135 時系列ボリュームデータマイニングのための 位相解析アプローチ

竹島 由里子[○](お茶の水女子大学), 藤代 一成(お茶の水女子大学)
山口 裕美(お茶の水女子大学), 高橋 成雄(群馬大学)

A Topological Analysis Approach to Dynamic Volume Data Mining
Yuriko TAKESHIMA, Issei FUJISHIRO, Yumi YAMAGUCHI and Shigeo TAKAHASHI

ABSTRACT

This paper takes advantage of a 3D field topology analysis for automating transfer function design aiming at volume data mining. The conventional Reeb graph-based approach to describe the topological features of 3D surfaces is extended to capture the topological skeleton of a volumetric field. Based on the analysis results, which are represented in the form of hyper Reeb graph, we propose two principles to design appropriate color/opacity transfer functions for direct volume rendering. Feasibility study of the present methodology is performed with a large scale 4D simulated dataset from atomic collision research. In analyzing the dynamic volume data, it turned out to be effective to use transfer functions designed appropriately at each time step. The basic idea of another approach with a higher order hyper Reeb graph to dynamic volume data mining is also discussed.

Keywords: Visual data mining, volume rendering, transfer function, Reeb graph, atom collision.

1. はじめに

ボリュームビジュアライゼーションは、測定やシミュレーションから得られた大規模な3次元データに潜む内部構造や動的振舞いを探究するために必要不可欠なツールである。なかでも、与えられた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、直観的にデータを理解できる可視化技法として、さまざまな分野で利用されている。しかしながら、データサイズが大きくなるにつれ、適切なトランスファーファンクション (transfer function) を設計して、意味のある画像を生成することが困難になってくる。そこで、与えられたデータの定量的な特性に基づき、効果的なトランスファーファンクションを設計する支援技術の開発が必要である。

本論文では、トランスファーファンクションの半自動設計を通して、ボリュームデータマイニング¹⁾を実行する新しい手法を提案する。具体的には、3次元サーフェスの位相モデリングであるReebグラフに基づく手法^{2),3)}を拡張し、ボリュームフィールドの位相的骨組みであるハイパーReebグラフ (hyper Reeb graph)^{4),5)}を利用する。これは、トランスファーファンクション設計のための基本的な参照構造の役割を果たす。このハイパーReebグラフを時系列ボリュームデータの各スナップショットボリュームに対して構成し、個々に適切なトランスファーファンクションを設計することによって、より効果的なボリューム

時系列解析が行えると期待される。

本論文は、以下のように構成される。次節で、レーブグラフの概念を示し、与えられたボリュームからハイパーレーブグラフを構成する方法について述べる。3節では、ハイパーレーブグラフを利用して、トランスファーファンクションを設計する方針を2通り紹介する。4節で、原子衝突シミュレーションの時系列データ解析に、提案方法を適用する。最後に5節で、本手法の拡張性や今後の課題について議論する。

2. ボリュームフィールド位相の表現

2.1. レーブグラフ

レーブグラフは、3次元サーフェスの位相解析に用いられるツールである^{2),3)}。 hf を目的とする等値面の高さ関数、 p, q を等値面上の点とする。高さ $hf(p)(=hf(q))$ におけるサーフェスの断面上で2つの点が同じ連結成分に含まれているならば、 p と q は同一であるとみなすことにより、高さ関数 hf に関するレーブグラフを得ることができる。レーブグラフではどのようなサーフェスも、3種類の特異点 (critical point)、すなわち、頂点 (peak)、峠 (pass)、底点 (pit) とそれらを結ぶ連続断面上の同相な連結コンタの集合を表すエッジによって位相的に特徴付けられる。Fig.1に、楕円体とトーラスのレーブグラフの例を示す。トーラスにおいては、高さ関数の軸方向の定義に

よって, 異なるレーブグラフが得られることに注意されたい. 言い換えれば, レーブグラフはあいまいではないが, 一意ではないサーフェス位相の表現方法である. レーブグラフの正確な定義については, 文献 2) を参照されたい.

Fig. 1 Reeb graphs for simple 3D surfaces. (a) Ellipsoid; (b) Torus.

2.2. ハイパーレーブグラフ

ハイパーレーブグラフ (以下, HRG と略す) は, レーブグラフの概念を 3 次元ボリュームフィールドに拡張したものである^{4),5)}. 理論的に, ボリュームは異なる目的値をもつ無限枚の等値面に分割することが可能である. 各等値面の位相的特徴は, 共通に定義された高さ関数を用いて, レーブグラフによって表すことができる. そこで, 等値面列に対して, 対応するレーブグラフを比較することによって, 同相な等値面の連続性が失われるフィールド値である**臨界フィールド値 (Critical Field Value; CFV)**を見つけることができる. HRG は, 位相データを記述する 2 つの層からなる階層的グラフである. グラフの上層は, CFV を昇順に並べた線形有向グラフで, CFV $f_i (i = 1, \dots, m)$ を与える m 個のノード v_i と, 解析する最小, 最大フィールド値 f_0, f_{m+1} を与える 2 つの境界ノード v_0, v_{m+1} をもつ. v_i, v_{i+1} を結ぶエッジ $e_{i,i+1}$ は, フィールド区間長 $l_{i,i+1} (= f_{i+1} - f_i)$ を重みとし, 下層でこの区間で同相なレーブグラフを表している. ここで, フィールド区間が開 (閉) のとき, ノードを白丸 (黒丸) で表すことにする.

実例として, 次の解析的なボリュームを考える:

$$f(x, y, z) = a^2 + b^2$$

$$a = \exp(-\sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + 1 - 2\sqrt{x^2 + y^2}})$$

$$b = \exp(-\sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + 1 + 2\sqrt{x^2 + y^2}}).$$

簡単な計算によって, このボリューム (以後メタトラスとよぶ) は, $a = b$ のときただ 1 つの CFV $f_1 (= 2e^{-2})$ をもつことがわかる. Fig. 2 に, このボリュームの HRG を示す. ここから次のことがわかる:

- フィールド値が増加するにつれ, 楕円体である等値面が消失していき, x 軸方向に壊れていく. そして, CFV を超えると, 原点の周りに単一の穴が現れ, 連続したトーラスが生成される.
- フィールド値が増加するにつれ, チューブの太さが細くなっていく.

Fig. 2 An HRG for the metatorus volume.

3. トランスファーファンクション設計

HRG に基づく適切なトランスファーファンクション設計の基本アイデアは, CFV 付近のボリュームフィールドで色 (色相) と不透明度を変化させることにより, 位相の変化を強調することである. ここでは, フィールドサブドメイン $[f_0, f_{m+1}]$ における 2 種類のトランスファーファンクションの定義を提案する. 色相と不透明度のトランスファーファンクションは, サブドメインの外では, 未定義および 0 (完全に透明) であるとする (Fig.3 参照).

次の 2 つの設計方針が考えられる:

- 方針 1⁴⁾: 色相のトランスファーファンクションは, フィールド値に対して規則的に増加 (減少) するものとし, 各 CFV $f_i (i = 1, \dots, m)$ において δ_h だけ一定に値が増加 (減少) するものとする. 一方, 不透明度のトランスファーファンクションは, 一定値 $\alpha (> 0)$ をとるが, CFV $f_i (i = 1, \dots, m)$ 付近で, 高さ δ_o , 幅 ω_o の山型の小さい突起をもつものとする (Fig.3(a)).
- 方針 2⁵⁾: 色相のトランスファーファンクションは, 一定の比率 δ_h で階段状に増加 (減少) するが, CFV $f_i (i = 1, \dots, m)$ を中心とする長さ ω_h の小区間内では線形に変化するものとする. 一方, 不透明度トランスファーファンクションは, CFV $f_i (i = 1, \dots, m)$ を中心にもつ, 長さ $\omega_o (= \omega_h)$ の区間で, 基準値 α に対して, δ_o だけ上昇する (Fig.3(b)).

Fig. 3 Design principles of transfer function accentuation. (a) Principle 1; (b) Principle 2.

Fig.4 に、一般的なトランスファーファンクション、および、2つの異なるトランスファーファンクションによってメタトラスボリュームをボリュームレンダリングした結果を示す。同図から、本手法で定義したトランスファーファンクションを用いた場合よりも、一般的なトランスファーファンクションを用いた場合よりも、メタトラスの内部構造を強調して描画していることがわかる。方針1では、同相な領域では色相が線形に変化するため、対象ボリュームのフィールドの変化を視覚的に理解することが可能である。また、方針2では、同相な領域が同一の色相で描画されるため、対象ボリュームの位相構造を直観的に理解することができる。

Fig. 4 Volume rendering of *metatorus* with accentuated transfer functions. (a) Using continuous hue and flat opacity transfer functions (reference); (b) Using accentuated transfer functions according to principle 1 ($\delta_h = 2/3\pi; \alpha = 0.02; \delta_o = 0.06; \omega_o = 0.04$); (c) Using accentuated transfer functions according to principle 2 ($\delta_h = 2/3\pi; \alpha = 0.02; \delta_o = 0.06; \omega_h = \omega_o = 0.03$).

4. アプリケーション：陽子 - 水素原子衝突

61^3 ボリューム、 10^4 タイムステップからなる陽子と水素原子の衝突シミュレーションの大規模4次元データを用いて、提案手法の有効性を確認する実験を行った。シミュレーションは、基本的なイオン-原子衝突問題を扱っており、核融合、物質科学、放射線学などのアプリケーションをもつ重要な問題である。ここでは、陽子をもつ正の電荷によって、目的の水素原子付近の電子の状態がどのように変化するかを観察することが目的である (Fig.5)。3次元電荷密度分布を可視化することによって、衝突のわかりやすい画像を得ることができる。なお、実験はSGI O2システム (CPU: R10000, Clock: 195MHz, RAM: 256MB) 上で、可視化ソフトウェア AVS/Express version 5.0¹ で開発したモジュールを用いて行った。

従来の時系列ボリュームデータの解析は、主としてアニメーション生成に頼っていた⁶⁾。しかし、HRGを利用して各時刻ごとに適切なトランスファーファンクションを設計することによって、より効果的な各時刻のスナップショットを得ることができる。また、HRGの構造を調べることで、衝突の近似的な時刻を簡単に得ることがで

Fig. 5 The problem of proton-hydrogen atom collision.

きる。これは、定常状態の水素原子付近の電荷密度分布が、球状の等値面からなる完全な層構造を構成していることによる。

Fig.6 に、衝突前、衝突時、衝突後の3つのスナップショットと、HRG、全時間区間における同一目的値の等電荷密度面、および3節の方針2によって強調されたボリュームレンダリングの画像を示す。同図から、電荷密度分布の内部構造の変化をより明確に理解することができる。

5. まとめ

本論文では、時系列ボリュームデータマイニングのための3次元フィールド位相解析に基づく方法を提案した。HRGを用いてダイレクトボリュームレンダリングに適切なトランスファーファンクションを設計することによって、ボリュームオブジェクトの内部構造や複雑な振舞いを理解するための効果的な視覚の手がかりをユーザに提供することができる。

提案した方法はさらに一般化できる。例えば、スプラッティングやセルプロジェクションのようなフォワード方式のボリュームレンダリングと組み合わせることも可能である。さらに、与えられたデータセットから連続した等値面を抽出することさえできれば、本方法は入力ボリュームデータのメッシュタイプにも依存しない。

一方、現在のレーブグラフ構成法は、ボリューム境界の位相の変化に敏感であるため、フィールド区間が $[f_0, f_{m+1}]$ という、ボリューム境界を含まない狭い区間を用いてHRGを構成している。本来は、与えられたレーブグラフから有効サブグラフを抽出するアルゴリズムを開発する必要がある。また、高さ関数の軸方向により、構成されるHRGが異なってくることから、与えられたボリュームデータの特徴を考慮して、高さ関数の軸を決定するべきである。全方向 (球面) マッピングは、この問題を解決する一つの簡便な解法であるが、計算コストを解消する問題が残されている。

さらに、本手法を真のボリュームデータマイニングツールに改良していくための鍵として、HRGのLOD制御を行うためのCFVの順序付けがある。その候補としては、高さ関数の軸の摂動解析やレーブグラフの同相性の緩和などが挙げられる。

最後に、各時系列ボリュームデータから構成されたHRGを時間軸にそって並べ、より高次のHRGを構成することを考える。これにより、与えられた時系列ボリュームデータの位相変化の過程が表現されるため、これを参照することで衝突時のような臨界時刻 (critical time) を容易に得ることができる。ここで、より高次のHRGを構成するた

¹AVS is a trademark of Advanced Visual Systems, Inc.

Fig. 6 Three types of volume data mining snapshots of proton-hydrogen atom collision: HRG (top); isodensity surface with the trajectory of marching proton (middle); and accentuated volume rendering (bottom). (a) Before collision; (b) Around collision; and (c) After collision.

めには, 隣接する HRG の類似度を測定するための尺度を導入する必要がある。

謝辞

有益な意見を頂いた芽暁陽助教授 (山梨大学), 品川嘉久講師 (東京大学), 細矢治夫教授 (お茶の水女子大学), 小山田耕二助教授 (岩手県立大学), および株式会社モノリスに感謝する。本研究の一部は, 文部省科学研究費補助金基盤研究 (C)(2)11680349 によって行われたものである。

参考文献

- 1) 藤代一成: ポリウムデータマイニング, 第 28 回可視化情報シンポジウム基調講演, P2-001 (2000).
- 2) Shinagawa, Y., Kunii, T. L.: Constructing a Reeb Graph Automatically from Cross Sections, IEEE Computer Graphics and Applications, Vol.11, No.6 (1991) pp. 44–51.
- 3) Takahashi, S., Ikeda, T., Shinagawa, Y., Kunii, T. L., Ueda, M.: Algorithms for Extracting Correct Critical

Points and Constructing Topological Graphs from Discrete Geographical Elevation Data, Computer Graphics Forum, Vol.14, No.3 (1995) pp.181–192.

- 4) Fujishiro, I., Azuma, T., Takeshima, Y.: Automating Transfer Function Design for Comprehensible Volume Rendering Based on 3D Field Topology Analysis, Proc. IEEE Visualization'99 (1999) pp. 467–470, p. 563.
- 5) Fujishiro, I., Azuma, T., Takeshima, Y., Takahashi, S.: Volume Data Mining Using 3D Field Topology Analysis, To appear in IEEE Computer Graphics and Applications, Vol.20, No.5 (2000).
- 6) Fujishiro, I., Maeda, Y., Sato, H., Takeshima, Y.: Volumetric Data Exploration Using Interval Volume, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol.2, No.2 (1996) pp.144–155.
- 7) Taubin, G.: A Signal Processing Approach to Fair Surface Design, Computer Graphics Proceedings (1995) pp.351–358.
- 8) Kier, L. B., Hall, L. H.: Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research, Academic Press (1976).