2L-09

TV 正則化型相互作用をもつマルコフ確率場モデルの提案

芳賀 友紀 † 関本快士 ‡ 安田宗樹 §
山形大学大学院理工学研究科 † 山形大学大学院理工学研究科 ‡ 山形大学大学院理工学研究科 §

1. はじめに

信号処理の分野で，total variation (TV) 正則化手法 [1] が知られている．TV 正則化法は，信号のエッジ情報を残しつつ全体的な平滑性を強めることのできる手法で，画像超解像などへの応用をもつ．本研究では，TV 正則化法を確率モデルのマルコフ確率場 (Markov random field (MRF)) に拡張した TV マルコフ確率場 (TV-MRF) を提案する．TV 正則化法ではハイパパラメータの手動最適化を必要とするが，提案する TV-MRF は統計的機械学習によってそのハイパパラメータを自動的に最適化することができる．しかし，ベイズ推定などで必要となる確率最大化は困難である．そこで，この問題を解決した新たな確率モデルを提案し，当該モデルのパラメータ推定アルゴリズムについて議論する．

2. TV 正則化型相互作用をもつマルコフ確率場

TV-MRF は無向グラフ $G(V, E)$ 上に確率分布を定義する MRF の一種である．ここで，$V := \{1, 2, \dots n\}$ はノードの集合であり，$E := \{\{i, j\} \mid V \text{ are adjacent}\}$ はリンクの集合である．ここで各ノードに確率変数 $\boldsymbol{x} = \{x_i \in \mathbb{R} \mid i \in V\}$ を対応させる．このグラフ構造から TV-MRF のエネルギー関数は以下のように定義される．

$$C_\theta(\boldsymbol{x}) := \frac{\lambda}{2}\sum_{i\in V} x_i^2 + \alpha \sum_{\{i,j\}\in E} |x_i - x_j| \tag{1}$$

式 (1) を用いて，確率分布は次のように定義される．

$$P_\theta(\boldsymbol{x}) := \frac{1}{Z_\theta}\exp\left(-C_\theta(\boldsymbol{x})\right) \tag{2}$$

ここで，$\theta = \{\lambda, \alpha\}$ をパラメータ，Z_θ は TV-MRF の規格化定数を示す．式 (1) の第 2 項が TV 正則化項であり，α は隣接する変数 x_i, x_j 間の平滑化強度を表す．

確率モデルを扱う際，確率が最大となる点を取り出す処理がしばしば行われる．しかし，式 (1) のエネルギー関数は 2 変数の絶対値 $|x_i - x_j|$ を含んでいるため，TV-MRF の確率最大化は困難である．

3. 緩和化 TV-MRF

前節で述べた TV-MRF は 2 変数の絶対値を含むため，確率最大化が困難である．この変数の絡みをなくすために，まず，補助変数 $\boldsymbol{u} := \{u_{i,j} \in \mathbb{R} \mid \{i, j\} \in E\}$ を用いて，式 (1) のエネルギー関数を次のように拡張する．

$$\hat{C}_\theta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) := \frac{\lambda}{2}\sum_{i\in V} x_i^2 + \alpha \sum_{\{i,j\}\in E} |u_{i,j}| \tag{3}$$

式 (3) を用いて，次の結合分布を定義する．

$$\hat{P}_\theta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) := \frac{1}{Z_\theta}\exp\left(-\hat{C}_\theta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})\right)\prod_{\{i,j\}\in E}\delta(u_{i,j} - x_i + x_j) \tag{4}$$

ここで，$\delta(\cdot)$ は Dirac のデルタ関数である．式 (4) を $\boldsymbol{u}$ について周辺化をすると，式 (2) と一致する．

$$\int d\boldsymbol{u}\hat{P}_\theta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) = P_\theta(\boldsymbol{x})$$

式 (4) に含まれる Dirac のデルタ関数は，分散がゼロに近づく極限におけるガウス分布と見なせる．

$$\delta(u_{i,j} - x_i + x_j) = \lim_{\sigma^2\to 0} \mathcal{N}(u_{i,j} \mid x_i - x_j, \sigma^2) \tag{5}$$

ここで，$\mathcal{N}(u_{i,j} \mid x_i - x_j, \sigma^2)$ は平均 $x_i - x_j$，分散 σ^2 のガウス分布である．この関係式を式 (4) に代入し，σ^2 についての極限を緩和させた以下の確率分布を考える．

$$P_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) \propto \exp\left(-\hat{C}_\theta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})\right)\prod_{\{i,j\}\in E}\mathcal{N}(u_{i,j} \mid x_i - x_j, \sigma^2)$$

ここで，$\phi = \theta \cup \{\sigma^2\}$ である．この分布は次のように書き直される．

$$P_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) = \frac{1}{Z_\phi}\exp(-E_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})) \tag{6}$$

$$E_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) := \frac{\lambda}{2}\sum_{i\in V} x_i^2 + \sum_{\{i,j\}\in E}\Bigg\{\alpha|u_{i,j}| + \frac{1}{2\sigma^2}(u_{i,j} - x_i + x_j)^2\Bigg\} \tag{7}$$

ここで，Z_ϕ は P_ϕ の規格化定数を表す．式 (6) を relaxation TV-MRF (rTV-MRF) と呼ぶ．rTV-MRF では，式 (1) でみられた 2 変数の絶対値が 1 変数の絶対値に置

Markov random field with TV-regularization-type interactions

† Tomoki Haga; Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University
‡ Kaiji Sekimoto; Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University
§ Muneki Yasuda; Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University

き換わっているため，確率最大化が困難であるという TV-MRF の問題点を解決した確率モデルとなっている．なお，式 (1) の C_θ から式 (7) の E_ϕ への変形は split Bregman (SB) 罰則法 [2] を用いた変形と同じであり，σ^2 は罰則係数の逆数とみなせる．

rTV-MRF の条件付き分布は以下の通りである．

$$P_\phi(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{u}) \propto \exp\left(\sum_{i\in V} h_i x_i - \frac{\lambda}{2}\sum_{i\in V} x_i^2 + \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{\{i,j\}\in E}(x_i - x_j)^2\right) \tag{8}$$

$$P_\phi(\boldsymbol{u} \mid \boldsymbol{x}) \propto \prod_{\{i,j\}\in E} \exp\left(\alpha|u_{i,j}| + \frac{1}{2\sigma^2}(u_{i,j} - x_i + x_j)^2\right) \tag{9}$$

ここで $h_i := \frac{1}{\sigma^2}\sum_{j\in\partial(i)} u_{i,j}$ であり，$\partial(i)$ はノード i に繋がるノードの集合である．式 (8) は多次元ガウス分布に変形できるガウス型マルコフ確率場 [3] の形式であるため，サンプリングは容易である．また，式 (9) は条件付き独立性を持つため，各 $u_{i,j}$ について独立な逆関数法が可能である．したがって，サンプリングが容易なこれらの条件付き分布を用いて $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{u}$ の交互サンプリングが可能である．これは，効率的なサンプリング手法であるブロック化ギブスサンプリングに対応している．

4．rTV-MRF のパラメータ推定

本節では，統計的機械学習に基づく rTV-MRF のパラメータ推定について説明する．本来は，補助変数 $\boldsymbol{u}$ を周辺化消去して学習が行われるが，本稿ではその前段階として，$\boldsymbol{u}$ のデータが得られた場合の学習を考える．

まず，N 個のデータ点の集合 $\mathcal{D}$ が得られたとする．

$$\mathcal{D} := \{\{\boldsymbol{x}^{(\mu)}, \boldsymbol{u}^{(\mu)}\} \mid \mu = 1, 2, \ldots, N\} \tag{10}$$

ここで，$\boldsymbol{x}^{(\mu)} := \{x_i^{(\mu)} \in \mathbb{R} \mid i \in V\}, \boldsymbol{u}^{(\mu)} := \{u_{i,j}^{(\mu)} \in \mathbb{R} \mid \{i,j\} \in E\}$ である．次に，式 (10) のデータに対する対数尤度関数を次のように定義する．

$$\ell(\phi \mid \mathcal{D}) := \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{N} \ln P_\phi\left(\boldsymbol{x}^{(\mu)}, \boldsymbol{u}^{(\mu)}\right) \tag{11}$$

統計的機械学習では，この対数尤度関数を最大化するパラメータ ϕ^* を求める．尤度最大化は勾配上昇法によって行うが，各パラメータに関する勾配には，次の式で表される rTV-MRF 上の期待値が含まれる．

$$\mathbb{E}_\phi[f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})] := \int\int d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{u} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) P_\phi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) \tag{12}$$

rTV-MRF は確率変数間の複雑な相互作用をもつため，期待値に含まれる $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{u}$ についての多重積分は，一般的には数値積分を用いて実行される．しかし，$|V|$ と $|E|$ が大きい場合，これは計算量的に困難である．よって，学習には期待値近似が必要となる．前節で述べたように，rTV-MRF では $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{u}$ の間のブロック化ギブスサンプリングが容易に可能であるため，期待値をサンプリング近似する．ブロック化ギブスサンプリングにより得られた M 個のサンプル点の集合 $\{\{\boldsymbol{x}_S^{(\nu)}, \boldsymbol{u}_S^{(\nu)}\} \mid \nu = 1, 2, \ldots, M\}$ を用いて、式 (12) の期待値を次のように近似する．

$$\mathbb{E}_\phi[f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})] \approx \frac{1}{M}\sum_{\nu=1}^{M} f(\boldsymbol{x}_S^{(\nu)}, \boldsymbol{u}_S^{(\nu)}) \tag{13}$$

この近似期待値を用いて各パラメータに関する勾配を計算することで，学習を近似的に行うことができる．これにより，TV-MRF のパラメータ θ だけでなく，手動最適化を要した罰則係数 σ^2 も推定できる．

5．まとめ

本研究では，信号のエッジを保存しつつ平滑化が可能な TV 正則化法を MRF に拡張した TV-MRF を提案した．さらに，このモデルは確率最大化が不可能という問題を抱えているため，これを解決した rTV-MRF を提案した．rTV-MRF は，効率的なサンプリング手法のブロック化ギブスサンプリングが容易であるという利点をもち．この利点を活用した統計的機械学習に基づくパラメータ推定方法について議論した．この推定法によって，TV 正則化法の利用の際に手動で決めていたハイパパラメータを自動的に最適化することができる．

今後の課題として，本来はデータとして得られない補助変数を周辺化消去するパラメータ推定法についての検討が挙げられる．また，画像処理をはじめとした様々な実問題への適応が検討される．

謝辞

本研究は科研費（18K11459, 18H03303，21K11778）及び JST CREST（JPMJCR1402）の助成を受けたものである．

文献

[1] D. Li and P. Wu, “ℓ 0 nht v: A non-convex hybrid total variation regularization method for image restoration,” in *2022 34th Chinese Control and Decision Conference (CCDC)*, pp. 450–455, IEEE, 2022.

[2] L. M. Bregman, “The relaxation method of finding the common point of convex sets and its application to the solution of problems in convex programming,” *USSR computational mathematics and mathematical physics*, vol. 7, no. 3, pp. 200–217, 1967.

[3] M. Yasuda, J. Watanabe, S. Kataoka, and K. Tanaka, “Linear-time algorithm in bayesian image denoising based on gaussian markov random field,” *IEICE TRANSACTIONS on Information and Systems*, vol. 101, no. 6, pp. 1629–1639, 2018.