

グラフ構造を有する高次元データからの 情報抽出のための手法開発

数理情報学専攻 48166211

黒河 天

指導教員

長尾 大道 准教授

1 はじめに

本研究では、2種類のグラフ構造を有する高次元データを扱う。

第1部では、結晶構造や生物組織の顕微鏡写真に代表される多角形充填構造を有する画像データを扱う。既存の領域分割手法によって多角形充填画像を多角形の境界領域と内部領域に分割するとき、領域としての境界部分は得られるが、境界線そのものや各多角形は得られない。そこで我々は、多角形充填画像のグラフ構造に着目した生成モデルであるグラフフィッティングモデルを導入し、同モデルの最尤推定に基づいて境界線を直接抽出する方法を提案する。

第2部では、RGB画像や地震計ネットワークの観測値に代表されるグラフ上の多変量信号を扱う。多変量グラフ信号のスペクトル密度行列の推定法を議論し、多変量グラフ信号の最適圧縮フィルタであるグラフフーリエ主成分分析を提案する。

本稿および発表では、第1部の内容のみを紹介する。

2 提案モデル

2.1 定義

頂点集合 $V = \{1, \dots, I\}$ 、辺集合 E なる無向グラフを $G = (V, E)$ とする。点集合 $(x_1, y_1), \dots, (x_I, y_I) \in \mathbf{R}^2$ および $\varepsilon > 0$ が与えられたとき、任意の $i, j \in V$ に対して2頂点 (x_i, y_i) と (x_j, y_j) を結ぶ線分を中心線とする幅 2ε の帯を $\Gamma_{ij}(\varepsilon)$ と表す。帯の和集合 $\Gamma_G(\varepsilon) = \bigcup_{\{i,j\} \in E} \Gamma_{ij}(\varepsilon)$ を G の半幅 ε の帯グラフとよぶ。無向グラフの平面埋め込みとその帯グラフを図1に示す。ある確率変数 X が平均 μ 、分散 σ^2 なる正規分布に従うことを $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ と表す。多角形充填画像の生成モデルであるグラフフィッティングモデルを提案する。

定義 1 (グラフフィッティングモデル). 確率変数

$\xi_{1,1}, \xi_{1,2}, \dots, \xi_{M,N}$ が互いに独立かつ

$$\xi_{m,n} \sim \begin{cases} \mathcal{N}(\mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2) & \text{if } (m,n) \in \Gamma_G(\varepsilon), \\ \mathcal{N}(\mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2) & \text{if } (m,n) \notin \Gamma_G(\varepsilon) \end{cases}$$

を満たすとき、確率変数 $\xi = (\xi_{m,n})_{m=1,n=1}^{M,N}$ はグラフ

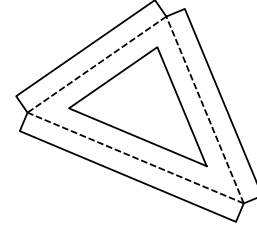


図1: 平面に埋め込まれた無向グラフ (点線) とその帯グラフ (実線で囲まれた領域)

フィッティングモデル (graph fitting model, GFM) に従うという。

領域 $\Gamma_G(\varepsilon)$ を境界、それ以外の領域をバルクという。確率変数 $\xi_{m,n}$ を第 m 行・第 n 列のピクセルの画素値とみなすと、GFM に従う ξ の実現値は観測画像とみなせる。すなわち GFM は、境界ピクセルの画素値とバルクピクセルの画素値が異なる正規分布からサンプルされるような画像の生成モデルである。

2.2 対数尤度の連続近似

パラメータ $\theta = (\{(x_i, y_i)_{i=1}^I\}, \varepsilon)$ なる GFM の最尤推定を考える。GFM に従う ξ の負の対数尤度は

$$\begin{aligned} & -\log p(\xi | \theta) \\ &= - \sum_{(m,n) \in \Gamma_G(\varepsilon)} \log n(\xi_{m,n} | \mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2) \\ & \quad - \sum_{(m,n) \notin \Gamma_G(\varepsilon)} \log n(\xi_{m,n} | \mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2) \\ &= \sum_{(m,n) \in \Gamma_G(\varepsilon)} f_{m,n} + \text{const.} \end{aligned}$$

と表せる。 $n(\cdot | \mu, \sigma^2)$ は $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ の密度関数であり、

$$f_{m,n} = \frac{(\xi_{m,n} - \mu_{\text{bound}})^2}{2\sigma_{\text{bound}}^2} - \frac{(\xi_{m,n} - \mu_{\text{bulk}})^2}{2\sigma_{\text{bulk}}^2} + \frac{1}{2} \log \frac{\sigma_{\text{bound}}^2}{\sigma_{\text{bulk}}^2}$$

とする。総和 $\sum_{(m,n) \in \Gamma_G(\varepsilon)} f_{m,n}$ は頂点座標や半幅について連続でないため、微分可能な関数

$$\tilde{J}(\theta) = \int_{\Gamma_G(\varepsilon)} \Psi \, dS \quad (1)$$

で近似する。 $\Psi : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}$ は $(1/2, M + 1/2] \times (1/2, N + 1/2]$ 上で $f_{[x-1/2], [y-1/2]}$ を、それ以外で0をとる2次元スカラー場である。ただし、 $[x]$ は実

数 x 以上の最小の整数である。この近似は画素を細かくする極限で一致する。

3 階段スカラー場の帯グラフ積分の最小化

式 (1) を、帯同士の 3 次以上の交叉を無視して関数

$$\mathcal{J}(\theta) = \sum_{\{i,j\} \in E} \int_{\Gamma_{ij}(\varepsilon)} \Psi \, dS - \sum_{i \in V} \sum_{\{j,k\} \subseteq N_i} \int_{\Delta_{i,jk}(\varepsilon)} \Psi \, dS$$

で近似する。 N_i は頂点 $i \in V$ の近傍である。 $\Delta_{i,jk}(\varepsilon)$ は図 2 に示す扇型である。領域 $\Gamma_{ij}(\varepsilon)$ および $\Delta_{i,jk}(\varepsilon)$ を適切にパラメータづけることで、目的関数 \mathcal{J} とその勾配を計算できる。 $\mathcal{J}, \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x_1}, \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial y_1}, \dots, \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial x_I}, \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial y_I}, \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \varepsilon}$ の時間計算量は $O(|V| + \varepsilon|E| + \varepsilon L)$ となる。

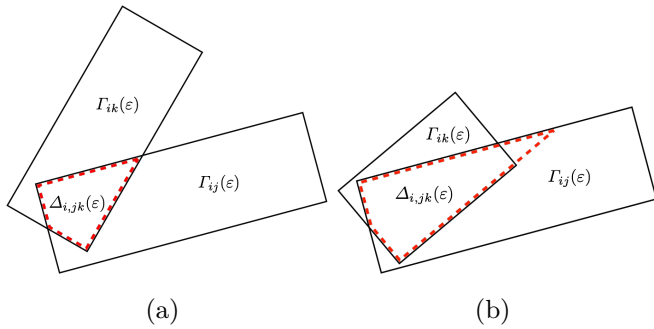


図 2: 扇型 $\Delta_{i,jk}(\varepsilon)$. 実線は帯 $\Gamma_{ij}(\varepsilon)$ および $\Gamma_{ik}(\varepsilon)$ の境界を、破線は扇型 $\Delta_{i,jk}(\varepsilon)$ の境界を表す。

4 数値実験

4.1 最尤推定の精度

GFM の生成画像から頂点座標と半幅を近似最尤推定し、推定誤差を測定した。頂点座標の初期値は真の頂点座標をガウスノイズで動かした 100 通りとし、半幅の初期値は真値を含む 3 通りとした。生成画像と初期頂点座標を図 3 に示す。提案手法として、KNOWN, PI-GRMF, PI-GMM, ESTIMATE の 4 種類を用意した。KNOWN はパラメータ $\mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2, \mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2$ を既知として最適化を行った。PI-GMRF は $\mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2, \mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2$ に混合正規分布の EM アルゴリズム (Zhang et al., 2001) に基づく推定値をプラグインして最適化を行った。PI-GMM は $\mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2, \mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2$ に混合正規分布の EM アルゴリズムに基づく推定値をプラグインして最適化を行った。ESTIMATE は $\mu_{\text{bulk}}, \sigma_{\text{bulk}}^2$ に PI-GMM と同じ推定値をプラグインし、 $\mu_{\text{bound}}, \sigma_{\text{bound}}^2$ を変数に含めて最適化を行った。最適化には逐次 2 次計画法 (Boggs, 1996) を用いた。

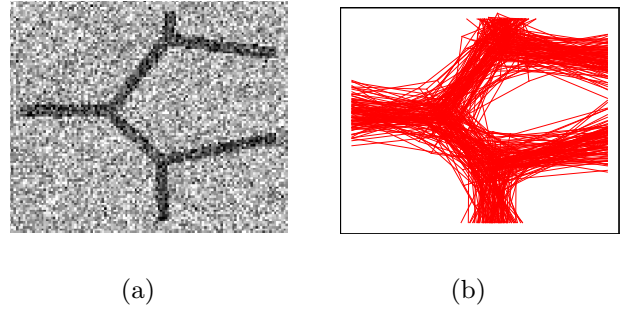


図 3: GFM の (a) 生成画像および (b) 100 通りの初期頂点座標。 (b) のひとつながりの線が 1 つの初期グラフ埋め込みを表す。

数値実験の結果、KNOWN および PI-GMRF は頂点座標を画像の横幅の 1% ほどの誤差で、半幅を 0.1% に満たない誤差で精度よく推定できた。PI-GMM による推定誤差は頂点座標、半幅ともに画像の横幅の 1% から 3% 程度になった。一方で、ESTIMATE の計算は不安定化し、推定誤差が $10^{13} \sim 10^{15}$ 倍までに増大した。

4.2 領域分割の判別精度

第 4.1 小節の KNOWN, PI-GMRF, PI-GMM, ESTIMATE に基づく領域分割の誤判別率を大津法 (Otsu, 1979), 混合正規分布の最尤推定, ガウス・マルコフ確率場の最大事後確率推定 (Besag, 1986) と比較した。KNOWN と PI-GMRF の平均誤判別率は 1% ほどに抑えられ、ガウス・マルコフ確率場の最大事後確率推定の誤判別率に匹敵した。PI-GMM の平均誤判別率は 5% から 10% ほどになり、混合正規分布の最尤推定や大津法の誤判別率を下回った。

参考文献

- Y. Zhang, M. Brady, and S. Smith, “Segmentation of brain MR images through a hidden Markov random field model and the expectation-maximization algorithm,” *IEEE Trans. Med. Imaging*, vol. 20, no. 1, pp. 45–57, 2001.
- P. T. Boggs, “Sequential quadratic programming,” *Acta Numer.*, vol. 4, no. 1, pp. 1–51, 1996.
- N. Otsu, “A threshold selection method from gray-level histograms,” *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.*, vol. 9, no. 1, pp. 62–66, 1979.
- J. E. Besag, “On the statistical analysis of dirty pictures,” *J. R. Stat. Soc. Ser. B*, vol. 48, no. 3, pp. 259–302, 1986.