位相幾何学に基づくボリュームデータの特徴抽出とそれを用いたデータベースの開発

栗生 敬子^{†1} 高田 雅美^{†1} 城 和貴^{†1}

本研究では、ボリュームデータから位相幾何学的に特徴のある部分を抽出し、それらを集めデータベースを設計する。あらかじめ位相幾何学な特徴を意義し、解析するデータ内で、定義した特徴部の有無を確認する。そして、特徴部の有無を解析したデータのメタデータとして扱い、データベースを設計する。それによって、特徴部をクエリとして検索にかけ、対応データやパラメータの値を返すことで、解析者にとって取得したい興味分野の検索補助が可能となる。

Feature Detection of Volume Data based on Topology and its Application to Database Construction

KEIKO KURIU,^{†1} MASAMI TAKATA^{†1} and KAZUKI JOE^{†1}

In this paper, propose a topological feature extraction method for volume data, and develop a database, which collects that kind of extracted feature. First, we define topological feature. Next, we extract topological features of a volume data set. In the case that topological features are extracted, the features are given as metadata of the volume data. A database is constructed with the volume data and the metadata. By using the database, when features are obtained as queries, the related data and parameters are returned. Hence, the database can find out the interest features with topological visualization.

^{†1} 奈良女子大学大学院人間文化研究科
Graduate School of Humanities and Sciences, Nara Women's University

1. はじめに

物理学、生物学などの多種多様な分野において、実時間での実験が困難な場合や実験状況の再現が難しい場合がある。そのような分野において、コンピュータで扱える仮説的なモデルを構築し、シミュレーションする方法がとられている。コンピュータシミュレーションとは、人の手では計算が困難である実験や、複雑な事象に対してコンピュータを用いて模擬的に計算するものである。コンピュータシミュレーションを用いることにより、事象が変化する要素をパラメータとして与え、さまざまな擬似的かつ、仮説的状况を作り出すことで、理論や実験では得られない成果を生み出すことが可能である。

近年の測定技術や計算資源の発達によって、シミュレーションで扱えるデータが増加しており、シミュレーション結果も膨大なものとなっている。そのため計算機性能の向上が進んでいても、ひとたびシミュレーション結果全体を目で見て確認すると、データ解析者が最も必要としている部分を見出すことが困難である。これを補完するための手段として、可視化が広く用いられている¹⁾。このような膨大なデータの可視化を効果的に行うには、解析によってデータ内に潜在する大局的な特徴を抽出し、その結果を参照する必要があると考えられる。また、データ解析者が観察を望むシミュレーション結果を表示することができれば、研究を効率的に進めることができる。そこで本研究では、対象データとして3次元単一スカラーデータ(ボリュームデータ)を取上げ、さまざまなデータの特徴部を抽出し、その特徴部とそのパラメータを格納するデータベースの設計を行う。特徴部は位相幾何学的な特徴のある部分のことをいい、スカラー値に関する等値面の位相変化(ボリューム位相構造)に着目する。ボリューム位相構造によって、データの分布状態が変化する位置およびそのスカラー値を捉えることが可能となる。この特徴部をクエリとしてデータベースに検索をかけ、その特徴部を持つデータのパラメータ値やデータを戻り値として設計する。

第2章では既存研究について、第3章では位相的ボリューム骨格化²⁾⁻⁴⁾について概説する。第4章で位相幾何学的な特徴の抽出、第5章でデータベースについて説明し、第6章で解析とその結果について、第7章でまとめを述べる。

2. データの特徴抽出

データ解析を行うための手法として、可視化が有効である。しかしながら、コンピュータシミュレーション等で算出されたデータは膨大なものが多く、可視化するには莫大な時間と専門的な技術を必要とする¹⁾。さらに、多数のコンピュータシミュレーション結果の中

図 1 produced isosurface by CPG

から、そのシミュレーションにおいて特徴的な部位を可視化することは難しい。そこで、本章では、大規模なコンピュータシミュレーションの結果から特徴的なものを可視化するための既存技術について紹介する。

第 2.1 節では特異点における可視化技術について紹介する。第 2.2 節では多次元伝達設計について説明する。

2.1 特異点可視化技術

特異点可視化技術とは、大規模なシミュレーション結果から特異点を探索し、本質を失うことなくシミュレーション結果が可視化されたものを単純化する技術のことである。この技術を利用した解析手法に特異点グラフ (CPG: Critical Point Graph) を用いた手法⁵⁾⁻⁶⁾がある。対象データが速度ボリュームデータの場合、ベクトルが 0 の点を特異点とする。スカラー値のボリュームデータの場合は勾配ベクトルが 0 の点を特異点と定義する。この特異点について固有値を求め、特異点を極点、鞍点、渦中心の 3 種類に分類する。鞍点から固有ベクトル方向に、微小距離移動した点と極点をつないでできるスケルトン形状が特異点グラフである。速度ボリュームデータから作成される特異点グラフは、Flow Topology と呼ばれる。これは複雑な流れ場を有限数本の流線で簡易に、本質を失うことなく表現することができる。特異点グラフを作成するためには、3 次元スカラー場からの勾配ベクトルの計算、特異点の計算、鞍点付近を出発点とする勾配ベクトルをつなげた勾配ベクトル線の計算を行う。特異点が密集している場合、この計算が収束しないことがある。例えば、速度ボリュームデータの場合、ベクトルが 0 に収束せず、スカラーデータの勾配ベクトルも 0 に収束することがなければ、大量の特異点が生成される。そこで、必要な特異点のみに着目するため、

特異点自身にラベル付けを行い、その重要度に応じて、段階的に特異点グラフの構築を行うアルゴリズムを用いて各特異点を示す。図 1 は CPG を用いた等値面の生成を示すグラフである。特異点グラフからボリュームデータ全体の探索が可能である。CPG は必ず等値面に交差する。その性質を活かして、特異点から自己増殖的に等値面を生成することができる。このことにより、等値面生成に必要なコストを大幅に削減できることが利点である。

CPG はボリュームデータの特徴を保持した簡易表現であると考えられる。もとのボリュームデータに比べて CPG を用いた場合のデータサイズは格段に小さく、ボリュームデータ検索のインデックスとして利用可能であることがわかる。しかしながら、CPG は速度ボリュームデータには有効であるが、他のボリュームデータに対して適応すると、正確な値を算出することができない。また、特異点をラベル付けすることにより、重要度別に扱うことができるためグラフの簡単化が可能であるが、そのための重要度の基準は分野ごとに異なる。ゆえに、適宜基準となる重要度を定義しなければならず、新しい分野に対する可視化は難しい。

2.2 位相属性を用いた多次元伝達設計

ボリュームデータ全体を半透明な画像として表示するボリュームレンダリングは、代表的な可視化技法の 1 つである。ボリュームレンダリングによって得られる可視化画像が持つ情報量は、各ボクセルに与えられたスカラー値や色や不透明度に変換する伝達関数に大きく依存するとして知られている。近年の多次元伝達関数設計手法の発展により、微分や曲率などの、スカラー値以外の種々の局所特徴を考慮に入れた画像の生成が可能となった。しかしながら実際の可視化においては、データに関する既知の大局的な構造を手がかりに、特定の目的を持ってボリュームデータの可視化を行うことがしばしばである。そこで新たに位相属性を導入して、このような観察者の目的に応じたボリューム可視化を行うための枠組みが研究されている。これらの位相属性は、ボリュームデータのレベルセットグラフから算出されるものであり、多次元伝達関数の変数として今までに用いられてきた局所特徴と異なり、ボリュームの大局的な構造をも捉えることが可能となる。具体的には、等値面の入れ子構造、位相変化の構造、位相の型変化などを強調することができ、観察者にとって効率よく可視化したものを確認することが可能である。だが新しく提案するだけでなく、従来多次元関数として利用されてきた位相属性も関係した、より高度な可視化操作の実現が必要となる。すなわち、観察者が可視化に対する専門的な知識を持ち合わせていることが必要となるため、必ずしも誰もが容易に利用できるとは限らない。また、このような複数の属性をもとに多次元伝達関数を設計するには、観察者の意図を酌むような直感的な伝達関数設計支援ツールが必要である。

3. 位相的ボリューム骨格化

本章では、位相的ボリューム骨格化について説明する。

位相的ボリューム骨格化とは、スカラー値に関する等値面の位相的な変化をたどることで、ボリュームデータが持つ局所的・大局的な特徴をともに考慮した解析手法を提供するものである。この解析を行うことでデータの分布状態が変化する位置、およびスカラー値を捉えることができ、ボリュームデータの持つ局所的および大局的な特徴の両方を考慮に入れることが可能である。

具体的には、解析の対象データとして物体の単位立方体当たりの体積を反映させたボリュームデータからボリューム位相構造⁷⁾を取り出し、ボリューム骨格木 (Volume Skeleton Tree) とよばれるグラフ構造を用いて表現している。ボリューム位相構造とは、スカラー値に関する等値面の位相変化を表したものである。等値面について、ある方向から水平面に切った切り口では、複数の等値面の結合や消滅が生じる部分が観察される。このような現象が起きる位置を臨界点、そのときのスカラー値を臨界スカラー値とよぶ。位相的ボリューム骨格化とは、臨界点をノードとし、臨界点周りの等値面の連結している部分をリンクさせてできるボリューム骨格木を、対象データから抽出したボリューム位相構造を用いて表現するという手法である。

このように、ボリューム位相構造を用いて、データの特徴を大局的にも、局所的にも特徴について着目することができる。よって本研究では膨大なボリュームデータについて位相的な構造である部分（特徴部）を抽出し、それらを検索にかけてパラメータ値を返すデータベースの設計を行う。

4. 位相幾何学的な特徴の抽出

本章では、位相幾何学的な特徴を抽出するために必要なボリューム臨界点について述べる。また、位相的な変化について説明する。第 4.1 節で臨界点の定義を述べ、第 4.2 節で臨界点の種類について紹介し、第 4.3 節で位相変化について、第 4.4 節では等値面の位相変化の割り当て手法について述べる。

4.1 臨界点の定義

ここでは、ボリュームデータにおける等値面が位相変化を起こす位置を示すボリューム臨界点の性質について説明する。ボリュームデータからそれぞれ異なるスカラー値で等値面を切り出すと、等値面の分裂や結合などの位相変化が得られる。ボリューム臨界点は位相変化の

図 2 critical points and neighborhoods

現れる位置に対応する。

数学的に、スカラー場での臨界点は、隣接するボクセルとの勾配が共に 0 となる点を臨界点として定義される⁹⁾。

4.2 臨界点周りの種別

臨界点には極大となる点、極小となる点、峠のような形をしている鞍点の 3 種類が存在する。この 3 種類に分類するため、臨界点において解析を行う。具体的には、臨界点におけるヘッセ行列の負の固有値の数を調べる。ヘッセ行列とは多変数実数の 2 階変動関数からなる行列である。臨界点、すなわち勾配が 0 になる点におけるヘッセ行列が正則行列のとき、多変数実数の偏導関数はヘッセ行列の指数から構成される 2 次関数と点の近傍で同一視できると数学的に定義されている。ヘッセ行列内の要素である、2 階偏導関数はラプラシアンフィルタを用いる。臨界点近傍のボクセルのスカラー値に適当な係数を振って 2 次微分を用いて求める。ヘッセ行列の負の固有値を考察することにより、行列の線形的な特徴を抽出し分類を行う。

図 2 は臨界点とその近傍について、ヘッセ行列の負の固有値との関係を図に表したものである。上の数字は負の固有値の数を示す。左から順に説明すると、まず負の固有値が 3 のとき、その臨界点は極大点となる。負の固有値が 2, 1 のとき、その臨界点は鞍点となる。そして負の固有値が 0 のとき、その点は極小点となる。以上のように種別を行い、それぞれの臨界点の性質について考察することが可能である。

4.3 等値面の位相変化

第 4.3.1 項では位相幾何学から位相的な変化について説明し、第 4.3.2 項で等値面ごとの位相変化の割り当てについて述べる。

4.3.1 位相的な変化

位相幾何学的な変化とは、幾何学的対象についての連続的な変形に影響されることの無い

図 3 phase variation

図 4 phase variations around maximum point and minimum point

図 5 phase variation around saddle points

図 6 methods of allocating phase variations

性質のものが変化することを意味する。簡単に述べると、各図形について、面積や円周の長さや体積をきちんと計算するのは別に、図形を作っている要素の「繋がり方」に着目して考えるものである。穴が開く、開かない等の変化のほか、位相的な特徴部として挙げられる、メビウスの輪やクラインの壺が存在するが、本研究では、それらを除いた位相変化を対象とする。図 3 に位相幾何学において代表的な図形を示す。上の 2 つの図形については、一方が連続的に変形することにより他方への一致可能なため、位相的な変化を起しているとはいえない。下の 2 つ図形について、球面上の閉曲線は球面上での変形で 1 点に縮められるが、トーラス上には 1 点に縮めることのできない閉曲線がある。そのため、一方が他方に変形するとき、位相的な変化が起こっているという。

4.3.2 等値面の位相変化

等値面に起こる位相的な変化について述べる。図 4 は、極大点と極小点の周辺の等値面の変化を示したものである。極小点では存在する等値面成分が消滅するのに対し、極大点では等値面成分が 3 次元空間に新しく現れるのがわかる。この図 3 で、左から右に向く黒い

data name	data size	parameter	critical point			Type of features	images
			min	max	saddle		
Typhoon data	1187 × 978 × 63	*	34104	8838	151040	 NONE	
⋮							

図 7 Database storage

矢印は「発生」を、右から左に向く白い矢印は「消失」を示す。

図 5 は負の固有値を 2 つまたは 1 つ持つ鞍点周りの等値面の位相変化の様子を示す。局所的に 2 つの等値面部分が 1 つに結合する固有値 2 つの臨界点に対し、負の固有値が 1 つ鞍点では局所的に 1 つの等値面部分が 2 つに分裂する。つまり、左から右に向く黒い矢印は「併合」を示し、右から左に向く白い矢印が「分離」を表す。

4.4 位相変化の割り当て

臨界点の種類の実行後、臨界点周りの等値面と位相的な変化の対応を調べる。

図 6 に位相変化の割り当ての流れの図を示す。まず、位相変化の割り当てを行う臨界点の近傍を抽出する。近傍の中で、同じスカラー値を持つボクセル同士を色づけし、他の等値面との差別化を図る。データベース作成者の主観的な考慮で、第 4.3.2 節で挙げたような位相変化を起こしている部分に該当しているかどうか考察する。

5. データベースの設計

第 5.1 節で概要について説明し、第 5.2 節でデータベースのクエリについて、第 5.3 節でデータベースに検索をかけた戻り値について説明する。

5.1 概要

設計するデータベースは、データ解析者が膨大なボリュームデータを解析する際の手助けとなる。データ解析者が希望する特徴である位相的な変化を起している部分を検索にかけ、その部分が含まれているメタデータを持つデータや、その特徴的な部分が検出された際のパラメータ値を戻り値とするようなデータベースを設計する。

位相幾何学的な特徴を抽出した時点で、それらを対象データのメタデータとして付け加える。データベースを用いることによって、解析者が必要とする部位を容易に検索すること

が可能となる。また、パラメータを戻り値とすることにより、パラメータチョイスの時間を削減することができる。図7にデータベースの格納例を示す。解析済みのボリュームデータに関するテーブルを用いて検索を行う。解析済みのデータに、メタデータとなる位相的な特徴、データ名、データサイズ、各臨界点の数を加えたものをデータベースに格納していく。その他に、位相的な変化の見られる部分を中心にボリュームレンダリングで可視化を行ったものの画像を格納し、解析者によりわかりやすく特徴部の情報を提供する。

5.2 クエリ

位相的な変化の一覧から、データ解析者が必要とする、興味のある部分を選択し、それをクエリとしてデータベースに検索をかける。希望する特徴部から、本稿第4章で定義した臨界点についての種類である極大点、極小点、鞍点と、位相変化の種類である分離、併合、消失、発生を割り出し、検索にかける。例えばデータ解析者が等値面で穴が生じる部分、つまり図5の上から3つ目のような特徴を持つデータを検索し、そのパラメータを戻り値とする。そうすることにより、解析者の解析するデータに対して、一つの指標を持つこととなり、パラメータチョイスを行う目印になる。そのことにより、多数の必要なパラメータをより詳細に設定できる。つまり、必要とするパラメータチョイスの選択範囲を削減ことができ、その範囲における、より細かなパラメータ設定が可能となる。

5.3 戻り値

データベースの戻り値は、解析者がクエリとして検索にかけた特徴部をメタデータとして持つデータやパラメータとする。データ解析者が希望する特徴部と類似している部分を位相変化から選択し、検索にかける。そして、該当するデータのパラメータを返す。このパラメータを一つの指標として扱うことができるため、データ解析者は解析対象のデータに対して効率よく分析することができる。また、特徴部が存在したデータ取得時のパラメータを戻り値とすることにより、任意の範囲でパラメータチョイスを行うよりも、適切なパラメータに近似するパラメータを用いてシミュレーションを行うことが可能となる。その結果、より効率的な研究成果が期待できる。

他にも、解析者の希望する特徴部のデータの部分をボリュームレンダリングで可視化させたものを確認することができる。そのため、同じ特徴部でも実際に表示されることにより、よりわかりやすく解析者に特徴部を示すことができる。

6. 解析と考察

本研究ではボリュームデータの位相幾何学的な特徴抽出を行い、その結果を基にデータ

図8 streaming queries

ベースの設計を行う。ボリュームデータの解析を行い、得られたデータから特徴部を可視化するため、特徴が存在する臨界点近傍には、RGB値それぞれがスカラー値ごとに比例するように色付けを行う。つまり、色づけは、近傍中に存在するボクセルの各スカラー値を調べ、この近傍のスカラー値を全て足し合わせ、 255×3 で割った値を、RGB値として割り当てる。これにより、ボリュームレンダリングで可視化を行う。可視化環境は、CPUはIntel(R) Pentium(R) 4 CPU @ 2.53GHz、メモリは1.256G、OSはfedla 9、ビデオカードはIntel Corporation 82845G/GL[Brookdale-G]/GE Chipset Integrated Graphics Deviceである。

6.1 台風データ

データ内容は水蒸気密度で表現されているデータをボリュームレンダリングしたものである。データはAVS形式でサイズは $1188 \times 979 \times 64$ で約140MBである。本稿で使用した台風データにおける臨界点の数は194083個であり、それぞれ、極大点が34104個、鞍点が151043個、極小点が8936個である。

図8は、台風データの解析結果を可視化したものである。図8-aの画像はデータ全体をRGB値とスカラー値を対応させて可視化したものである。図8-bの画像はx軸方向から原点

に向かって見た図であり、臨界点が鞍点で、臨界点周りに2つの等値面が併合している部分
が得られる。図8-cの画像については、z軸方向から原点に向かって見た図であり、臨界点
が極小点で、等値面が発生した部分にあたる。

aの台風の全体像より、位相幾何学的に特徴のあるデータの変化が、明らかに描かれてい
ることがわかる。本実験で用いた台風データは、水蒸気密度のみからなるデータである。こ
の水蒸気密度に対して位相幾何学的な特徴を適用することによって、台風の形が再現されて
いる。つまり、台風の形状は、水蒸気密度と相関的な関係があることがわかる。

bの丸で示した部分が位相的な変化のあらわれている部分である。図からわかるように上
と下の面が併合している。これは下の面が極大の臨界点を向かえるとともに、上にある等値
面が極小点から発生しているため、結果的に結合していることがわかる。

cの丸で囲んでいる範囲では臨界点周りで等値面が発生し、密に重なっている様子がわか
る。cの例にあるように、臨界点の場所によって、可視化を行っても分かりづらい部分が存
在する。実際にここで可視化した部分には近傍に臨界点が密集していることから、臨界点近
傍で色づけを行っても、正確な見分けが困難となる。

6.2 考 察

今回は26近傍を考えて解析を行っているが、より正確に行うためにさらに幅を広げて確
認すべきであると考え。なぜならば、前に挙げた2つの実験のように、臨界点が多いた
め、解析者にとって有効な位相的な変化を見つけ出し提示することが必ずしもできるとは限
らないからである。また、位相変化がある部分の中にはまったく不要であるものが含まれて
いる可能性もある。近傍、26近傍、147近傍等さまざまな近傍での臨界点周りの等値面を
確認して、特徴部分を抽出することが大切である。しかし作業には膨大な時間が必要となる
が、重要である。実際に色づけを行う際には、1つの等値面に対して、より周りと差別化で
きるような色合いで色づけすることが重要である。

7. ま と め

本稿では、ボリュームデータに対して位相幾何学的に特徴のある変化を起こしている部
分の抽出を行い、それらを用いたデータベースの設計を行った。このことにより、膨大なボ
リュームデータから大局的かつ局所的な特徴を安定して捉えることが可能になった。また、
本研究で設計したデータベースのシステムにより、データ解析者が解析対象データに対し
て、興味分野の検索を補助することが可能である。データベースへの問い合わせに対する戻
り値にパラメータを含めることにより、パラメータチョイスの時間を削減することが可能で

あると考える。

実験の結果、位相変化を見極める際の色づけと、検討する臨界点の近傍の設定が重要であ
ることがわかった。また、データベースには、解析時の近傍を考慮に入れて開発すること
が重要であると考え。今後は、解析を行うボリュームデータを増やす。たとえば、データ
を大きさや臨界点のみで決めるのではなく、さまざまな分野のシミュレーションデータやボ
リュームデータを扱うことにより、より実用的なデータベースの開発を目指す。また、格納
するデータの解析を行う近傍の種類を多くし、臨界点に対してより多くの種別を行う。

参 考 文 献

- 1) (2001) The Visualization Society of Japan website. [Online].
Available: <http://www.visualization.jp/>
- 2) S. Takahashi, Y. Takeshima, and I. Fujishiro: Topological Volume Skeletoniza-
tion and Its Application to Transfer Function Design, Graphical Models, Vol.66,
No.1, pp.24-49, (2004)
- 3) I. Fujishiro, S. Takahashi, Y. Takeshima: Collaborative Visualization: Topological
Approaches to Parameter Tweaking for Informative Volume Rendering(Keynote),
In Systems Modeling and Simulation: Theory and Applications, Asia Simulation
Conference 2006, Springer-Verlag, pp.1-5, (2006)
- 4) Takeshima, Y. Takahashi, S. Fujishiro, I. Nielson, G.M.: Introducing Topological
Attributes for Objective-Based Visualization, In Proceeding of Eurographics/IEEE
VGTC International Workshop on Volume Graphics, pp.137-145, p.236, (2005)
- 5) (2004) Koyamada Laboratory website. [Online]. Available: [http://www.viz.media.kyoto-
u.ac.jp/main/research/research2.htm](http://www.viz.media.kyoto-u.ac.jp/main/research/research2.htm)
- 6) Y. Watahshiba, K. Sakai, and K. Koyamada: Visualization of Similar Situation
between Volume Datasets by Using Critical Point Graph and Character Recognition
Technique, The Journal of the Society for Art and Science, Volume.5, No.1,
pp.11-17, 2006
- 7) Y. Takeshima, H. Terasaka, S. Takahashi, and I. Fujishiro: Applying Volume-
Topology-Based Control of Visualization Parameters to Fluid Data, CD-ROM
Proceedings of Fourth Pacific Symposium on Flow Visualization and Image
Processing(2003-6)
- 8) M. Tokunaga, Y. Takeshima, S. Takahashi, and I. Fujishiro: Sophisticating Volume
Visualization Based on Analysis of 3D Field Topology, The Journal of the Institute
of Image Electronics Engineers of Japan, Vol.32, No.4, pp.418-427(2003)
- 9) Omenko A.T. and Kunii, T.L. 「Topological Modeling for Visualization」, chapter
6, pp.105-125, Springer-Verlag(1997).