

幾何変換のスパース回帰による変形場の表現

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

概要: 本研究では、1960年代に製作された連続組織切片から元の3次元形状を復元することを目的に、切片画像対に対する位置合わせに取り組んでいる。組織切片では製作における物理的加工により歪みが生じており、非剛体位置合わせが必要となる。本稿ではこの変形を画像平面上で幾何変換が滑らかに変化する幾何変換場としてモデル化し、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の、幾何変換のスパース回帰を提案する。シミュレーションデータを用いて幾何変換場の復元結果を評価する。また、幾何変換場の推定を利用した画像の非剛体位置合わせ例を示す。

1. はじめに

京都大学先天異常標本解析センターには器官形成期のヒト胚子標本が所蔵されている [1]。中でも、正常例と外表異常例それぞれ約 500 例ずつについて製作された連続組織切片 (図 1) は、顕微鏡によって細胞レベルの詳細な観察が可能であり、ヒトの発生過程を解明する上で極めて貴重な資料である。一方、1つの試料に対応する切片は多いもので数千にもなるため、スライドグラス上に並べられた多数の切片から元の3次元的な形態を把握することは非常に困難である。

現代であれば、位相 CT や MRI などの3次元イメージングを行った後で組織切片を製作することで、各切片を元の3次元的な形態に対応付けるアプローチをとることができる。しかし、ヒト胚子の標本は新規収集が極めて困難であることから、現有する切片化されていない標本に対して非可逆的な加工である切片化を施すことは避けられるべきである。そこで本研究では、古いもので1960年代に製作された既存の試料を最大限活用するため、連続組織切片のみから元の3次元的な形態を復元することを目標としている。

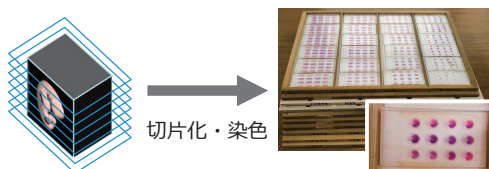


図 1: 連続組織切片の例

2. 連続組織切片からの3次元復元

切片作製における物理的な加工によって、各切片には歪みが生じている (図 2(a)) ため、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。連続組織切片からの3次元復元における非剛体位置合わせでは、Free-Form-Deformation [2] や変分法 [3] に基づく手法などにより、隣接する切片対の画像を直接比較することで変形場を推定するアプローチが取られることが多い。しかし、本研究で対象とする連続組織切片は経年劣化による非一様な退色*1などにより、隣接する切片であったとしても画像としての差が大きい場合などがある。

我々は [4] において、組織切片画像から検出される特徴点の対応付けに基づく非剛体位置合わせと、これを積層することによる3次元復元の手法を提案した。この手法では、物理的な加工によって生じる変形は大局的で滑らかなものであるとみなし、局所的な剛体変換 (並進+回転) を空間的に補間することで変形場を表現した。局所的な剛体変換を推定するため、特徴点対を k-means クラスタリングによって K 個のクラスタに分け (図 2(b)), 各クラスタから剛体変換 $y_k \in SE(2)$ を推定した (図 2(c))。この変換を各クラスタの特徴点の重心位置 \mathbf{x}_k に対応付け、任意の点 \mathbf{x} における変換 (図 2(d)) は次式による合成によって定めた。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in SE(2)} \left\| \sum_k \frac{t_k(\mathbf{x})}{\sum_j t_j(\mathbf{x})} \operatorname{Log}_q(y_k) \right\| \quad (1)$$

$$t_k(\mathbf{x}) = \frac{1}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2} \quad (2)$$

ここで $\operatorname{Log}_q(\cdot) : SE(2) \rightarrow \mathfrak{se}(2)$ は q における $SE(2)$ の接平面への対数写像であり、式 (1) は $t_k(\mathbf{x})$ による y_k の重み

*1 例えば、スライドグラスの縁付近で特に顕著である。

¹ 奈良先端科学技術大学院大学 情報科学領域

² JST さきがけ

³ 京都大学大学院 医学研究科

a) funatomi@is.naist.jp

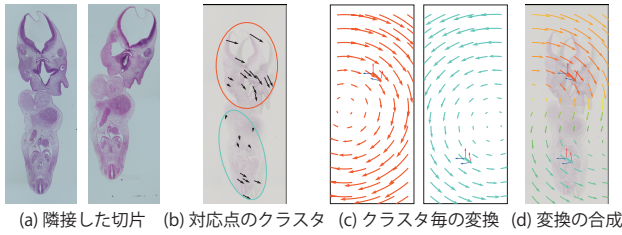


図 2: 変換の合成による画像位置合わせ [4]

付き内測平均とすることを意味している。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ることができる [5], [6]。

3. 幾何変換場の回帰

従来の画像位置合わせでは、任意の点 \mathbf{x} に対し変位場 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ を推定するアプローチを取っていた。これに対し、[4] ではいくつかの座標における幾何変換の組 $\{\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k\}$ が与えられた下で $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ を推定したが、これは変位場ではなく、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び、この回帰問題について議論を進める。

[4] ではクラスタ数 $K \leq 8$ 程度までの k-means によって対応点をクラスタリングして幾何変換場のモデル化を行ったが、各特徴点对においてその局所特徴などを活用して幾何変換も推定し、多くのサンプル $\{\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k\}$ を収集できれば、画像の位置合わせの精度向上が期待される。

3.1 既存手法 [4] の問題点

しかし、この目論見は式 (1),(2) を用いてもうまくいかない。これはある意味で自明ではあるが、実例を図 3 に示す。これらの式を用いると、(a) に示した 2 つの因子から生成される幾何変換場は (b) のようになる。なお、幾何変換場によって格子模様を変形させた画像を合わせて表示している。ここからランダムに選択した $K = 24$ サンプルを (c) に示す。先述の画像位置合わせの文脈では、真の変形場を (b) とし、これが式 (1),(2) に従っていることを担保した上で、(c) に示したサンプルが得られた状況を想定する。同じ式によって (c) から生成した幾何変換場を (d) に示し、(e) は (b) と (d) の差を表したものである。一見してそれらしい場が生成されているものの、特にサンプルの粗密に従って誤差が大きい部分があることが見て取れる。

3.2 幾何変換に対するカーネル回帰モデル

そこで、まずは一般の回帰モデルを幾何変換に適用することを考える。回帰モデルといっても多様なモデルが提案されているが、式 (1) に近いのはカーネル回帰モデルである。

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{x}) \quad (3)$$

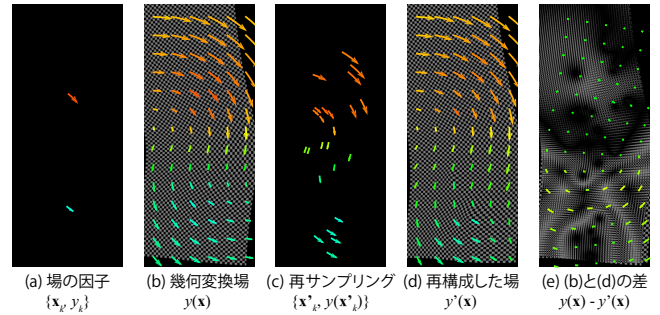


図 3: 幾何変換場からの再サンプリングと再構成

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。

幾何変換を対象とした場合の関連研究として、[7] 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。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in \mathcal{M}} \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x}) d(q, c_i)^2}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x})} \quad (4)$$

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) に対する回帰を示し、 $d(R_1, R_2) = \|\log(R_1^{-1} R_2)\|$ としている*2。

式 (4) 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り、式 (1) がこれに対応する。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in \text{SE}(2)} \left\| \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x})}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x})} \text{Log}_q(c_i) \right\| \quad (5)$$

ここで、係数 $c_i \in \text{SE}(2)$ である。[4] では、基底関数として式 (2) を用いることで、正規化された重みがサンプル点において $\frac{\Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x}_k)} = \delta_{ik}$ を満たすため、係数 $c_i = y_i$ とできた。

一方で、このような基底関数は特にサンプル点 \mathbf{x}_k 近傍で特異な振る舞いをし、前節で述べたような問題がある。一方、ガウスカーネルのような一般的な基底関数を利用すると $\frac{\Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \neq \delta_{ik}$ となるため、係数 c_i として y_i をそのまま用いることはできない。そこで本稿では $y(\mathbf{x}_k) = y_k$ となるよう係数 c_i を求める方法について考える。

3.3 データ項

係数 c_i を求める際、所与のサンプル $\{\mathbf{x}_k, y_k\}$ に対して以下のような定式化を考えることになる。

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

式 (5) における q が y_k となることを要請することになるため、次式が導かれる。

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

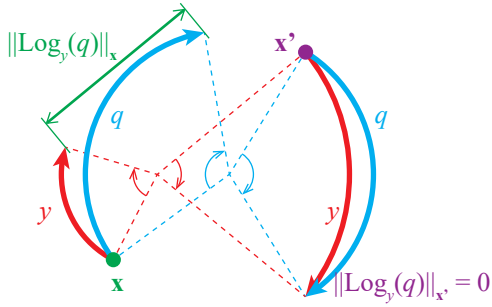


図 4: 剛体変換に対する計量

$$c_i = \operatorname{argmin}_{c_i \in \text{SE}(2)} \sum_k \left\| \sum_i \frac{\Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \text{Log}_{y_k}(c_i) \right\| \quad (6)$$

3.4 剛体変換に対する計量

[7] で用いられていた通り、SO(3) には一般的な計量が与えられるが、剛体変換 SE(2) は並進が含まため自明ではない。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 (1) でも問題になるはずだが、[5], [6] 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誤差は存在し、式 (6) の右辺が $0 \in \mathfrak{se}(2)$ になることは期待できないため、この計量を考える必要が出てくる。

具体例として、図 4 では 2 つの変換 $q, y \in \text{SE}(2)$ 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*3。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。

$$\|\text{Log}_q(y)\|_{\mathbf{x}} = \|q\mathbf{x} - y\mathbf{x}\|_2^2 \quad (7)$$

3.5 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

*3 ただし角度は異なる

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 (3) 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。

$$c_i = \operatorname{argmin}_{c_i} \left\| y_k - \sum_i c_i \Phi_i(\mathbf{x}_k) \right\|_2^2 + \lambda \sum_i |c_i| \quad (8)$$

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 $c_i \in \text{SE}(2)$ 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 (5) において任意の q に対して $\text{Log}_q(c_i)$ の項がなくなる必要がある。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。

$$y(\mathbf{x}) = \operatorname{argmin}_{q \in \text{SE}(2)} \left\| \sum_i \frac{w_i^2 \Phi_i(\mathbf{x})}{\sum_j w_j^2 \Phi_j(\mathbf{x})} \text{Log}_q(c_i) \right\| \quad (9)$$

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。

$$c_i, w_i = \operatorname{argmin}_{c_i \in \text{SE}(2), w_i \in \mathbb{R}} E(c_i, w_i) \quad (10)$$

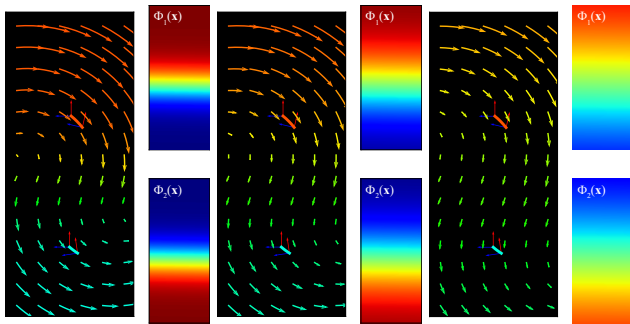
$$E(c_i, w_i) = \sum_k \left\| \sum_i \frac{w_i^2 \Phi_i(\mathbf{x}_k)}{\sum_j w_j^2 \Phi_j(\mathbf{x}_k)} \text{Log}_{y_k}(c_i) \right\|_{\mathbf{x}_k} + \lambda \sum_i |w_i| \quad (11)$$

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 (9) 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。

3.6 実装

式 (10) 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 [8] 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 を用い、係数の初期値は $c_i = y_i, w_i = \frac{1}{K}$ とした。5000 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) 1000 回の繰り返し処理によりさらに係数を最適化した。



(a) $\gamma = 2.0 \times 10^{-5}$ (b) $\gamma = 1.0 \times 10^{-5}$ (c) $\gamma = 0.5 \times 10^{-5}$

図 5: 様々な γ のガウスクERNELを用いて、2つの因子から生成した幾何変換場

4. 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。

4.1 データの生成

図 3 と同様、2つの因子から幾何変換場を生成した。ただし、基底関数としてガウスクERNELを採用した。

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

ガウスクERNELには、パラメータ γ があり、これによって場の滑らかさが変化する。いくつかの γ について同じ2つの因子から生成された場の違いを図 5 に示す。また、各因子の重み $\frac{\Phi_i(\mathbf{x})}{\sum_j \Phi_j(\mathbf{x})}$ の空間分布もあわせて示す。 γ が小さいほど重みの変化が急峻であり、大きいほど緩やかであることが見てとれる。

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 $\{\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k\}$ をランダムに抽出した (図 6a 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 $\{\mathbf{x}_l, \mathbf{y}_l\}$ を格子点上で抽出した (図 6a 中央)。

4.2 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 $[1, 10^6]$ の区間を対数スケールで 19 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 6 に示す。図はそれぞれ、式 (11) を最小化することによって得られた係数 c_i 、式 (9) によって再構成された幾何変換場 $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ 、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

みと係数の組 $\{w_i, c_i\}$ の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。ただ、いずれの結果についても、図 3 と比べて差分が小さくなっていることが分かる。

また、幾何変換場の差分に関する定量的な尺度として、式 (7) と同様、訓練・テストサンプルそれぞれについて、点を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 $\{w_i, c_i\}$ の数の推移を図 7 に示す。 λ を大きくするとともに、推定された因子の数が小さくなっていることが分かる。また、訓練データに対する RMSE は徐々に大きくなっているが、訓練データとテストデータとの RMSE の差は徐々に小さくなっており、過学習の効果が抑えられ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された。

5. 画像位置合わせにおける変形場への適用

図 2 に示した接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[9] 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、[4] と同様の K-means クラスタリングおよび RANSAC アルゴリズムにより外れ値を検出し、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局所的な剛体変換 SE(2) を推定し、訓練サンプル $\{\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k\}$ とした。入力画像対と対応点を図 8a に示す。

先の実験と同様、さまざまな正則化項に対する重み λ でスパースカーネル回帰を行った。基底関数としてガウスクERNELを採用し、パラメータ $\gamma = 2.0 \times 10^{-5}$ とした。なお、この値は画像の解像度と変形の度合いによって調整されるべきものであるが、これは今後の課題である。

推定された因子、およびそれによって構成された幾何変換場によって画像を位置合わせした結果を図 8 に示す。図から、 λ の大きさに応じて、幾何変換場の因子の数が増えているものの、位置合わせ結果としてはいずれも概ね良好であることが見て取れる。画像の上部では十分な位置合わせができていない様にも見えるが、これは対応点はその部分から得られていないことが原因である。より高度な外れ値への対応を導入することでさらに多くの幾何変換場のサンプルを用いることができれば、より詳細な位置合わせが可能になると思われるが、これも今後の課題である。また、実画像の位置合わせの結果に対する定量評価も課題として残されている。

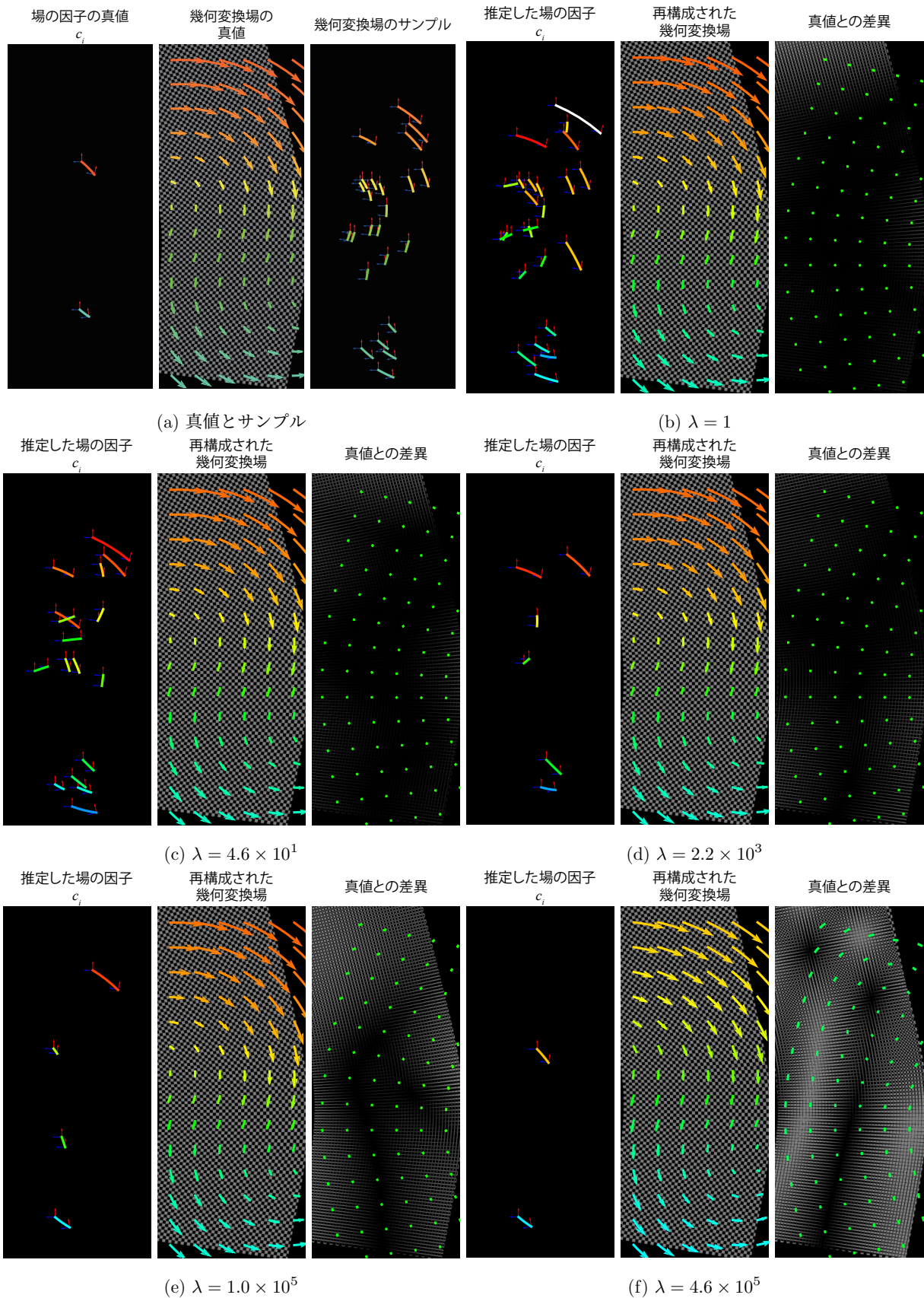


図 6: さまざまな λ に対して推定された因子とそこから生成された幾何変換場, および真値との差分

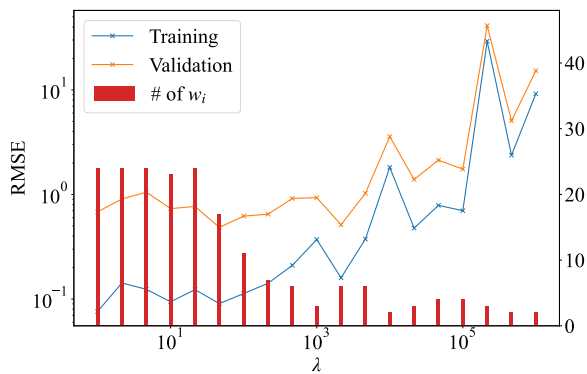


図 7: さまざまな λ に対する RMSE と変数の選択数の変化

6. まとめと今後の課題

本稿では、1960年代に製作された連続組織切片から元の3次元形状を復元することを目的に、切片画像対に対する非剛体位置合わせ手法について述べた。物理的加工によって生じた歪みを、画像平面上で幾何変換が滑らかに変化する幾何変換場としてモデル化し、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の、幾何変換のスパースカーネル回帰を提案した。

幾何変換場では空間座標と剛体変換 $SE(2)$ が対として定義されることを利用し、リーマン多様体に対するカーネル回帰の定式化に剛体変換の差異に対する計量を導入した。また、剛体変換に対しては、疎性を実現するような正則化項を直接定義することが難しいことを述べ、これへの対応としてスカラー量の重み、およびこれを実効化するための定数項を導入した。以上の工夫により、正則化項への重みを調整することで縮小推定が実現できることを、幾何変換場のシミュレーションデータを用いた評価によって示した。また、切片画像対に対する位置合わせ結果を示すことで、提案手法の有効性を確認した。

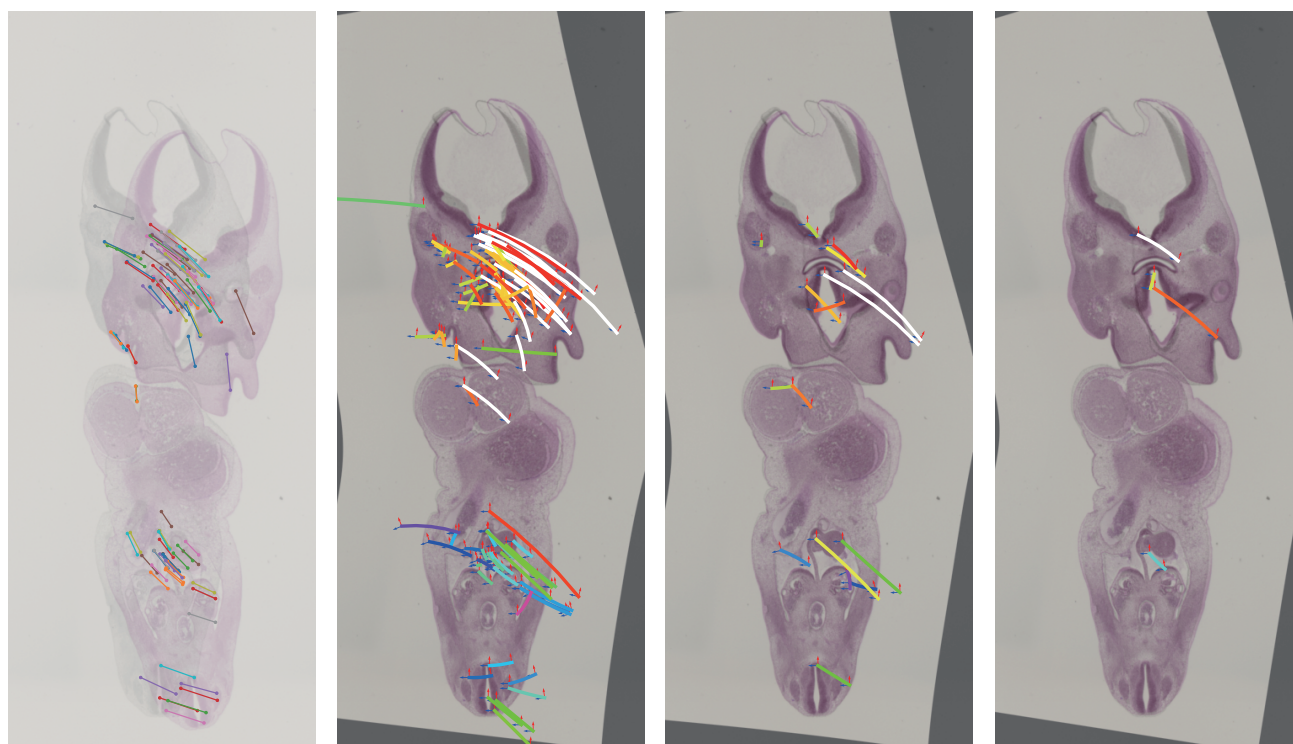
本稿では剛体変換 $SE(2)$ を対象としたスパースカーネル回帰の画像位置合わせ問題への応用について述べたが、3次元や相似変換でも同様の定式化が可能であり、他にも応用先があると予想される。今後はこれについても取り組みを進めていきたい。

謝辞 本研究は JST さきがけ JPMJPR2025 の支援を受けたものである。

参考文献

[1] Yamaguchi, Y. and Yamada, S.: The Kyoto collection of human embryos and fetuses: history and recent advancements in modern methods, *Cells Tissues Organs*, Vol. 205, No. 5-6, pp. 314-319 (2018).
[2] Hermann, J., Brehmer, K., Jankowski, V., Lellig, M., Hohl, M., Mahfoud, F., Speer, T., Schunk, S. J., Tschernig, T., Thiele, H. and Jankowski, J.: Registration of Image Modalities for Analyses of Tissue Samples Using 3D Image Modelling, *PROTEOMICS - Clinical Applica-*

tions, Vol. 15, No. 1, p. 1900143 (2021).
[3] Wang, C.-W., Gosno, E. B. and Li, Y.-S.: Fully automatic and robust 3D registration of serial-section microscopic images, *Scientific reports*, Vol. 5, No. 1, pp. 1-14 (2015).
[4] Kajihara, T., Funatomi, T., Makishima, H., Aoto, T., Kubo, H., Yamada, S. and Mukaigawa, Y.: Non-rigid registration of serial section images by blending transforms for 3D reconstruction, *Pattern Recognition*, Vol. 96, p. 106956 (2019).
[5] Kavan, L., Collins, S., Žára, J. and O’Sullivan, C.: Geometric Skinning with Approximate Dual Quaternion Blending, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 27, No. 4 (2008).
[6] Pennec, X. and Arsigny, V.: *Exponential Barycenters of the Canonical Cartan Connection and Invariant Means on Lie Groups*, pp. 123-166, Springer Berlin Heidelberg (2013).
[7] Davis, B. C., Fletcher, P. T., Bullitt, E. and Joshi, S.: Population Shape Regression From Random Design Data, *2007 IEEE 11th International Conference on Computer Vision*, pp. 1-7 (2007).
[8] Matsuda, G., Kaji, S. and Ochiai, H.: *Anti-commutative Dual Complex Numbers and 2D Rigid Transformation*, pp. 131-138, Springer Japan (2014).
[9] Pablo Alcantarilla (Georgia Institute of Technolog), Jesus Nuevo (TrueVision Solutions AU), A. B.: Fast Explicit Diffusion for Accelerated Features in Nonlinear Scale Spaces, *Proceedings of the British Machine Vision Conference*, BMVA Press (2013).



(a) 入力画像対の対応点

(b) $\lambda = 1$

(c) $\lambda = 2.2 \times 10^3$

(d) $\lambda = 1.0 \times 10^6$

図 8: スパースカーネル回帰による変形場のモデル化に基づいた画像位置合わせ