

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2014

課題番号：25540041

研究課題名(和文) 特異ファイバーの分類に基づく多値関数データの特徴解析と可視化

研究課題名(英文) Visual analysis of Multi-valued function data via classification of singular fibers

研究代表者

高橋 成雄 (Takahashi, Shigeo)

東京大学・情報理工学(系)研究科・准教授

研究者番号：40292619

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、多値関数のサンプルデータの特徴抽出および可視化手法として、多値関数の逆像であるファイバーのトポロジー変化の追跡と、そのトポロジー変化に対応する特異ファイバーのトポロジー型の分類に関する計算アルゴリズムを整備した。特に関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ さらにはファイバーが点に縮退してしまう $f: R^2 \rightarrow R^2$ の場合において、ファイバー追跡のための計算アルゴリズムを実装した。そして、この実装したアルゴリズムを基礎に、数学者が特定の多値関数の微分トポロジーを解析できる可視化システム構築、複数のスカラー属性値を用いた3次元形状検索、多値フィールド地理情報の対話的可視化などの問題に応用した。

研究成果の概要(英文)：This study aims at visually analyzing features of data samples taken from multi-valued functions, by tracking the topological changes in mathematical fibers that are defined to be inverse images of such multi-valued function values. The proposed approach also allows us to identify the topological types of singular fibers, which has topological changes in the corresponding inverse images. The study specifically focus on the case $f: R^3 \rightarrow R^2$ and then the case $f: R^2 \rightarrow R^2$ where the inverse image is shrunk to a single point. The computation algorithms developed in this study have been applied to several problems including mathematical visualisation that facilitates mathematicians to explore further research insights in the area of differential topology, 3D shape retrieval that takes into account two scalar attribute functions, and multiple geographical field analysis through interactive visual analytics.

研究分野：可視化学

キーワード：多値関数 微分トポロジー 特異ファイバー joint contour nets 可視化 特徴解析 数理可視化

1. 研究開始当初の背景

一般的に科学シミュレーションにより得られるデータは、その時空間配置を考慮に入れると、関数 $f: R^n \rightarrow R^m$ の離散サンプル点集合として定式化できる。例えば、空間における気温と気圧のデータは、関数 $R^3 \rightarrow R^2$ の離散サンプルと考えられる。近年可視化分野においては、このようなデータの視覚的な解析に、関数値の逆像のトポロジーの変化を追跡する微分トポロジーを用いる手法が、データの大局的な特徴を効果的に抽出できることもあり、注目を集めるようになってきた。

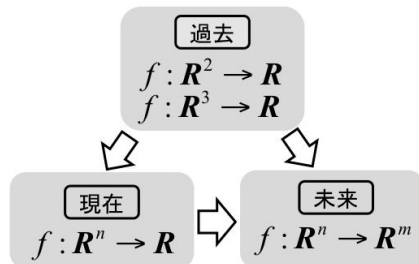


図 1: 微分トポロジー解析の変遷

微分トポロジーによるデータ解析は、図 1 のように、1990 年代から 2000 年代前半に、地形標高値や 3 次元画像(ポリウム)などのスカラー関数 $f: R^2$ または $R^3 \rightarrow R$ の離散サンプルデータを対象に始まった[1]。さらに 2000 年代後半には、関数 $f: R^n \rightarrow R$ の定義域の次元 n が大きい場合に、手法が拡張された[2]。しかし、微分トポロジーを用いた多値関数 $f: R^n \rightarrow R^m$ のデータ解析・可視化は、高度な数学的概念の導入が必要であり、まだ限られた数の研究しか行われていないのが実状であった。

参考文献

- [1] S. Takahashi, Y. Takeshima, and I. Fujishiro: Topological volume skeletonization and its application to transfer function design, Graphical Models, Vol. 66, No. 1, pp. 24–49, 2004.
 [2] S. Takahashi, I. Fujishiro, and M. Okada: Applying manifold learning to plotting approximate contour trees, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol. 15, No. 6, pp. 1185–1192, 2009.

2. 研究の目的

本研究では、微分トポロジーを用いた多値関数 $f: R^n \rightarrow R^m$ のデータ解析・可視化を、個々のスカラー関数の逆像のトポロジーの変化ではなく、複数のスカラー関数の逆像の共通部分であるファイバーに着目し、そのトポロジー変化が生じる特異ファイバーを抽出することで実現していく。また、特異ファイバ

ーのトポロジー型を、その周辺のデータの振る舞いから抽出する計算アルゴリズムの実現を図る。さらに、さまざまな実多値関数データに内在する特定の現象と特異ファイバーのトポロジー型の対応関係を解析し、データ特徴を可視化する際に用いる視覚パターン(メタファ)を定式化する。

昨今科学計算を行うための計算環境は高性能・高並列化されてきており、シミュレーションにより得られるデータサイズは大規模化している。このような大規模データは、対象の正確な振る舞いを記述できる反面、その巨大さゆえに重要な特徴がデータそのものに埋没しやすい。本研究は、多値関数データの大局的な振る舞いを、微分トポロジーを用いて抽出・可視化する手法を実現することで、大規模データを階層的に効率良く解析するための技法という位置づけも担っている。

3. 研究の方法

本研究は、ファイバーのトポロジー変化の追跡、特異ファイバーの位相型抽出、実多値関数データの特徴解析・可視化の 3 つの中心的ステップにより、微分トポロジーに基づく多値関数離散サンプルデータの解析手法を確立する。特に、研究計画の前半部分では、3 次元の定義域から 2 次元の値域への関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ サンプルデータについて、上記の 3 つのステップを集中的に進めていく。研究計画後半では、一般的な関数 $f: R^n \rightarrow R^m$ サンプルデータの解析・可視化への対応を進めながら、提案手法の検証と評価を行なっていく。

4. 研究成果

本研究で得られた成果は、速報としていくつかの論文にまとめることができているが、研究期間後半に得られた結果については論文が現在投稿中、または今後論文投稿を準備する段階にある。

以下に、得られた成果について代表的なものを記す。概要として、4.1) 特異ファイバーの抽出とそのトポロジー型の同定アルゴリズムの構築、4.2) 数理可視化システムへの応用、4.3) 多値関数に関する微分トポロジー特徴用いた形状検索、4.4) 多値フィールド地理情報の対話的可視化について、以下順次記していく。

4.1) 特異ファイバーの抽出とそのトポロジー型の同定アルゴリズムの構築

本研究計画の最初の課題として、多値関数の逆像に対応するファイバーの抽出とそのトポロジー変化の追跡、さらにトポロジー変化の型の同定のアルゴリズムの構築に取り

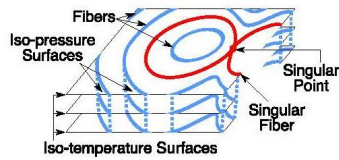


図 2: ファイバーの定義

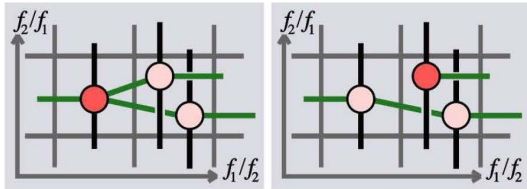


図 3: joint contour net を用いた特異値の同定.

組んだ。この報告書ではしばらく、対象となる多値関数を、3次元ユークリッド空間を定義域にもち、2次元ユークリッド空間を地域にもつ関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ について検討していくこととする。

まず、図 2 にあるように、3次元空間の温度と気圧の分布について考えてみる。いま、同温度面(温度が等しい曲面)と等圧面(圧力が等しい曲面)を図のように考えると、その交差部分は青い線で描かれた部分に対応する。これらはある特定の温度と圧力に対応する逆像ととらえることができ、ファイバーと定義される。さらにこのファイバーの変化を、温度や圧力の値を変えて追跡すると、そのトポロジーが変化する赤い線で描かれた特徴的なファイバーを見つけることができる。これを特異ファイバーと定義する。本研究は、上記のファイバーのトポロジー変化を追跡し、さらに特異ファイバーのトポロジー型を同定することで、対応する多値関数のサンプルデータの特徴を抽出していく。

実際のファイバーの関数値による変化の追跡は、アルゴリズムの側面から考えると、スカラー関数のように関数値がひとつの場合と比較して、技術的困難が伴う。これは、すから関数の場合ファイバーの変化は、スカラー値のみの1次元方向に限られるが、多値関数の場合複数方向に変化が生じるため、その変化を一貫性を持って追跡できなくなるためである。本研究では、近年研究が進んできている joint contour nets と呼ばれるグラフ構造を構築することで、このファイバーのトポロジー変化の追跡を実現する。joint contour nets の構築は、1) サンプル点を手がかりに定義域を、単体的複体(三角形分割や四面体分割)を用いて表現する。2) 地域をフレームバッファ上に定義し、各単体(三角形や四面体)を頂点の関数値を参照してフレームバッファに描くことでラスタ化する。3) 各ピクセルに描かれた単体の ID を参照することで、対応する逆像の連結関係を同定し、joint contour net を構築するという処理を踏む。これは、定義域のサンプル点を、量子化され

Type	Color	Topological Change	# Fiber Components	# Boundary Points	Description
0a	Gray		1 → 1 → 1	0 → 0 → 0	Regular interior fiber component.
0b	Gray		1 → 1 → 1	2 → 2 → 2	Regular boundary fiber component.
I	Red		0 → 1 → 1	0 → 0 → 0	Birth of an interior fiber component.
II	Orange		1 → 1 → 1	0 → 1 → 2	An interior fiber component meets the boundary.
III	Yellow		0 → 1 → 1	0 → 1 → 2	Birth of a boundary fiber component.
IV	Light Blue		1 → 1 → 2	2 → 3 → 4	A boundary fiber component splits at boundary.
V	Green		1 → 1 → 2	0 → 0 → 0	An interior fiber component splits.
VI	Blue		1 → 1 → 2	2 → 2 → 2	A boundary fiber component splits in the interior.
VII	Purple		2 → 1 → 2	4 → 4 → 4	Two boundary fiber components meet and re-pair.

図 4: 本研究で実現した特異ファイバーの分類

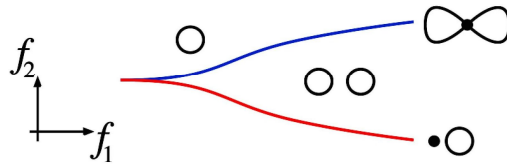


図 5: 数学者による、多値関数のファイバーの手描きの遷移図の例

た値域に写像することで、可能となる計算アルゴリズムであり、この量子化の詳細度によって、解析結果の詳細度も制御することが可能となる。

ファイバーのトポロジー変化は、関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ の場合図 3 に示される通り、どちらかの関数の軸方向に joint contour net が分岐・併合をもつ場合と、新たにノードが生成・消滅が生じる場合として抽出することができる。これにより、ファイバーのトポロジー変化の追跡を、系統的に行うことができるようになる。

さらに我々が取り組んでいる関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ の場合において、より詳細なトポロジー変化の分類、つまり特異ファイバーの型分類を行うために、定義域内のファイバーのみならず、定義域境界におけるファイバーのトポロジー変化を、新たに境界専用の joint contour net を構築することで、図 4 のように実現した。以下の述べる研究成果は、すべてここで述べた joint contour net や特異ファイバーの分類を基礎において得られたものであることに注意する。

4.2) 数理可視化システムへの応用

4.1) で構築したファイバーのトポロジー変化追跡のためのアルゴリズムは、数学者が多値関数のファイバーを可視化して、さらに高度な研究を行うための基礎として用いることができる。実際、数学者は多値関数におけるファイバーの遷移図を手で描くことで、研究を進めてきている。図 5 はそのような事例を示しており、値域におけるファイバーのトポロジー変化を描いたものに対応する。本研究では、このような手描きの図を用いた多値関数の視覚的な表現を、構築した計算アルゴリズムを用いて、自動的及び対話的に生成できるシステムの構築を目指した。

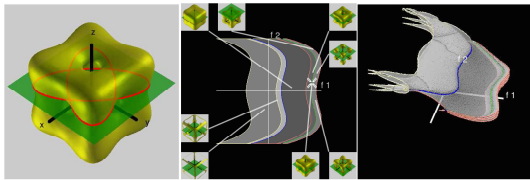


図 6: 多値関数における, ファイバーのトポロジー変化の可視化システム.

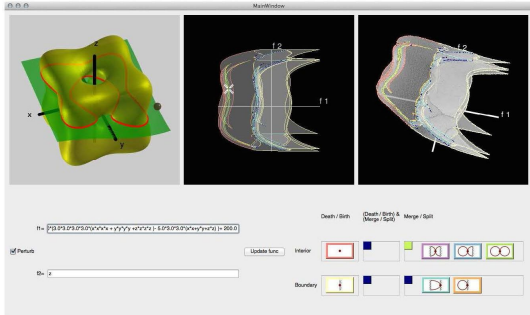


図 7: システムにおける摂動操作の様子. 多値関数の形状に微調整を加えることで, 退化している特異ファイバーを非退化に変換できる.

図 6 は, 本研究で構築したシステムの概要を示している. 図 6 左は, 定義域において, 現在の関数値における 2 つの等値面(黄色と緑)と, その交差部分であるファイバー(赤)を示している. 図 6 中央は, 値域におけるデータの写像範囲とともに特異ファイバーが生じる関数値を特徴線で示している. さらに, 各関数値における定義域の様子をユーザのマウス入力により小さい画像ラベルとして表示することが可能である. また, 現在の関数値は \times 印で描かれていることに注意する. 図 6 右は, 値域のファイバーの連結成分の変化を, 3 次元的に層構造として表示したものである.

また, 本システムは, さらに退化した特異ファイバーに対話的に摂動操作を適用して, 非退化な特異ファイバーに変換する操作をも備えている. 図 7 は, その特異ファイバーの非退化処理操作の実際の様子を示している.

また, 本システムに関するユーザスタディについては, 数学学習者および数学研究者に協力をお願いして, 実際にシステムを使用してもらったことで, システムの機能に関する評価を行ってもらった. 特に, 退化した特異ファイバーを非退化なものに分解する摂動操作については, 数学関係者の注目を集めており, 現在新たに数名の数学研究者に加わってもらい, 本研究で構築した計算アルゴリズム及びファイバー可視化システムのさらなる拡張について議論を進めているところである.

4.3) 多値関数に関する微分トポロジー特徴用いた形状検索

本研究では, 多値関数のファイバーにおけ

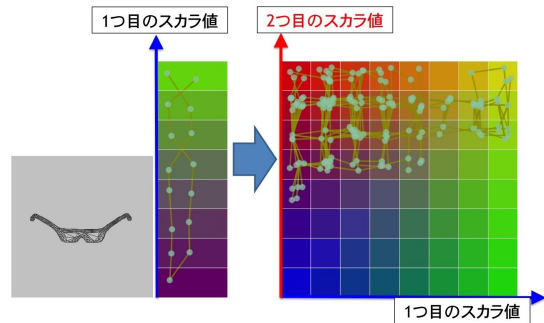


図 8: スカラ値関数による形状検索と, 多値関数による形状検索の比較.

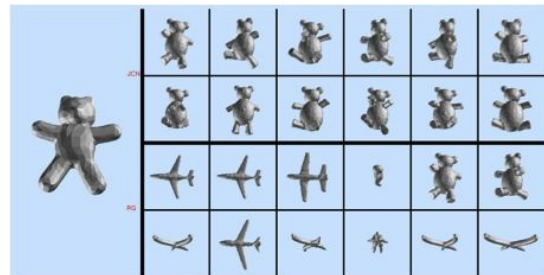


図 9: 多値関数とスカラ値関数による形状検索結果の比較. 上半分が多値関数による結果, 下半分がスカラ値関数による結果を表す.

るトポロジー変化を記述する joint contour net を, 3 次元形状検索に応用する手法の開発を行った. 従来の形状検索においては, 形状上に定義される測地線距離を, すべてのサンプル点ペアに対して和をとることで求められる積分測地線距離を用いる手法が効果を発揮していた. この属性値は, 形状の大まかなトポロジーを捉えることが可能ではあるが, 積分測地線距離のみをスカラ関数として用いるため, 他の属性値を合わせて用いたより詳細な形状類似度判定が技術的に困難であるという問題を抱えていた. 本研究では, 図 8 にあるように, もうひとつの属性値をスカラ関数として導入して, 2 つのスカラ値関数を用いた形状検索を実現した. 特に本研究で構築している joint contour net を用いたファイバーの変化を形状の記述子として用いることで, 2 つのスカラ値関数を別々に用いるよりも形状検索精度が向上することが確認できた.

図 9 は, 実際に形状検索を行った結果を示している. 上半分が, 提案手法に対応し, 多値関数を用いた形状検索による結果, 下半分は従来手法の検索結果に対応する. 従来手法は, 先の述べた積分測地線距離のみを用いているのに対し, 提案手法では, 新たに別の属性値として対処 3 次元形状の平均曲率を導入した. そのため, 形状の骨組みの構造のみならず, 形状のふくらみの度合いも考慮に入れた形状類似度を効果的に定義することができ, 結果として形状のふくらみに違いをもつ形状の検索において精度の向上が見られることが確認できた. 今後は, 曲率以外の属

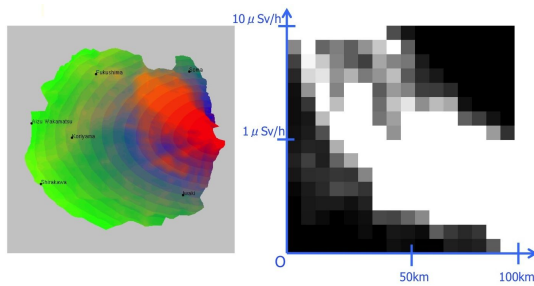


図 10: 福島第一原発周辺の放射能レベルと原発からの距離を用いたファイバートポロジー解析．関数値の量子化レベルは 16×16 ．

性値についても検討を加え、様々の属性値の組み合わせを対話的に選択しながら、形状検索を行うシステムの開発につなげていく予定である．

4. 4) 多値フィールド地理情報の対話的可視化

最後に、今まで取り組んできた多値関数 $f: R^3 \rightarrow R^2$ とは異なる、 $f: R^2 \rightarrow R^2$ の場合についての取り組みを紹介する．2次元の定義域から2次元の値域への写像の場合、数学的に考えると、対応するファイバーは $f: R^3 \rightarrow R^2$ のように曲線ではなく、点になってしまう．この点のトポロジー変化を追跡することは不可能であり、結果として技術的な問題が生じてしまう．しかしながら、本研究の計算アルゴリズムは予め値域を定義する各関数値において量子化処理を施しているため、各関数値は区間に区切られる．そのため、計算により得られるファイバーも、各関数値区間の厚みのある等値面(区間ボリュームと呼ばれる)に対応し、結果としてファイバーは曲線として得られることになる．そのため本研究で得られた成果は、数理的なファイバーの定義からは得られないが、計算アルゴリズムにおける離散的なデータの扱いゆえに可能となる点においても、興味深い．

実際には、地図上で定義される2つの属性値のファイバーについて、そのトポロジー変化の追跡を行った．具体的には、福島第一原発周辺の放射能レベルと原発からの距離を2つの関数値としてとり、それぞれの関数値ペアにおけるファイバーの連結成分数を可視化した．図10と図11はその結果であり、異なる量子化レベルで可視化を行っている．ここで、値域において画素が白いほど連結成分数が多いことを示しており、対応するファイバーのトポロジー変化が激しいことを示している．図10では、 16×16 の量子化レベルを用いており、放射能のレベルと原発からの距離の大まかな振る舞いについて視覚的に情報を得ることができる．これに対して、図11ではより詳細な振る舞いを視覚的に解析することができ、2箇所の特徴的なファイバーのトポロジー変化を生じる関数値領域が

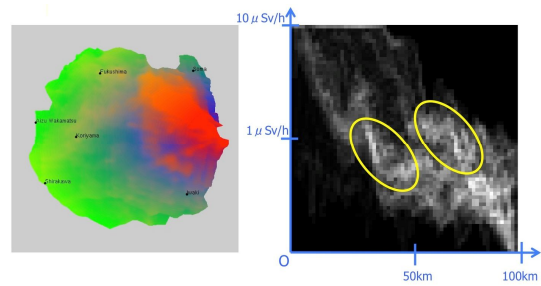


図 11: 福島第一原発周辺の放射能レベルと原発からの距離を用いたファイバートポロジー解析．関数値の量子化レベルは 64×64 ．この量子化レベルでは、特徴的な部分が確認できる．

あることを視認することができる．また、本システムにおいても値域の特定の関数値ペアをマウスでポイントすることで、定義域のどの部分の領域が対応するかを対話的に確認できるようになっている．

今後は、各地点の標高値や高度差などを属性値にとり、放射能レベルとの関係について可視化し検討をするとともに、時系列データについてもファイバーを用いた視覚解析を通じて、特徴の抽出を試みる予定である．

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計3件)

(すべての論文は査読有り論文である．)

- 1) Osamu Saeki, Shigeo Takahashi, Daisuke Sakurai, Hsiang-Yun Wu, Keisuke Kikuchi, Hamish Carr, David Duke, and Takahiro Yamamoto, Visualizing Multivariate Data Using Singular Theory, In Masato Wakayama et al., editors, *the Impact of Applications on Mathematics*, Mathematics for Industry, Vol. 1, pp. 51-65, Springer, 2014. http://dx.doi.org/10.1007/978-4-431-54907-9_4
- 2) Osamu Saeki and Shigeo Takahashi, Visual Data Mining Based on Differential Topology: A Survey, *Pacific Journal of Mathematics for Industry*, Vol. 6, pp. 47-56, 2014. <http://dx.doi.org/10.1186/s40736-014-0004-y>
- 3) Daisuke Sakurai, Osamu Saeki, Hamish Carr, Hsiang-Yun Wu, Takahiro Yamamoto, David Duke, and Shigeo Takahashi, Interactive Visualization for Singular Fibers of

Function $R^3 \rightarrow R^2$, conditionally accepted for IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, (Special Issue of IEEE SciVis 2015), 2015.

〔学会発表〕(計 8 件)

1. Osamu Saeki, Visualizing Multivariate Data Using Singular Theory, Forum “Math-for-Industry” 2013 - The impact of Applications on Mathematics -, Nov. 4-8, 2013, Nishijin Plaza, Fukuoka, Japan. (Invited Talk)
2. 菊池 景介, 櫻井 大督, 吳 湘筠, 佐伯 修, 高橋 成雄, 多値関数に関するトポロジー記述子を用いた 3 次元形状検索, 情報処理学会第 76 回全国大会, 2014 年 3 月 11 日～13 日, 東京電機大学, 足立区, 東京.
3. Osamu Saeki, Visualizing Multivariate Data Using Singular Theory, Visiting Lecture at Center for Advanced Studies, Apr. 1, 2014, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland. (Invited Talk)
4. Osamu Saeki, Singular Fibers and Visualization of Multivariate Data, 13th International Workshop on Real and Complex Singularities, Aug 1, 2014, ICMC, University of San Paulo, San Paulo, Brazil. (Invited Talk)
5. 佐伯 修, 柔らかい幾何学, トポロジーでデータ構造を解析する, 九州大学テクノロジーフォーラム 2014, セッション , 2014 年 12 月 3 日, 東京国際フォーラム, 千代田区, 東京. (招待講演)
6. Osamu Saeki, Singular Fibers and Data Visualization, 可微分写像の特異点論とその応用, 2014 年 12 月 4 日, 京都大学数理解析研究所, 京都市左京区, 京都. (招待講演)
7. 芦沢 未菜, 吳 湘筠, 高橋 成雄, 高次元データ解析における測地的 k-平均クラスタリング法の効果と検証, 情報処理学会第 77 回全国大会, 2015 年 3 月 17 日～19 日, 京都大学, 京都市左京区, 京都. (学生奨励賞受賞)
8. 大高 悠希, 吳 湘筠, 高橋 成雄, 相互情報量による視点位置の定量的評価, 情報処理学会第 77 回全国大会, 2015 年 3

月 17 日～19 日, 京都大学, 京都市左京区, 京都. (学生奨励賞受賞)

〔その他〕
ホームページ等
<http://www.tak-lab.org/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高橋 成雄 (TAKAHASHI Shigeo)
東京大学・大学院情報理工学系研究科・准教授
研究者番号: 4 0 2 9 2 6 1 9

(2) 研究分担者

佐伯 修 (SAEKI Osamu)
九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所・教授
研究者番号: 3 0 2 0 1 5 1 0