A103

四面体マッチング法によるスカラボリュームデータの類似度算定

酒井 晃二[○] (京都大学), 南 智規 (京都大学), 小山田 耕二 (京都大学)

Tetrahedron matching method for detecting scalar volume similarity

Koji SAKAI, Tomoki MINAMI and Koji KOYAMADA

ABSTRACT

Traditional classifying and searching systems have required special features of data from manual input. To overcome this undesirable task, a method which automatically creates and utilizes a "Critical Point Graph (CPG)" as an index of volume data has been proposed. In order to achieve suitable search and classification results, it is required to automatically calculate similarity between CPGs from a set of selected volume data. We introduce a new feature-matching algorithm to make an exact correspondence of positions between two CPGs. This is an extension of "Triangular Matching Algorithm" which is usually employed in the field of 2D fingerprint matching. In order to evaluate the effectiveness, we evaluated the influence of data resolution and arrangement in our proposed CPG based method. We confirmed the effectiveness and usefulness of our proposed CPG based method when applied to numerically constructed weather volume data sets. From computational experiments, our new CPG method has shown suitable ability for similarity calculation between two dissimilar volume data.

Keywords: Tetrahedron Matching, Similarity, Volume data

1. はじめに

一般に、膨大な数値データから新たな知見を得るためには、ニーズに合わせて高速に検索する仕組みが求められる。この仕組みにおいて、入力されたデータから(i)「特徴」を抽出し、(ii)その特徴に基づいてインデックスが生成され、インデックスを基にデータが検索されることが望ましい。検索においては、(iii)インデックス間の類似度を算出、評価する必要がある。これら(i)~(iii)の手続きが、ほぼ自動的にストレスのない時間内で処理されることが理想とされる。

本報において、我々は三次元データ空間に離散的に数値が定義されたデータ（以下、ボリュームデータ）を対象として、「特徴」に基づくボリュームデータ間の類似度を自動算定する仕組みを提案する。ボリュームデータの特徴には「特異点」および「積分曲線」から構成される特異点グラフ (CPG; Critical Point Graph, 以下, CPG) を用いる。CPG の構築手法および特異点、積分曲線は第2章において詳述する。

本報の構成は、以下の通りである。第2章において、提案手法である CPG を用いた類似度算出手法について詳述する。第3章では、四面体を用いたボリュームデータの類似度算定手法を提案する。第4章では実験に用いるデータおよび実験方法について述べる。第5章では、得られた結果を考察し、提案手法の有用性に言及する。最後に、第6章において、本報をまとめ、今後の展開について展望を述べる。

2. 特異点グラフを用いた類似度計算手法

本報において、以下の手続きにより作成される CPG を用いて類似度を算出する手法を「CPG 法」と呼ぶ。

2.1 CPG の構築

以下、(1)~(4)に CPG の構築手法を述べる。

(1)特異点 (CP; Critical Point) の抽出

ボリュームデータから勾配ベクトルを算出し、スカラ値が定義されている立方体において、勾配ベクトルが0となる点を CP として探索する¹⁾。CP 算出過程において、立方体内の勾配ベクトルの補間には、三重線形補間法を用いた。また、本報では、対象となる格子点の隣接格子点におけるスカラ値から、差分近似法を用いて勾配ベクトルを算出した。CP の分類は、Helman ら²⁾の方法に従った。

(2)データ境界特異点 (BCP; Boundary Critical Point) の抽出

ボリュームデータ内部の CP だけの考慮では、境界面上のスカラデータがグラフ構造に反映されないという問題を生じる。BCP を設定することにより、データ境界のスカラ値がグラフ構造に反映されるため、より適切なグラフ構造を構築することができる。ボリュームデータの境界面は二次元の正方格子で構成されているため、BCP は二次元空間における CP となる。BCP の算出方法、分類方法は、2.1(1)に従った。

(3)積分曲線の算出

CP 付近で積分曲線開始点を設定し、積分曲線を算出する。開始点の設定手法は、小山田らの方法¹⁾に従った。

本報において、ボリウムデータの立方格子間隔を d と定めた場合、積分曲線開始点は鞍点から固有ベクトル方向に $0.5d$ 移動した点の座標を用いた。また、積分には、2 次ルンゲクッタ法を用いた。積分曲線の終了条件は、積分曲線端の積分点が CP もしくは BCP と $0.5d$ まで接近した場合と定めた。

(4) 不要 BCP と不要積分曲線の削除

上記(3)までの処理において、与えられる場によっては、CP 間もしくは CP と BCP 間を接続していない積分曲線や、どこにも接続していない BCP が存在する。そこで、以下の条件に合う BCP および積分曲線を削除する。

- ①両端が CP および BCP に接続していない積分曲線
 - ②積分曲線に接続していない BCP
 - ③特定の CP と鞍点間に 2 本以上の積分曲線が存在する場合、最短経路の積分曲線を除くすべての積分曲線
- ①～③の操作により、グラフ構造構築において、必要以上の BCP および積分曲線を削除する。

2.2 CPG マッチングアルゴリズム

CPG 間の位置合わせおよび類似度算出手法を以下に示す。

(1) CPG 間の位置合わせアルゴリズム

CPG を構成する CP 集合を利用して CPG の正規化を行うことにより、2 つの CPG 間の位置合わせを行う。CPG の正規化は、以下の①～③過程を経て行われる。

①CP 集合の重心を基準とする平行移動

CP 集合の重心を算出し、データ空間の原点位置に並行移動する。

②CP 集合の主成分分析を用いた回転軸の設定

CP 座標の各成分を用いて分散共分散行列を算出する。分散共分散行列 M_1 は以下のように表される。

$$M_1 = \begin{bmatrix} V_x^2 & C_{xy} & C_{xz} \\ C_{yx} & V_y^2 & C_{yz} \\ C_{zx} & C_{zy} & V_z^2 \end{bmatrix} \quad (1)$$

ここで V_x^2 , V_y^2 および V_z^2 は、それぞれの座標成分の分散、 C_{xy} , C_{yz} および C_{zx} は 2 つの座標成分の間の共分散を表す。 M_1 の固有値、固有ベクトルを算出する。最大の固有値に対応する固有ベクトルが CP 集合の第 1 主成分軸となる。 M_1 を用いて、以下の行列 M_2 を算出する。

$$M_2 = M_1 - \lambda \begin{bmatrix} v_x^2 & v_x v_y & v_x v_z \\ v_y v_x & v_y^2 & v_y v_z \\ v_z v_x & v_z v_y & v_z^2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

ここで、 λ は行列 M_1 の最大固有値を表し、 v_x , v_y および v_z は行列 M_1 の最大固有値に対する固有ベクトルの各成分を表す。この行列 M_2 の最大固有値に対する固有ベクトルが CP 集合の第 2 主成分軸である。第 1 主成分軸をデータ空間の X 軸に、第 2 主成分軸が Y 軸に一致するように回転行列を算出し、CPG を回転させる。

③CPG スケールの正規化

CPG 内で用いられる座標系は、ボリウムデータのスカラ値が定義されている格子サイズに依存する。そのため、解像度がそれぞれ異なるボリウムデータ群から構築された CPG 間の類似度は単純には比較できない。CPG の大きさを正規化することにより、解像度が異なるボリウムデータから構築された CPG 間の類似度計

算を可能とする。

尚、CPG の正規化に用いる CP 集合には、BCP を含まないものとした。

2.3 CPG を用いた類似度算出

(1) 類似度計算手法のためのデータ空間分割

CPG を構成する各 CP および積分曲線構成点の座標値を用いて、2 つの CPG に共に外接する直方体を構成する。次いで、この外接直方体の X 軸、Y 軸および Z 軸を任意の定数 n で分割する。これらの小領域を、CPG 間の類似度を計算する際の分割領域とし、類似度計算に用いる。

(2) 類似度算出方法

CPG 間の各構成 CP および積分曲線構成点の位置情報比較は、ボリウムデータ間のスカラ値勾配を比較することと同義である。そこで、2 つの CPG 間の各構成 CP および積分曲線構成点の位置を比較することで類似度を計算する。2.3(1)において生成した小領域中で、CP および積分曲線構成点が存在する小領域を比較することにより類似度を計算する。以下に CPG_A と CPG_B との間の類似度 S を算出する計算式を記す。

$$S = \frac{N_{match}}{N_A + N_B - N_{match}} \quad (3)$$

ここで、 N_A および N_B は、それぞれの CPG が存在する小領域の総数を表し、 N_{match} は 2 つの CPG 間で一致した小領域の数を表す。

3. 四面体マッチング法を用いた類似度算定

第 2 章で示した CPG 法は、比較 CP 数が少ない場合、一つの CP の欠損により、正規化パラメータが変化し、類似度計算結果に影響する。また、同手法は、一部分の領域が重なるデータ間での類似度算定に対応していない。この問題に対応するため、類似した領域を基準に比較対象のボリウムデータから構築された CPG 間のレジストレーション手法を提案する。本報では、類似領域の重ね合わせを行うアルゴリズムとして、指紋認証分野で用いられている Triangular Matching algorithm³⁾ をボリウムデータに適用範囲を拡張した四面体マッチングアルゴリズム (TM; Tetrahedron Matching, 以下, TM 法) を提案する。

3.1 四面体マッチングアルゴリズム

ボリウムデータから抽出された CP をマニューシャ⁴⁾として扱い、4 点の CP から構成される四面体を基準にレジストレーションを行う。ここで、比較する 2 つの CPG のうち、CP 数がより少ない CPG を“Refer”，

Fig. 1 Data (A) and choosing tetrahedron from CPs

CP 数が多い CPG を“Test”と呼ぶことにする。以下、(1)～(3)の手続きを経てマッチングを行う。

(1) Refer から四面体 T_{ref} を選択

Refer に含まれる CP 集合から 1 つの四面体を選択する方法には、全ての CP から 4 点の CP セットを全て選択することも考えられるが、構成 CP 数が多い場合には、組み合わせの数が増え、計算コストが $O(n^3)$ で増大する(n は CP 数)。そこで、CPG が積分曲線によって CP 間のつながりを持つことを利用する。積分曲線の計算は、CP のうち鞍点付近から開始される。そこで、四面体を構成する 4 点のうちの 1 点として鞍点を選択する。この点を“root”と呼ぶ。root と積分曲線によって接続される CP 群から 3 点を選択し、四面体を構成する。この場合の CP 群には、BCP を含まないものとした。Fig.1(b) に CPG から 1 つの四面体を選択するイメージを表す。3 点の CP 選択は、全ての組み合わせについて、繰り返し検討する。ここで選択された四面体群を“ T_{ref} ”とする。もし、root と接続される CP 数が 3 点未満の場合には、異なる鞍点を root として選択し直す。

(2) Test からの相似形状四面体探索と T_{ref} との対応

T_{ref} の選択手法と同様に、Test から四面体“ T_{test} ”を選択する。次に、 T_{ref} と T_{test} が相似四面体であるかを判定する。 T_{ref} と T_{test} を構成する頂点中の root を互に対応させる。他の 3 頂点の対応には、CP の種類(maximum, minimum, saddle)を利用する。 T_{ref} と T_{test} において、対応する辺の長さの比 r_i を求めることにより、相似の度合を評価する。

$$r_i = \frac{l_{r_i}}{l_{t_i}} \quad \{i=0, \dots, 5\} \quad (4)$$

ここで、 i は 2 つの四面体間に対応する辺の識別子を表し、 l_{r_i} は T_{ref} の i 辺の長さを表す。2 つの四面体間の相似度合が高い場合は、6 つの辺の比 r はほぼ一致するが、相似性が低い場合は、その比にばらつきが生じる。このばらつきを評価するため、次の変数 c_{ij} を計算する。

$$c_{ij} = \frac{r_j}{r_i} \quad \{i, j=0, \dots, 5\} \quad (5)$$

これら 36 個の変数がすべて(6)式を満たす場合、2 つの四面体 T_{ref} と T_{test} は相似関係にあると判定する。

$$0.95 < c_{ij} < 1.05 \quad \{i, j=0, \dots, 5\} \quad (6)$$

(3) 四面体を基準とした CPG 間のレジストレーションおよび類似度計算

相似である 2 つの四面体 T_{ref} と T_{test} を用いた CPG 間のレジストレーションおよび類似度計算処理の過程を以下に示す。

- ① root をデータ座標系の原点に平行移動
- ② 四面体を基準とした CPG のスケールリング
- ③ 面体を基準とした CPG の回転操作
- ④ CPG 間の類似度計算

類似度計算は、CP 数が少ない Refer を基準とする。Refer の CP 群、BCP および積分曲線構成点の座標値を用いて、Refer に外接する直方体を形成し、その外接直方体の X 軸、Y 軸および Z 軸を一定数 n で分割することにより、類似度計算に用いる小領域を作成する。類似度計算は、第 2 章に示した方法と同様である。

4. 実験

計算機環境には、CPU: PentiumM 1.1GHz, Memory :

760MB, OS : WindowsXP を用いた。

Table1 Volume data sets

Name	Attribute	Resolution
A	Scalar volume data (basis)	25×25×25
B	90° rotation around X-axis	25×25×25
C	90° rotation around Y-axis	25×25×25
D	90° rotation around Z-axis	25×25×25
E, F	a part of data (A)	13×19×19
G	mirror data of data (A)	25×25×25
H	data (A) minus const. value	25×25×25

類似度計算および比較に用いたボリュームデータを Table 1 および Fig.1(a)に示す (データは、AVS Express® に内蔵される wind.fld の x 成分値の一部である。)。Data(A)～Data(F)間で総当り組み合わせにより、ボリュームデータ間の類似度を算定した。また、類似度計算に用いる外接直方体の分割数は 32 とした。

5. 結果と考察

Fig.2(a)および Fig.2(b)にそれぞれ、CPG 法および TM 法を用いて算定した Data(A)～Data(G)間の類似度を示す。また Table2 と Table3 は、それぞれの類似度計算に要する計算時間 (ms) を示す。計算時間は、10 回平均値である。

Fig. 2 Results of similarity measure

Table 2 Computation time when using CPG method

Name	A	B	C	D	E	F
A	3.7	2.9	2.6	3.5	3.3	3.7
B	2.9	3.8	3.4	4	3.6	3.4
C	2.6	3.4	3.6	3.6	2.8	3
D	3.5	4	3.6	4.2	3	2.9
E	3.3	3.6	2.8	3	2.5	2.7
F	3.7	3.4	3	2.9	2.7	2

[ms]

5.1 データ回転による類似度の変化

Data(A)～Data(D)間の類似度を比較した結果 (Fig.2(a) および(b)), CPG 法, TM 法ともに、類似度計算にデータ回転変形の影響を受けないことが分かり、両手法ともに意図通りの動作をしていることを確認した。

Table 3 Computation time when using TM method

Name	A	B	C	D	E	F
A	18.5	47	14.1	14.7	48.3	0.1
B	47	15	64	59.9	48.5	0.1
C	14.1	64	17.4	14.2	46	0.1
D	14.7	59.9	14.2	15.6	48.5	0.1
E	48.3	48.5	46	48.5	8.2	0.1
F	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

[ms]

5.2 領域を切り出したボリュームデータとの類似度計算

Data(A)と Data(F), または, Data(A)と Data(G)間の類似度は, CPG 法を用いた場合 (Fig.2(a)) では, どちらのデータ間においても, 非常に低い類似度を算定した. これは, CPG 法が, 比較するデータ領域で過不足なく CPG が抽出されていることを前提とした手法であることに原因がある. 一方, TM 法 (Fig.2(b)) では, Data(A)と Data(F)間の類似度が計算され, 比較的高い数値を示した. しかしながら, Data(A)と Data(G)間の類似度は算定されなかった. これは, TM 法における四面体の対応付け方法に起因するものである. Fig.3 に Data(F)と Data(G)から抽出された CPG を示す.

(a) Data(F) (b) Data(G)
Fig.3 Extracted CPG from Data (F) and Data (G)

TM 法における四面体の対応付けにおいては, 積分曲線により互いに接続されている CP 数が 3 以上ある鞍点の存在が必要である. Data(F)はこの場合に相当する. しかしながら Data(G)のように, 接続 CP 数が 3 以上ある鞍点が存在しない場合は, TM 法によるレジストレーションが不可能となる. 以上の結果, TM 法においては, 接続 CP 数が 3 以上ある鞍点が必要であり, 適用範囲の限界を有している.

5.3 鏡像データとの類似度 : Data(A)と Data (G) の比較

Data(A)と (H) は鏡像関係にあり, それぞれから得られる CPG 間にも鏡像関係が残る. そのため, CPG 法では, 類似度が完全に 0 にはならない. 一方, TM 法を用いた場合, Data(A)と (H) 間で類似の四面体を抽出した. しかしながら, TM 法は鏡像データの特定に対応していないことから, 類似度は 1 にならない.

5.4 類似度計算時間の比較

Table 3 に TM 法による類似度計算時間を示す. まず, Data(F)と他のデータとの間で類似度を計算する場合, 他の場合と比べて突出して計算時間が短い. Fig.3(b)に記されている Data(F)と他のデータとの間の類似度は, 全て 0.0 になっている. これは, Data(F)の CPG から TM

法に必要な四面体を構成する鞍点が存在しないことにより, 類似度計算が打ち切られたことを表している.

同一データ間での類似度計算時間は, 四面体を構成できるデータ間の類似度計算時間においては, 他と比較して早い. TM 法の計算過程は, 大きく 2 つのステップに分けられており, 第一ステップでは, 互いに相似な四面体を全て探索する. 第二ステップでは, 選択された四面体を基準にレジストレーションを行い, 類似度を計算する. 第二ステップでは, 計算中に類似度が 0.99 以上になった場合, 処理を終了するように定めている. そのため, 同一データ間の類似度計算は, 第二ステップにかかる時間が短くなり, 全体の計算時間も短くなったと考えられる. Table 4 に Data(A)同士間, Data(A)と Data(B)間の類似度計算に伴う第一ステップおよび第二ステップの計算時間を記す.

Table 4 Calculation time for step1 and step2

Data	Step1	Step2
A-A	2.0	13.0
A-B	2.0	38.0
A-E	3.8	91.2

[ms]

6. まとめ

スカラボリュームデータから特徴を抽出し, 類似度を算定する手法として, CPG 法および TM 法を提案した. CPG 法は, 同一解像度のデータ同士の比較を想定したものであり, TM 法は, 解像度によらない方法である. CPG 法では, 同一解像度のデータ同士の比較において良好な類似度算出結果を得た. また, TM 法では, 一部分の類似度を算定できることを示した.

TM 法は, レジストレーションの鍵となる root 鞍点の存在が必要であり, これが存在しない場合には, 類似度を算出することが出来ないという問題点がある. このような問題では, そもそも CP 数が少ない場合が考えられる. そのような場合には, CPG 法を用いることによって現実的な計算時間で目的を達するものと考えられる. このような場合に対応した検索システムの開発が, 今後の課題となる.

謝辞

本研究の一部は, 文部科学省科学研究費補助金 (若手研究者(B)17700293) の支援を受けて実施されたものである.

参考文献

- 1) 小山田耕二, 土井章男, 千葉則茂, 三中西信治, “四面体格子を用いた渦の可視化—数値流体シミュレーションへの適用—”, 電子情報通信学会論文誌 D-II, Vol. J79-D-II, No.11, pp.1871-1878
- 2) Helman, J.L., Hesselink, L., “Visualization of Vector Field Topology in Fluid Flows”, IEEE Computer Graphics and Applications, Vol.11, No.3 (1991), pp.36-44
- 3) Kovacs-Vajna, Z.M., “A fingerprint verification system based on triangular matching and dynamic time warping”, IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.22, No.11 (2000), pp.1266-1276