができる。一般的に、フレームレートの大幅な変化がユーザに精神的な負荷を与えることが知られてい

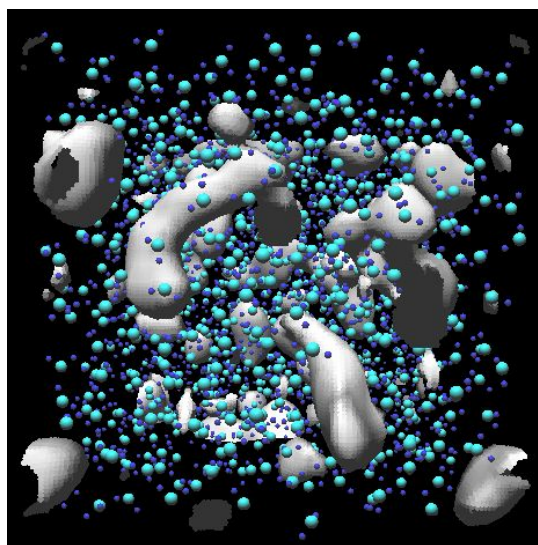


図 2: 水分子及び瞬間密度分布の可視化

るため、安定したフレームレートを維持することは、解析効率を向上させることにつながる。図2は、本研究で得られた粒子系データの可視化結果である。本画像では区別し難いが、視点を画像中心の手前側とし、奥側にある粒子は解像度を落として描画されている。

数値計算および粒子の初期配置システム、大規模粒子系可視化環境を連続して行える環境を構築することにより、より柔軟に粒子系解析を実行する環境を構築することができた。

粒子系解析におけるデータの一括管理として、対象データ、計算パラメタ、可視化結果、可視化処理の流れを関連付けてデータベースに格納するようにした。ユーザによるデータベース利用の手間を軽減するため、可視化結果を表示することにより、関連する情報を引き出せるようにした。また、対象データを選択することによっても、そのデータを可視化した結果を表示できるようにした。また、一連の可視化処理の履歴を木構造として表現することにより、どのような可視化処理が行われたか、一瞥することができる。ユーザが選択した可視化結果を並置して表示することにより、パラメタスタディなどによる類似データの可視化結果の比較や、同一データによる別の可視化技法の適用結果などを容易に比較することができる。これらの機能を用いることにより、研究者はデータの保存管理に特別な意識を払う必要がなくなり、データ管理における情報の損失や過ちなどが減少することが期待できる。また、ユーザの上位層にグループを作成することにより、グループ単位での研究情報の共有が可能になると考えられる。管理者および各ユーザは、他のユーザの進捗状況を把握できるとともに、他のユーザが実行した解析履歴から、自分の解析方法を変えるなど、情報交換の場として利用できるように環境に拡張することが可能である。

5. 主な発表論文等  
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計2件)

竹島由里子、コンピュータビジュアルイ  
ゼーション：可視化技法の特徴と高度な  
可視化、空気清浄、査読無、50巻、2013  
年、29-33

小田川雅人、竹島由里子、藤代一成、菊  
川豪太、小原拓、GPUを用いた適応的粒  
子系可視化、日本機械学会論文集B編、  
査読有、77巻、2011年、1767-1778

DOI:10.1299/kikaib.77.1767

〔学会発表〕(計5件)

Yuriko Takeshima, Issei Fujishiro,  
Ontology-Based Support of  
Visualization Workflow Design for  
Structural Analysis, 22<sup>nd</sup> Conference  
on Structural Mechanics in Reactor  
Technology, 2013年8月20日, アメリ  
カ・サンフランシスコ

Yuriko Takeshima, Issei Fujishiro,  
Shigeo Takahashi, Toshiyuki Hayase, A  
Topology-Enhanced Juxtaposition Tool  
for Hybrid Wind Tunnel, Pacific  
Visualization 2013, 2013年2月28日,  
オーストラリア・シドニー

Yuriko Takeshima, Shigeru Obayashi,  
Issei Fujishiro, Collaborative  
Visualization for Integrated Visual  
Informatics, 9<sup>th</sup> Internathional  
Conference on Fluid Dynamics, 2012  
年9月20日, 仙台

Yuriko Takeshima, Goal-Oriented  
Visualization Support System for  
Fluid Analysis, 8<sup>th</sup> Japanese-German  
Frontiers of Science Symposium, 2011  
年10月28日, 東京

Yuriko Takeshima, issei Fujishiro,  
Toshiyui Hayase, Measurement-  
Integrated Simulation and  
Visualization of Karman Vortex  
Streets in Hybrid Wind Tunnel,  
ASIAGRAPH2011, 2011年10月21日, 東  
京

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

取得状況(計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

竹島 由里子 (TAKESHIMA, Yuriko)  
東北大学・流体科学研究所・講師  
研究者番号：20313398

(2)研究分担者

( )

研究者番号：

(3)連携研究者

( )

研究者番号：