

数値データ可視化システム VisPlusの紹介

名古屋大学大型計算機センター
高橋 一郎

発表内容

- ◆ 背 景
- ◆ 概 要
- ◆ 使用例
- ◆ ビジュアルプログラミング
- ◆ 可視化プログラム・ライブラリ
- ◆ 入力データ自動生成プログラム
- ◆ 今後の課題

AVS

グラフィックス・アプリケーションの開発/可視化ツール

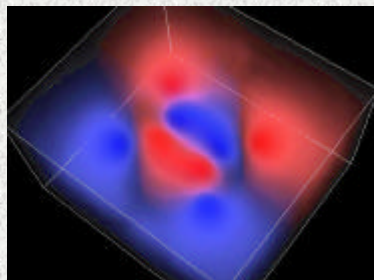
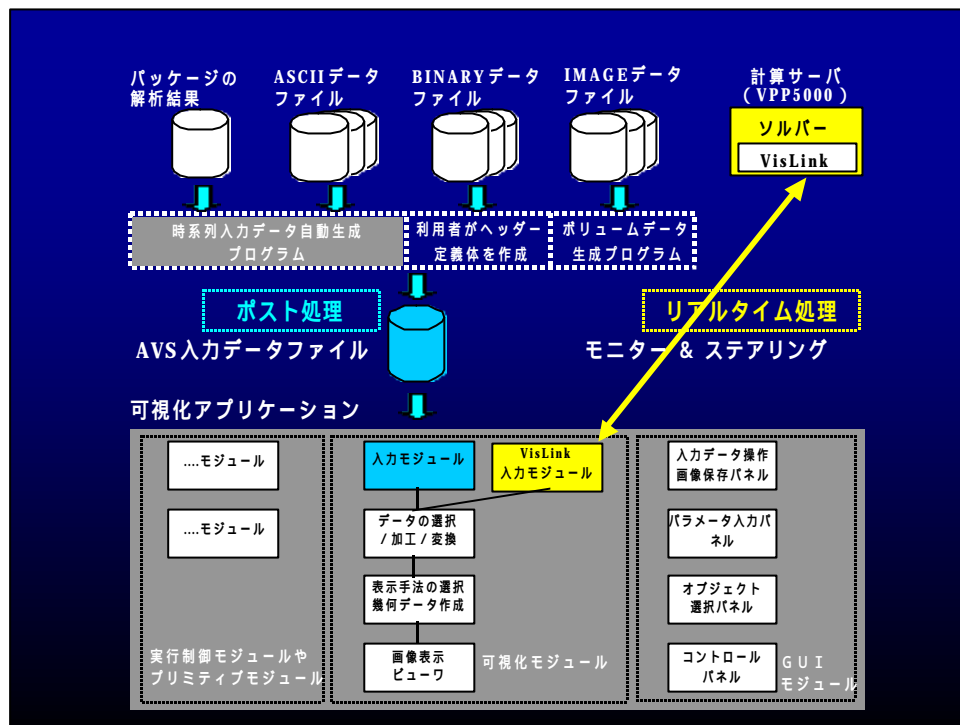
AVS/Express Viz

AVS/Express Developer

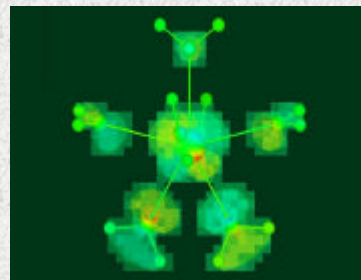
- ✧ アプリケーションの開発機能(GUIも含む)
- ✧ 表現手法やディスプレイへの表示機能が豊富
- ✧ 画像処理機能(保存, キャプチャ等)
- ✧ オープンプラットフォームで動作

背 景

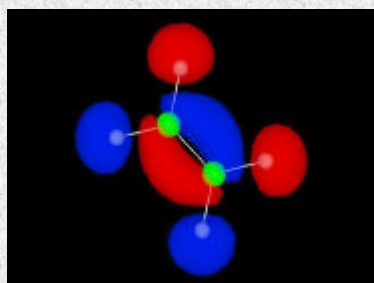
- ◆ AVSをうまく使いになせない
- ◆ AVSに関する専門知識が必要
- ◆ 入力ファイルの作成方法がわからない
- ◆ 可視化プログラムの作成方法がわからない
- ◆ 可視化結果の保存方法がわからない



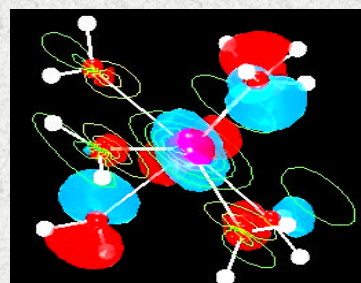
ボリュームレンダリング表示



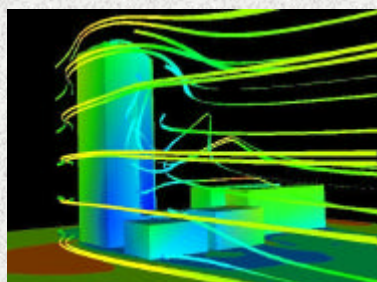
ボリュームレンダリング表示



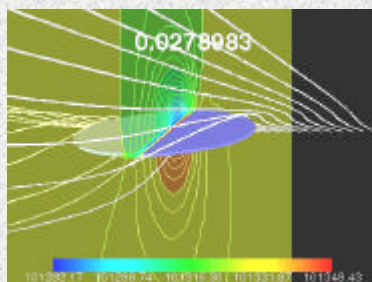
等値面表示



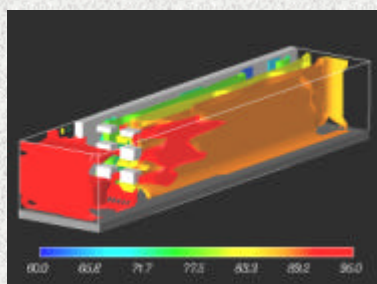
等値面とコンター表示



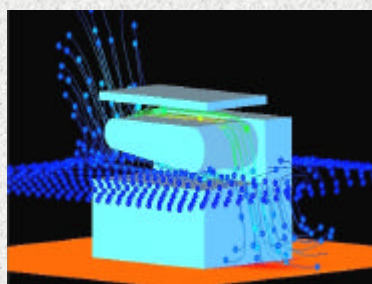
流線のリボン表示



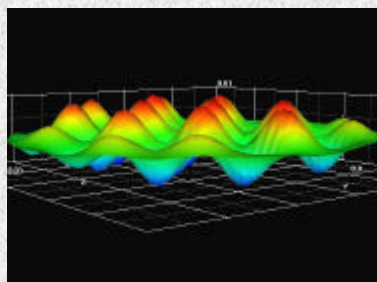
流線表示



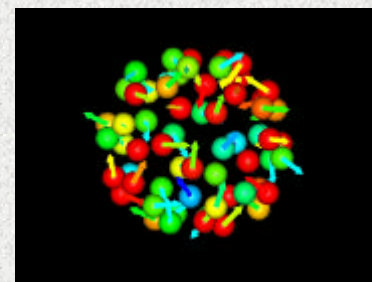
複数の等値面表示



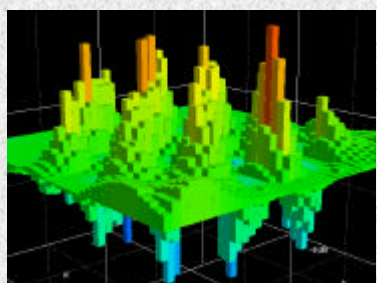
パーティクルトレース表示



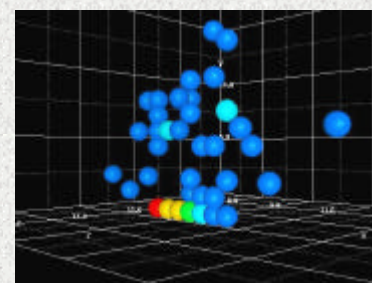
鳥瞰図表示



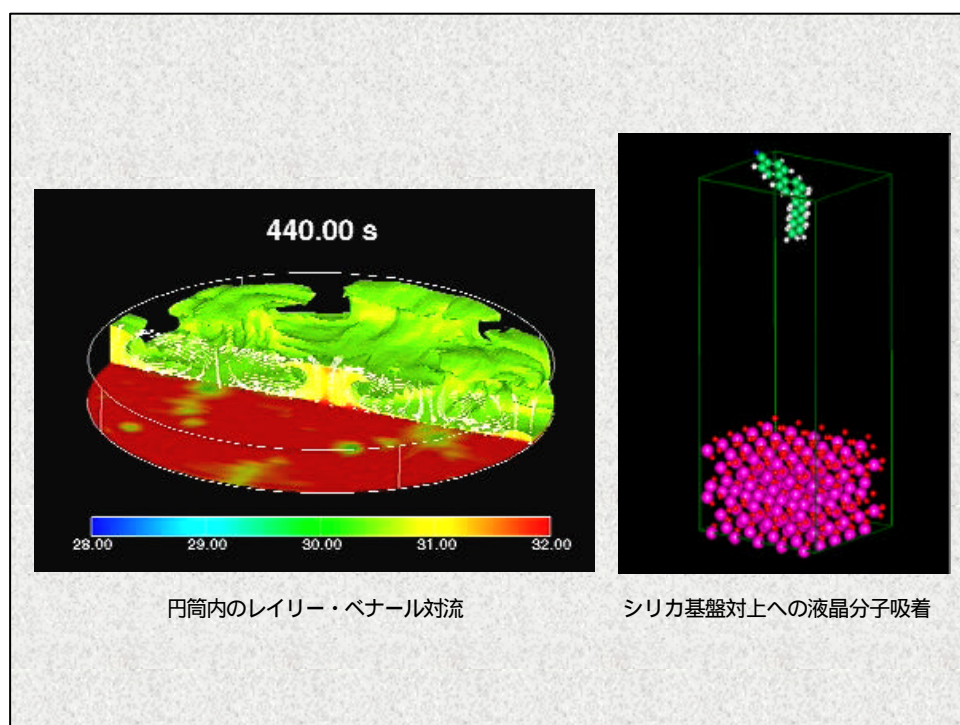
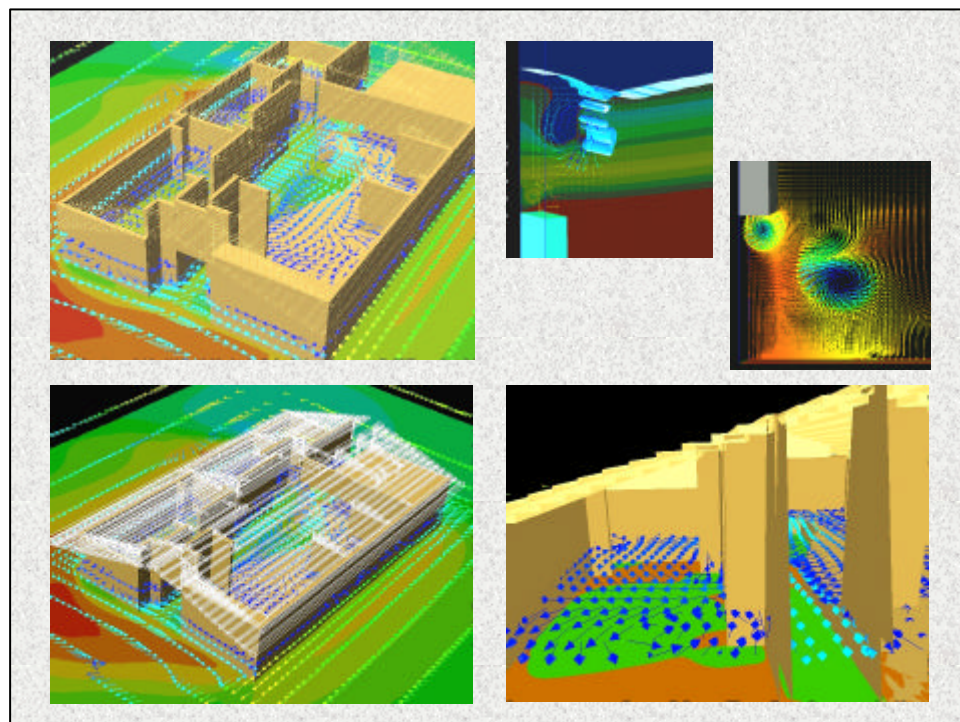
グリフ表示

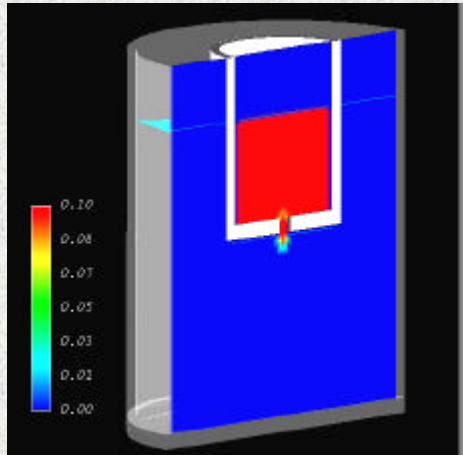


3次元グラフ表示

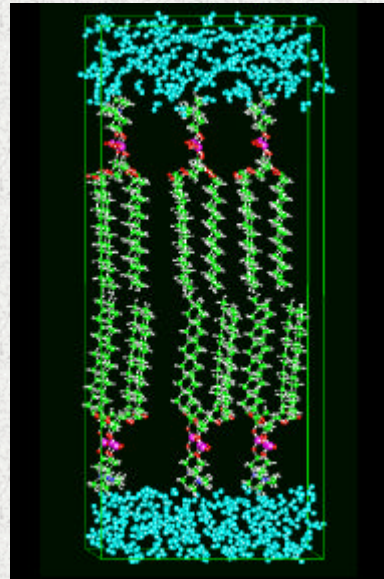


グリフ表示





塩水と真水の拡散対流シミュレーション



細胞膜のシミュレーション

【使用例】 AlfaFlow の解析結果ファイルの可視化 (**cyl.OUTSFF**)

```
gpcs% alfas_cyl
*****
***   alfas command start   ***
*****
> Data type. -----
          1 : TEMPERATURE
          2 : PRESSURE
          3 : VELOCITY-U
          4 : VELOCITY-V
          5 : VELOCITY-W
          -----
> Coordinate      : BFC
> Grid points (i,j,k): 50 40 40
> Number of the steps : 5

>
> Coordinate output. 80000
> Data      output.
          1 : 100.0 s
          2 : 200.0 s
          3 : 300.0 s
          4 : 400.0 s
          5 : 500.0 s
*** alfas end ***

gpcs% vis_cyl_flow
```

【使用例】 Gaussianの解析結果ファイルの可視化 (C2H4.out)

```

gps% g98cut C2H4.out 5.6.7.8
*** g98cut start ***
Parameter of MOPL0T.
-----
# Plane=(3D, Distance=0.0)
AO=14
MO=14
Dtype=5D
Density=(off, HOMO=8)
MO_File=C2H4.MO
MO_Range=(5 5)
-----
*** g98cut end ***

gps% moview C2H4
*****
*      moview start      *
*****
> Input File make. <- C2H4.input,
                      C2H4.MO,
                      C2H4.step
      moplot executed. MO_Number = 5
      moplot executed. MO_Number = 6
      moplot executed. MO_Number = 7
      moplot executed. MO_Number = 8
> Network File make.
> AVS Express start.

```

【使用例】 CSV 形式の時系列ファイルの可視化 (ex.001.data ~ ex1.003.data)

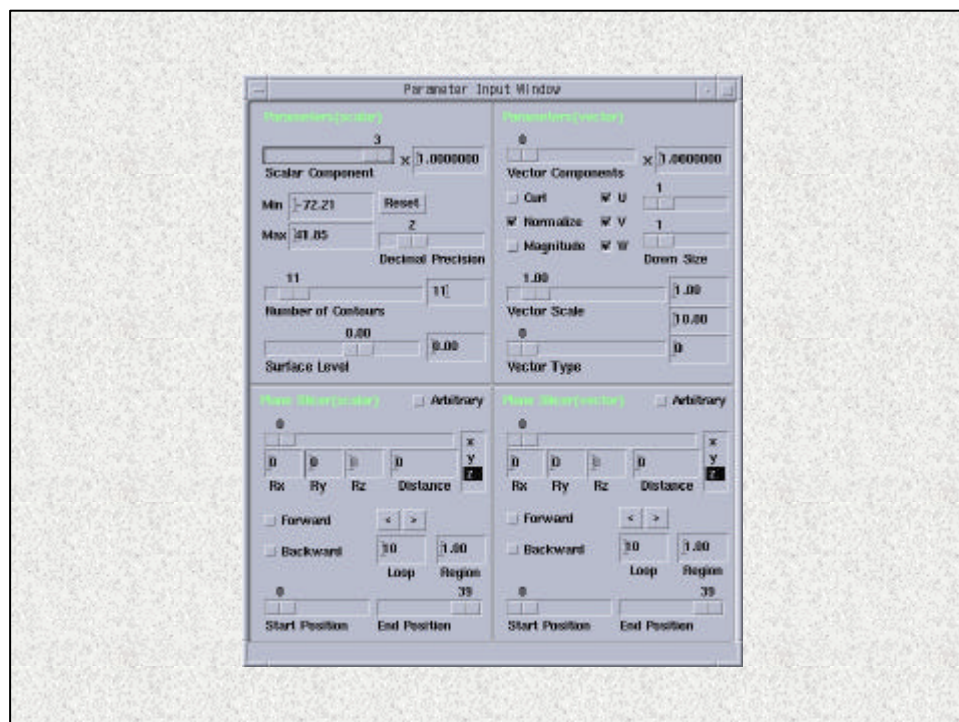
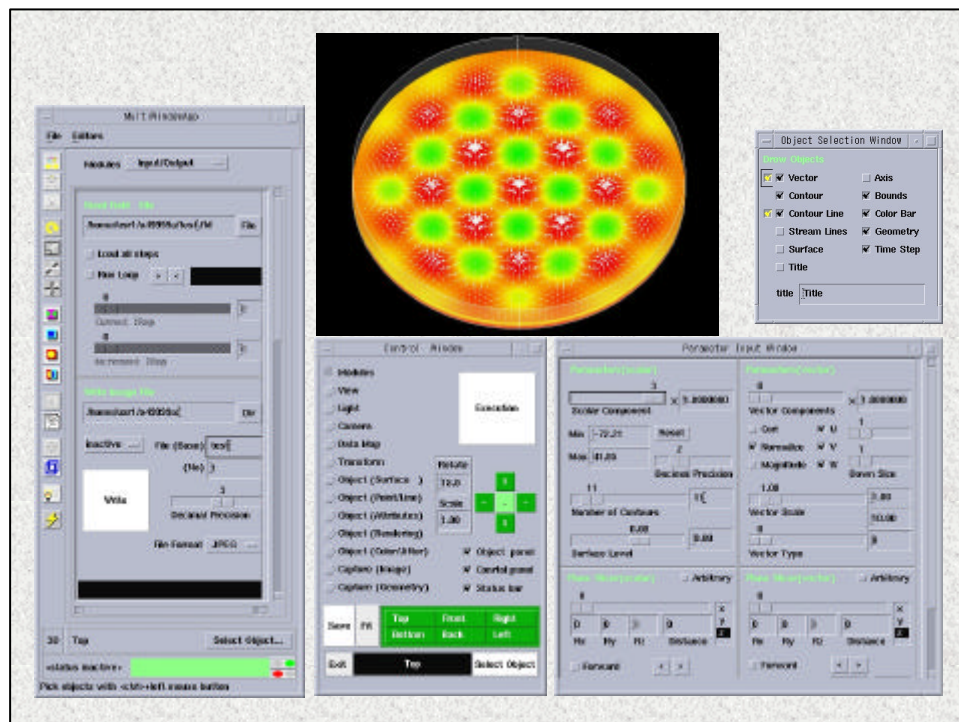
X	Y	Z	U	V	W	P
-4.420E+00	-4.000E+00	2.500E-01	1.004E+00	-8.092E-02	1.359E-02	1.660E-02
-3.260E+00	-4.000E+00	2.500E-01	1.015E+00	1.575E-02	2.334E-02	1.917E-02
-2.430E+00	-4.000E+00	2.500E-01	1.029E+00	-2.178E-02	2.933E-02	1.637E-02
:	:	:	:	:	:	:

```

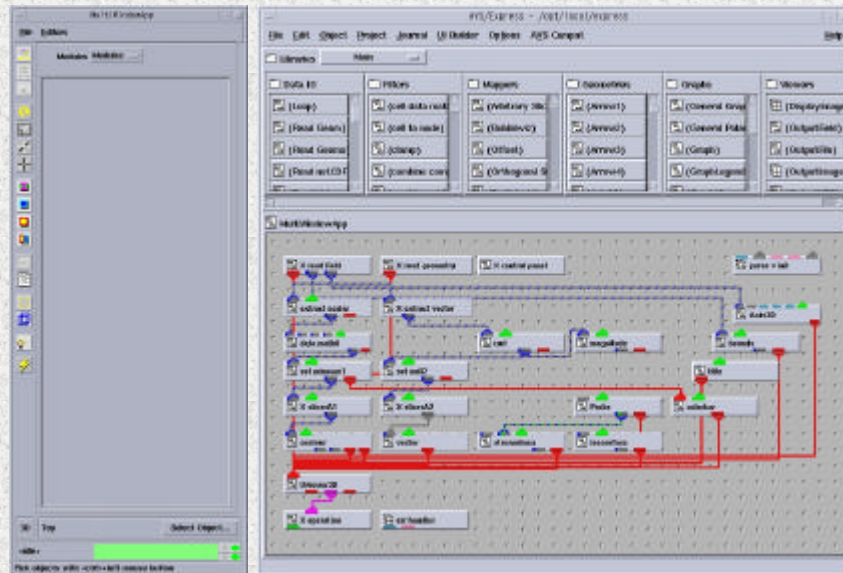
gps% avsfld1 ex 30 20 10
fortran mode
*****
*      AVS Field Data convert start      *
*****
#      --- Output file information ---
dim1 = 30      # dimension of axis 1
dim2 = 20      # dimension of axis 2
dim3 = 10      # dimension of axis 3
nspac= 3      # number of physical coordinates
veclen= 4      # number of components at each point
data = float   # native format of gs
field = irregular # field type

#      --- Output step information ---
> 1 : ex.001.data      "grid & data" output.
> 2 : ex.002.data      "grid & data" output.
> 3 : ex.003.data      "grid & data" output.
*** avsfld1 normand ***

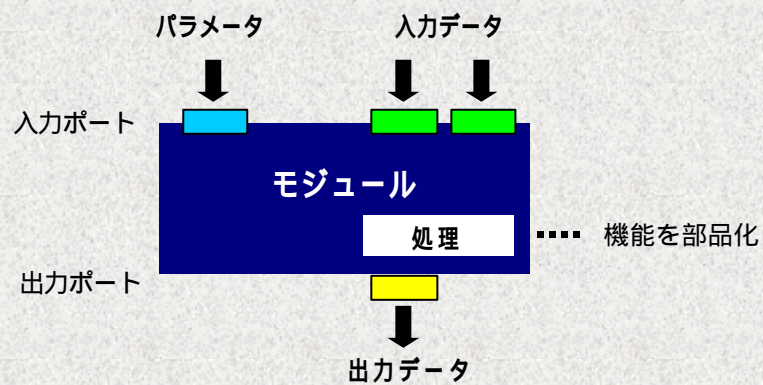
```



ビジュアルプログラミング

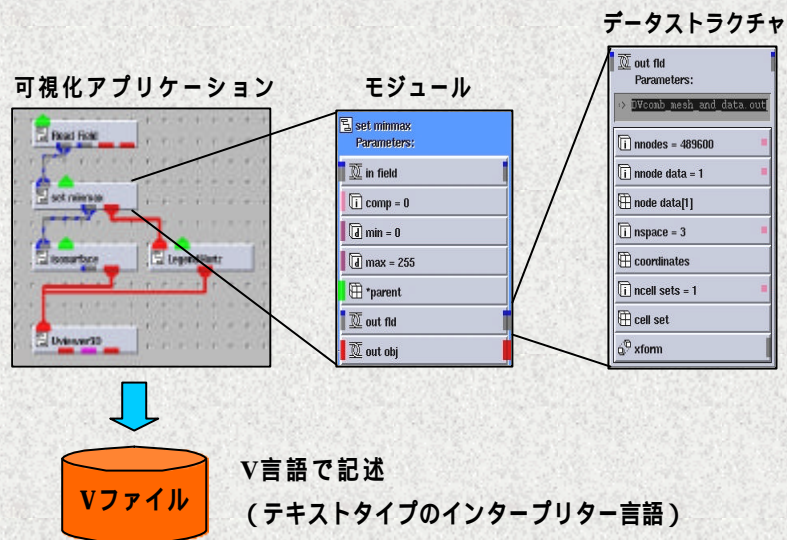


Data Flow型の実行アーキテクチャ

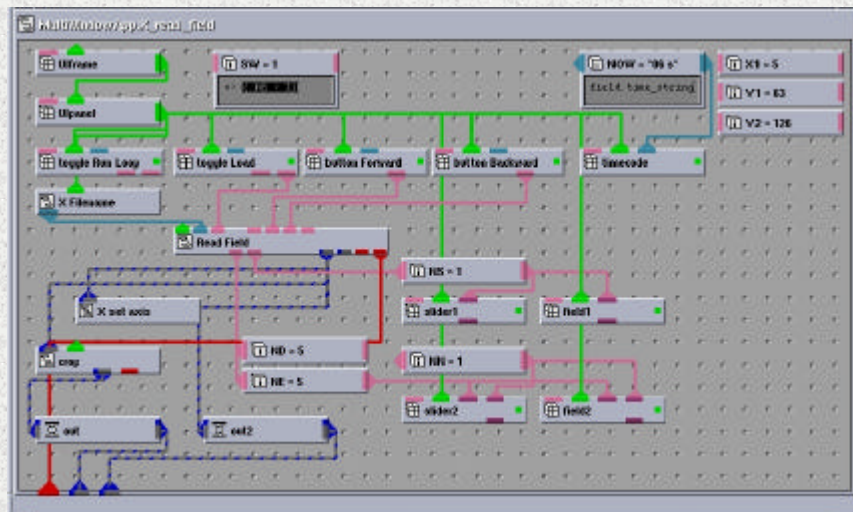


入力データかパラメータの変更が発生するとモジュールは実行され、結果を出力する。

モジュールの階層的なオブジェクト構造



X read fieldモジュール



可視化プログラム・ライブラリ

タイプ/ライブラリ名	FORMAT 表形式		ベクトル	コンター	等値面	ポリネーム	長断図	流線図	マーカー	グラフ	説 明
	スカラーデータ 数値データ	ベクトルデータ 形状データ									
flow [#]	F	G	○	○	○		○				流体用データ表示
contour [#]	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)
 S : Field (離散型 データ)
 U : UCD (非構造格子型データ)
 I : イメージ (G I F , J P E G 等)
 G : ジオメトリ
 A : ASCII形式のジオメトリ

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

AVS入力データ自動生成プログラム

◆ パッケージの解析結果ファイル用

-F L O W

Gaussian

MASPHYC

MASPHYC-S Pなど

◆ ASCIIデータファイル用

avs fld , avs fld1 , avs fld2 , avs fldm ...

変換プログラムの対応データ

- 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

AVS入力データ変換操作

ASCIIデータファイル



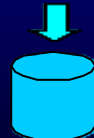
オプション
パラメータ

時系列入力データ自動生成
プログラム



原子情報定義ファイル

(原子名, 原子半径,
vander waals半径, カラー番号)



AVS入力データファイル (時系列 F i e l d フォーマット)

1. ヘッダー (ASCII 形式)
2. データ (BINARY形式)
3. ステップ情報 (ASCII 形式)

変換プログラムの入力ファイル形式

case.data 又は case.nnn.data

物理量データ 1	物理量データ 2	...
:	:	

case.data 又は case.nnn.data

格子座標データ	物理量データ 1	物理量データ 2	...
:	:	:	

case.grid 又は case.nnn.grid

格子座標データ
:

case.data 又は case.nnn.data

物理量データ 1	物理量データ 2	...
:	:	

case.atom 又は case.nnn.atom

原子名	座標データ	物理量データ 1	...
:	:	:	

case.bond 又は case.nnn.bond

原子通番	原子通番	カラー番号
:	:	:

今後の課題

- ◆ 可視化プログラムライブラリの充実
及び性能,操作性の向上
- ◆ AVS入力データ生成プログラムの充実
- ◆ 非構造格子 (UCD)のサポート
- ◆ 大規模データのサポート