

大規模画像復元問題に対する 数値計算法の開発

細田 陽介

福井大学

2013 年 9 月 6 日 NIFS

発表の概要

- NINS プロジェクト
- 問題設定
- 従来の方法
- 本プロジェクトでの成果
 - 複合線形正則化
 - 複合最大エントロピー法
- まとめと今後の課題

NINS プロジェクト 「大規模」 の概要

プロジェクト名： 大規模画像復元問題に対する高速な数値
計算法の開発

メンバー： 岩間尚文 (NIFS)
速水謙 (NII) 張紹良 (名大)
保國恵一 (NII) 阿部邦美 (岐阜聖徳学園大学)
工藤博幸 (筑波大学) 寺西大 (広島工大)
Per Christian Hansen (デンマーク工科大学)
Lothar Reichel (ケント州立大学)
James G. Nagy (エモリー大学)
細田陽介 (福井大学)

NINS プロジェクト 「大規模」 の目的

プロジェクトの目的： 大規模な画像復元問題に対して高速かつ安定な数値計算法を開発し、実用化する

大規模とは： 方程式の係数行列のサイズが大きいこと
数百万，数億，もしくは，それ以上
ただし，多くの場合，疎行列である

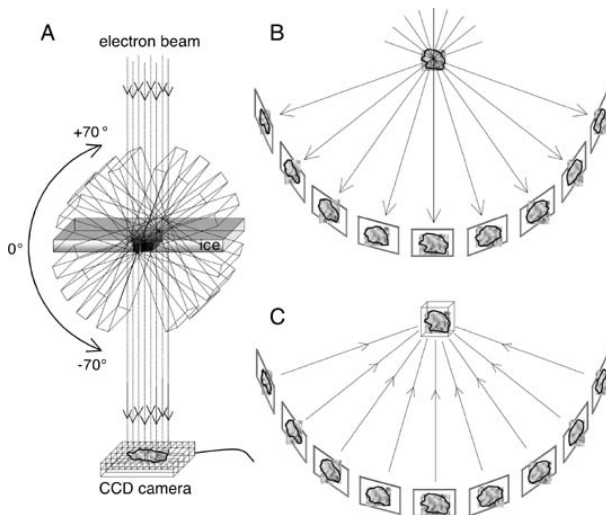
画像復元問題では： 問題は，第1種フレドホルム型積分方程式として定式化される

そのため，係数行列は悪条件となる

データに微小なノイズが混入しただけで，解が大きく変ってしまう $\Rightarrow$ 数値的不安定性

目標： 大規模かつ悪条件な疎行列を係数行列に持ち，データにノイズを含んだ線形方程式に対して数値計算法を開発する

代表的な問題：電顕CT像再構成問題 (1)



代表的な問題：電頭CT像再構成問題(2)

- 観測データ b と求めるべき画像ベクトル x は、観測装置に依存した係数行列 A により

$$Ax = b$$

の線形の関係にある

- このとき、 A は大規模疎行列
(非ゼロ要素の割合は1パーセント未満) であり、
かつ、悪条件となる
- 撮影角度の制限によるデータ欠損 ($m < n$)
- データは観測誤差などのノイズを含んでいる

大規模問題に対する数値計算法

- 大規模疎行列を係数行列に持つ線形方程式

$$Ax = b$$

に対する数値計算法は**反復解法**を用いることが一般的

- 反復解法とは、適当な**初期ベクトル**から、解に収束するような**近似解の列**を生成する方法
- その近似解の列を生成するときの漸化式

$$x^{(k+1)} = Mx^{(k)} + c$$

において、反復行列 A が反復ごとに変わらない方法を**定常反復法**、反復ごとに変わる方法を**非定常反復法**という

悪条件問題に対する反復解法

- 一般に、定常反復法は安定であるが、収束が遅い
- 逆に、非定常反復法は、収束は速いが、数値的に不安定
- それゆえ、大規模かつ悪条件な問題に対しては、定常反復法が用いられることが多い
- 悪条件方程式に対する代表的な反復解法として ART そして SIRT が挙げられる
- 本プロジェクトでは、非定常反復法の適用ならびに、その安定な実装の開発を目指す
- ただし、方程式に直接適用するのではなく、正則化法として実装

正則化法 (1)

- $m < n$ であるため、方程式 $Ax = b$ の解には**自由度**がある
- その自由度を制約するため、**2乗残差一定**

$$\|Ax - b\|^2 = \epsilon^2$$

の条件のもとで、解に課す非負の関数

$$L(x)$$

を**最小化**する（**制約条件付き最小化問題**）

正則化法 (2)

- 制約条件付き最小化問題は,

$$\min_x \{ \|Ax - b\|^2 + \lambda^2 L(x) \}$$

と書き直すことができる

- λ を **正則化パラメータ** と呼ぶ
- λ を大きくとると $L(x)$ が解 x におよぼす影響が大きくなり, 逆に λ を小さくすると $L(x)$ の影響は小さくなる

正則化法 (3)

- 規準関数 $L(x)$ の選択
 - $L(x) = \|x\|^2$
 - $L(x) = \|Lx\|^2$ (L はラプラシアン)
 - $L(x) = \sum x_j \ln x_j$
- 正則化パラメータの選択
 - GCV
 - L カーブ
- $L(x)$ と λ が決まれば解は決まる
 - 計算方法の選択

線形正則化法 (1)

- 規準関数として

$$L(x) = \|Lx\|^2$$

とすると**線形な正則化法**となる

- 従来、線形な正則化法は「**特異値分解**」や「**QR 分解**」など、行列の分解を用いて解かれていた
- しかし、これらの分解を大規模疎行列に適用するのは**計算量・メモリの面からも困難**である
- 本研究では、大規模疎行列向きの「**反復解法**」を用いて線形正則化法での解の構成を考察する

線形正則化法 (2)

■ 最小化すべき問題は

$$\min_x \{ \|Ax - b\|^2 + \lambda^2 \|Lx\|^2 \}$$

となり，これは

$$\min_x \left\| \begin{bmatrix} A \\ \lambda L \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\|^2$$

と変換できる

線形正則化法 (3)

- つまり，係数行列と右辺ベクトルをそれぞれ

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda L \end{bmatrix}, \quad \hat{b} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

とおいた線形方程式

$$\hat{A}x = \hat{b}$$

の**最小二乗問題**

$$\min_x \|\hat{A}x - \hat{b}\|^2$$

として定式化できる

線形正則化法 (4)

- このとき，係数行列

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda L \end{bmatrix}$$

のサイズは $(m + n) \times n$ であり（縦長），かつ，階数は

$$\text{rank}(\hat{A}) = n$$

であるため，この最小二乗問題は**唯一解**を持つ

線形正則化法の組合せ

- $\|x\|_2^2$ 最小化と $\|Lx\|_2^2$ 最小化を組み合わせて

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda_0^2 \|x\|_2^2 + \lambda_2^2 \|Lx\|_2^2 \}$$

- この場合も線形最小2乗問題

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} A \\ \lambda_0 I \\ \lambda_2 L \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

に変換可能

数値例（線形正則化法）

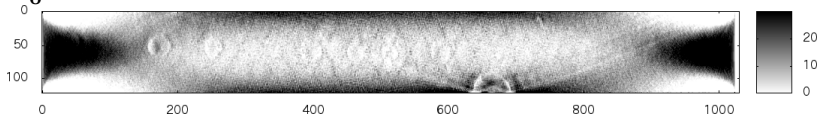
- 実際の電子顕微鏡 CT のデータの**一断面**を使用
- 画像サイズは 1024×119 に縮小
- 撮影は -70 度から 70 度まで、約 2 度ずつ 70 枚
- 係数行列のサイズは 71680×121856
- 非ゼロ要素の割合は約 0.11 パーセント
- ただし、**信頼できない視線**に関するデータは、計算から除外
 - 除外されたデータは約 20000 個

計算機環境

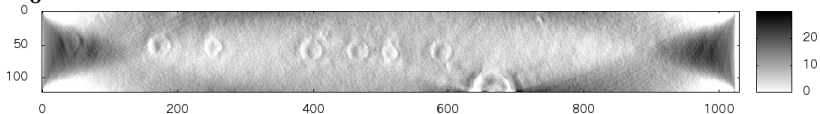
- Intel Xeon CPU E5-2640 (2.5GHz) 12 コア, 24 スレッド
- メインメモリ: 64 GB
- キャッシュサイズ: 15360 KB
- Ubuntu Server 12.04.2 (64bit)
- gcc バージョン 4.6.3
- 行列・ベクトル積を OpenMP でマルチスレッド化
- 演算は倍精度実数を使用
- 線形最小二乗問題に対してのソルバは CGLS 法
 - CGLS 法は、正規方程式に対する共役勾配法の安定な実装の一つ
- CGLS 法の前処理は行っていない

Tikhonov の正則化法 (1)

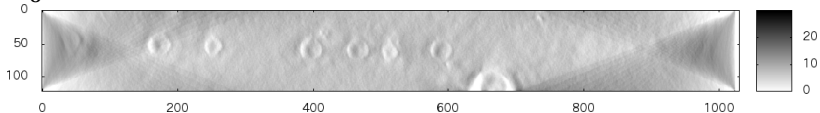
$\lambda_0 = 5.0$



$\lambda_0 = 10.0$

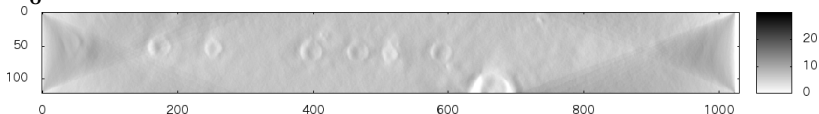


$\lambda_0 = 20.0$

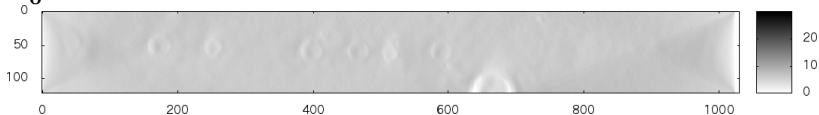


Tikhonov の正則化法 (2)

$\lambda_0 = 30.0$



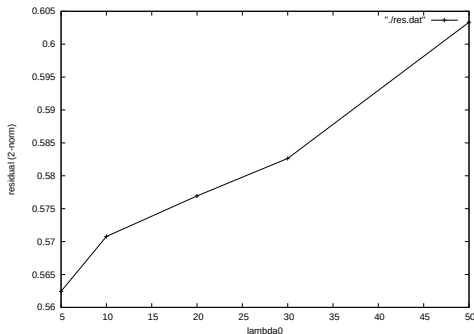
$\lambda_0 = 50.0$



- λ_0 が大きくなるほど画像は滑らかとなる
- λ_0 が小さいほど残差が小さくなるが，画像両端の artifact が大きい

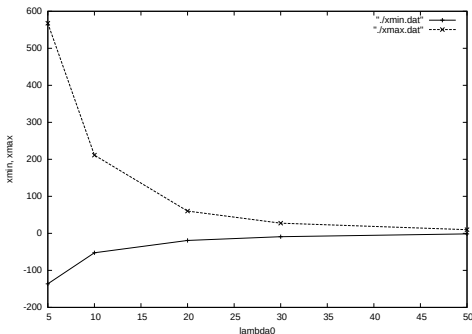
Tikhonov の正則化での相対残差

■ 正則化パラメータ (横軸) と相対残差 (2 ノルム) の関係



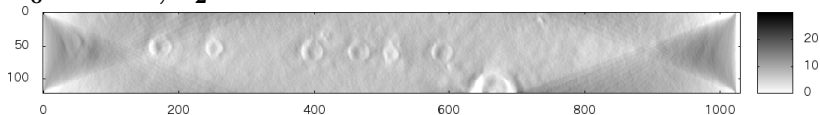
Tikhonov の正則化での画素値の最小と最大

■ 正則化パラメータ (横軸) と画素値最大と最小の関係

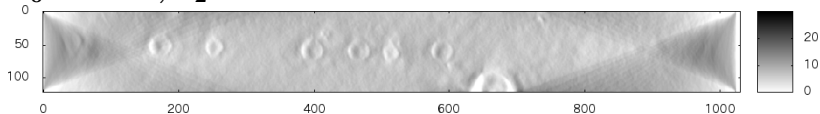


複合線形正則化 (1)

$$\lambda_0 = 20.0, \lambda_2 = 1.0$$

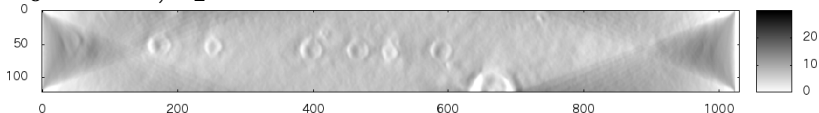


$$\lambda_0 = 20.0, \lambda_2 = 10.0$$

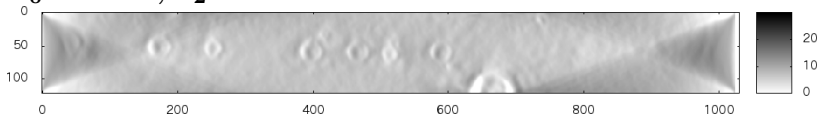


複合線形正則化 (2)

$$\lambda_0 = 20.0, \lambda_2 = 20.0$$



$$\lambda_0 = 20.0, \lambda_2 = 50.0$$



- ラプラシアン正則化を併用することにより，ある程度は画像両端の artifact が押えられたが，不十分である
- 画像の missing wedge についても，あまり改善はみられない

最大エントロピー法 (1)

- 基準関数として

$$L(x) = \sum_{j=1}^n x_j \ln x_j$$

を用いると**最大エントロピー法**となる

- このとき、最小化問題は

$$\min_x \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \sum_{j=1}^n x_j \ln x_j \right\}$$

最大エントロピー法 (2)

- 画素値 x_j は正であるため、変数変換

$$x_j = e^{y_j}$$

をおこなう

- すると、最小化すべき評価関数は

$$\Gamma(y) = \left\| A \begin{bmatrix} e^{y_1} \\ \vdots \\ e^{y_n} \end{bmatrix} - b \right\|_2^2 + \lambda \sum_{j=1}^n y_j e^{y_j}$$

最大エントロピー法 (3)

- 評価関数を各 y_j で偏微分すると、解くべき連立非線形方程式

$$h(y) = A^T \left(A \begin{bmatrix} e^{y_1} \\ \vdots \\ e^{y_n} \end{bmatrix} - b \right) + \lambda \begin{bmatrix} 1 + y_1 \\ \vdots \\ 1 + y_n \end{bmatrix} = 0$$

を得る

数値計算法 (1)

- この連立非線形方程式の数値計算法として **Newton 法**を採用する
- Newton 法の反復では

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} - p$$

と近似解を更新する

- ただし, p は**ヤコビアン行列**を係数行列に持つ線形方程式

$$J(y^{(k)})p = h(y^{(k)})$$

の解である

数値計算法 (2)

- すなわち、最大エントロピー法を用いる場合、各 Newton 反復において、線形方程式

$$(A^T A + \lambda D^{-1}) D p = h$$

をいかにして**高速に解くか**が問題となる

- ただし、上式の D は

$$D = \text{diag}(e^{y_1}, \dots, e^{y_n})$$

である

MEM と線形正則化の組合せ (1)

■ 最小化問題

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \|Ax - b\|_2^2 + \gamma \sum_{j=1}^n x_j \ln x_j + \lambda_0^2 \|x\|_2^2 \right\}$$

を考える

■ この最小化問題は

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \left\| \begin{bmatrix} A \\ \lambda_0 I \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2^2 + \gamma \sum_{j=1}^n x_j \ln x_j \right\}$$

と書き直すことができる

MEM と線形正則化の組合せ (2)

■ つまり,

$$\hat{A}_{\lambda_0} = \begin{bmatrix} A \\ \lambda_0 I \end{bmatrix}, \quad \hat{b} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

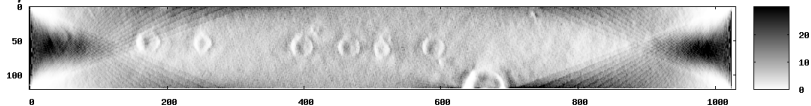
とおけば,

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \|\hat{A}_{\lambda_0} x - \hat{b}\|_2^2 + \gamma \sum_{j=1}^n x_j \ln x_j \right\}$$

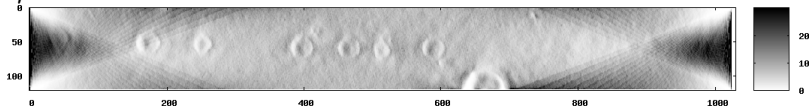
となり, MEM と同様のプログラムを用いて解けることが分かる

MEM (1)

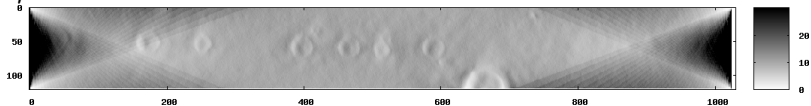
$\gamma = 0.5$



$\gamma = 1.0$

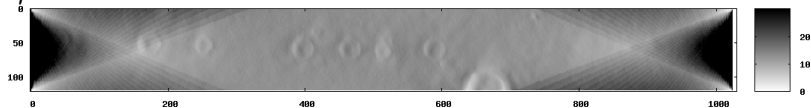


$\gamma = 5.0$

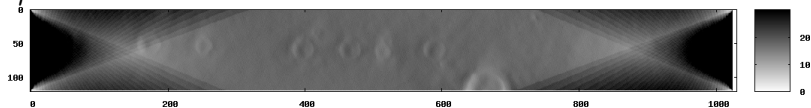


MEM (2)

$\gamma = 10.0$



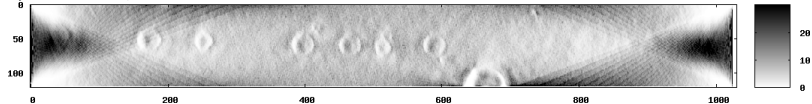
$\gamma = 20.0$



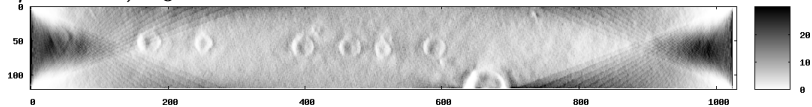
- 線形正則化法よりも、濃淡のはっきりした画像が得られている
- 画像両端の artifact は線形正則化よりも大きい

複合 MEM (1)

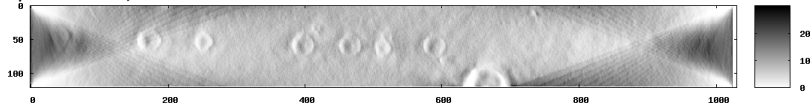
$$\gamma = 0.5, \lambda_0 = 1.0$$



$$\gamma = 0.5, \lambda_0 = 5.0$$

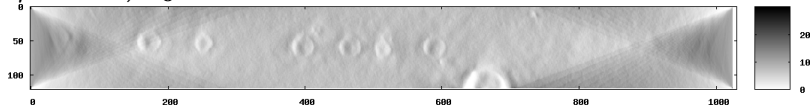


$$\gamma = 0.5, \lambda_0 = 10.0$$

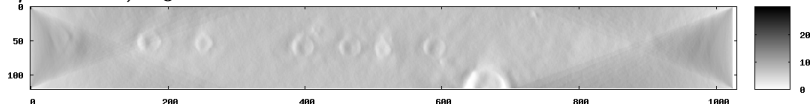


複合 MEM (2)

$$\gamma = 0.5, \lambda_0 = 20.0$$



$$\gamma = 0.5, \lambda_0 = 30.0$$



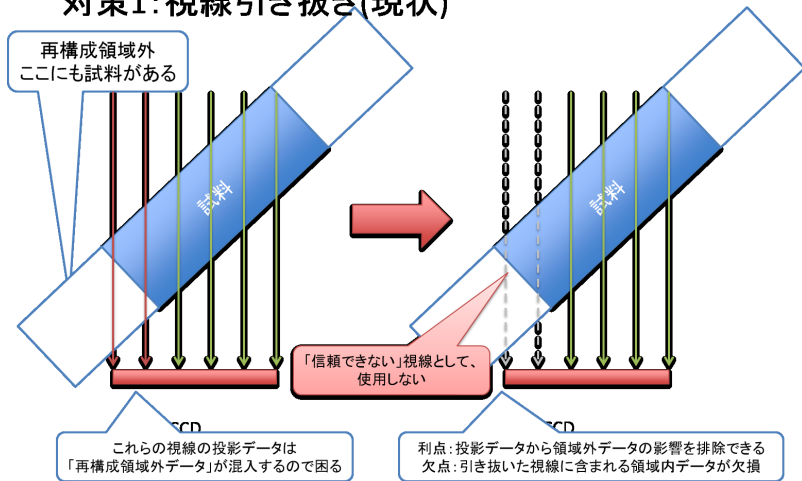
- 線形正則化を併用することにより，濃淡を維持しつつ，画像のノイズ除去に成功している
- λ_0 を大きくすると両端の artifact を除去されるが，画像全体が平滑になってしまう

まとめ

- 大規模画像復元問題に対して正則化法を適用
- 線形正則化法では、複数の線形条件を組合せて画像を再構成する方法を開発し、その有効性を検証
- 最大エントロピー法でも、線形な条件を組合せて画像を再構成する数値計算法を開発し、その有効性を検証
- いずれも、実用的な時間で画像が再構成できることを確認
- 正則化パラメータを適切に選択することにより、高品質な画像が求められることを検証した

今後の課題：視線の復活

対策1: 視線引き抜き(現状)



今後の課題

- 視線の復活による画像の改善
- ラプラシアン行列を用いた正則化法に対する数値計算法の改良
- Newton 法での線形方程式の数値計算法の改良
- 重み付き正則化法の適用とその評価
- 再構成像への制約条件の検討