

数値データ可視化システム VisPlus について

名古屋大学大型計算機センター
高橋 一郎

1. はじめに

AVS(Application Visualization System)は、米国 AVS 社が開発した汎用データ可視化システムで、グラフィックス・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である。

AVS/Express は、AVS の後継ソフトウェアで、AVS で利用できた可視化技術に加え様々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、AVS を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、容易に使いこなすのは難しい。

そこで、AVS の知識のない研究者の方でも容易に、AVS の持っている豊富な機能を使って様々な可視化処理が行えるような汎用可視化システム「VisPlus」を作成することにした。VisPlus は、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)まで一貫してサポートするシステムで、パッケージソフトウェアの解析結果や CSV 形式のデータを取り込んで AVS の時系列入力ファイルを生成するソフトウェアと、作成した入力ファイルを読み込んで可視化処理を行う可視化アプリケーション・ライブラリから成る。

本稿では、AVS のビジュアルプログラミング方法と、現在開発中の数値データ可視化システム VisPlus について報告する。

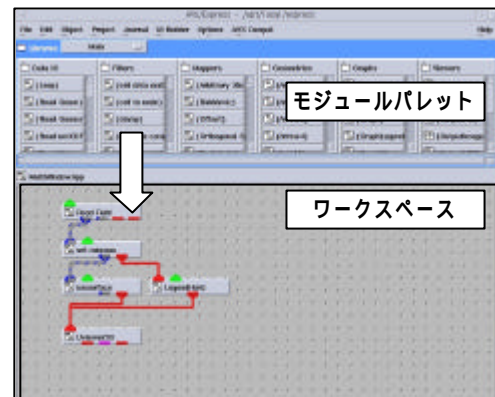


図1 ネットワークエディタの使用例

2. ビジュアルプログラミング

VisPlus は、AVS を起動して表示されるネットワークエディタ(図1)というビジュアルプログラミングツールを使って、可視化アプリケーションを作成している。作成方法としては、データの入力や加工などを行う機能をアイコン化した可視化モジュールを、ネットワークエディタ上のモジュールパレットから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れに沿ってモジュール同士を接続してアプリケーションを作成する。このモジュールパレットには、可視化モジュールの他に、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

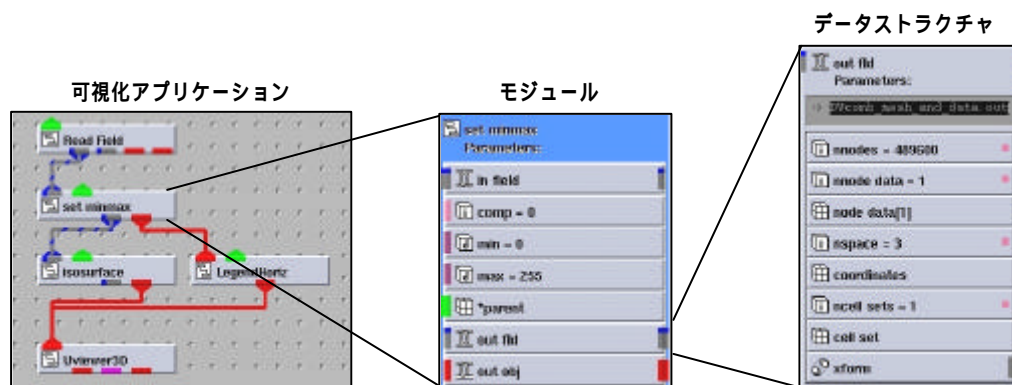


図2 モジュールの階層的なオブジェクト構造

続処理を行う LOOP モジュール, トリガー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 モジュールなどがあり, これらのモジュールを組み合わせる様々なアプリケーション (AVS ではネットワークと呼ぶ) を作成することができる。

また, 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, 一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ている (図2参照)。AVS のオブジェクトは, すべてカーネルの中間言語である V 言語で定義され, ステートメント (オブジェクトの接続/切断/変更等), コマンド (情報の入手や実行の制御), 組み込み関数 (数学関数や論理演算) が利用できる。オブジェクトに対してプログラミングを行うときは, モジュール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3) を使用する。

このような機能を使って作成した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する。また, 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, テキストタイプのインタープリター言語 (V 言語) で記述されているため, オープンプラットフォームで動作する。

可視化アプリケーションを実行する場合は, AVS を起動して表示されるネットワークエディタに, V ファイル読み込んでアプリケーションを構築する。そして, 入力モジュールに入力データのファイル名をインプットすると, 可視化フローに従って線で結ばれた上層のモジュールから下層のモジュールにデータが流れて順に処理され, 可視化結果が画像表示ビューワに表示される。

3. 動作環境 (図4, 図5参照)

VisPlus は, FORTRAN プログラムとシェル及び AVS の V 言語を使って作成しており, AVS が利用できる UNIX システムで動作する。本センターでは, 汎用計算サーバ (GP7000F) 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。また, 研究室のパソコンから利用する場合は, 名古屋大学でサイトライセンスを取っている X-win32 という X サーバのソフトウェアをホームページからダウンロードして利用する。

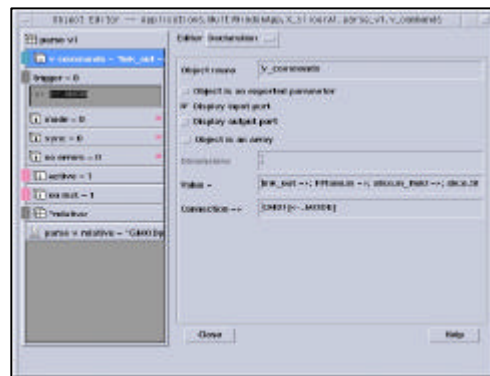


図3 オブジェクトエディタの使用例

4. 可視化手順 (図5参照)

可視化処理を行う場合は, 表2の可視化アプリケーション・ライブラリから使用するアプリケーションを選択する。そして, 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 入力ファイルを作成する。パッケージソフトウェアの解析結果や CSV データについては, VisPlus の時系列入力ファイル自動生成プログラムを使用する。

ポスト処理を行う場合は, 可視化コマンドのオペランドに, ライブラリ名と入力ファイル名を指定して, 可視化アプリケーションを起動する。

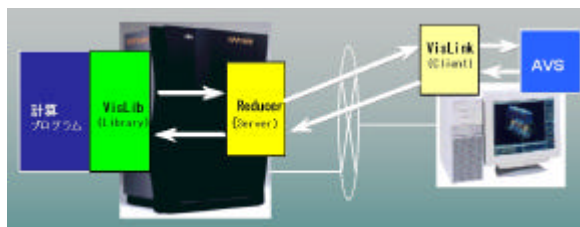


図4 VisLink システムの構成

解析プログラムのモニターやステアリング操作を行う場合は, 富士通社製の AVS 連携のリアルタイムビジュアルイゼーション・ソフトウェア「VisLink」を使用する。利用方法は, 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, 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 を使ってモニター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 VPP5000 に, この VisLink がインソ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ーやステアリング操作を行うことができる。

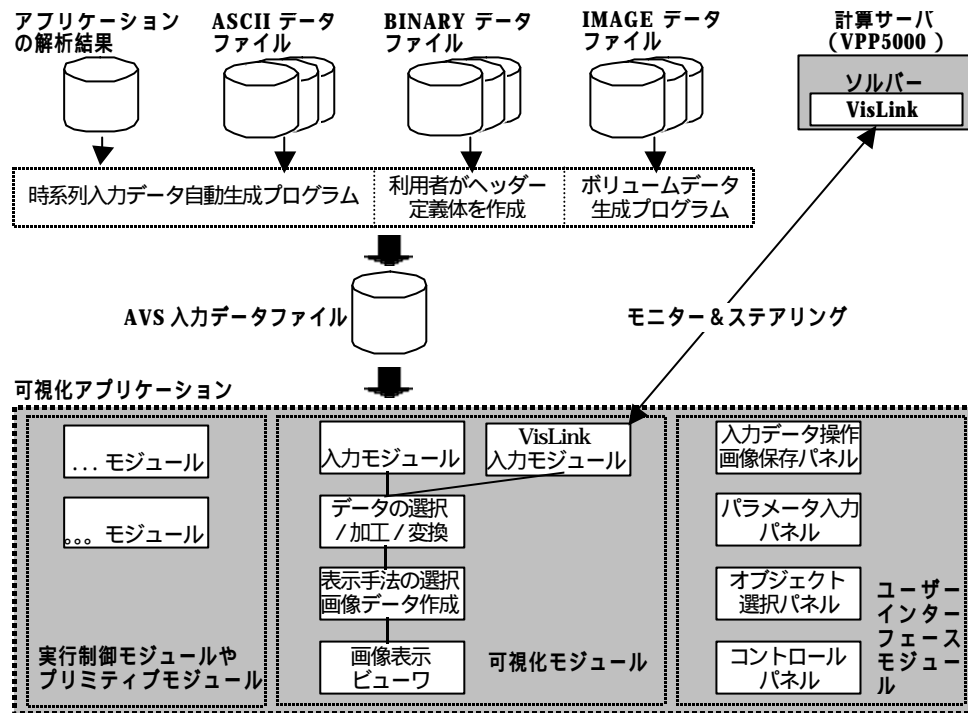


図5 可視化データの流れ

5. 操作ウインドウ (図6, 図7参照)

VisPlus の可視化アプリケーションを起動すると、次の5つのウインドウが画面に表示される。

- MultiWindowApp ウインドウ
- Control ウインドウ
- Parameter Input ウインドウ
- Object Selection ウインドウ
- 画像表示ウインドウ

MultiWindowApp ウインドウは、モジュールや表示オブジェクト、ビュー、ライト、カメラ等の操作を一括して行うための AVS のウインドウである。また、Module メニューの Top には、入力データの読み込み操作や表示画像の保存操作を行う VisPlus 専用の Input / Output パネルが表示される。

Control ウインドウは、アプリケーションとウインドウを制御するためのウインドウで、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の制御（一時停止や終了）や可視化作業に必要な機能 (Module 操作, Object 操作, View 操作, Capture 操作, Camera 操作等) を Multi WindowApp ウイ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ができる。

Parameter Input ウインドウは、コンポーネント選択パネル, パラメータ入力パネル, Slicer パネル

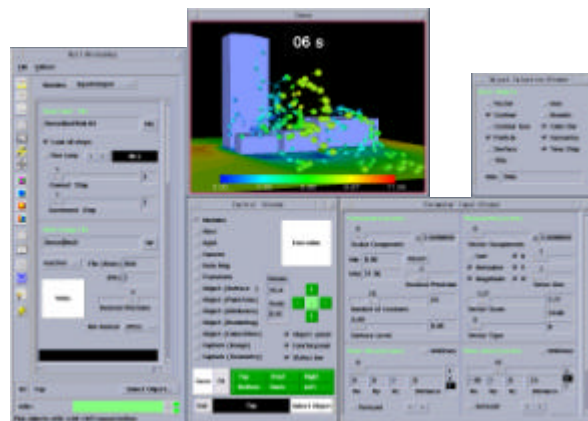


図6 流体向けアプリケーションの使用例

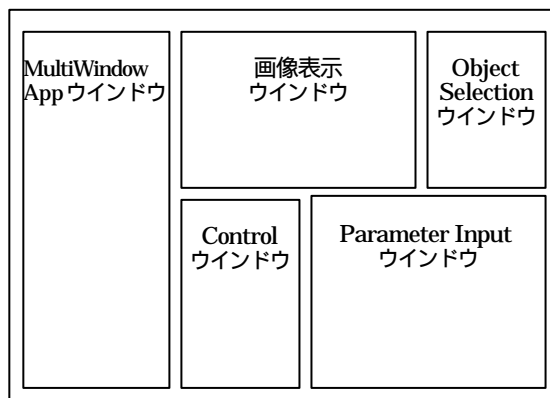


図7 操作ウインドウの形式

等から成る。Slicer パネルを利用すると、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オブジェクトの表示 / 非表示を行う。

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、Parameter Input ウィンドウ及び Object Selection ウィンドウについては、様々な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。

6 . AVS 入力ファイル自動生成ソフトウェア

このソフトウェアは、パッケージソフトウェアの解析結果を変換するプログラムと、CSV データを変換するプログラムから成り、入力ファイルを元に AVS の時系列 Field データフォーマット・ファイルや形状データフォーマット・ファイルを作成する。

時系列 Field データフォーマット・ファイルは、ヘッダー、データ、ステップ情報の3つのファイルで構成される。ヘッダーファイルは、可視化アプリケーションでデータを読み込むときに使用する ASCII 形式のファイルで、データファイルやステップ情報ファイルの関連付けを行う。データファイルは、格子座標とデータを格納するバイナリー形式のファイルで、Fortran の unformat 形式 (単精度) で作成する。ステップ情報ファイルは、時系列または複数データのステップ情報を設定する ASCII ファイルで、データを可視化するときには画像表示ビューワー一緒に表示される。

パッケージソフトウェアの解析ファイルを AVS の入力ファイルに変換する場合は、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、-FLOW, Gaussian, MASPHEC, MASPHEC - SP の解析結果が利用できる。例えば、Gaussian の解析結果については、分子軌道表示、振動解析表示、化学反応表示のための変換プログラムを作成した。

CSV 形式の ASCII データを AVS の入力ファイルに変換するプログラムは、次の形式のデータが利用できる。

- 2次元および3次元空間のデータ
- 時系列または複数データ
- 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)

この変換プログラムは、次の4種類のプログラムと、CSV データの項目を並び替えたり、必要な項目を限定する CSV データ編集プログラムから成る。

- データが一つのファイルに存在する (プログラム名: avsfld)
- データと格子データが一つのファイルに存在する (プログラム名: avsfld1)
- データと格子データが別々のファイルに存在する (プログラム名: avsfld2)
- 分子データとデータが一つのファイルに存在する (プログラム名: avsfldm)

avsfld の入力フォーマット 「case.data 又は 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 又は case.nnn.data」	
格子座標データ(XY 又は 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 又は case.nnn.grid」と 「case.data 又は case.nnn.data」	
格子座標データ(XY 又は 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 又は case.nnn.atom」と 「case.bond 又は 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)
:	:

表1 CSV データ変換プログラムの入力ファイルの形式

表2 可視化アプリケーション・ライブラリー一覧

FORMAT 表現手法 ライブラリ名	入力データ FORMAT		ベ ク ト ル	コ ン タ	等 値 面	ボ リ ュ ム	鳥 瞰 図	流 線 図	マ カ	グ ラ フ	説 明
	数値 デー タ	形状 デー タ									
flow ^{# 2}	F	G									流体用データ表示
contour ^{# 2}	F										スカラーデータ表示
bubble [#]	F										バブル表示
surface [#]	F										5つの等値面表示
⋮											⋮
MD	S	2S									ボール&スティック&データ
MO	F	2A									ボール&スティック固定 データは変化
MO_react	F	2S									ボール&スティック&データ

<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 (G I F , J P E G , T I F F 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

7 . 可視化アプリケーション・ライブラリ

可視化アプリケーション・ライブラリは、AVSのビジュアルプログラミングツールを使って開発した V ファイルのライブラリである。表2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。

このライブラリの入力インターフェースは、すべて、時系列3次元データに対応している。時系列3次元データの他に、入力インターフェースを持っているアプリケーションについては、ライブラリ名の最後に上付き文字(表3)を付加して入力インターフェースを示している。このインターフェースを利用するときは、ライブラリ名の最後に上付き文字を付けて使用する。

例えば、ライブラリ名 flow で、時系列の2次元データを可視化するときのアプリケーション名は、flow2 になる。また、複数データの2次元データを可視化するときは、flow#2 になる。

表3 入力インターフェース一覧

上付き文字	入力インターフェース
#	複数データファイル対応 test.001.fld, test.002.fld, ...
@	VisLink 対応
2	2次元座標入力データ対応

8 . おわりに

数値シミュレーションの解析結果や実験データを可視化するシステム VisPlus について紹介した。このシステムを利用すると、身近にあるデータを容易に AVS の豊富な機能(表現手法、レンダリング、画像処理)を使って可視化処理を行い、結果をファイルに保存することができる。

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応範囲を広げ、操作性や実行性能の向上をはかる予定である。AVS 入力ファイル自動生成ソフトウェアについては、対応するパッケージソフトウェアを増やし、順にサポートしていく予定である。

なお、Gaussian(分子軌道計算)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さんが作成した MOPLLOT 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。

最後に、いろいろアドバイスして頂いた富士通長野システムエンジニアリング AVS サポートセンターの方々に感謝いたします。

<参考文献>

(1)AVS/Express マニュアル

<http://www.kgt.co.jp/library/trial/avs/index.html>