

幾何変換の合成に基づく変形場のスパースモデリング

船富 卓哉^{1,2,a)} 山田 重人³ 藤村 友貴¹ 櫛田 貴弘¹ 向川 康博¹

概要

本稿では、画像の非剛体位置合わせを目的とし、画像平面上で幾何変換が滑らかに変化する幾何変換場によって変形をモデル化する手法を提案する。画像特徴点対から得られる少数の幾何変換のサンプルからこれを復元するために、幾何変換のスパース回帰を定式化する。シミュレーションデータを用いて、提案した定式化によって変形場のスパースモデリングが可能となることを示す。また、幾何変換のスパース回帰を利用した組織切片画像の非剛体位置合わせ例を示す。

1. はじめに

生体の組織切片画像では、切片作製における物理的な加工によって歪みが生じている。そのため、これらの画像位置合わせでは非剛体変形を補償するような手法が求められる。画像対を直接比較することで変形場を推定する Free-Form-Deformation[2] や変分法 [8] に基づく手法などが取られることが多い。これらの手法では、任意の点 \mathbf{x} に対し変位場 $u(\mathbf{x})$ を推定するアプローチを取っていた。これに対し我々は [3] において、少数の局所的な剛体変換（並進+回転, SE(2)) を画像全体で補間することで、物理的な加工によって生じる大域的で滑らかな変形を表現することができることを示した。この手法では、任意の座標における幾何変換 $y(\mathbf{x})$ を少数の幾何変換の重み付き合成によってモデル化した。これは変位の場合ではなく、SE(2) の場を表現しているといえる。本稿ではこれを幾何変換場と呼ぶ。

局所的な剛体変換は、SIFT や AKAZE などの局所特徴点の対応付けに基づいて推定することができる。一般的な組織切片画像では数百の特徴点対が得られるため、より多くの幾何変換を用いることによって、非剛体位置合わせの精度向上が期待できる。一方 [3] では、補間に用いる重みは経験的に設定した関数を用いていたが、その特異な振舞いが原因で、変形場の記述に用いる幾何変換の数を増大させると却って精度が悪化するという問題があった。

そこで本論文では幾何変換場のモデル化を、いくつかの座標における幾何変換 $\{\mathbf{x}_k, y_k\}$ が K 組与えられた下で $y(\mathbf{x})$ を推定する回帰問題として捉え、この定式化を目的とする。与えられた幾何変換の数が増大しても、そこから場の表現に有効な少数の因子を抽出し、変形場を精度よく表現できる回帰モデルの定式化に取り組む。

2. 幾何変換場の回帰

2.1 幾何変換に対するカーネル回帰モデル

まずは一般の回帰モデルを考える。回帰モデルといっても多様なモデルが提案されており、その 1 つにカーネル回帰モデルがある。

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{x}) \quad (1)$$

ここで $\Phi_i(\mathbf{x})$ は基底関数、 c_i は係数であり、一般的には $f(\mathbf{x}), c_i, \Phi_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ である。基底関数として動径基底関数 (Radial Basis Function) を用いれば、いわゆる RBF 補間とみなせる。

この定式化は幾何変換に対して直接適用することはできない。 $f(\mathbf{x}), c_i \in \text{SE}(2), \Phi_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ とした場合、この定式化は SE(2) に対する線形和を意味する。しかし、幾何変換は積算では閉じているが、線形和に対しては閉じていない。例えば、線形和に対応する、幾何変換の重み付き内測平均は下式によって定義される。

$$\operatorname{argmin}_{q \in \text{SE}(2)} \left\| \sum_i \frac{w_i}{\sum_j w_j} \operatorname{Log}_q(c_i) \right\| \quad (2)$$

ここで $w_i \in \mathbb{R}$ は重みであり、 $\operatorname{Log}_q(\cdot) : \text{SE}(2) \rightarrow \mathfrak{se}(2)$ は q における SE(2) の接平面への対数写像である。重みが凸、つまり非負で和が 1 となるよう正規化されていれば、単純な繰り返しアルゴリズムで求められることが知られている [4], [7]。

関連研究として [1] はリーマン多様体 \mathcal{M} に対するカーネル回帰を定式化している。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in \mathcal{M}} \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x}) d(q, c_i)^2}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x})} \quad (3)$$

ここで、 $\Phi_i(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ 、 $c_i \in \mathcal{M}$ 、 $d(q, c_i)$ は \mathcal{M} 上での計量である。また、例の 1 つとして 3 次元回転変換 SO(3) に対す

¹ 奈良先端科学技術大学院大学

² JST さきがけ

³ 京都大学

^{a)} funatomi@is.naist.jp

る回帰を示し、 $d(R_1, R_2) = \|\log(R_1^{-1}R_2)\|$ としている*1.

式 (3) はリーマン多様体に対するものであるが、ここで扱う剛体変換 $SE(2)$ に対しても同様の考え方が可能である。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in SE(2)} \left\| \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x})}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x})} \operatorname{Log}_q(c_i) \right\| \quad (4)$$

ここで、係数 $c_i \in SE(2)$ である。本稿では $y(\mathbf{x}_k) = y_k$ となるような係数 c_i を求める定式化を考える。

2.2 データ項

係数 c_i を求める際、所与のサンプル $\{\mathbf{x}_k, y_k\}$ に対して $y(\mathbf{x}_k) = y_k$ を求める定式化は以下となる。

$$c_i = \operatorname{argmin}_{c_i \in SE(2)} \sum_k d(y(\mathbf{x}_k), y_k)^2$$

式 (4) における q が y_k となることを要請することを意味し、次式が導かれる。

$$c_i = \operatorname{argmin}_{c_i \in SE(2)} \sum_k \left\| \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \operatorname{Log}_{y_k}(c_i) \right\| \quad (5)$$

2.3 剛体変換に対する計量

[1] で用いられていた通り、回転変換 $SO(3)$ には一般的な計量が与えられるが、剛体変換 $SE(2)$ は並進を含むため自明ではない。これは、回転が角度、並進が長さの次元を持っており、これらを統一的に扱うことができないからである。何らかの重みを設定して和を取ることもあるが、これら 2 つの影響の大きさは、それを評価する空間座標によって異なる。

これは本来、式 (2) でも問題になるはずだが、[4], [7] でも示されている通り、重みが凸であるならば回転と並進の両方で十分小さな値に収束するため、このバランスは問題とならない。しかし、回帰問題を考える場合には常に残差が存在し、式 (5) の右辺で $\sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \operatorname{Log}_{y_k}(c_i) = 0 \in \mathfrak{se}(2)$ となることは期待できない。そのため、 $\mathfrak{se}(2)$ の計量を考える必要が出てくる。

具体例として、図 1 では 2 つの変換 $q, y \in SE(2)$ を 2 つの点 $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^2$ に対して施した様子を示している。2 つの変換に対して \mathbf{x} が写る先は大きく異なるが、 \mathbf{x}' は同じ位置に写る*2。このように、2 つの変換 q, y の差は、それが施される位置によって大きく異なる。

ただし、幾何変換場の回帰問題においては、変換が単体で与えられるのではなく、常にそれが定義される座標と組で与えられる。また、画像位置合わせの文脈では、これまで変位だけが考えられてきたのと同様、写る先の位置が重要であると考えられる。以上から、ここでは変換の計量として以下を採用する。

$$\|\operatorname{Log}_q(y)\|_{\mathbf{x}} = \|q\mathbf{x} - y\mathbf{x}\|_2^2 \quad (6)$$

*1 $\log(R) = \frac{\theta}{2 \sin \theta} (R - R^T)$

*2 ただし角度は異なる

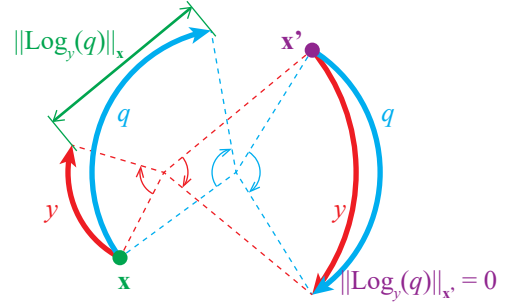


図 1: 剛体変換に対する計量。

2.4 正則化項

カーネル回帰では、基底関数 $\Phi_i(\mathbf{x})$ がサンプル数だけ存在するため、そのままでは容易に過学習となってしまう。これを防ぐため、一般的には正則化項が導入される。本研究で扱う画像位置合わせでは物理的加工による変形のモデル化を目的としており、その幾何変換場は滑らかで単純なものになることが想定されるため、疎性を要求する正則化項を追加し、いわゆるスパース回帰を試みる。

式 (1) に対して疎性を導入する場合、係数 c_i に対する l_1 ノルムを正則化項として加えることで、以下のように定式化される。

$$c_i = \operatorname{argmin}_{c_i} \left\| y_k - \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{x}_k) \right\|_2^2 + \lambda \sum_i |c_i| \quad (7)$$

ここで λ は疎性に対する重みであり、これを大きくすると係数の多くが 0 となる。

幾何変換場のモデル化に同様の考え方を導入すると、係数 $c_i \in SE(2)$ に対して l_1 ノルムを定義したいところではあるが、 \mathbb{R} における 0 に対応する要素が $SE(2)$ にはないため、これは困難である。疎性の実現を目指す場合、式 (4) における $\operatorname{Log}_q(c_i)$ の項が q によらず無効となることが求められる。そこで、新たな実数係数 $w_i \in \mathbb{R}$ を導入し、回帰モデル式を以下のように変更する。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in SE(2)} \left\| \sum_i \frac{w_i^2 \Phi_i(\mathbf{x})}{\sum_j w_j^2 \Phi_j(\mathbf{x})} \operatorname{Log}_q(c_i) \right\| \quad (8)$$

なお、基底関数による重みの非負性を担保するため、 w_i^2 とした。係数の導出式は以下の通りとなる。

$$c_i, w_i = \operatorname{argmin}_{c_i \in SE(2), w_i \in \mathbb{R}} E(c_i, w_i) \quad (9)$$

$$E(c_i, w_i) = \frac{1}{K} \sum_k \left\| \sum_i \frac{w_i^2 \Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j w_j^2 \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \operatorname{Log}_{y_k}(c_i) \right\|_{\mathbf{x}_k} + \lambda \sum_i |w_i| \quad (10)$$

ただし、ここで 1 つ問題が残る。正則化項によって $|w_i|$ を小さくする効果が見込まれるが、式 (8) に w_i のスカラー倍に対する不定性があるため、正則化項をいくらでも小さく

できてしまい、疎性の効果が得られない。これを抑えるため、小さな定数の重みを持つ項として、 $w_0\Phi_0(\mathbf{x}) = \epsilon, c_0 = \mathbf{I}$ を導入した。ここでは \mathbf{I} は恒等変換である

2.5 実装

式 (9) の求解として、今回は勾配法を用いることとした。計算はすべて PyTorch によって実装し、勾配 $\frac{\partial E}{\partial c_i}, \frac{\partial E}{\partial w_i}$ は PyTorch の自動微分機能を利用して求めた。SE(2) の具体的な表現としては行列を始めとして様々あるが、ここでは対数写像や指数写像が閉形式で示される反可換二重複素数 [5] を採用した。

勾配法のアルゴリズムとして PyTorch に実装されている Adam を使い、係数の初期値は $c_i = y_i, w_i = \frac{1}{K}$ とした。1000 回の繰り返し処理の後、 $0.05 \times \max_i(w_i)$ を閾値として w_i を縮小し、さらに正則化項を加えず ($\lambda = 0$ として) 500 回の繰り返し処理によりさらに係数を最適化した。

3. シミュレーション評価

本章では、人工データによって生成した幾何変換場を用いて、幾何変換場のスパースカーネル回帰の有効性について評価を行う。

3.1 データの生成

式 (2) を用い、2 つの因子 (図 2a 左) の重み付き内測平均として幾何変換場を生成した。重みとしてガウスカーネルを採用した*3。

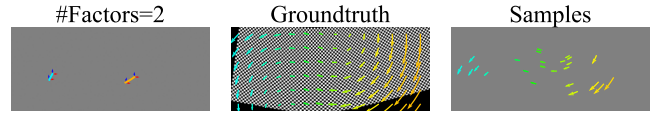
$$\Phi_i(\mathbf{x}) = \exp(-\gamma\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2^2)$$

回帰に用いるため、 $\gamma = 2.0 \times 10^{-5}$ で生成された幾何変換場から $K = 24$ 個の訓練サンプル $\{\mathbf{x}_k, y_k\}$ をランダムに抽出した (図 2a 右)。また、回帰結果を評価するため、 $L = 84$ 個のテストサンプル $\{\mathbf{x}_l, y_l\}$ を格子点上で抽出した (図 2a 中央)。

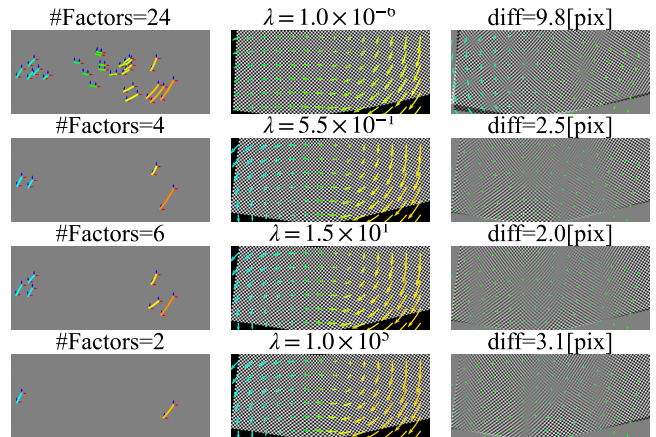
3.2 幾何変換場に対する回帰の結果

得られたサンプルを用いてスパースカーネル回帰により幾何変換場を再構成した。ここでは定数項のパラメータを $\epsilon = 10^{-6}$ とし、正則化項に対する重み λ は $[10^{-6}, 10^5]$ の区間を対数スケールで 35 等分し、評価を行った。また、基底関数のパラメータは、幾何変換場の生成に用いたのと同じ $\gamma = 2.0 \times 10^{-5}$ とした。

いくつかの代表的な λ に対する結果を図 2b に示す。図はそれぞれ、式 (10) を最小化することによって得られた係数 c_i 、式 (8) によって再構成された幾何変換場 $y(\mathbf{x})$ 、生成された幾何変換場と再構成された幾何変換場の差分を示している。 λ を大きくしていくにつれ、縮小推定された重



(a) 幾何変換場の真値と回帰に用いるサンプル。



(b) さまざまな λ に対して推定された因子とそこから生成された幾何変換場、および真値との差分。

図 2: シミュレーション評価に用いた幾何変換場とスパースモデリングの結果。色相は各点での回転の大きさを示す。

みと係数の組 $\{w_i, c_i\}$ の個数が少なくなっていることが分かる。ただ、 λ を大きくしすぎると、幾何変換場の差分が大きくなっていることが見て取れる。

また、幾何変換場の差分に関する定量的な尺度として、式 (6) と同様、訓練・テストサンプルそれぞれについて、点に変換によって写る先の座標の差を RMSE を用いて評価した。正則化項に対する重みに対する RMSE の値と、スパース回帰の結果として縮小推定された重みと係数の組 $\{w_i, c_i\}$ の個数の推移を図 3 に示す。 λ を大きくするとともに、推定された因子の個数が小さくなっていることが分かる。また、訓練データ・テストデータに対する RMSE は、いずれも λ を大きくするとともに減少し、その差も小さくなっている。ただし、 λ を大きくしすぎると、却って悪化する傾向が見て取れる。因子の数をある程度絞った方がうまく幾何変換場を表現できていることが分かる。

以上で見てきた通り、一般のスパース回帰と同様の特性が表れており、SE(2) の幾何変換場を対象としたスパースカーネル回帰が実現できていることが検証できた。

4. 画像位置合わせにおける変形場への適用

組織切片画像対に対し、スパースカーネル回帰による変形場のモデル化を試みた。OpenCV に実装された AKAZE[6] を用いて、画像間での特徴点の対応関係を取得した。なお、対応点には誤りも含まれるが、局所領域で RANSAC アルゴリズムにより剛体変換を推定することで外れ値を検出し、これを除去した。こうして得られた 96 の対応点それぞれに対し、近傍 10 個の対応点を用いてその点における

*3 [3] で用いた関数ではなく、RBF 補間などで用いられる一般的な関数を用いた。

