

# Wii リモコンを使った分子動力学計算の 3 次元リアルタイム可視化の試み

○岩橋建輔、松尾純一

自然科学研究機構 分子科学研究所 技術課

## 概要

既存の分子動力学計算プログラムを改造し、計算途中の分子をリアルタイムで立体視できる可視化を行った。プログラムを表示用スレッドと計算用スレッドに分け、共有メモリーを使って分子の座標をスレッド間で共有した。OpenGL のクラウドバッファと NVIDIA のビデオドライバーを使って、視点をずらした左目用と右目用の 3 次元画像を異なる向きの偏光フィルムを貼った 2 台のプロジェクターで重ねて投影し、偏光眼鏡で立体視できるようにした。

イベント展示用として、水分子をぶつける機能を付加し、Wii リモコンで初速度と方向とタイミングを操作できるようにした。位置決めのために赤外線的光源が必要であり、新たに作成した。

## 1 序

### 1.1 三次元立体映像用機器の歴史と今後

日本における三次元立体映像の本格的普及への第一歩は 2003 年 3 月の「3D コンソーシアム」設立である。それ以前にも、自作システム等で三次元立体映像を実現しているものもあったが、左右の動画の同期を取る部分に独自の工夫が必要であったり、容易に開発ができるものでは無かったと思われる。3D コンソーシアムが設立されたことにより、三次元立体映像を作成するための最低限の共通仕様が合意され、それに即した特殊用途向けの製品がいくつか発表された。デスクトップ向けの外部モニターの製品では Sharp 製の LL-151D、プロジェクター製品では Sony 製の SRX-S105 などがこの時代のものである。しかし、これらの製品は比較的効果であり爆発的普及へは至らなかった。

この状況に変化が見られたのは 2008 年に PC で三次元ゲームをやる人向けに安価なモニターが発売されたことである。これにより一般の人でもパソコン販売店店頭で展示品を見ることができるようになった。Zalman 製の M220W や Hyundai 製の E465S などがこの時代のものである。

2010 年は「3D テレビ元年」と言われているように、三次元立体表示できるテレビを 2010 年に投入すると複数の大手メーカーから発表されている。今後、ますます三次元立体表示可能な機器が普及していくものと考えられる。

### 1.2 分子可視化ソフトウェアにおける三次元立体表示の現状

分子可視化ソフトウェアは数多く存在するが、その中でも代表的な pymol や vmd では既にいろいろな形式の三次元立体表示が可能になっている。これらのソフトウェアの三次元立体表示への対応が早かったのは、これらのソフトウェアが最初から OpenGL で記述されていたからである。OpenGL で記述さえすれば、左目用と右目用の画像の作成は比較的容易である。OpenGL で左用の画像と右用の画像を目的の外部出力機器の方式に合わせて出力するのはビデオドライバーの役割であるため、開発者の負担は少ない。

研究者の間で三次元立体表示の普及が進まない理由は 3 つあると考えられる。第一に知名度がないために、そもそも知らないということが考えられる。第二に三次元立体映像化できるかどうかは、ビデオカード依存

であるからである。現状では、nVidia製のワークステーション向けの比較的高価なQuadroシリーズを必要としている。第三に外部モニターを選択肢が少ないのと通常のモニターと比べ若干高価であることである。

## 2 分子動力学計算の3次元リアルタイム可視化ソフトウェア

2009年度は分子化学研究所の3年に一度の一般公開の年であった。その展示物として、計算機上で水分子が実際に動いている様子を三次元立体映像として見てもらう企画をした。また、単に見るだけの展示としないために、Wiiリモコンを使って水分子をぶつけられる体験型展示とした。

この要件を満たすために、作製するソフトウェアにいくつかのことが要求される。第一に、いつどのように水分子がぶつけられるか決定されていないため、水分子の動きをリアルタイムで計算する必要がある。第二に、計算を進めながら分子の途中の座標をリアルタイムで三次元立体映像化する必要がある。第三に、ボトルネックを減らすためホットスポットの高速化を行う必要がある。

### 2.1 ソフトウェアの概略

ソフトウェアの主な流れの概略を図1に示してある。

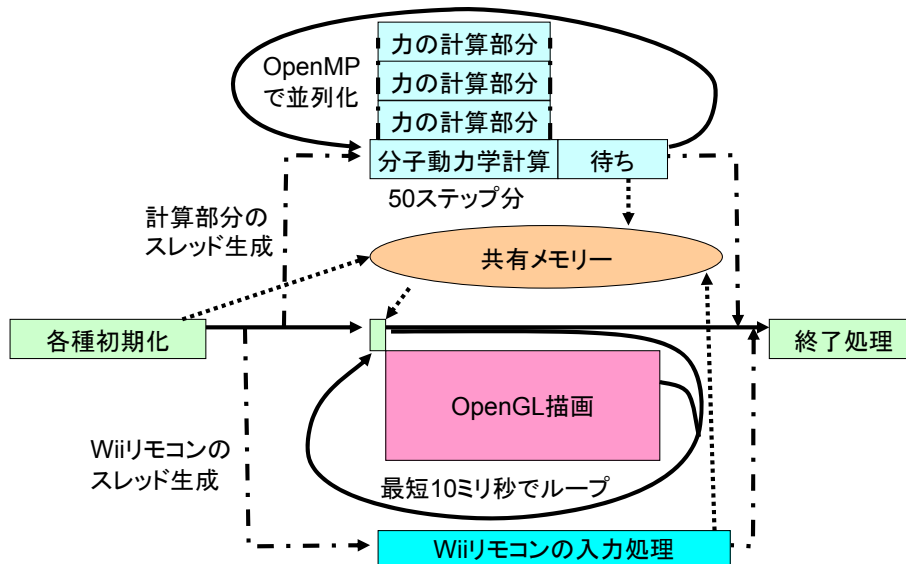


図1. ソフトウェアの主な流れの概略図

プログラムは各種初期化をした際、座標データとスレッド間で必要な変数を共有メモリー下に配置する。これらの変数はスレッド間で共有され必要に応じてロックしながら使われるようにしている。各種初期化を終えた後、Wiiリモコンを扱うためのスレッドと水分子を動かすための分子動力学計算部分のスレッドを生成する。前者のスレッドはWiiリモコンからの入力があれば共有メモリーにイベントの内容を書き込む。後者のスレッドはこのプログラムのホットスポットである力の計算部分を含んでいる。そこで、このスレッドではさらにOpenMPでホットスポットを並列化している。一定ステップ毎に動いた後の座標を共有メモリーに書き込むが、前回書き込んだ座標データが未描画の場合は描画が終わるまで新しい座標を書き込まないように待つようにしてある。一方、2つのスレッドを生成したスレッドは主に描画を担当するスレッドとなる。最短10ミリ秒ごとに新しい座標が書かれていないか確認し、新しい座標があればOpenGLで描画を行う。終了命令を受けた場合、デッドロックに注意しながら各種終了処理を行う。

このプログラムのスクリーンショットを図2と図3に示す。図2は非ステレオ表示環境でのスクリーンショットであり、個々の分子がぼやけることなく表示されている。図3は左目用と右目用の画像を1ライン毎

に交互に描いたスクリーンショットであり、Zalman M220W のような三次元立体モニターで偏光眼鏡を通して見ると立体的に見ることができる。

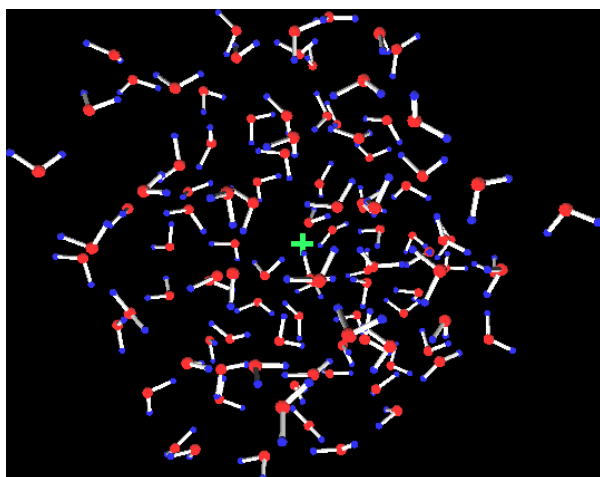


図3. 左目用だけを描いたスクリーンショット

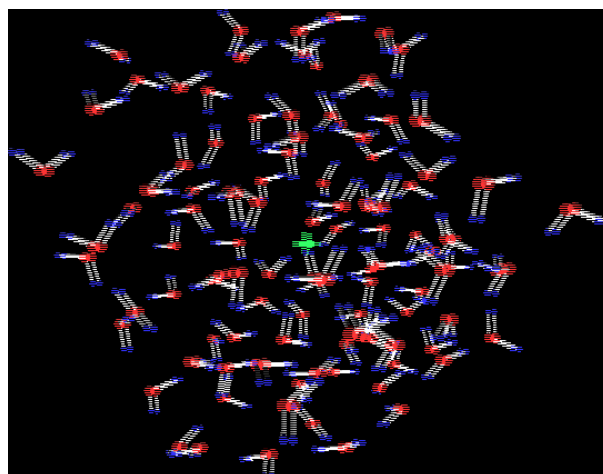


図2. 左目用と右目用の画像を1ライン毎に交互に描いたスクリーンショット

## 2.2 プログラムの性能限界

このプログラムがハードウェアの性能を使い尽くすためには、一番のホットスポット部分である分子動力学計算の力の計算部分の並列化がまず必要である。その後、描画と分子動力学計算の計算時間がほぼ同一になるようなパラメーターチューニングが必要である。

ボトルネックの要因として、CPU の速度と個数、GPU の速度、polling の時間間隔、メモリーのアクセス速度が考えられる。一方、チューニング可能なパラメーターは、分子数 (CPU, GPU, memory に関係)、1 秒間あたりの描画数 (GPU, polling に関係)、1 フレームあたりの描画ポリゴン数 (GPU, CPU に関係)、1 描画あたりのステップ数 (CPU に関係) がある。

表1は、いろいろなCPUで並列数を変えて分子動力学計算の繰り返し部分を1万回実行に要した時間をまとめたものである。分子の数がN倍に増えると実行時間はNの二乗倍になることがわかる。これは今回の仕様であり、通常の分子動力学計算では、このような計算時間の増加がないような別のアルゴリズムが使われている。今回のプログラムでは並列化効率は悪くなく、4並列程度までは問題ないことがわかる。ただし、Hyper-Threading に関しては、その効果がほとんどないことがわかる。CPUの種類ごとの実行速度を比較すると、Pentium D 2.80GHz と Core2 Duo E6600 はほぼ同速度であり、Core i7 920 はそれらの2倍の速度があることがわかる。

OpenGL 描画部分のビデオカード依存を調べ

るために、nVidia製のビデオカード3種類 (GeForce 7600GS、GeForce 9800GT、Quadro FX 3700) を異なる2台のパソコン (Pentium D 2.80GHz 搭載機と Core2Duo E6600 搭載機) に装着し、500回描画するのに要した

CPU 名	CPU 数	54 分子	108 分子	216 分子
Intel Pentium D 2.80GHz	1	2.5 秒	10.2 秒	40.6 秒
	2	1.8 秒	5.8 秒	21.3 秒
Intel Core2 Duo E6600 (2.4GHz)	1	2.6 秒	10.5 秒	43.2 秒
	2	1.7 秒	5.7 秒	21.9 秒
Intel Core i7 920 (2.67GHz)	1	1.1 秒	4.8 秒	19.0 秒
	2	0.6 秒	2.4 秒	9.6 秒
	4	0.5 秒	1.7 秒	5.1 秒
	8 (HT)	0.4 秒	1.4 秒	5.1 秒

表1. いろいろなCPUで並列数を変えて分子動力学計算の繰り返し部分を10000回実行に要した時間

時間を表2にまとめた。

同一マシンで異なるビデオカード装着した場合の比較よりわかることは、Quadro の場合 GeForce より 2 倍程度速いことがわかった。また、異なる GeForce のカードでもほぼ同程度の速さであることもわかった。これは、Quadro シリーズが OpenGL に最適化されたものであるのに対し、GeForce シリーズは DirectX に力点を置いているためであると考えられる。

次に同一ビデオカードを異なるマシンに装着した場合の比較よりわかることは、Pentium D 2.80GHz 搭載機は Core2Duo E6600 搭載機より 2 倍程度遅いことがわかる。この理由はマシンの PCI Express のバージョンがそれぞれ 1.1 と 2.0 に由来し、バージョン 2.0 で通信速度が 2 倍になっているからである。

ステレオ画像の作成の有無による描画時間の違いはそれほど大きくない。これは OpenGL の機能のディスプレイリストを使って、重複計算を回避しているためと考えられる。

ポリゴン数 (円の分割数)	17389 個 (7)	34561 個 (10)	76141 個 (15)
nVidia GeForce 7600 GS	15.1 秒 9.1 秒	25.0 秒 17.0 秒	58.8 秒 34.0 秒
nVidia GeForce 9800 GT	16.3 秒 9.1 秒	27.5 秒 16.2 秒	57.3 秒 33.5 秒
nVidia Quadro FX 3700 ステレオ無	8.3 秒 3.9 秒	10.9 秒 8.2 秒	16.8 秒 11.8 秒
nVidia Quadro FX 3700 ステレオ有	8.7 秒 4.3 秒	11.7 秒 8.5 秒	18.2 秒 12.1 秒

表2. いろいろなビデオカードで 500 回描画するのに要した時間（上段は Pentium D 2.80GHz 搭載機の場合、下段は Core2Duo E6600 搭載機の場合）

### 3 三次元立体表示システムの作製

今回作製したシステムは以下のものから構成されている。

- 複数 CPU 搭載で PCI Express 2.0 を持つパソコン
- クワッドバッファが使える nVidia 製ビデオカード
- 多少の電圧低下にも耐えられるパソコンの電源
- DLP 方式のプロジェクター2 台
- 偏光板と偏光眼鏡
- シルバースクリーン
- なるべく狭い間隔でプロジェクターを上下に配置できる台
- 3D 対応のモニター

これらを実際に組み立てたものが図 4 である（ただし、スクリーンとモニターは省略した）。上記の機材でいくつかの注意点がある。プロジェクター2 台の消費電力が大きいので、使用場所によっては 90V まで電圧低下が起きた場合があった。そのため、当初使用予定だった電源ではパソコンに電力を供給できず、急遽入力電圧に幅を持っている電源を使うことで対処した。液晶方式のプロジェクターが市販されているが、出力光が既に偏光なので、今回の用途には不向きである。偏光の種類は直線偏光や円偏光があるが、通常の利用ではどちらでも問題ない。通常のスクリーンでは偏光を乱反射させてしまうため、偏光眼鏡を通して左右両方の画像が混ざって見えてしまう。そのため、正確に光を反射する鏡のようなシルバースクリーンを用いる必要がある。2 台のプロジェクターで同一範囲を投影する必要があるため、スクリーンまでの距離や角度がなるべく同じにする必要がある。そのため、位置や高さの微調整ができるような台でなければならない。3D 対応モニターは独自のプログラムを開発する場合には試行錯誤のために必要である。



図4. 今回製作した三次元立体映像システム

## 4 Wii リモコンと赤外線光源

Wii リモコンは Bluetooth 周辺機器であり、パソコンから認識させることができる。しかし、Wii リモコンのプロトコルは非公開であり、そのままでは通常の周辺機器として利用することができない。このような状況にも関わらず、先人の努力により主要なイベントをパソコンで取得することができる cwiid ライブラリーが提供されるようになった。今回のプログラムでは cwiid ライブラリーを利用している。

Wii リモコンには CMOS が装備されていて、赤外線受信部に投影された複数の外部の赤外線光源の場所をパソコンで受け取ることができるので、複数の赤外線光源があればリモコンの向きと距離を知ることができる。また、3 軸加速度センサーも装備されていて、リモコンがどのように振られているのかが、わかるようになっている。この2つの情報を組み合わせると「ものを投げるような動き」を検知することができる。今回のプログラムではその情報をうまく利用して、実際に分子を投げているような感覚を使用者に与えることができた。

今回使用した赤外線光源は市販品ではなく、電子パーツを組み合わせて独自に作成した。赤外線発光部は、赤外線 LED を4個並列につないだものを用いた。4個用いた理由は、LEDの光の量増やすこと、およびLEDの照射範囲が15度程度と狭いので取り付けるときに若干方向を変えることで実効照射範囲を増やすことができるからである。乾電池一個で動作できるように途中に抵抗を入れて、定格電流でLEDが光るようにした。その完成品が図5である。今回製作した赤外線発光装置をスクリーンの両脇に配置し、スクリーンから4メートル程度離れたところの赤外線を実際にWiiリモコンで検出することができた。



図5. 自作した赤外線発光装置

## 5 まとめ

三次元立体映像システムの作製、左右の映像の合成技術の確立、分子動力学計算プログラムと可視化プログラムの融合、Wii リモコンの使用、赤外線発生装置の作製という5つの事項が相互に融合できてこそできた展示物であった。なお、分子動力学計算プログラムの原形は分子科学研究所の斉藤教授より提供して頂いた。また、赤外線発光装置の作成は松尾が担当し、それ以外を岩橋が担当した。総製作期間は約2ヵ月半、総費用はパソコンも含めて約60万であった。

本研究は、平成21年度の分子科学研究所の所長奨励研究の一環として行った。