

大規模データ可視化におけるレベルセットグラフの可能性

東北大学・流体科学研究所 藤代 一成 (Issei Fujishiro)

Institute of Fluid Science,

Tohoku University

東京大学・大学院新領域創成科学研究科 高橋 成雄 (Shigeo Takahashi)

Graduate School of New Frontier Sciences,

The University of Tokyo

東北大学・流体科学研究所 竹島 由里子 (Yuriko Takeshima)

Institute of Fluid Science,

Tohoku University

1 データ危機

数値シミュレーションや計測を行うための環境の劇的な進歩によって、日常的に取り扱うデータの量は飛躍的に増大している。たとえば1つのランにつき、現在利用可能なGPUの3Dテクスチャマッピング機能を用いて、効率的にレンダリングできる 256^3 の1バイト長3次元規則格子データ（ボリュームデータ [1]）を、1万タイムステップとすると仮定しよう。4種類の関連物理パラメータに対して各々8点だけ代表値をとったとしても、対照実験に必要なデータの総量は、簡単な計算により8ペタバイトにも達してしまうことがわかる。このような大規模時系列データのすべてを可視化して比較することは至難の業である。実際には、分野固有の知識や経験に頼って深く見るべきランを絞り込み、さらに時区間を限定してアニメーションを制作するような「見せない可視化 (selective visualization)」が現実的な解となるはずである。

ところで、3次元の中身の詰まった情報を2次元のスクリーンに投影するのであるから、所詮何かを犠牲にしなければならない。しかし、

- どの位置でどちらの方向に断面を切ればよいのか？
- どの目的値で何枚の等値面を抽出すれば十分か？
- どのようなカラーと不透明度への伝達関数 (transfer function) を用意すれば、遮蔽効果を極小化して対象データの特徴を捉えられるのか？

これらはどれ一つとっても、スナップショットのボリュームに対してさえ難しい問題である。そのうえ、曖昧にしか定まらない方針にそって時系列ボリュームデータをアニメーション化してみても、何も視覚的に捕捉できていないことが判明したら、また最初からやり直しである。こうした試行錯誤の果てに、我々は未処理のデータの山を築いてはいないだろうか？ここでは、この問題をデータ危機 (data crisis) とよぶことにする。

2 レベルセットグラフとボリュームデータマイニング

我々は、このようなデータ危機に挑み、大量の時系列ボリュームデータから有用な情報を探り出すために、ボリュームデータマイニング (VDM: Volume Data Mining) [2, 3] のツールを研究開発する T (Topology) - プロジェクトを1999年から推進してきた [4, 5, 6]。

そこでは、ボリュームデータの汎用的視覚探索環境を実現することを目的として、データの局所的な性質だけでなく、大局的な傾向も同時に把握することができる特長をもつ、微分位相幾何学 (differential topology) の知見を利用するという一貫した姿勢をとってきた。その中心となるコンセプトは、スナップショットボ

リウムの位相骨格を表現する VST (Volume Skeleton Tree)[7] である。VST はボリウムデータの特徴を、等値面の生成・消滅・併合・分岐を特徴づける、臨界点 (critical point) の接続関係によって表現したレベルセットグラフ (level-set graph) の一種である (図 1(a) 参照)。我々は、独自の適応的四面体分割と位相骨格の簡単化に基づいて、複雑な内部構造やノイズ成分をもつボリウムデータからでも、効率的かつ頑健に多重解像度の VST を抽出するアルゴリズムを開発した [8]。

こうして抽出された VST をベースとして、我々はこれまでに、スナップショットボリウムに対して以下に示すような 5 種類の VDM ツールを実現してきた。

1. 臨界点ヒストグラム [9]

スカラ値方向の臨界点の個数分布を、臨界点ヒストグラム (critical point histogram) とよぶ。これを参照し、臨界点が特に集中するスカラ値周辺から、色伝達関数の色相角速度を相対的に高くした等値面を選択的に抽出することによって、識別性が高く、豊富な情報量をもつ半透明等値面群を描くことができる。

2. 臨界等値面/代表等値面 [10]

一つ以上の臨界点を通過する臨界等値面 (critical isosurface) は位相変化の様子を、同相のスカラ区間の中央値で抽出される代表等値面 (representative isosurface) はボリウム骨格の全体像を把握するのにそれぞれ有効である。

3. 等値面の包含関係の抽出 [11]

VST のリンクパターンを解析することにより、同一のスカラ値をもつ等値面の連結成分同士が入れ子状をなす現象を同定することができる。この場合は、深い位置にある連結成分の不透明度を相対的に高く設定することによって、浅い位置の連結成分に隠されてしまうことを防ぐことができる。

4. 多次元位相属性 [12, 13]

VST に直接的に記述されている臨界点の分布に加え、VST から導出される等値面の包含レベル・軌道距離・種数変化等の位相属性を複数組み合わせた多次元伝達関数 (multi-dimensional transfer function) を用いることによって、対象ボリウムの局所的かつ大局的な特徴を効果的にレンダリングすることができる。

5. 区間型ボリウム分解 [14]

VST の各リンクが区間型ボリウム [15] の連結成分と一致する事実を利用し、VST の組織的な走査によって、ボリウムの外側から順に同相な部分ボリウム領域を半自動的に取り除いていくことができる。

ここで、多次元伝達関数の効果を示す事例をひとつあげよう。図 1 は、レーザ核融合の爆縮シミュレーションから得られた、ある特定時刻の質量密度データ [13] の可視化結果である。この質量密度データの等値面は燃料とプッシャーの接触面を表しており、あるスカラ値区間では、複数の等値面成分のうちひとつの等値面成分がその他の等値面成分を包含していることが知られている。このとき外側の等値面成分は燃料とプッシャーの作用・反作用によって生じる不要な面であり、観察者の主たる興味の対象は内側の等値面成分だけである。

図 1(a) に、この爆縮シミュレーションデータの VST を示す。リンクの横の数字は対応するリンクの入れ子レベルを表している。この VST は、既に簡単化が施されており、爆縮データの大局的な構造を効果的に表現している。

まず、ハット型の 1 次元不透明度伝達関数を用いて代表等値面を強調したボリウムレンダリング画像を図 1(b) に示す。この図から、一定の内部構造が視認できても、外側の球状の等値面成分が全体を覆っているため、実際に観察したい入れ子構造の内部が見えにくいという問題が生じていることがわかる。

これに対し、図 1(c) のように従来のスカラ値に加え、VST の入れ子レベルを定義域とする 2 次元伝達関数を用いて、外側に存在する等値面成分の不透明度を低くしながら内側を高くすると、先の例では観察しにくかった内部構造を明瞭に可視化することができる。

さらに、図 1(d) のように、入れ子レベルが 0 のとき不透明度が 0 になるように不透明度伝達関数を制御すれば、入れ子構造の内部だけを視覚的に抽出することもできる。

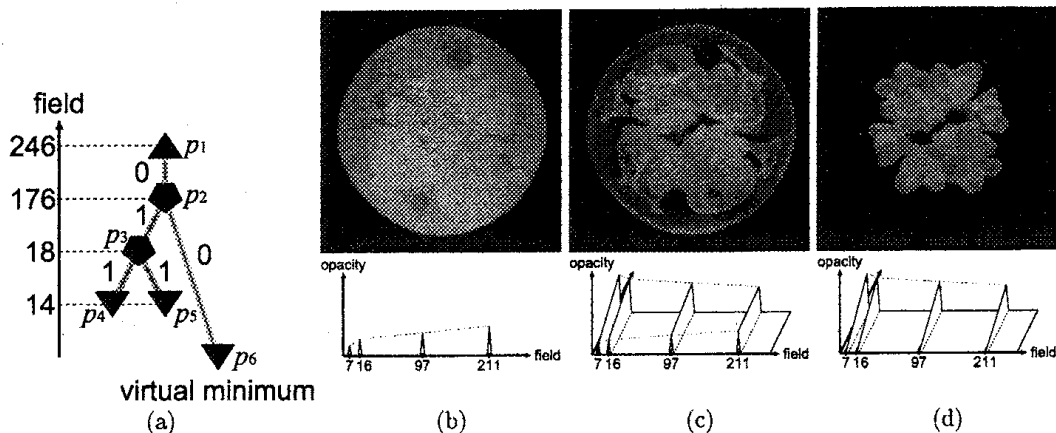


図 1: レーザー核融合爆縮データの可視化: (a) VST; (b) 位相構造を強調したスカラ値を変数とする 1 次元不透明度伝達関数; (c) スカラ値および入れ子レベルを変数とする 2 次元不透明度伝達関数; (d) 入れ子の内部構造だけを強調する 2 次元不透明度伝達関数

3 時系列ボリュームデータマイニング

前節で述べたようなスナップショットボリュームの可視化がいくら洗練化されても、大規模な時系列データのすべてを視覚的に比較することは難しい。そこで我々は、微分位相幾何学の知見利用を時系列ボリュームデータへも拡張する試みを実施してきた。図 2 にそのフレームワーク [16, 17] を示す。ここでは最初から対象の時空間をアニメーション化せずに、その代わり T-IS (Topological Index Space, 位相索引空間) とよばれる帯状の時系列データプロファイルをユーザに提供する。

T-IS を構成するには、まず各時刻のスナップショットボリュームから抽出された VST を固有値解析し、位相索引 (topological index) とよばれる特徴量に変換した後、擬似カラー符号化し一列に並べればよい。図 2 では、水素原子に陽子を衝突させる数値シミュレーションにおける電子の電荷密度分布データ (1 万ステップ) [15] の時間変化を 100 分の 1 にダウンサイズした T-IS が示されている。明るい箇所ほど位相的に複雑であることを示しているため、ユーザはここから、位相的な意味で衝突に伴う複雑な現象が生じている時区間を特定することができる。

次にこの T-IS を、位相変化を起こしているスカラ値を臨界点の種別ごとにトレースできる拡大 T-IS (expanded T-IS) に展開する (expanding)。ユーザは特定された時区間で今度は標的とすべきスカラ値の範囲を特定することができる。さらに同様のランが複数あるならば、T-IS や拡大 T-IS 同士を比較することにより、実際の可視化を行わなくても、物理パラメータ間の因果関係のある程度特定することも可能になる。

この時点で、高次記憶デバイスから仮想記憶領域に必要なデータフラグメントだけを選択的にローディング (selective data migration) し、その部分時空間に対して適正にチューニングされた伝達関数を用いて、情報量の豊富なアニメーションを効率的に制作することができる。このような「見せない可視化」は、

昨今 HPC 環境と結合する環境で頻繁に見られる、与えられたデータを力任せにすべて可視化しようとする“out-of-core visualization”の概念と好対照をなしている。

さらにユーザは、アニメーションを観察した結果から、特に観察したい時刻を特定して、対応するスナップショットのボリュームを、前節で説明した VDM ツールを利用してプロービング (probing) することもできる。たとえば、臨界等値面や代表等値面の形状をつぶさに解析し、その近傍を強制的に描く伝達関数を用意すれば、微分位相幾何学的な特徴が明確に伝わるボリュームレンダリング像を半自動的に得ることができる。図 2 では実際に、衝突直後に陽子から水素原子核に迂回して戻ろうとする、電荷の特徴的な歪みのパターンを伴う電子雲が得られている。

こうした一連の流れから得られた情報をベースにすれば、詳細に解析すべき時区間を限定して、より細かいタイムステップで、しかも必要ならば関連物理パラメータ値を調整したうえで、再計算を実行することができる。これが適応的ステアリング (adaptive computational steering) であり、このフィードバックループは、従来のポスト処理としての可視化を、プレ処理としても活かす情報ドリルダウン (information drill-down) の中核をなしている。

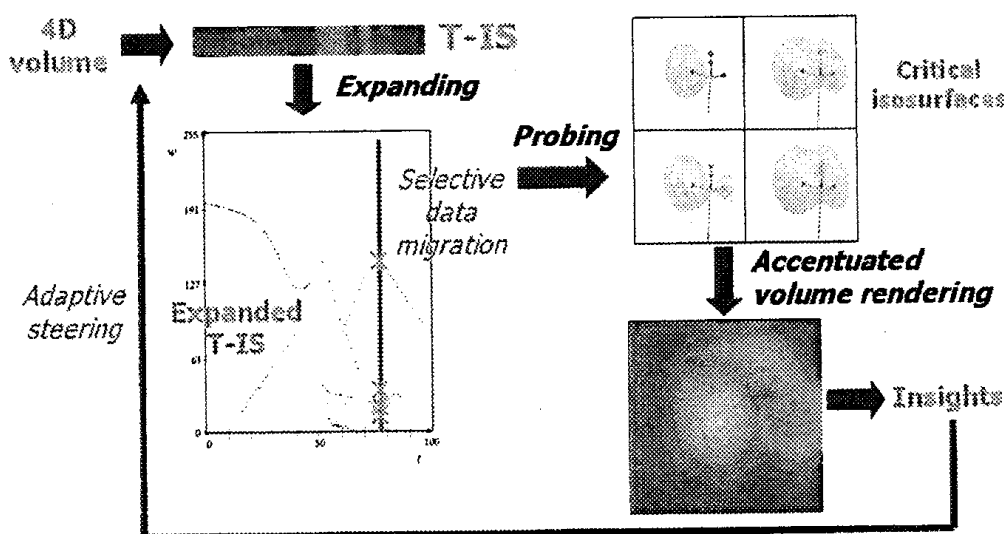


図 2: T-map : 時系列ボリュームデータマイニングのフレームワーク

4 セレンディピティの科学

本稿では、大規模な時系列ボリュームデータから重要な特徴を効果的に捉えるために、システム側がユーザとコラボレーションしてパラメータ調整 (parameter tweaking) を行い、適切な可視化を実行する枠組みを実現しようとする筆者らの試みを紹介してきた。

今後も、「セレンディピティ (serendipity)」を必然化するという大きな命題に向かって、微分位相幾何学のような数理的原理の採用によるツールの汎用化を進めていきたい。その一方で、ツールを特化し、現場で積極的に利用されるようにするには、各分野固有の知識や経験をデータベース化して取り込む努力も同時に継続していく必要があると考えられる。

謝 辞

これまで T-Project に参加してくれたお茶の水女子大学大学院人間文化研究科の院生諸姉に感謝する。図 1 で使用した爆縮データは、兵庫県立大学の坂上 仁志 助教授から提供されたものである。本研究の一部は、科学研究費補助金 基盤 (C) 11680349, 13680401, 奨励 12780185, 若手 (B) 14780189, ならびに株式会社富士総合研究所, 株式会社 三菱プレシジョン, 大川情報通信基金からの奨学寄附金によって行われたものである。

参考文献

- [1] 中嶋 正之, 藤代 一成 (編著): コンピュータビジュアライゼーション, 共立出版, 2000 年 11 月
- [2] 藤代 一成: 「ボリュームデータマイニング (オーガナイズドセッション『ボリュームデータマイニング』基調講演)」, 可視化情報学会誌, vol. 20 Suppl., no. 1 (第 28 回可視化情報シンポジウム講演論文集), 2000 年 7 月, pp. 161-162
- [3] Fujishiro, I., Azuma, T., Takeshima, Y. and Takahashi, S.: "Volume Data Mining Using 3D Field Topology Analysis," *IEEE Computer Graphics and Applications*, vol. 20, no. 5, pp. 46-51, September/October 2000.
- [4] 藤代 一成, 高橋 成雄, 竹島 由里子, 大塚 理恵子, 徳永 百重, 安藤 祥子: 「T-Project: 位相構造に基づくボリュームデータマイニング」, 可視化情報学会誌, vol. 22 Suppl., no. 1 (第 30 回可視化情報シンポジウム講演論文集), 2002 年 7 月, pp. 145-146
- [5] 竹島 由里子, 高橋 成雄, 藤代 一成: 「ボリューム位相構造を用いたボリュームビジュアライゼーション」, 可視化情報学会誌, vol. 25, no. 96, pp. 31-34, 2005 年 1 月
- [6] 藤代 一成, 高橋 成雄, 竹島 由里子: 「大規模データ可視化におけるレベルセットグラフの可視化」, 計算工学, vol. 10, no. 1, pp. 11-14, 2005 年 1 月
- [7] Takahashi, S., Takeshima, Y. and Fujishiro, I.: "Topological Volume Skeletonization and Its Application to Transfer Function Design," *Graphical Models*, vol. 66, no. 1, pp. 24-49, January 2004.
- [8] Takahashi, S., Nielson, G. M., Takeshima, Y. and Fujishiro, I.: "Topological Volume Skeletonization Using Adaptive Tetrahedralization," in *Proc. Geometric Modeling and Processing 2004*, Beijing, IEEE Computer Society Press, April 2004, pp. 227-236.
- [9] Takeshima, Y., Terasaka, H., Takahashi, S. and Fujishiro, I.: "Applying Volume-Topology-Based Control of Visualization Parameters to Fluid Data," in *CD-ROM Proc. 4th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing*, Chamonix, June 2003.
- [10] 徳永 百重, 竹島 由里子, 高橋 成雄, 藤代 一成: 「位相解析に基づくボリュームビジュアライゼーションの高度化」, 画像電子学会誌, vol. 32, no. 4, pp. 418-427, 2003 年 7 月
- [11] Takahashi, S., Takeshima, Y., Fujishiro, I. and Nielson, G. M.: "Emphasizing Isosurface Embeddings in Direct Volume Rendering," in *Book on Dagstuhl Seminar on Scientific Visualization 2003*, Springer-Verlag, 2005, (To appear).
- [12] Takeshima, Y., Takahashi, S., Fujishiro, I. and Nielson, G. M.: "Introducing Topological Attributes for Objective-Based Visualization," in *DVD Proc. IEEE Visualization 2004 (Poster)*, Austin, October 2004, pp. 85-86.

- [13] Takeshima, Y., Takahashi, S., Fujishiro, I. and Nielson, G. M.: "Introducing Topological Attributes for Objective-Based Visualization of Simulated Datasets," in *Proc. Volume Graphics 2005*, Stony Brook, IEEE Computer Society Press, June 2005, (To appear).
- [14] Takahashi, S., Fujishiro, I. and Takeshima, Y.: "Interval Volume Decomposer: A Topological Approach to Volume Traversal," in *Proc. Visualization and Data Analysis 2005*, San Jose, SPIE, January 2005, (To appear).
- [15] Fujishiro, I., Maeda, Y., Sato, H. and Takeshima, Y.: "Volumetric Data Exploration Using Interval Volume," *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, vol. 2, no. 2, pp. 144-155, June 1996.
- [16] 大塚 理恵子, 藤代 一成, 高橋 成雄, 竹島 由里子: 「T-map : 位相的特徴解析に基づく時系列ボリュームデータマイニング手法」, 画像電子学会誌, vol. 31, no. 4, pp. 504-513, 2002 年 7 月
- [17] Fujishiro, I.: "T-Map: A Topological Approach to Time Series Volume Data Mining," *Science & Technology in Japan*, vol. 22, no. 86, pp. 6-11, July 2003.