

可視化データ出力 “Dump Image” の数式解説 (dump_image.cpp)

Open DEM Japan

2025年7月2日

シミュレーションの状態を2D画像として保存するモジュール `DumpImage` は、粒子座標・結合情報を取り込み、カメラ変換と射影変換を通じて各ピクセルの色と深度を決定する。以下ではその幾何計算と色付け処理を数式化する。

まずシミュレーション領域における粒子位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)^\top$ を視点（カメラ）空間へ写像する。カメラは中心 \mathbf{c} 、視線方向 \mathbf{v} 、上方向 \mathbf{u} を持ち、 $\mathbf{v}, \mathbf{u}, \mathbf{v} \times \mathbf{u}$ は右手系を成す。球面座標で指定されるパラメータ θ （鉛直角）、 ϕ （方位角）より

$$\mathbf{v} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)^\top, \quad (1)$$

とおく。正規直交基底

$$\mathbf{e}_x = \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{u}}{\|\mathbf{v} \times \mathbf{u}\|}, \quad \mathbf{e}_y = \frac{\mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}}{\|\mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{v}\|}, \quad \mathbf{e}_z = \mathbf{v}, \quad (2)$$

によりワールド座標からカメラ座標への変換は

$$\mathbf{r}' = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x^\top \\ \mathbf{e}_y^\top \\ \mathbf{e}_z^\top \end{bmatrix} (\mathbf{r} - \mathbf{c}). \quad (3)$$

透視射影（perspective）係数を $p \geq 0$ とすると、画像平面上の正規化座標は

$$\hat{x} = \frac{r'_x}{p + r'_z}, \quad \hat{y} = \frac{r'_y}{p + r'_z}. \quad (4)$$

$p = 0$ で正投影（orthographic）、 $p > 0$ で遠近法となる。拡大縮小（zoom） $z_m > 0$ を組み合わせればピクセル座標は

$$x_{\text{pix}} = \frac{W}{2}(1 + z_m \hat{x}), \quad y_{\text{pix}} = \frac{H}{2}(1 - z_m \hat{y}), \quad (5)$$

ただし W, H は画像の幅と高さである。

粒子は球として描画される。半径 a をもつ球がカメラからの距離 $d = r'_z$ にあるとき、画像上の見掛け半径は

$$a_{\text{scr}} = \frac{z_m a}{p + d}. \quad (6)$$

球面のシェーディングやハイライトは法線ベクトルと仮想光源との内積に比例する強度係数を用いてピクセル単位で評価されるが、本実装では外部ライブラリ `Image` に委譲される。

結合 (bond) は端点 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ を結ぶ円柱として描画する。周期境界系では

$$\boldsymbol{\delta} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad (7)$$

が箱長 \mathbf{L} の半分を超える成分を持つ場合、

$$\boldsymbol{\delta} = \text{sgn}(\boldsymbol{\delta}) \odot \mathbf{L}, \quad (8)$$

により **最小画像** を取り、必要に応じて円柱を 2 分割する。

色情報は属性値 s を最小値 s_{\min} 、最大値 s_{\max} で

$$\xi = \frac{s - s_{\min}}{s_{\max} - s_{\min}} \in [0, 1], \quad (9)$$

へ正規化し、多色グラデーション $\mathbf{c}(\xi) \in [0, 1]^3$ を通じて RGB 値に変換する。型別 (type) あるいは化学元素 (element) による固定色も選択可能であり、数列

$$\{\text{red, green, blue, yellow, aqua, cyan}\} \quad (10)$$

が周期的に割り当てられる。

深度バッファ $D(x, y)$ は各ピクセルの最近接物体までの距離を保持し、新規オブジェクトが

$$d < D(x, y) \quad (11)$$

を満たす場合のみ色が更新される。これにより奥行き関係が正しく表現される。

描画終了後、JPEG あるいは PNG / PPM フォーマットでファイルへ書き出す。キャンバス背景色 \mathbf{c}_{bg} 、ボックス枠線幅 ε_{box} 、座標軸長 l_{axis} などのパラメータは入力スクリプト中の `dump / dump_modify` コマンドによって動的に変更できる。

以上により `dump_image.cpp` の幾何変換・色付け・可視化処理は (??)-(??) の連鎖で定式化され、シミュレーション結果を高品質な画像として逐次出力する機構を実現している。