

STM シミュレータ計算結果を可視化するソフトウェアの開発

Advanced Algorithm & Systems

● 目的

現在、STM シミュレータの計算結果は、Techplot というソフトウェアにより、可視化している。しかし、このソフトウェアは、あくまでもデータの状態を色分けなどによって可視化するもので、リアルさにはかける。

そこで、STM 電子顕微鏡で観察した状態に近い、よりリアルな画像を得ることを考える

● 内容

STM シミュレータで出力した、3 次元的な広がりを持つ電子状態密度データを、ボリュームレンダリング (Volume Rendering) を使用して 3 次元画像として可視化するソフトウェアを開発する

● 得られる結果

電子密度の状態を表す、よりリアルでわかりやすい画像が得られる

STM シミュレータの計算結果を、よりリアルな画像を使ってプレゼンテーションに使用することや、広報的な活動に使用することができるようになる

● 実現方法

○ 可視化の方法にボリュームレンダリング (Volume Rendering) を使用

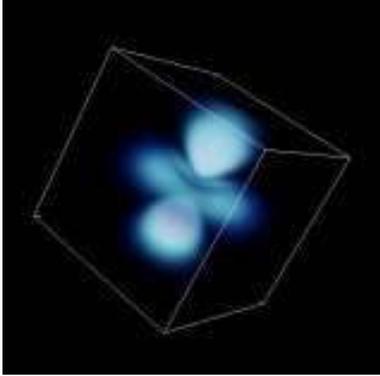
STM シミュレータで計算した、ある位置での電子密度 (=電子の存在確率) を、その位置での不透明度とする

この不透明度を使用してボリュームレンダリングを行うことで、3 次元空間内 (直方体内とする) の電子密度の状態を、半透明の 3 次元画像として可視化する

ボリュームレンダリングを使用するメリット

ボリュームレンダリングを使用するデメリット

ボリュームレンダリングの例



○ GPU (Graphics Processing Unit) と 3 次元テクスチャマッピングを使用することで、計算量の多いボリュームレンダリングの高速化を図る

表示する 3 次元空間 (直方体) 内の不透明度を 3 次元テクスチャとして生成

このようにして生成した 3 次元テクスチャを、この直方体内にある、視線に垂直な何枚もの平面 (Proxy Polygon) にテクスチャマッピングすることで、ボリュームレンダリングを行う。テクスチャマッピングを使用することで、グラフィックボードの GPU によるハードウェア計算を可能とし、表示の高速化を図る

3 次元テクスチャデータとなった不透明度からの表示色の生成にプログラマブルシェーダを使用する

● システム構成

OS : WindowsXP

グラフィックスアクセラレータ : OpenGL2.0 または DirectX9 対応グラフィックアクセラレータ (NVIDIA 製または ATI 製)

開発ツール : Microsoft VisualStudio 2005

開発言語 : C++

グラフィックス API : OpenGL2.0 (OpenGL Shading Language) または DirectX9 (Shader2.0)