

気泡の可視化～「無い」ものを可視化する～

渡辺宙志 (東大物性研)

研究目的

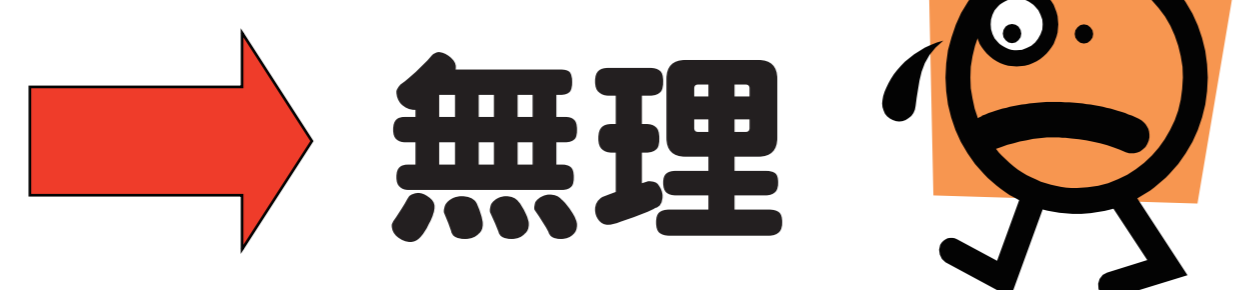
サイエンスは最終的には二次元グラフに宿る。しかし、正しく計算ができていないかの確認や起きている物理現象の直感的な把握のためには適切な可視化が欠かせない。我々は分子動力学法による急減圧シミュレーションにより多重気泡生成過程を研究しているが、データの規模が大きく、また可視化対象が気泡であることから様々な困難があった。本講演では気泡の可視化手法について試行錯誤した結果について報告する。

大規模計算のデータ

大規模計算は出力されるデータも大規模

- いま京コンピュータで実行中の計算
- ・粒子数 10 億粒子
- ・スナップショット 24GB/ フレーム
- ・総フレーム数 1000 フレーム

全て出力すると 24TB/ ラン

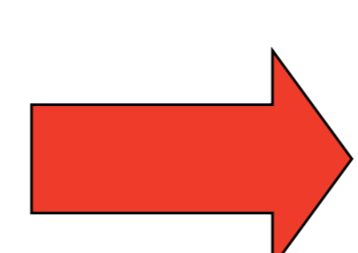
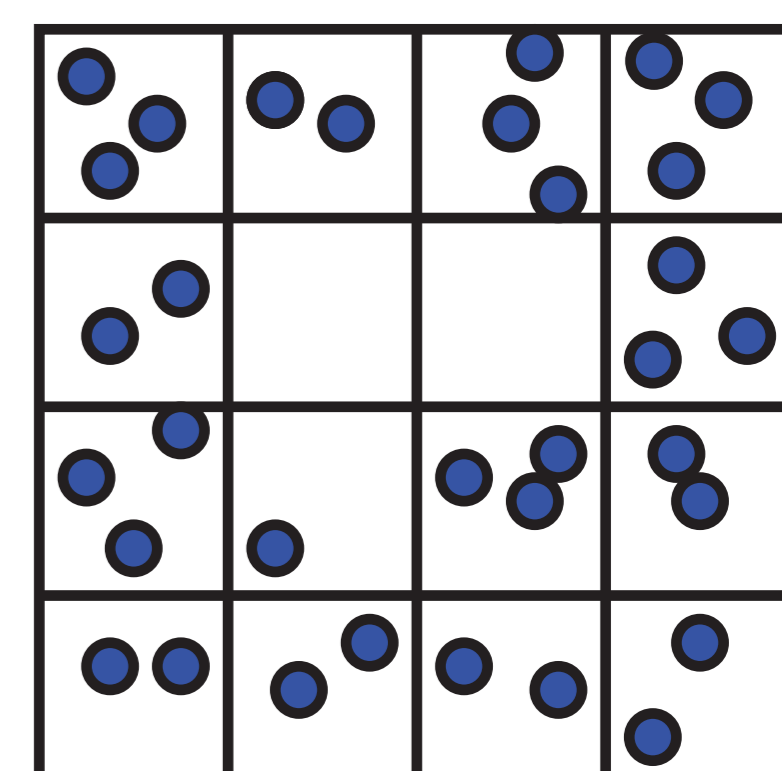


無理

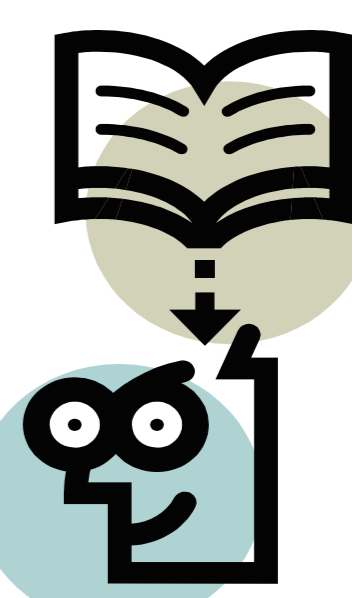
※ 無理ではないにせよかなり厳しい

データの空間粗視化

空間をセルに分割、局所密度をデータとして保存。255 個以上粒子が入らないようにセルの大きさを決め、セルごとの粒子数を unsigned char で保存。



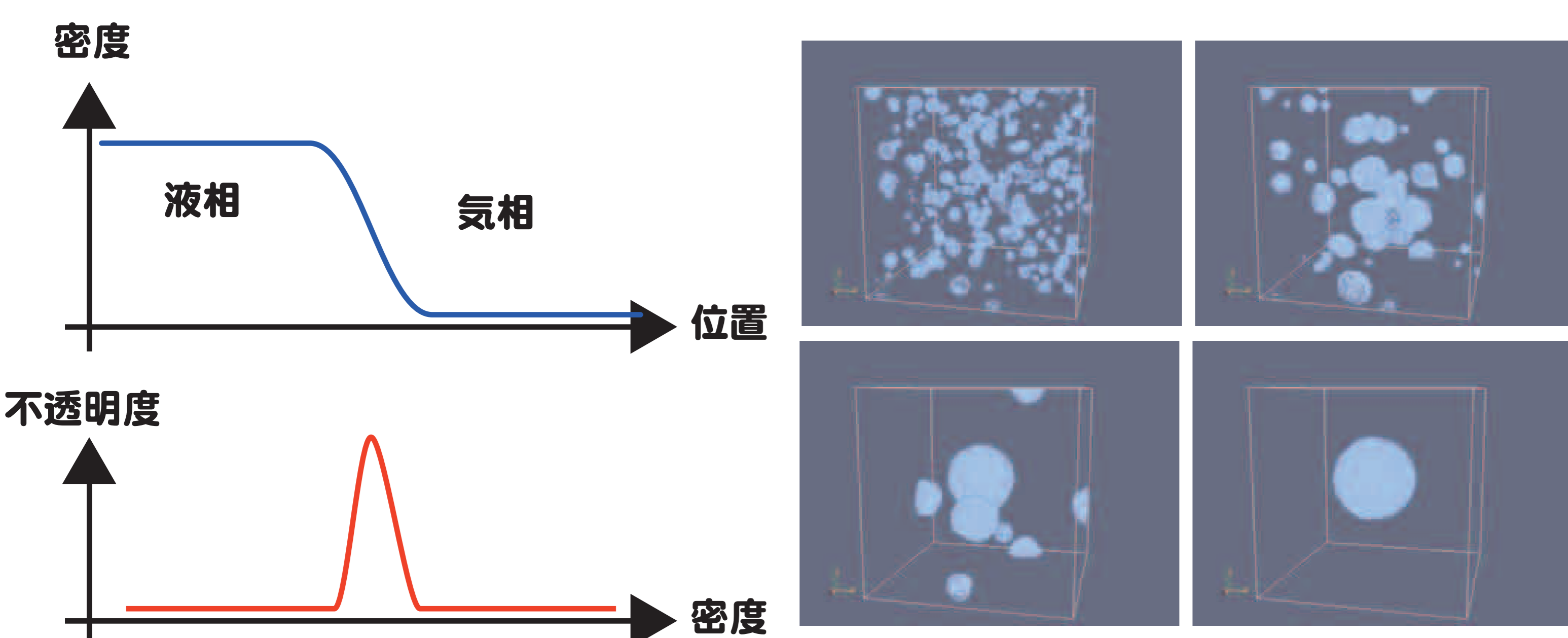
セルあたり 1 バイトで済む
エンディアンを気にしなくて良い



※ 6 億 2 千万粒子の計算で 32MB/ フレーム (450 倍以上圧縮)

可視化その1 「疑似界面検出」

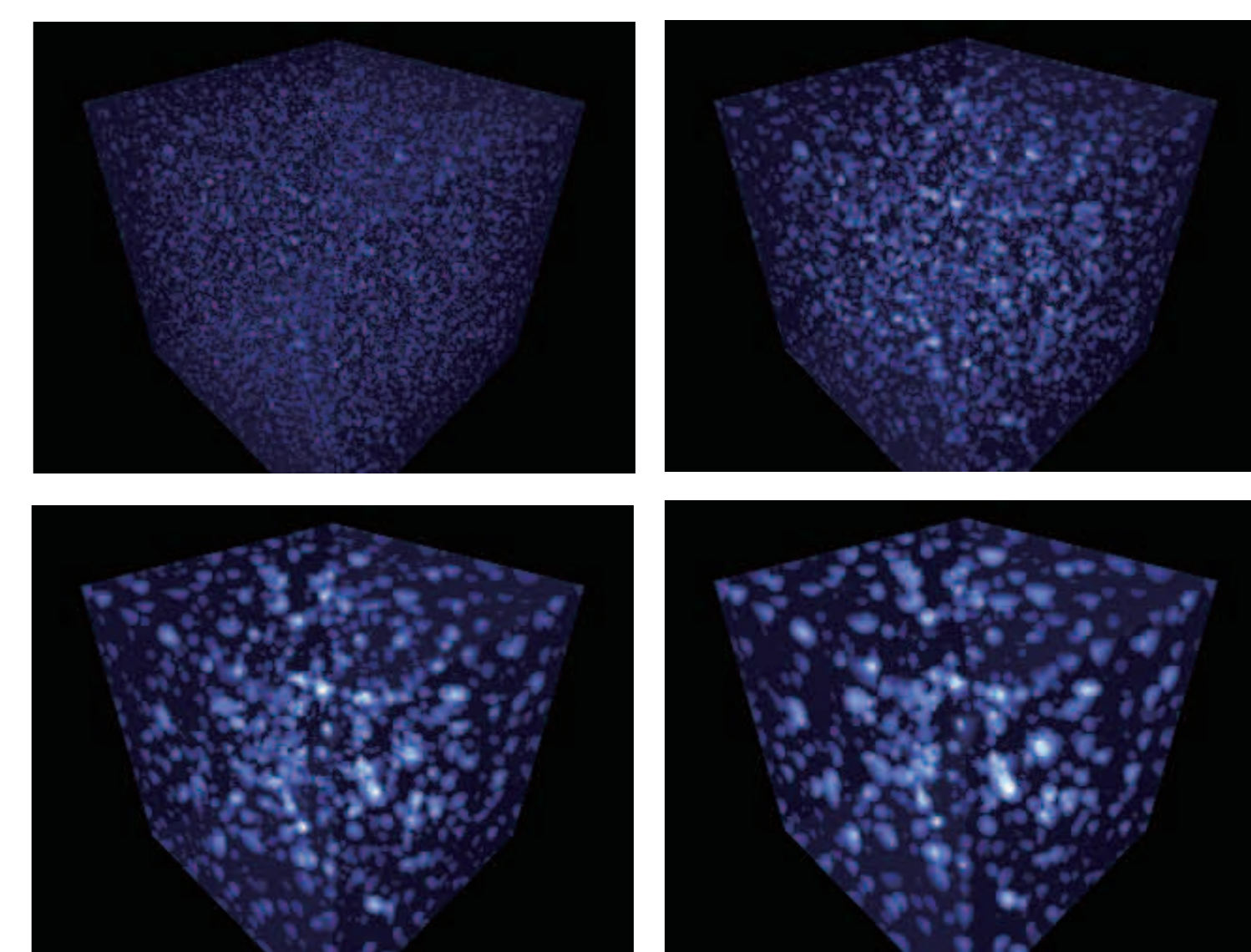
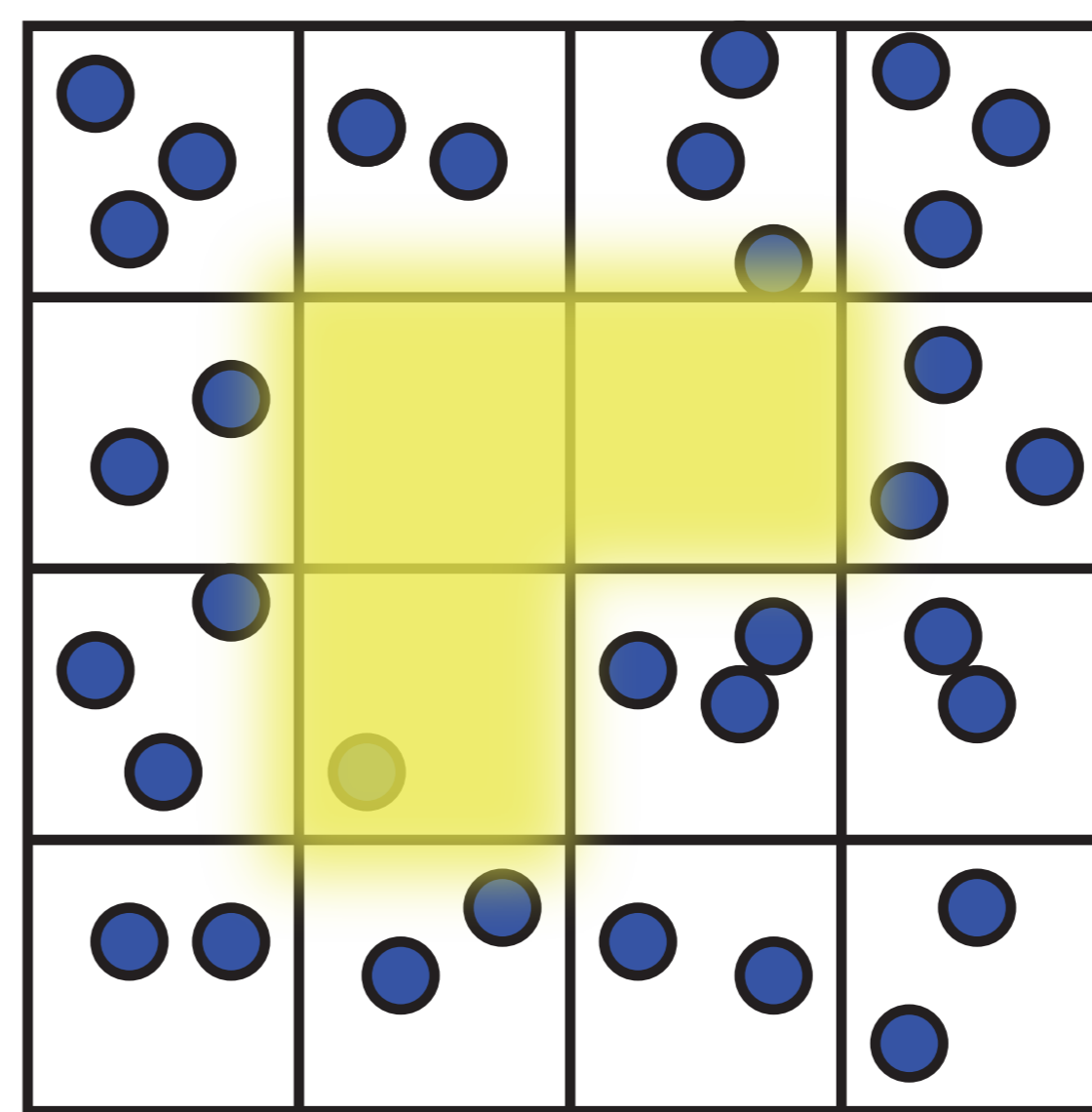
気液界面に有限の厚さがあることを利用



※ ParaView によるボリュームレンダリング

可視化その2 「ボリューム発光」

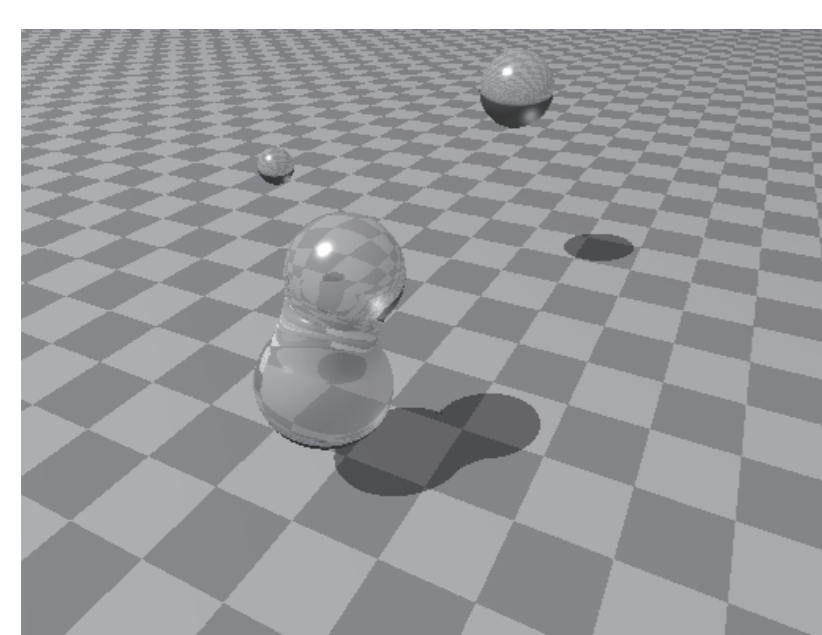
局所密度が低いセルを発光させる
密度が低いほど発光強度を強く



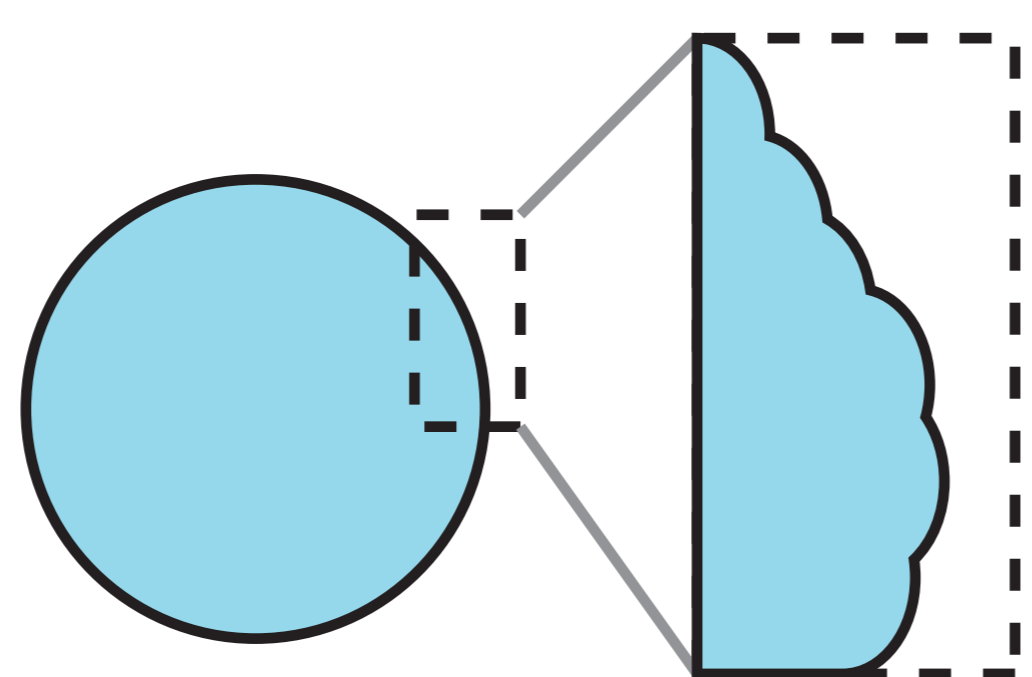
※ POV-Ray によるボリュームレンダリング

可視化その3 「メタボール」

気相セルにメタボールをおいて融合
水の屈折率を与えてレイトレーシング → 失敗



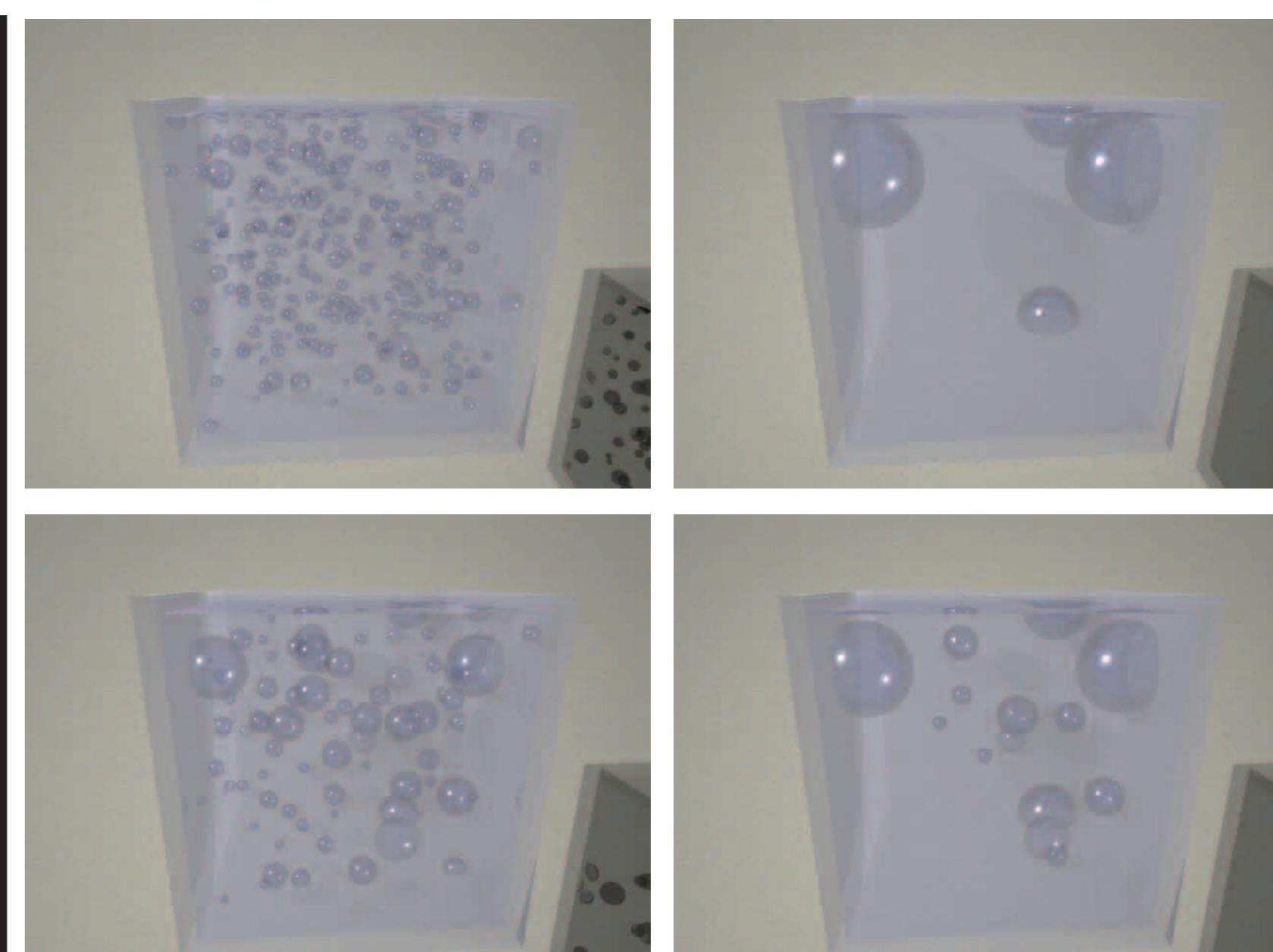
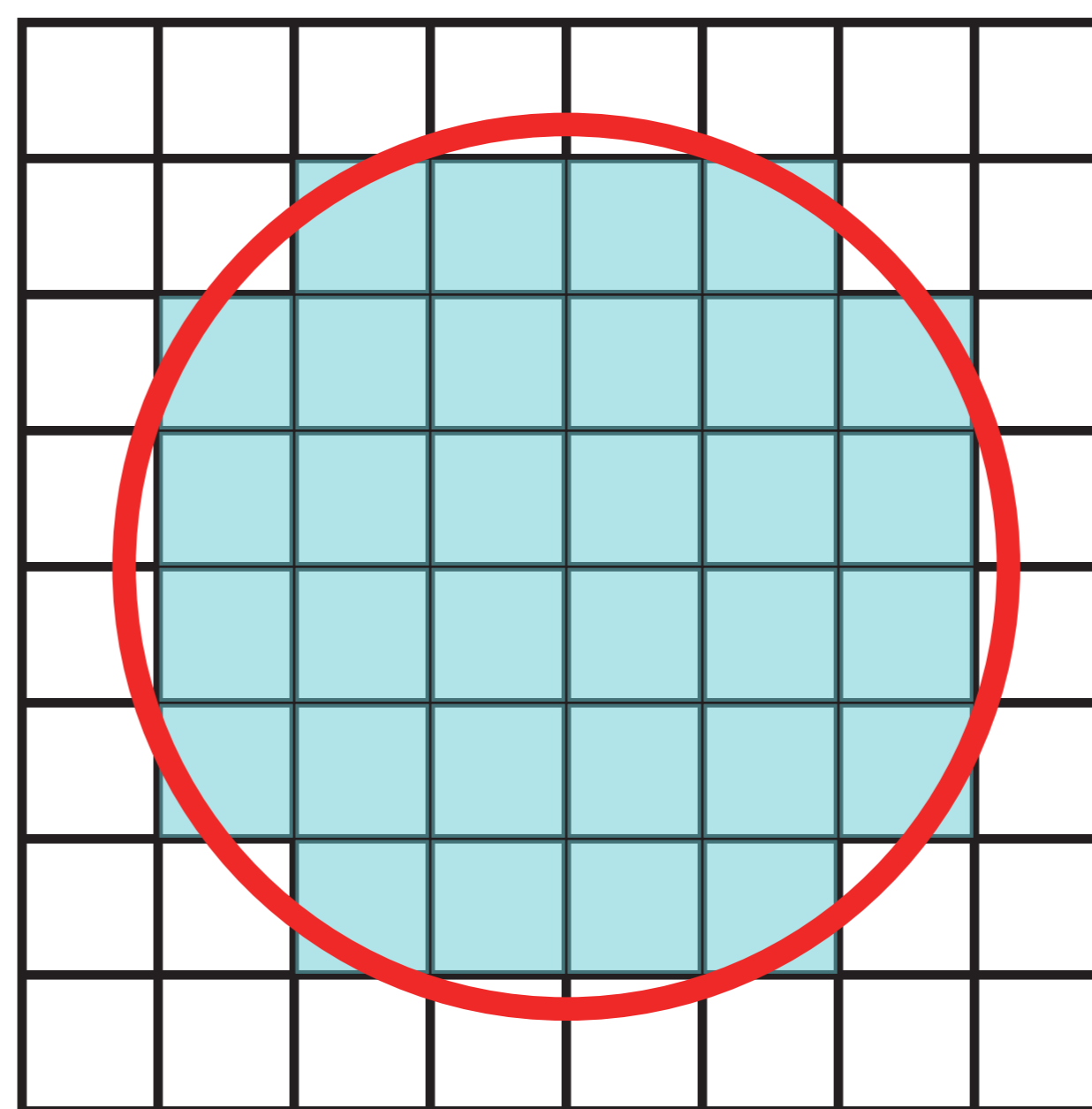
「メタボール (blob)」球対称の密度を与えたボールを多数配置し、密度が閾値を超えた場所を描画する手法



気泡表面がでこぼこになってしまい、光が乱反射してごちゃごちゃに。そもそもメタボールが多すぎてレンダリング困難

可視化その4 「クラスタリング」

気泡と判定されたセルをクラスタリング
重心と体積を計算し、球として描画



まとめ

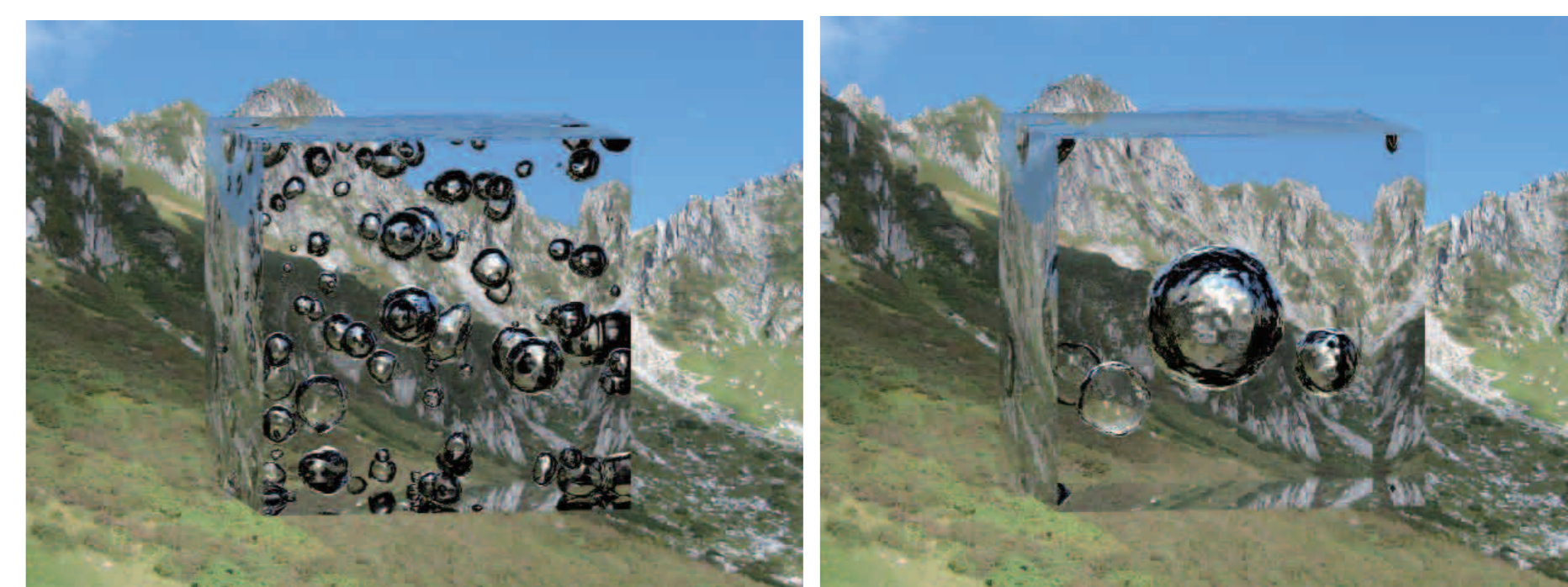
- ・粒子系における局所的な相の定義は難しい
- ・水の屈折率を与えると水に見えない (しかも見づらい) → 可視化にはセンスと試行錯誤が必要
- ・ポスト処理が重い → そろそろスパコンが必要に → 可視化も含めた on-the-fly 計算?

謝辞

本結果は、物性研共同利用スパコン及び理化学研究所の「京」を利用して得られたものです (課題番号 hp130047)。また、科研費による助成を受けています (課題番号 23740287)。

おまけ

「気泡の可視化、なんとかならないかなあ」と共同研究者にデータを渡したら、後日こんな画像が送られてきた→



→ 可視化で最も重要なのは、そういうのが得意な共同研究者