確率的画像処理におけるランジュバン方程式に基づく周辺化事後確率最大推定の構成法

乘松 渉

北海道大学 大学院情報科学研究科 複合情報学専攻 複雑系工学講座 混沌系工学研究室

平成 22 年度 修士論文

図 1: 平成 22 年 2 月 10 日. 講演する筆者. 修士論文発表会にて. (撮影: 井上純一先生)

複合情報学専攻 修士論文 (2011 年 2 月 10 日)

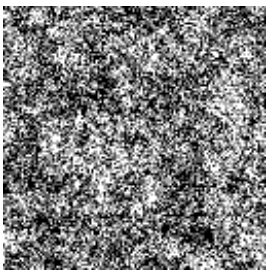
確率的画像処理におけるランジュバン方程式に基づく周辺化事後確率最大推定の構成法

混沌系工学研究室 修士 2 年 乘松渉

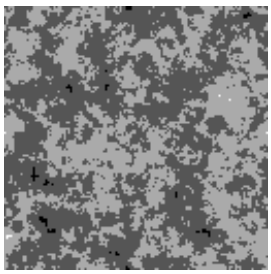
Construction of the maximizer of posterior marginal estimate by Langevin equation in probabilistic image processing

Research Group of Complex Systems Engineering
Laboratory of Chaos Systems Engineering
MC2 Wataru NORIMATSU

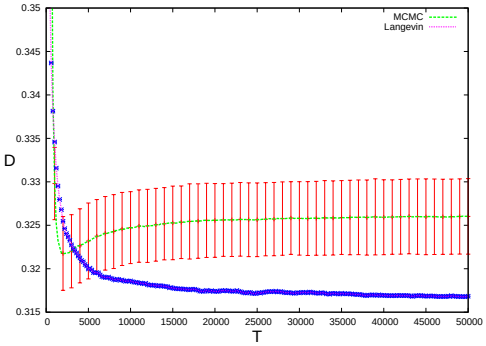
Abstract : We formulate the maximizer of posterior marginal (MPM) estimate for Bayesian probabilistic image processing by using the Langevin equation. We also evaluate the statistical performance from the view point of statistical mechanics of information. The multi-state Ising model and additive white Gaussian noise are introduced as the regularization term and the degrading process, respectively. Then, the recursion relations with respect to each pixel are derived via the extremum condition of energy function. The long-time average of time series derived from the recursion relations gives the maximum a posteriori (MAP) estimate and it is shown that the estimate is regarded as a kind of the average filter. We next try to construct the estimate using the fluctuation around the MAP estimate by solving stochastic differential equations and evaluate the performance both numerically and analytically. We perform an original image estimate by Markov chain Monte Carlo(MCMC) method numerically successively. Finally, we show that it is possible to construct the MPM estimate by simulating the Langevin equation numerically as well as the MCMC.



劣化画像



ランジュバン方程式に基づく
MPM 推定による修復画像



MCMC とランジュバン方程式の
長時間平均のためのステップ数に
よる自乗誤差の変化

研究業績 : 乘松渉, 井上純一, 確率的画像処理におけるランジュバン方程式に基づく周辺化事後確率最大推定の構成法, 電子情報通信学会ニューロコンピューティング研究会, 技術報告書 pp. 35-40, 2009 年 10 月 24 日 発表

目 次

1　はじめに

ベイズ統計に基づく画像処理はデジタル画像をマルコフ確率場で表現することで容易にスピン系の統計力学との対応がつく [1, 2, 3, 4, 5]. 従って, 画像復元や逆ハーフトーン処理などの原画像推定問題に対しては事後確率最大推定 (MAP) や周辺化事後確率最大推定 (MPM) に基づいて解を構成することができる. しかし, 高次元確率分布の期待値であるこれらの推定値を具体的に求めるためには画素間の強い相関のため, 正確な計算を遂行することはほぼ不可能であり, 多くの場合, マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) や平均場法などの近似的アプローチを取らざるを得ない. とりわけ, マルコフ連鎖モンテカルロ法は計算機上に事後確率をシミュレートし, そこからのサンプリングとして平均値を計算するが, その計算に時間がかかってしまうことがわかっている. 熱・統計力学ではこの方法とは別にランジュバン方程式に基づいてボルツマン分布を生成する方法が知られており, 最近ではニューラルネットワークの学習などに応用され, その性能が数理的に調べられてきている [6, 7]. そこで, 本研究では確率的画像処理に対して周辺化事後確率最大推定値を構成するため, ランジュバン方程式の長時間平均を用いた方法を提案し, その性能を計算機実験により評価する.

本稿の構成は以下の通りである. まず, 第 2 節で本研究で扱うデジタル画像についてを解説し, その後の計算機実験で実際に用いる原画像及びその生成アルゴリズムと, 劣化画像を生成する際の劣化過程について説明する. 第 3 節ではベイズ統計による MAP 推定と MPM 推定について説明する. 第 4 節で本研究で考えるデジタル画像処理 — ここでは画像修復に話を限定する — を表現するためにマルコフ確率場を導入する. ベイズの処方箋により, 対応するスピンモデルが明らかとなる. また, この節では事後確率の対数で与えられるハミルトニアンの極値条件から得られる反復式を用いて MAP 解を構成することを試みる. また, この MAP 解まわりの揺らぎの効果が修復率に与える影響を計算機実験および無限レンジ模型の解析により明らかにする. 第 5 節ではマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) による計算実験を行う. 続く第 6 節では事後確率をランジュバン方程式に基づき生成し, そこから各画素の長時間平均を算出することで周辺化事後確率最大推定を構成する方法を導入し, 計算機実験を行う. 得られた結果についての議論は第 7 節で行う. 最後の第 8 節はまとめである.

2　本研究で扱うデジタル画像について

本節では、本研究で扱うデジタル画像について説明する. 2 次元のデジタル画像は最小単位であるピクセル (画素) が正方格子上に並んで構成されている. 各画素は光の強さ (明度) を表す情報を持っており, この情報は階調値と呼ばれる 0 または自然数で表される. 画像のデータ形式には ASCII 形式と Binary 形式があり本研究では ASCII 形式の画像データを扱う. 特にここでは PGM 形式の画像について説明する.

図 2 に PGM 形式の画像をファイルのテキストエディタなどで開いた場合の様式 (左) とその画像 (右) を載せる. テキストの 1 行目は画像のデータ形式を表すものであり, 「P2」は画像がグレースケールでその階調値が全て ASCII 形式で格納されていることを示している. その他にも「P1」, 「P3」〜「P6」の記号があり, 「P1」は二値の白黒画像, 「P3」はフルカラーで共に ASCII 形式であることを示し, 「P3」〜「P6」は Binary 形式であることを示している.

空白行を挟んで 3 行目は画像の縦横のサイズを示している. 続いて 4 行目は階調値の最大値を表し, 5 行目からは各ピクセルの階調値を表している. 従って, この図の場合は縦 100 ピクセル, 横 100 ピクセルの 256 階調のグレースケール画像であるということを表している.

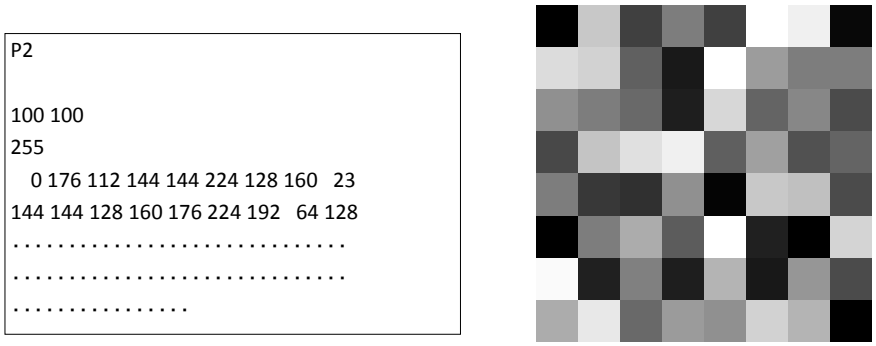


図 2: PGM 形式のテキスト様式 (左) と PGM 形式の画像 (右)

次に各画素のラベル付けを行う．M×N 個の画素が正方格子上に並んでいる状態を考えた場合, 各画素の位置を (x, y) $(x = 0, 1, \cdots, M-1,\ y = 0, 1, \cdots, N-1)$ と表すとする．また、周期境界条件 (periodic boundary condition) を設定し, $x = M-1$ であれば $x+1 = 0$, $x = 0$ であれば $x-1 = M-1$, $y = N-1$ であれば $y+1 = 0$, $y = 0$ であれば $y-1 = N-1$ と規定する．位置 (x, y) における階調値を $\xi_{x,y}$ と表すとする．この階調値 $\{\xi_{x,y} | x = 0, \cdots, M-1,\ y = 0, \cdots, N-1\}$ で与えられる画像は

$$\{\xi\} \equiv (\xi_{0,0}, \xi_{1,0}, \cdots, \xi_{M-1,0}, \xi_{0,1}, \cdots, \xi_{M-1,1}, \cdots, \xi_{M-1,N-1})^T \tag{1}$$

で表すことができる．

2.1 原画像: Q 階調イジング模型のスナップショット

本研究では, 扱う手法に対して定量的な性能評価をするために Q 階調イジング模型のギブス分布からのスナップショットを原画像に用いる．この原画像 $\{\xi\}$ のエネルギー関数とギブス分布は

$$H(\{\xi\}) = J_0 \sum_{(x,y)} \sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)} (\xi_{x,y} - \xi_{k,l})^2 \tag{2}$$

$$P(\{\xi\}) = \frac{\mathrm{e}^{-H(\{\xi\})}}{\sum_{\{\xi\}} \mathrm{e}^{-H(\{\xi\})}} \tag{3}$$

である．ここで, $\mathbb{N}(x, y)$ は画素 $\sigma_{x,y}$ の隣接画素集合であり, 正方格子の場合には $|\mathbb{N}(x, y)| \equiv z = 4$ であることに注意する．$J_0 > 0$ であり, このエネルギー関数は, 隣接する画素対が同じ階調値を取ることでエネルギーが小さくなることから, スナップショット画像の連続性を示している．また, このスナップショットはパラメータ J_0 の値に依存することに注意する．J_0 の逆数を温度 $T = J_0^{-1}$ と定義し, この温度を $T = 0.95, 1.35, 1.75$ と値を変えたときのそれぞれの温度でのスナップショット (4 階調) は図 3 のようになる．T は温度であるので, T の値が大きくなるほどエネルギーがなりやすく隣接する画素と違う階調値をとろうとする影響が強い．従って, 図 3 の右側の図のように色がまばらでざらざらとした模様の画像が現れる．逆に温度が小さくなっていくとエネルギーが小さくなりやすく隣接する画素と同じ階調値をとろうとする影響が強くなるので, 図 3 の左側の図のように同色による塊が大きい画像が現れる．

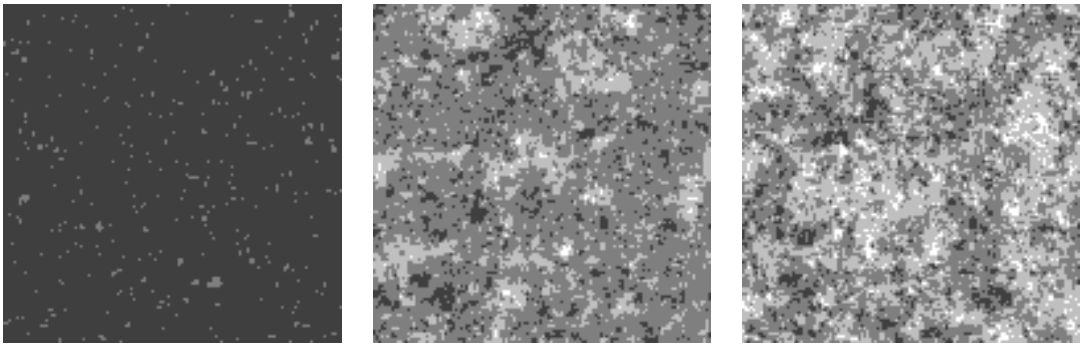


図 3: 4 階調のイジング模型からのスナップショット. 左から $T = 0.95, 1.35, 1.75$ に選んである. 画像サイズは 128×128

2.1.1 マルコフ連鎖モンテカルロ法による画像生成アルゴリズム

マルコフ連鎖モンテカルロ法は, 与えられた確率分布の平均, 分散などの統計量を乱数を用いて計算するアルゴリズムであり, 多くの互いに独立なサンプルを与えられた分布に従ってランダムに生成する方法である. ここでは, マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いて, 式 (3) で与えられたギブス分布のサンプルを 1 つだけランダムに生成し, スナップショット画像を生成する手順を説明する. ここで T_1, T_2, T_{MCS} は自然数であるとする.

- 手順 1 : 区間 $[0, 1]$ で一様乱数を T_1 回発生させる.
- 手順 2 : 各画素 (x, y) に対して区間 $[0, Q)$ で一様乱数を発生させ, その整数部分を $\xi_{x,y}$ の階調値として設定する.
- 手順 3 : 区間 $[0, 1]$ で一様乱数を T_2 回発生させる.
- 手順 4 : $t \Leftarrow 0$ と設定する.
- 手順 5 : $t \Leftarrow t+1$ とし, 各画素 $(x.y)$ に対して区間 $[0, Q)$ で一様乱数を発生させ, その整数部分を $\xi'_{x,y}$ として設定する. 区間 $(0, 1)$ で一様乱数 $f_{x,y}$ を発生させ,

$$\frac{\exp\bigl(-H_{x,y}(\xi'_{x,y})\bigr)}{\exp\bigl(-H_{x,y}(\xi_{x,y})\bigr)} > f_{x,y} \tag{4}$$

  を満たす場合に $\xi_{x,y} \Leftarrow \xi'_{x,y}$ として更新する.
- 手順 6 : $t < T_{MCS}$ であれば手順 5 に戻り, $t = T_{MCS}$ ならば終了する.

2.2 劣化過程

劣化過程として各画素毎に独立に生成されるノイズとして平均 0, 分散 σ^2 の加法的白色ガウスノイズを考える. 各画素毎に生成されるノイズを $\{\eta\}$ とすると

$$P(\{\eta\}) \quad = \quad \frac{e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{(x,y)}\eta^2_{x,y}}}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^{MN}} \tag{5}$$

で与えられる. このノイズ $\{\eta\}$ と原画像 $\{\xi\}$ から劣化画像 $\{\tau\}$ が

$$\tau_{x,y} \quad = \quad a_0\xi_{x,y} + a\eta_{x,y} \tag{6}$$

の劣化過程によって与えられ, その結果を量子化したものを劣化画像とする. (本論文中では, $a = a_0 = 1.0$ とする.) [1] この時, 条件付き確率 $P(\{\tau\}|\{\xi\})$ は

$$\begin{aligned} P(\{\tau\}|\{\xi\}) &= P(\{\eta\} = \{\tau\} - \{\xi\}) \\ &= \frac{e^{h\sum_{(x,y)}\{\xi_{x,y}-\tau_{x,y}\}^2}}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^{MN}} \qquad (7) \\ h &= \frac{1}{2\sigma^2} \qquad (8) \end{aligned}$$

のように表すことができる.

3 ベイズ統計と MAP/MPM 推定

本研究で扱うのは, 劣化画像 $\{\tau\}$ が与えられたもとで原画像 $\{\xi\}$ を推定する問題である. 原画像 $\{\xi\}$ の推定値を $\{\sigma\}$ とすると, 事後確率 $P(\{\sigma\}|\{\tau\})$ はベイズの公式より

$$\begin{aligned} P(\{\sigma\}|\{\tau\}) &= \frac{P(\{\tau\}|\{\sigma\})P(\{\sigma\})}{P(\{\tau\})} \\ &= \frac{P(\{\tau\}|\{\sigma\})P(\{\sigma\})}{\sum_\sigma P(\{\tau\}|\{\sigma\})P(\{\sigma\})} \qquad (9) \end{aligned}$$

と表すことができる. ここで $\sum_{\{\sigma\}}(\cdots) = \sum_{\sigma_1=0}^{Q-1}\sum_{\sigma_2=0}^{Q-1}\cdots\sum_{\sigma_{MN}=0}^{Q-1}(\cdots)$ であると定義する. この事後確率 (9) を最大化するような $\{\sigma\}$ を推定することを最大事後確率推定 (Maximum A posteriori 推定 : MAP 推定) と呼ぶ.

また事後確率 (9) を注目する画素 $\sigma_{x,y}$ の周りで周辺化すると

$$P(\sigma_{x,y}|\{\tau\}) \equiv \sum_{\sigma\neq\sigma_{x,y}} P(\{\sigma\}|\{\tau\}) \qquad (10)$$

のように周辺化事後確率が与えられる. この周辺化事後確率を最大にするような $\sigma_{x,y}$ を推定するのが周辺化事後確率最大推定 (Maximizer of Posterior Marginals : MPM 推定) と呼ぶ.

4 マルコフ確率場による定式化

Q 階調の濃淡画像を考え, 各画素が 2 次元正方格子上に配置されている状況を考える. ベイズの処方箋に従えば, ガウス型正則化項で事前確率, 加法的白色正規ノイズ項で劣化過程 (尤度関数) をそれぞれ確率モデル化すると, 事後確率は $\propto \mathrm{e}^{-\beta H}$ に従うことがわかる. よって, 制御変数 β の $\beta \to \infty$ 極限で与えられる MAP 解は次のハミルトニアン:

$$H = J\sum_{(x,y)}\sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)}(\sigma_{x,y}-\sigma_{k,l})^2 + h\sum_{(x,y)}(\sigma_{x,y}-\tau_{x,y})^2 \qquad (11)$$

の極値で与えられることになる.

[1] 本稿の計算機実験では全てこの原画像と劣化過程 (画像) を用いる.

4.1 揺らぎを用いた確率的画像処理

ベイズ統計によれば, 上述で定義されたマルコフ確率場に対し, 事後確率を注目する画素を除いて周辺化し, 画素ごとにベイズ推定を行うことができる. この MPM 推定は MAP 解がハミルトニアンの極値である解空間の「一点」を解とするのに対し, 事後分布で記述される画素ごとの「揺らぎ」を取り入れた確率的情報処理であると言える. 画像修復などでノイズが大きい場合には, 上述の MPM 推定が MAP 推定と比べ自乗誤差をより小さくすることが知られている [1, 2, 3, 5]. 本稿では, この MPM 推定をランジュバン方程式を用いて構成することを目標とするが, 事後確率で与えられる揺らぎではなく, MAP 解のまわりのガウス型揺らぎを用いて画像修復を行った場合を予備実験として調べる. そこで以下では, まず, MAP 解のまわりの揺らぎが修復率に与える影響を数値的/解析的に調べることにする.

4.2 MAP 解再考

MAP 解のまわりのガウス型揺らぎを扱う前に, まずは我々のマルコフ確率場 (11) に対する MAP 解について検討してみる. ここではデジタル画像を考えているので, 各画素 $\sigma_{x,y} \in \{0, Q-1\}$ は離散値をとるが, これを暫定的に「連続変数」とみなすことにより, 具体的な極値条件が $\partial H/\partial\sigma_{x,y} = 0$ で与えられる. 従って, この極値条件を用いて MAP 解を得るためのアルゴリズムを構成することができる. 具体的には劣化画像 $\{\tau\}$ が与えられた際,

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial \sigma_{x,y}} &= 2\left\{\sum_{(k.l)\in\mathbb{N}(x,y)} (\sigma_{x,y} - \sigma_{k,l}) + h(\sigma_{x,y} - \tau_{k,l})\right\} \\ &= 2\left\{(zJ+h)\sigma_{x,y} - J\sum_{(k.l)\in\mathbb{N}(x,y)} \sigma_{k,l} - h\tau_{k,l}\right\} = 0 \end{aligned} \tag{12}$$

であるので,

$$(zJ+h)\sigma_{x,y} = J\sum_{(k.l)\in\mathbb{N}(x,y)} \sigma_{k,l} + h\tau_{k,l} \tag{13}$$

すなわち

$$\sigma_{x,y} = \frac{1}{zJ+h}\left\{J\sum_{(k.l)\in\mathbb{N}(x,y)} \sigma_{k,l} + h\tau_{k,l}\right\} \tag{14}$$

となり, $\gamma \equiv h/J$ と定義することで時間を t とした次の更新式:

$$\sigma_{x,y}^{(t+1)} = \frac{1}{z+\gamma}\left\{\sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)} \sigma_{k,l}^{(t)} + \gamma\tau_{x,y}\right\} \tag{15}$$

の収束点を事後確率最大推定値 (MAP) として採用することができる. ハミルトニアンのエネルギー・ランドスケープ構造が複雑ではなく, 最小値が一意に決まるのであれば, 上記 (15) 式の反復後に得られる収束点は正確に MAP 解に等しくなる.

4.3 MAP 解まわりのガウス型揺らぎの効果

まず, H の極値まわりの揺らぎを考えることである種の「有限温度推定」を構成し, その解が MAP 解とどの程度異なるのかを自乗誤差基準の観点から調べる. この場合の「事後確率」$P(\{\sigma\}|\{\tau\})$ が

$$\begin{aligned} P(\{\sigma\}|\{\tau\}) &\propto \exp\left[-\beta\sum_{(x,y)}\left\{\sigma_{x,y}-\frac{1}{z+\gamma}\left(\sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)}\sigma_{k,l}+\gamma\tau_{x,y}\right)\right\}^2\right] \\ &\equiv \mathrm{e}^{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{(x,y)}\eta_{x,y}^2} \end{aligned} \tag{16}$$

で与えられるとすると, $\eta_{x,y}$ は平均ゼロ, 分散が $(1/2\beta)$ の正規分布に従う. 従って, このことから, 次の確率的反復式 (決定論的反復式 + 揺らぎ) を構成することができる.

$$\sigma_{x,y}^{(t+1)} = \frac{1}{z+\gamma}\left\{\sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)}\sigma_{k,l}^{(t)}+\gamma\tau_{x,y}\right\}+\eta_{x,y}^{(t)} \tag{17}$$

ここに, 変数 $\eta_{x,y}^{(t)}$ は加法的白色正規ノイズであり

$$\langle\eta_{x,y}^{(t)}\eta_{k,l}^{(t')}\rangle = (2\beta)^{-1}\,\delta_{(x,y),(k,l)}\delta_{t,t'} \tag{18}$$

を満たす. (17) 式で与えられる確率差分方程式を反復的に解き, その長時間平均値を各画素の推定値とする. つまり

$$\overline{\sigma}_{x,y}\equiv\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\sigma_{x,y}(t)$$

を推定値として採用する. このとき, 原画像を $\{\xi\}$ で表すと, 自乗誤差は

$$D = \frac{1}{N}\sum_{(x,y)}(\overline{\sigma}_{x,y}-\xi_{x,y})^2 \tag{19}$$

で与えられる. アルゴリズムの観点からは, 式 (17) の反復過程で $\beta\to\infty$ と制御することで精度良く MAP 解を求めることができる. 以下ではこの MAP 解, および, MAP 解まわりのガウス型揺らぎの効果を計算機実験および解析計算により評価する.

4.4 計算機実験

ここでは画像修復問題について上記方法の有効性を計算機実験により確認する. 計算機の環境は以下のとおりである.

CPU:Intel Core2 Quad Q9400 2.66GHz, 搭載メモリ:DDR2-800 4GHz, OS:Ubuntu10.10 64bit

2.1.1 節の手順で $Ts=J_0^{-1}=1.75$ と設定して得られる 4 階調, 128×128 の原画像を用い, 2.2 節の劣化過程でガウスノイズの分散を 1 として劣化画像を作成した. この時の原画像と劣化画像を次図に載せる. この時, 原画像と劣化画像との差の分散の実測値が $\sigma^2\approx 0.785$ と求められる. 平均 0, 分散 1 のガウスノイズを与えているので, 理論的には原画像と劣化画像の差の分散は与えたノイズの分散と一致するのだが, ノイズを与えた際に整数化を行って劣化画像を作成しているのでこの様なズレが生じている.

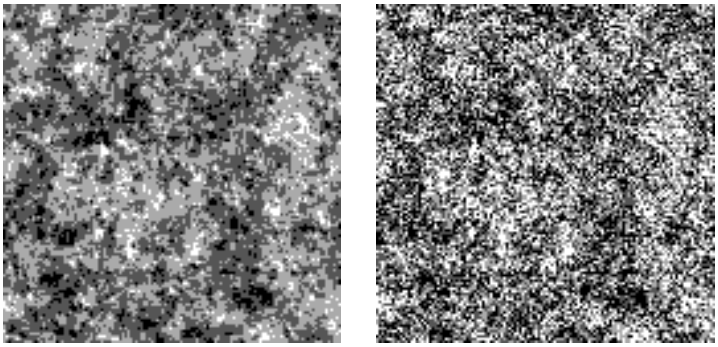


図 4: 原画像 (左) と劣化画像 (右).

4.4.1 修復結果

まずは (15) 式の反復によって得られる MAP 解の自乗誤差性能を評価する．このとき, 自乗誤差 (19) の 2 つのハイパーパラメータの比: $\gamma = h/J$ による変化を調べる．この時, 原画像と劣化画像の差の分散より, 自乗誤差を最小とする h の理論値は, 式 (8) から計算できる．従って, γ の理論値は

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{h}{J_0} = \frac{Ts}{2\sigma^2} \\ &\approx 1.11 \end{aligned} \tag{20}$$

と求めることができる．この理論値は, 実行した修復が正しく動作しているのかのを評価するのに用いる．劣化画像から (15) 式の反復の長時間平均値を用いて原画像を修復した際, 求めた推定値に対して整数化を行って修復画像としているので, 理論値 (20) とのズレが生じると考えられる．そのため図 5 には, 推定値を整数化しないで自乗誤差を計算した場合と推定値を整数化して修復画像とし自乗誤差を計算した場合両方での γ による自乗誤差の変化のグラフを載せる．

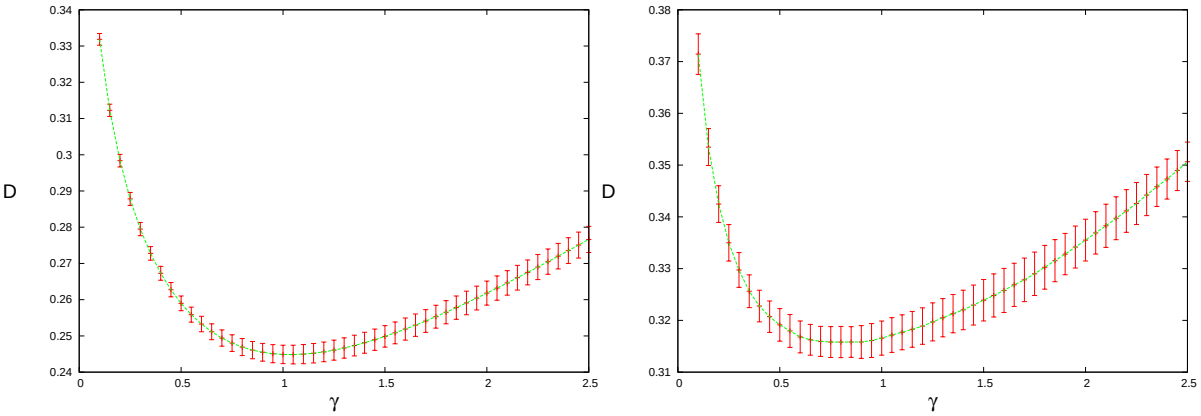


図 5: 推定値を整数化しなかった場合 (左) と推定値を整数化した場合 (右) での γ による自乗誤差の変化

左の図より, 自乗誤差は $\gamma \simeq 1.1$ で最小値をとることがわかる．理論値 (20) とも一致することからこの画像修復を正しく動作したといえる．また右の図では $\gamma \simeq 0.8$ で最小値をとっており, この γ の値を用いて, 同様に (17) 式の反復の長時間平均値を用いて原画像を修復した場合の自乗誤差の β

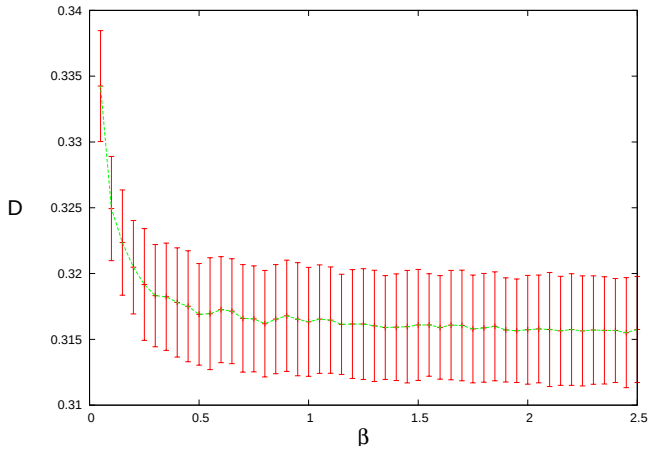


図 6: 自乗誤差の β 依存性.

依存性を図 6 に載せる.
また, 時間間隔 T における長時間平均値に対する自乗誤差の振る舞いを

$$D(T) \quad = \quad \frac{1}{N}\sum_{(x,y)}\left(\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T}\sigma_{x,y}(t)-\xi_{x,y}\right)^2 \tag{21}$$

で定義し, これをいくつかの β の値に対して, 図 7 にプロットする. この図から, 時間平均を取るべ

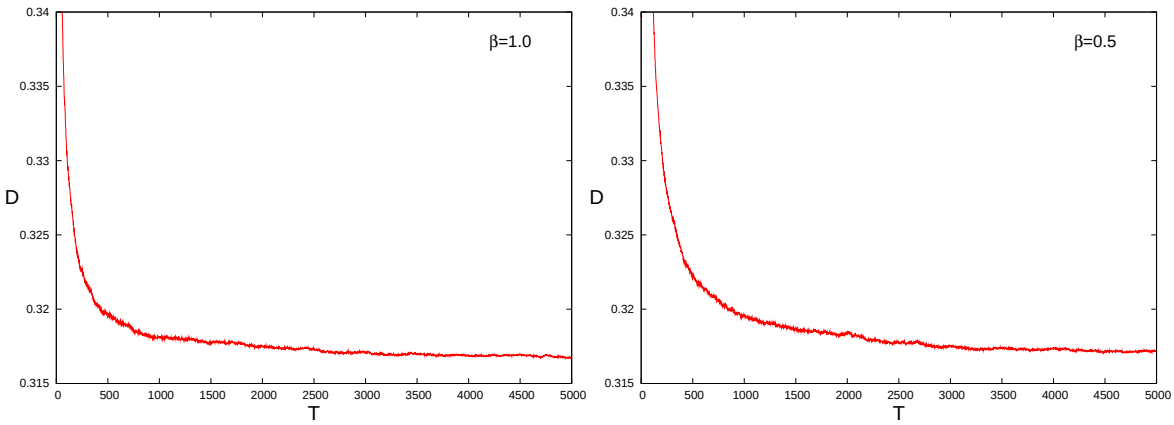


図 7: 自乗誤差 (21) のサンプリング数 T 依存性. $\beta = 0.5$ (左), および $\beta = 1.0$ (右). $T \to \infty$ の極限が図 5 での平衡状態を与える.

きサンプリング数 T を大きくとることで, 自乗誤差は図 5 で与えられる平衡状態へ漸近していくことがわかる. また, 結果として得られる修復画像を図 8 (右) に載せる. さらに図 9 では自乗誤差の γ 依存性をいくつかの β に対してプロットした. 最適な γ 値は β の減少とともに大きい値をとることがわかる. また, β の増加とともに平均自乗誤差は減少していくことから, MAP 解のまわりのガウスノイズによる揺らぎは確率的画像処理としてうまく機能しないことがわかる. 事後分布の揺らぎを用いた確率的画像処理については第 6 節で議論する. この振る舞いの妥当性は次節の無限レンジ模型の解析で再現できる.

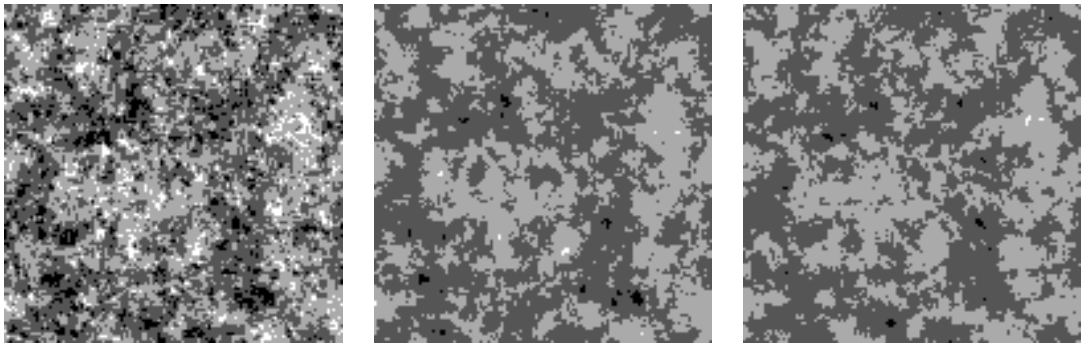


図 8: 左から原画像, $\beta=\infty$ とした場合の修復画像, $\beta\to\infty$ とした場合の修復画像 ($z=4$)

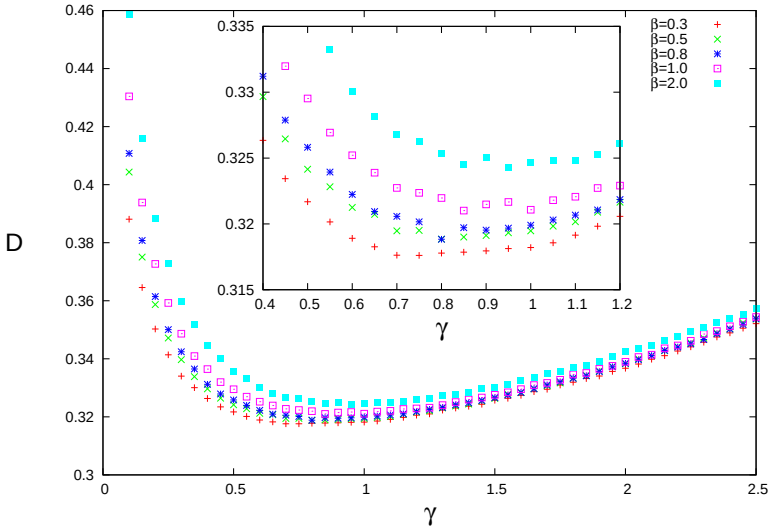


図 9: 図 6 の原画像, 劣化画像に対する自乗誤差の γ 依存性 ($z=4$) の数値実験による評価. いくつかの β に対する振る舞い. この振る舞いの妥当性は無限レンジ模型の解析で再現できる.

4.5 無限レンジ模型とその解析

無限レンジ模型での解析ではハミルトニアンを

$$H=-\frac{J}{N}\sum_{ij}(\sigma_i-\sigma_j)^2-h\sum_i(\sigma_i-\tau_i)^2$$

と書き換える. i,j についての和は全ての画素対に対してとることに注意されたい. ここで原画像 $\{\xi\}$ はギブス分布 $P(\{\xi\})=Z_0^{-1}\mathrm{e}^{-N^{-1}J_0\sum_{ij}(\xi_i-\xi_j)^2}$ からのスナップショットとする (Z_0 は確率の規格化定数). すると, 原画像はハイパーパラメータ J_0 によって特徴付けられるので, ベイズ最適解に対する自乗誤差を定量的に評価することができる. また, 画像の劣化過程 $\xi_i\to\tau_i$ は各画素ごとに条件付き確率: $P(\tau_i|\xi_i)=(\sqrt{2\pi a^2})^{-1}\mathrm{e}^{-(\tau_i-a_0\xi_i)^2/2a^2}$ で与えられる. 無限レンジ模型の場合, ハミルトニアンの極値条件は

$$\sigma_i \quad = \quad \frac{Jm+h\tau_i}{J+h},\quad m=\frac{1}{N}\sum_i\sigma_i \tag{22}$$

であり, これが MAP 解を与える. 従って, 「事後確率」がこの極値からのガウス型揺らぎとして

$$P(\{\sigma\}|\{\tau\}) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\sum_i(\sigma_i-\frac{Jm+h\tau_i}{J+h})^2}\delta(Nm-\sum_i\sigma_i)}{\sum_{\{\sigma\}}\mathrm{e}^{-\beta\sum_i(\sigma_i-\frac{Jm+h\tau_i}{J+h})^2}\delta(Nm-\sum_i\sigma_i)} \tag{23}$$

$$\sum_{\{\sigma\}}(\cdots) = \sum_{\sigma_1=0}^{Q-1}\cdots\sum_{\sigma_N=0}^{Q-1}(\cdots)$$

で与えられるものと仮定すると, このシステムの分配関数 Z は大自由度極限 $N\to\infty$ において

$$\begin{aligned} Z &= \prod_{i=1}^{N}\sum_{\sigma_i=0}^{Q-1}\int_{-i\infty}^{+i\infty}\frac{d\tilde{m}}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}dm \\ &\times \mathrm{e}^{N\tilde{m}m-\beta\sum_i(\sigma_i-\frac{Jm+h\tau_i}{J+h})^2-\tilde{m}\sum_i\sigma_i} \\ &\simeq \mathrm{e}^{N\tilde{m}m+N\log\{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-\beta(\sigma-\frac{Jm+h\tau}{J+h})^2-\tilde{m}\sigma}\}} \equiv \mathrm{e}^{N\ll f(m,\tilde{m})\gg} \end{aligned} \tag{24}$$

すなわち

$$\lim_{N\to\infty}\frac{\log Z}{N} = \sup_{m,\tilde{m}}\ll f(m,\tilde{m})\gg$$

と鞍点評価できる. ここで, (23) 式においてはデルタ関数で極値条件 (22) を状態和 Z に反映させ, (24) 式においては, これをデルタ関数のフーリエ変換を用いて書き換えたことに注意されたい. ここに, 括弧 $\ll\cdots\gg$ は原画像の選び方, および, 劣化過程についての平均操作を意味する. また, $m,\tilde{m}$ は秩序変数であり, 単位画素あたりの平均自由エネルギー $\ll f(m,\tilde{m})\gg$ に関する鞍点条件 $\partial\ll f(m,\tilde{m})\gg/\partial m=\partial\ll f(m,\tilde{m})\gg/\partial\tilde{m}=0$ から決定される. 具体的に $m,\tilde{m}$ の満たすべき鞍点方程式は

$$\begin{aligned} m &= \left[\int_{-\infty}^{\infty}Dx\,\frac{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\sigma\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}}{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}}\right] \\ \tilde{m} &= \frac{-2\beta}{1+\gamma}\left[\int_{-\infty}^{\infty}Dx\,\frac{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\Omega_{\xi,\sigma}(x)\,\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}}{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}}\right] \end{aligned}$$

となる. ただし, 式を煩雑にすることを避けるため, $\Omega_{\xi,\sigma}(x)$ を次で定義したことに注意されたい.

$$\Omega_{\xi,\sigma}(x) \equiv \frac{(1+\gamma)\,\sigma-m-\gamma(ax+a_0\xi)}{1+\gamma}$$

また, 括弧 $[\cdots]$ は具体的に次式で与えられる平均操作を意味する.

$$[\cdots] = \frac{\sum_{\xi=0}^{Q-1}(\cdots)\,\mathrm{e}^{-J_0\xi^2+2J_0m_0\xi}}{\sum_{\xi=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-J_0\xi^2+2J_0m_0\xi}}$$

ここで原画像の秩序変数 m_0 は次で与えられる.

$$m_0 = \frac{1}{N}\sum_i\xi_i = \frac{\sum_{\xi=0}^{Q-1}\xi\,\mathrm{e}^{-J_0\xi^2+2J_0m_0\xi}}{\sum_{\xi=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-J_0\xi^2+2J_0m_0\xi}}$$

これらの解 $m_0,m,\tilde{m}$ に対し, 平均自乗誤差は

$$\begin{aligned} D &= \left[\int_{-\infty}^{\infty}Dx\,\{\xi-\Theta_Q(L_{m,\tilde{m}}(x))\}^2\right] \\ L_{m,\tilde{m}}(x) &\equiv \frac{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\Omega_{\xi,\sigma}(x)\,\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}}{\sum_{\sigma=0}^{Q-1}\mathrm{e}^{-\beta\Omega_{\xi,\sigma}(x)^2-\tilde{m}\sigma}} \end{aligned}$$

で与えられる．ここに $\Theta_Q(x)$ は Q 階調に拡張された階段関数である．また, $Dx = (dx/\sqrt{2\pi})\,\mathrm{e}^{-x^2/2}$ である．解析結果の一部を図 10 に載せる．ここでは簡単のため 3 階調 ($Q = 3$) を扱い, 原画像の生

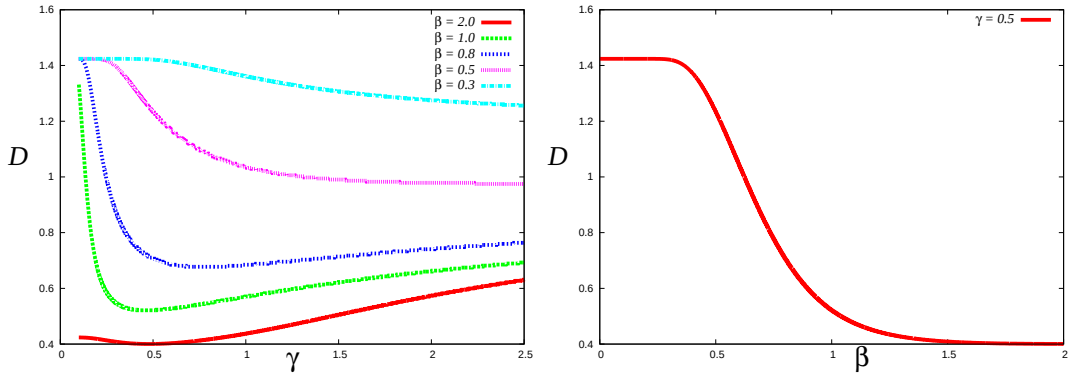


図 10: 図 9 のシミュレーション結果に対応する自乗誤差の γ 依存性 (左). $Q = 3, J_0 = a_0 = a = 1$ に選んだ．右図は図 6 のシミュレーション結果に対応する $\gamma = 0.5$ に固定した場合の自乗誤差の β 依存性.

成逆温度を $J_0 = 1$ (このときの磁化は $m_0 = 1$), 正規雑音のシグナル/ノイズ比を $a_0 = a = 1$ で与えた．従って, 最適なハイパーパラメータは $\gamma = h/J = 0.5$ である．図 10 (左) に β を様々変えた場合の自乗誤差の γ 依存性をプロットする．$\beta = 2.0$ の場合には鞍点方程式の数値計算の精度上, ほぼ MAP 解が得られたと考えてよく (実質的な $\beta \to \infty$ 極限), この場合は図 10 (左) より, 自乗誤差を最小とする γ は $\gamma = 0.5$ で与えられる．一方, 徐々に β の値を減少させ, MAP 解のまわりの揺らぎの効果を取り込むと, 自乗誤差は増加し, また, 自乗誤差の最小値を与える γ の値も 0.5 から外れていく．この様子を γ の値を最適値 $\gamma = 0.5$ に固定し, 自乗誤差を β の関数としてプロットしたものが図 10 (右) である．これらの結果は前節でみた数値計算結果をサポートすることがわかる．

5 マルコフ連鎖モンテカルロ法による計算機実験

ここではマルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた画像修復を行い．その性能を計算機実験によって確認する．用いるエネルギー関数は,

$$H(\{\sigma\}) \quad = \quad J \sum_{(x,y)} \sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)} (\sigma_{x,y} - \sigma_{k,l})^2 + h \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y} - \sigma_{x,y})^2 \tag{25}$$

である．分布は式 (3) に従う．1 つだけのサンプルを取るのであれば 2.1.1 節と同様の手順であるが, ここではモンテカルロステップ T_{MCS} で全てのサンプルの和を計算して, T_{MCS} で割った平均値を推定値 $\{\sigma\}$ として求めている．以下に修復のアルゴリズムについて説明する．ステップ t でのサンプルを $\{\sigma^{(t)}\}$ とし, T_1, T_{MCS} は自然数とする．

- 手順 1：初期値を $\sigma^{(0)}_{x,y} \Leftarrow \tau_{x,y}$ と設定する．
- 手順 2：区間 $[0, 1]$ で一様乱数を T_1 回発生させる．
- 手順 3：$t \Leftarrow 0$ と設定する．

- 手順 4 : $t \Leftarrow t+1$ とし, 各画素 $(x.y)$ に対して区間 $[0, Q)$ で一様乱数を発生させ, その整数部分を $\sigma'_{x,y}$ として設定する. 区間 $(0,1)$ で一様乱数 $f_{x,y}$ を発生させ,

$$\frac{\exp\left(-H_{x,y}(\sigma'_{x,y})\right)}{\exp\left(-H_{x,y}(\sigma^{(t-1)}_{x,y})\right)} > f_{x,y} \tag{26}$$

  を満たす場合に $\sigma^{(t)}_{x,y} \Leftarrow \sigma'_{x,y}$, そうでない場合は $\sigma^{(t)}_{x,y} \Leftarrow \sigma^{(t-1)}_{x,y}$ として更新する.

- 手順 5 : $\sum_{i=0}^{t-1} \sigma^{(i)}_{x,y} + \sigma^{(t)}_{x,y}$ を計算する.

- 手順 6 : $t < T_{MCS}$ であれば手順 4 に戻り, $t = T_{MCS}$ ならば手順 7 へ進む.

- 手順 7 :

$$\overline{\sigma}_{x,y} \quad = \quad \frac{1}{T_{MCS}} \sum_{t=0}^{T_{MCS}} \sigma^{(t)}_{x,y} \tag{27}$$

  を計算し, その結果を整数化したものを修復画像とする.

このアルゴリズムを用いて修復したときの $\gamma = h/J$ による自乗誤差の変化を図 11 に示した. この

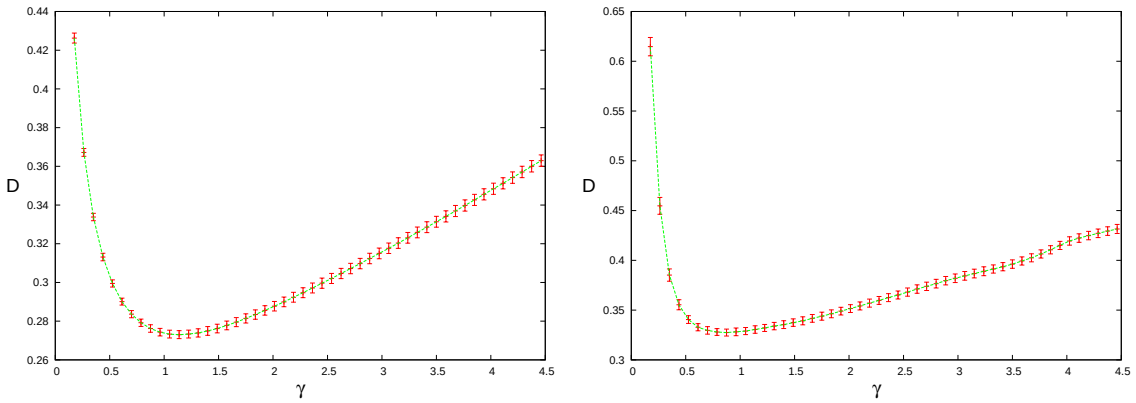


図 11: $\overline{\sigma}_{x,y}$ の整数化を行わなかった場合 (左) と整数化を行った場合 (右) の γ による自乗誤差の変化

図でも 4.4.1 節と同様に推定値の整数化を行わなかった場合と, 整数化して修復画像とした場合の両方のグラフを載せている. 左の図より, 自乗誤差は $\gamma \simeq 1.1$ で最小値をとり, 理論値 (20) とも一致するのでこのマルコフ連鎖モンテカルロ法による画像修復も正しく動作していると言える. また右の図から, $\gamma \simeq 0.8$ で最小値をとることがわかる. この γ の値を用いた時の修復画像を原画像と共に図 12 に載せる.

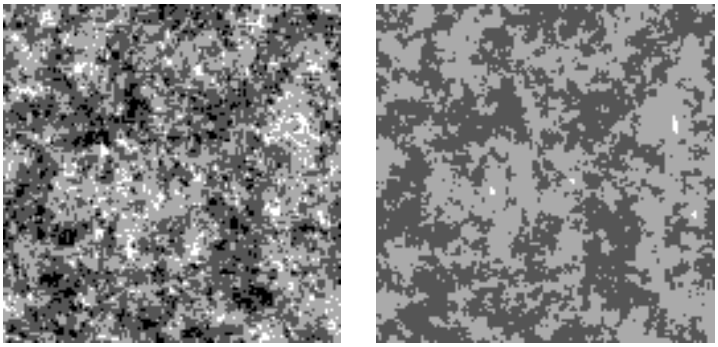


図 12: 原画像 (左) と MCMC 法による修復画像 (右).

また, この時モンテカルロステップ T_{MCS} に対する自乗誤差の変化を式 (21) と同様に

$$D(T_{MCS}) = \frac{1}{N}\sum_{(x,y)}\left(\frac{1}{T_{MCS}}\sum_{t=0}^{T_{MCS}}\sigma_{x,y}(t) - \xi_{x,y}\right)^2 \tag{28}$$

と定義し, その結果をプロットしたものを図 13 に載せる.

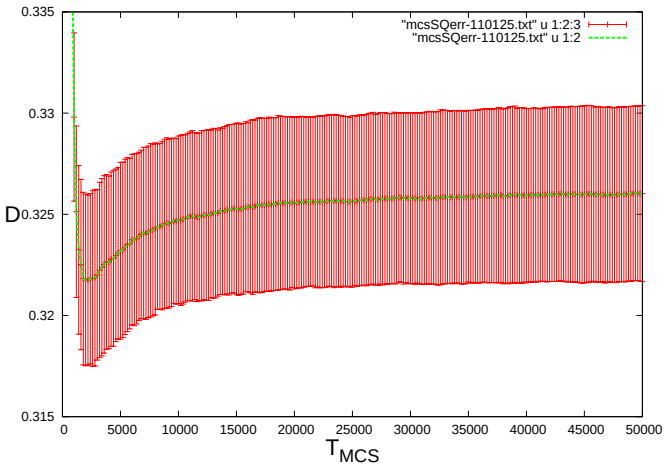


図 13: モンテカルロステップ T_{MCS} による自乗誤差の変化.

6 ランジュバン方程式と事後分布

4 節では MAP 解の周りのガウス型揺らぎを用いた推定法を確率的差分方程式を用いて構成したが, この種の確率微分方程式を用いて, 事後分布を直接生成することもできる. 具体的には, 次のランジュバン方程式を用いればよい.

$$\frac{d\sigma_{x,y}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \sigma_{x,y}} + \frac{dR_t}{dt},\ R_t = \sqrt{2t\beta^{-1}}R_l \tag{29}$$

ここに, R_l は独立な正規分布 $\mathcal{N}(0,1)$ からのスナップショットである. 実際, 上記方程式からの状態生成を繰り返すと, そのサンプリング点が従う確率密度が事後確率 $\sim \mathrm{e}^{-\beta H}$ に従うことを一般的に示すことができる [8, 9].

さて, 画像修復の場合, エネルギー関数 H は (11) 式で与えられるので, 具体的に上記方程式は, 時間微分を微小時間 α で適切に離散化すると

$$\sigma_{x,y}^{(t+1)} = \sigma_{x,y}^{(t)} - 2J\alpha \left\{ \sum_{(k,l)\in\mathbb{N}(x,y)} (\sigma_{x,y}^{(t)} - \sigma_{k,l}) + \gamma(\sigma_{x,y}^{(t)} - \tau_{x,y}) \right\} + \sqrt{2\alpha\beta^{-1}} R_l \tag{30}$$

と書き直すことができる. ここに, α は微小時間刻みである. このランジュバン方程式を $\beta = 1$ に設定して十分まわし, その長時間平均値

$$\overline{\sigma}_{x,y} \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T} \sigma_{x,y}^{(t)} \tag{31}$$

を離散化したものを各ピクセルごとの推定値とすれば周辺化事後確率最大推定値 (MPM) が得られる. その導出から明らかなように, 方程式 (30) はハミルトニアンの勾配に基づくため, MCMC 法によるサンプリングでの期待値計算と比べ計算時間の短縮が期待できる.

6.1 数値実験

まずはこれまでの実験と同様に, 推定値を整数化しなかった場合と, 整数化を行った修復画像での γ によるそれぞれ自乗誤差の変化を調べ, 図 (14) に載せた.

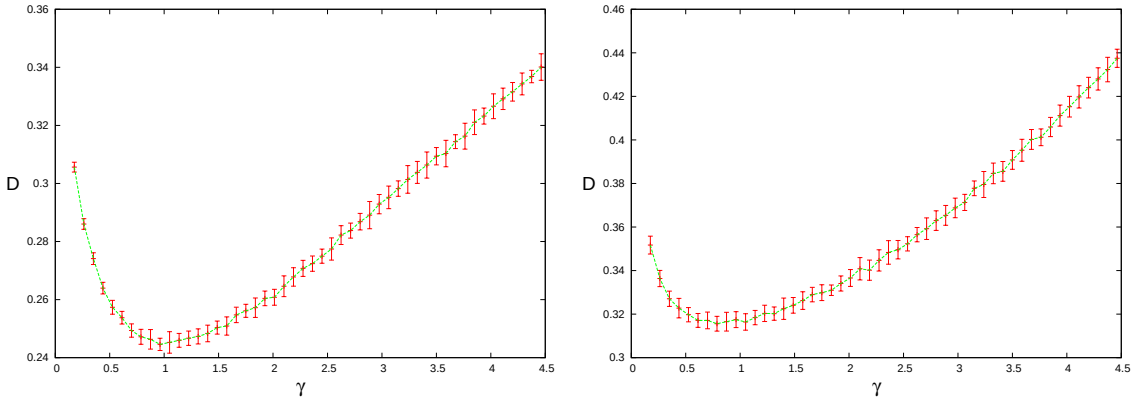


図 14: 整数化を行わなかった場合 (左) と整数化を行い修復画像とした場合 (右) での γ による自乗誤差の変化.

左の図より, 自乗誤差は $\gamma \simeq 1.0$ で最小値をとなり, γ の理論値 (20) に近い値をとっているので, ランジュバン方程式 (30) から生成される画素の長時間平均 (31) により構成した周辺化事後確率最大推定 (画素ごとのベイズ推定値) は正しく推定できていると評価できる. また右の図から, $\gamma \simeq 0.8$ で最小値をとることがわかる. この γ 値を用いた時, 式 (21) による自乗誤差の動的振る舞いを図 15 に載せる.

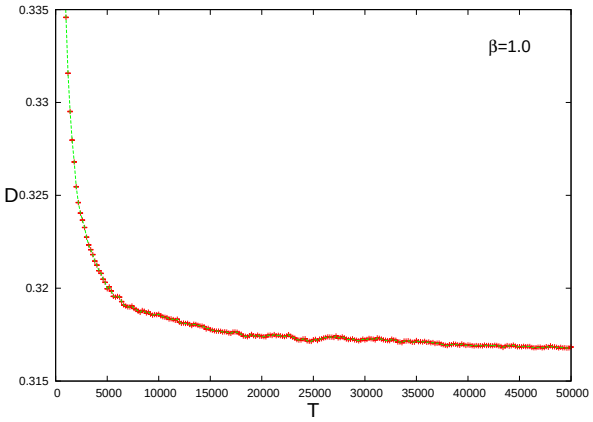


図 15: 自乗誤差 (21) の時間 T 依存性. $\beta = 1.0, \gamma = 0.8, J = Ts^{-1} = (1.75)^{-1}$ と選んでいる. $T \to \infty$ の極限が図 16 での平衡状態を与える.

平衡状態で式 (30) の逆温度 β の変化による自乗誤差の振る舞いを図 16 に載せる. この図 16 よ

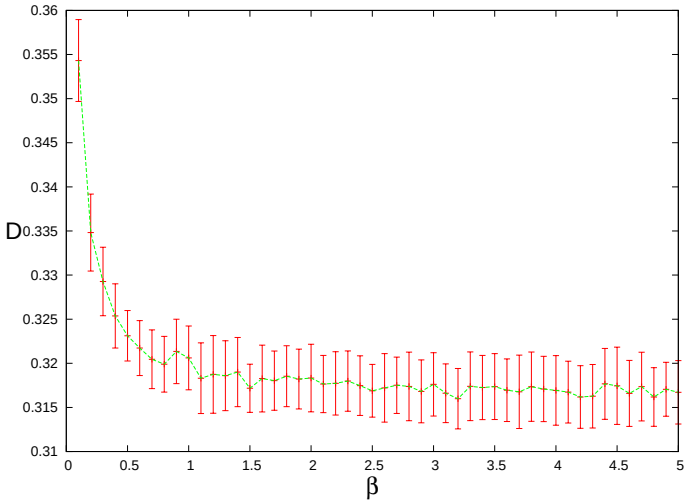


図 16: 逆温度 β による自乗誤差の振る舞い.

り, 逆温度 β の増加とともに平均自乗誤差は単調に減少していることがわかる. また, $\beta = 1.0$ に設定した時に得られる修復画像の例を原画像とともに図 17 に載せる.

7 ディスカッション

本節では 5 節と 6 節で得られた結果について議論を行い, 画像修復の性能についてを修復画像の推定精度, 修復にかかる計算時間の面で比較, 検討をする.

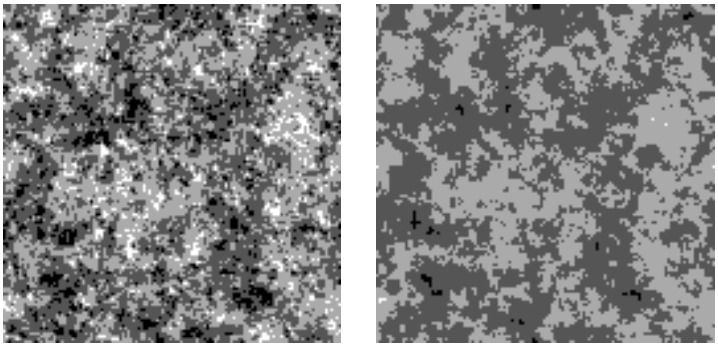


図 17: 原画像 (左) とランジュバン方程式 (30) から生成される画素の長時間平均 (31) により構成した周辺化事後確率最大推定で結果として得られる修復画像. $\beta = 1.0$.

7.1 推定精度に関して

本研究では, 推定精度の評価基準として原画像との自乗誤差を求めてきた. 5 節と 6 節では, 長時間平均をとるときの自乗誤差の時間的な振る舞いとして, 式 (28) と式 (21) を計算し, その結果を図 13 と図 15 に載せてきた. ここではその比較のために 2 つのグラフを同時にプロットしたものを図 18 に載せる.

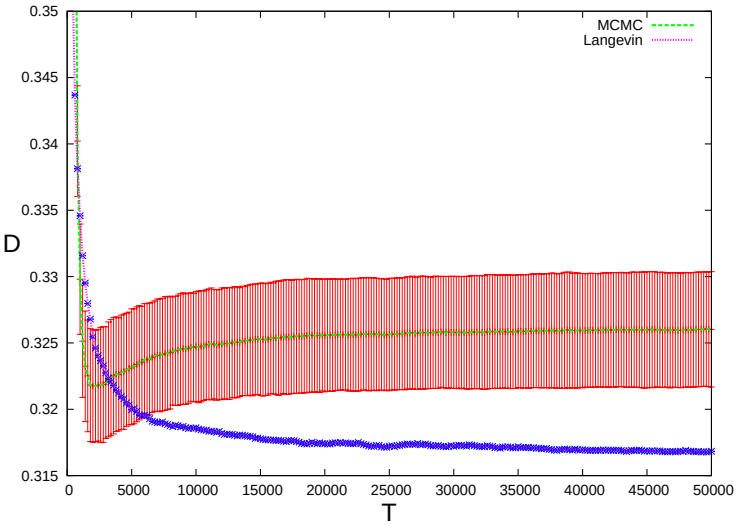


図 18: MCMC 法とランジュバン方程式のそれぞれで画像修復を行った時の自乗誤差の時間的振る舞い.

この図より, ステップ数が少ない場合では MCMC 法の方が精度が良いが, $T \to \infty$ の平衡状態に近づくに連れてランジュバン方程式を用いた MPM 推定の精度が MCMC 法より良くなっていくことがわかる.

7.2 計算時間に関して

続いて両手法の推定にかかる計算時間の比較を行う. 比較のため, 図 18 で自乗誤差が同程度 (グラフの交差点) になるステップ数 $T_{MCS} = T = 3250$ をパラメータとして採用している. この時, 画

像のサイズを変化させた時に計算にかかる時間をプロットしたものが図 19 である．この図より計

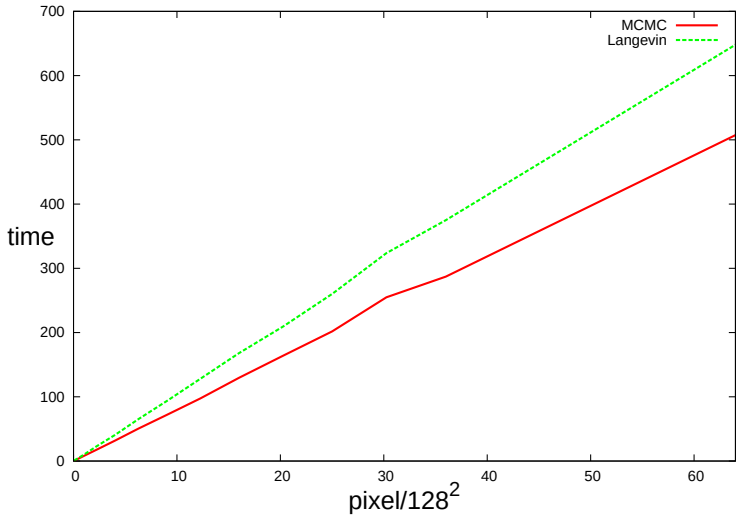


図 19: 128×128 の画像を基準とした画像のサイズ比 (横軸) を変化させたときの計算時間の振る舞い.

算時間は画像サイズに比例しており, MCMC 法がランジュバン方程式を用いた MPM 推定よりも高速である．以上より, これらの結果を比較すると, 推定平均をとるためのステップ数が小さければ MCMC 法の方が精度が高く, ステップ数が多くなるとランジュバン方程式を用いた MPM 推定の方が精度が高い．計算時間に関しては MCMC 法の方が高速であるという結果になった.

8 おわりに

ベイズ推論に基づく MPM 画像復元をランジュバン方程式を用いることで構成し, その平均的性能を評価した．正則化項, および劣化過程にそれぞれ多値イジング模型, ガウスノイズを仮定したマルコフ確率場模型を導入し, その事後確率最大推定値をエネルギー関数の極値条件から導出される反復式により求め, 次いで, この MAP 解のまわりのガウス型揺らぎを用いた修復の性能を確率差分方程式の長時間平均値として計算し, その性能を平均自乗誤差基準により評価した．この妥当性は無限レンジ模型の解析により比較検討できた．また, 事後確率をランジュバン方程式, ランジュバン型の確率微分/差分方程式を用いてシミュレートし, その長時間平均値を用いた推定が MCMC 法と同様に構成できることを示した．この時, 長時間平均をとるためのステップ数が多ければ, MCMC 法よりも精度が良くなることが分かった.

謝辞

本研究を進めるにあたり, 多くのご指導ご助言を頂いた混沌系工学研究室のの井上純一准教授, 小野哲雄教授には深く御礼申し上げます. また, 様々な場面において色々なアドバイスをいただいた混沌系工学研究室の皆様にも深く感謝いたします.

参考文献

[1] 西森秀稔, 「スピングラス理論と情報統計力学」新物理学選書, 岩波書店 (1999).

[2] K. Tanaka, *Journal of Physics A : Mathematical and General*, **35**, R81 (2002).

[3] 田中和之, 「確率モデルによる画像処理入門」森北出版 (2006).

[4] G. Winkler, *Image Analysis, Random Fields and Markov Chain Monte Carlo Methods*, Springer (2003).

[5] C.M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer (2006).

[6] R.M. Neal, *Bayesian Learning for Neural Networks*, Lecture Notes in Statistics, Springer (1996).

[7] 岩垣足火, 渡辺澄夫, 「ランジュバン方程式を用いたベイズ学習の特異モデルにおける挙動について」, 電子情報通信学会, 技術報告書, NC2008-88 (2009-1), pp. 37-42 (2009).

[8] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation: Methods of Solution and Applications*, Springer (1988).

[9] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*, Springer (1983).

[10] D. M. Carlucci and J. Inoue, *Physical Review E* **60**, 2547 (1999).

[11] J. Inoue and D. M. Carlucci, *Physical Review E* **64**, 036121 (2001).