

事前過分割を利用した 高効率スペクトラルクラスタリングによる 医用画像分割

田中 智貴^{†1} 酒井 智弥^{†1}

概要: 本研究は MRI 等の画像を効率的に分割する手法を提案する。特徴空間において、線形分離不可能なクラスタとして表される画像分割領域をスペクトラルクラスタリングで求める際、主要な計算コストとなる類似度行列の生成と固有値分解は事前クラスタリングによって削減できる。提案手法では、Watershed 過分割領域を事前クラスタとすることで画像のエッジを考慮しながら事前クラスタリングの効率化と事前クラスタ数の指定の回避を達成する。提案手法のこれらの利点を確認するため、脳の MRI 断層画像の分割において k -means 事前クラスタリングとの比較実験を行った。

キーワード: 特異値分解, 事前クラスタリング, Ncut

Segmentation of medical images by efficient spectral clustering with watershed presegmentation

TOMOTAKA TANAKA^{†1} TOMOYA SAKAI^{†1}

Abstract: This paper presents a method of reducing computational cost of segmentation for medical images. Pixels are represented as a point set in a feature space of positions and values of pixels. Spectral clustering finds the image segments as linearly nonseparable clusters. Computational cost of spectral clustering is in the construction of affinity matrix and eigenvalue decomposition, which can be reduced by pre-clustering. our method, uses watershed segments as pre-clusters, to achieve fast pre-clustering and avoid determining the number of clusters, taking account of image edges. To confirm the advantages of our method, We evaluate the performance of our method in MR brain image segmentation by comparing to spectral clustering with k -means preclustering.

Keywords: singular value decomposition, pre-clustering, Ncut

1. はじめに

研究では、画像分割の計算コストの削減を目的とする。画像分割とは、画像中の物体を構成している画素の部分集合で抽出する画素の分類に相当する。画像分割の先行研究として、微分幾何的に定義された画像の境界（エッジ）を検出する Canny 法 [1]、物体の輪郭の滑らかさやエッジ

を基にしてエネルギーを最小化するように輪郭を抽出する Snakes 法 [2]、エッジを地形に見立て稜線によって分割する Watershed 法 [3] 等が挙げられる。また、画素のデータ集合から類似した画素の部分集合を作るクラスタリングによる画像分割する方法がある。本研究では、医用画像が二次元以上になっても分割の原理とアルゴリズムの変更が不要なクラスタリングを用いる。クラスタリングにおけるデータ集合には、線形分離可能であるデータ集合と線形分離不可能なデータ集合という 2 つの性質に分けられる。線

^{†1} 現在、長崎大学
Presently with Nagasaki University

形分離可能なデータ集合であれば、データ集合が存在する特徴空間における超平面で部分集合が抽出されるため、計算量が少ないクラスタリングが可能である。線形分離不可能なデータ集合の場合、データ集合が呈する多様体の構造に基づくクラスタリングが必要である。一般的に、画像の集合は特徴空間で多様体構造を呈することが多く、線形分離不可能な性質を持っていることが多い。

本研究では、線形分離不可能なデータ集合にクラスタリングを行う代表的な手法であるスペクトラルクラスタリングを利用する [4]。2章ではスペクトラルクラスタリングの原理とその効率化について概説し、3章では提案手法の原理とアルゴリズム、4章では提案手法の評価実験を行い、5章で今後の展望を述べる。

2. スペクトラルクラスタリングとその効率化

2.1 原理

n 本の d 次元特徴ベクトルの集合 $P = \{p_1, \dots, p_n \in \mathcal{R}^d\}$ が与えられている。また、核関数 K を用いて p_i, p_j 間の類似度を $w_{ij} = K(p_i, p_j)$ とする。類似度グラフ G は、サンプルを表す n 個の節と、サンプル間の類似度で重み付けられたグラフで定義される。この類似度グラフ G の切断された枝の重みで表されるエネルギー関数が最小となるように G を切断することでクラスタ $C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$ を得ることができる。Normalized Cut(Ncut)と呼ばれるエネルギー関数は内的結合と外的分離の均衡が取れたクラスタが得られる関数である。

$$Ncut(C_1, \dots, C_k) = \sum_{l=1}^k \frac{cut(C_l, P \setminus C_l)}{cut(C_l, P)} \quad (1)$$

この関数で、 $cut(X, Y)$ は $p_i \in X$ と $p_j \in Y$ の枝の重みの和であり、 $P \setminus C_l$ は $C_l \subset P$ の補集合である。式(1)の最小化はNP困難であるが、これを対角和の最小化問題として実数に緩和することで、正規化された類似度行列

$$S = D^{-1/2} W D^{-1/2} \quad (2)$$

の固有値問題に近似される [4]。 $W = [w_{ij}]$ は正規化されていない類似度行列、 D は W の行和を対角要素とした対角行列である。 k 個のクラスタは行列 S の上位 k 個の固有ベクトルからなる $n \times k$ 行列 X_k から決定される。 X_k の n 本の行ベクトルを正規化すると、 k 次元空間で密集した k 個のクラスタを呈する。この k 個のクラスタはよく分離されているので、 k -meansクラスタリング法によるベクトル量子化によって容易にクラスタを特定できる。

2.2 アルゴリズム

Ncutに基づく k 分割スペクトラルクラスタリングの算法 [4]をアルゴリズム 1 に示す。スペクトラルクラスタリングでは、核関数に、

$$K(p_i, p_j; \sigma_s) = \exp\left(-\frac{\|p_j - p_i\|_2^2}{2\sigma_s}\right) \quad (3)$$

を用いている。

アルゴリズム 1 の主な計算コストは手順 1 の類似度行列の作成と、手順 4 の固有値分解 (EVD) にある。まず、手順 1 では $\mathcal{O}(dn^2)$ の手間数と $\mathcal{O}(n^2)$ の記憶領域が必要となる。手順 4 では正規化類似度行列 S が適度に疎でない限り、 k 本の固有ベクトルを求める手間数は $\mathcal{O}(kn^2)$ である。

アルゴリズム 1 スペクトラルクラスタリング。

入力: $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$: データ集合, k : クラスタ数, σ_s : 核関数の尺度

出力: $C = C_1, C_2, \dots, C_k$: クラスタ

- 1 核関数 $K(p_i, p_j; \sigma_s)$ で測った類似度を ij 要素とする類似度行列 $W \in \mathcal{R}^{n \times n}$ を作成する。ただし $W_{ii} := 0$ とする。
 - 2 ii 成分が W の第 i 行の和である対角行列 $D \in \mathcal{R}^{n \times n}$ を用意する。
 - 3 正規化類似度行列 $S := D^{-1/2} W D^{-1/2}$ を計算する。
 - 4 S の上位 k 本の固有ベクトル $X_k \in \mathcal{R}^{n \times k}$ を作成する。
 - 5 X_k の行ベクトルをそれぞれ正規化した行列 $Y_k \in \mathcal{R}^{n \times k}$ を作成する。
 - 6 Y_k の n 本のベクトルに対して k -meansクラスタリングを実行する。
 - 7 Y_k の第 i 行のベクトルが第 l クラスタに分類されていたら、サンプル p_i を C_l に入れる。
-

2.3 スペクトラルクラスタリング効率化の関連研究

スペクトラルクラスタリングを効率化するための様々な関連研究がある [5][6][3]。それらの多くは計算コストの高いアルゴリズム 1 の手順 1 の類似度行列の疎行列近似、手順 4 の固有ベクトル計算の効率化に基づいている。また、式(1)のNcut最小化を固有値問題に緩和しない手法も存在する [7]。この手法はNcutの最小化を重み付き核 k -meansクラスタリングに帰着させ、類似度グラフ G の多重レベル表現とクラスタ間のデータ交換を応用することで局所解を回避している。ただし、この手法は疎な類似度行列があらかじめ与えられており、かつ高い精度が要求されない問題に限り有効である [5]。クラスタリングを行う前に単純な過分割することによる効率手法がある。[6]。事前クラスタと他の全データの間の類似度のみで類似度行列を作成することで類似度行列の計算回数が削減される。これは集合 P の要素と、事前クラスタリングによって集合 P から作成した集合 Q の要素の間に構成した類似度の2部グラフを切断するクラスタリングと見なせる。アルゴリズム 1 のように類似度行列は正方行列ではないが、アルゴリズム 2 のように正規化と特異値分解によって固有ベクトルを推定できる。先行研究では、入力 P を k -meansで事前クラスタリングしたクラスタの重心の集合を Q として用いている。 k -meansの計算コストは小さいが、クラスタリングに画素のユークリッド距離しか考慮されない。事前クラスタリングにエッジ等の画像の特徴を考慮できれば、画像分割に適した類似度の評価が可能になる。

アルゴリズム 2 長方形類似度行列の場合のスペクトラルクラスタリング [6].
 入力: $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$: n 個のデータ集合, $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_l\}$: l 個のデータ集合, k : クラスタ数, σ_s : 核関数の尺度
 出力: $C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$: クラスタ
 1 核関数 $K(p_k, q_j; \sigma_s)$ で測った類似度を ij 要素とする類似度行列 $W_{PQ} \in \mathbb{R}^{n \times l}$ を作成する. ただし $p_k = q_j$ のとき $W_{ij} := 0$ とする.
 2 類似度行列 W_{PQ} の行和, 列和から対角行列 D_P と D_Q を用意する.
 3 長方形行列 $S_{PQ} = D_P^{-1/2} W_{PQ} D_Q^{-1/2}$ を計算する.
 4 S_{PQ} の上位 k 本の左特異ベクトル $U_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を作成する.
 5 U_k の行ベクトルを正規化した行列 $Y_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を作成する.
 6 Y_k の n 本のベクトルに対して k -means クラスタリングを行う.
 7 Y_k の i 行のベクトルが第 l クラスタに分類されていたら, サンプル p_i を C_l に入れる.

3. 提案手法

3.1 Watershed による事前過分割

s 次元の画像のスカラー場関数を $f(x)$, $x \in \mathbb{R}^s$ で表したとき, 勾配強度は $\|\nabla f(x)\|$ で定義される. 勾配強度を地形と見立てた場合, 地形に水を流すと稜線を境界として水溜りが生まれる. 稜線で囲まれた空間, つまり分水界に水を流すと地理的に貯水地になる領域に画素を分割する方法を Watershed 分割と呼ぶ [8]. 実際には, 画像をぼかしの目安 σ で画像をぼかし, 勾配強度を求める微分演算処理をした後, Watershed 分割を行う. 事前クラスタリングによる過分割は, 計算コストが低く, さらに画像の特徴を考慮できるものが望ましい. 提案手法では, この Watershed 分割領域によって事前クラスタを定める. Watershed 分割領域に対応する離散画像の画素の集合を Superpixel と呼ぶことにする.

3.2 事前過分割を利用した高効率スペクトラルクラスタリングのアルゴリズム

Watershed 分割による事前クラスタリングを用いた高効率スペクトラルクラスタリングのアルゴリズムをアルゴリズム 3 に示す. アルゴリズム 3 の手順 3 では, 全画素と全 Superpixel での長方の類似度行列を作成している. Superpixel と画素の間の類似度評価は重要である. 本研究では, 簡単のため SuperPixel の重心と, Superpixel の平均の画素を特徴量とした. 単位が異なる距離と平均画素値に対して重み付けが必要である. 画素の x 座標, y 座標, 画素値を成分とする特徴ベクトル $p_i = (x_i, y_i, f_i)$ に対して

$$p'_i = \left(\frac{x_i}{\sigma_x}, \frac{y_i}{\sigma_x}, \frac{f_i}{\sigma_I} \right) = \frac{1}{\sigma_I} (rx_i, ry_i, f_i) = \frac{p''_i}{\sigma_I} \quad (4)$$

と置く. ここで, 距離の尺度は σ_x , 画素値の尺度は σ_I である. また, その比を

$$r = \frac{\sigma_x}{\sigma_I} \quad (5)$$

とする. r の値を大きくすると画素値より距離を重視した重み付けになり, r の値を小さくすると画素値の類似性を重視した重み付けになる. Superpixel の特徴ベクトル q'_j も式 (4) と同様に定義する. p'_i と q'_j 間の類似度は

$$K(p'_i, q'_j; \sigma_r) = \exp \left(- \frac{\|q'_j - p'_i\|_2^2}{2\sigma_r^2} \right) \quad (6)$$

$$= \exp \left(- \frac{\|q''_j - p''_i\|_2^2}{2\sigma_r^2 \sigma_I^2} \right) \quad (7)$$

$$= \exp \left(- \frac{\|q''_j - p''_i\|_2^2}{2\sigma_k^2} \right) \quad (8)$$

$$= K(p'', q'', \sigma_k) \quad (9)$$

と表される. ただし,

$$\sigma_k = \sigma_r \sigma_I \quad (10)$$

とする. σ_k が大きくなるほど k -means 法のように線形分離する手法に近づき, 小さくなるほど線形分離不可能なクラスタを抽出する手法となる. クラスタ抽出後, 画素のラベリングにより同クラスタで隣接している画像の集合を求め分割領域とする.

アルゴリズム 3 事前過分割を利用した高効率スペクトラルクラスタリング
 入力: f : 入力画像, k : クラスタ数, σ_k : 核関数における尺度, r : 距離と画素数の重み付けの値
 出力: $C = \{C_1, C_2, \dots, C_k\}$: クラスタ
 1 点集合 $P'' = \{p''_1, \dots, p''_n\}$ を作成する. ここで, $p''_i = (rx_i, ry_i, rf_i)$ とする. f_i は画素 (x_i, y_i) における画素値 $f(x_i, y_i)$ である.
 2 画像 f を Watershed 過分割によって Superpixel を作成する.
 3 点集合 $Q'' = \{q''_1, \dots, q''_l\}$ を作成する. ここで, $q''_j = (r\bar{x}_j, r\bar{y}_j, r\bar{f}_j)$ とする. (\bar{x}_j, \bar{y}_j) と \bar{f}_j はそれぞれ j 番目の Superpixel の重心と平均画素値である.
 4 データ集合 P'', Q'' について核関数 $K(p''_i, q''_j; \sigma_k)$ で測った類似度を ij 要素とする類似度行列 $W_{P''Q''} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を作成する.
 5 類似度行列 $W_{P''Q''}$ の行和, 列和から対角行列 D_P と D_Q を用意する.
 6 長方形行列 $S_{P''Q''} = D_P^{-1/2} W_{P''Q''} D_Q^{-1/2}$ を計算する.
 7 $S_{P''Q''}$ の上位 k 本の左特異ベクトル $U_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を作成する.
 8 U_k の行ベクトルを正規化した行列 $Y_k \in \mathbb{R}^{n \times k}$ を作成する.
 9 Y_k の n 本のベクトルに対して k -means クラスタリングを行う.
 10 Y_k の i 行のベクトルが第 l クラスタに分類されていたら, 第 i 画素を C_l に入れる.

4. 実験

4.1 実験と評価の方法

提案手法の性能を評価する. 比較する手法は k -means 事前クラスタリングによるスペクトラルクラスタリングとする. 実験では, 組織の種類が既知の領域からなる脳の MRI 断層画像を用いる. 人間の頭部を正面から水平方向に切断した MRI 断層画像を実験に使用する ($X: 0, Y: -42, Z: -26$ による Z 軸断面) [9]. 断層画像は図 1 であり, 背景, 脳, 眼球, 頭蓋骨など様々な組織を持った画像である. この画像には図 2 脳や神経など特徴の画素毎に 12 種類の番号が付けられた正解領域が与えられている.

4.2 純度による評価

提案手法によるクラスタリング結果は計算途中の 4 つのパラメータに依存する. 4 つのパラメータとは, Watershed 計算に用いるぼかしの目安 σ , 核関数の σ_k , 距離と画素値の重み付けの尺度 r , クラスタ数 k である. それぞれの値 $\sigma \in (0.3, 1.5, 2.0, 4.0, 8.0)$, $\sigma_k \in (50, 100, 200, 400)$, $r \in (0.1, 0.3, 0.6, 1.0)$, $k \in (3, 4, 5, 6, 7, 8)$ について, 全

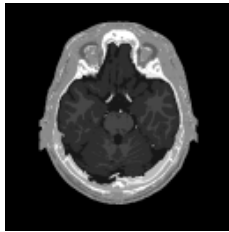


図 1 頭部の MRI 断層画像

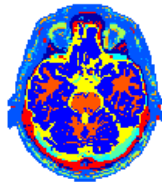


図 2 正解領域

での組み合わせ 480 通りで画像分割を行い、正解画像と比較することで提案手法の性能を調査する。分割結果を $R = \{R_1, R_2, \dots, R_n\}$ 、正解領域を $A = \{A_1, A_2, \dots, A_m\}$ とする。行を正解の分割領域、列を分割結果として、 R_i と A_j に共通に属するデータの個数 $X_{ij} = |R_i \cap A_j|$ でクロス表を作成する。 $|\cdot|$ は要素の個数を表す。

領域分割の正確さの指標として、ある正解の分割領域を分割領域 R_i が最大に交わる正解領域が A_h のとき、 R_i と A_h の交わりの割合

$$P_i = \frac{1}{|R_i|} \max_h |R_i \cap A_h| \quad (11)$$

を純度と定義する。平均の純度は

$$\sum_{i=1}^k \frac{|R_i|}{N} P_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^k \max_h |X_{ik}| \quad (12)$$

と計算される。平均の純度は 0 から 1 の値をとり、値が高いほど分割領域が正解に近いことを表す。

表 1 はパラメータを変えた 480 通りのクロス表から純度が高い 10 通りを示している。クラスタ数 k が大きいほど純度が高くなる傾向がある。クラスタ数以外のパラメータが平均純度に与える影響を調査するため、 $k = 3$ と固定した時の平均純度を測定した。表 2 は $k = 3$ の時の 80 通りのクロス表から純度が高い上位 10 個のパラメータを表にする。

4.3 画像分割結果

図 3、図 4 はそれぞれ既存手法、提案手法による画像分割結果である。分割領域の画素値は領域内の平均輝度とする。

4.4 計算量

表 3 は既存手法の k -means 法による事前クラスタリングと提案手法の計算時間を比較したものである。提案手法

表 1 上位 10 個の平均純度とそのパラメータ (σ, σ_k, r, k はそれぞれガウシアンフィルタの帯域の尺度、類似度行列に使用する核関数の尺度、距離と画素値の類似性の重み付けの尺度、クラスタ数)

番号	純度	σ	σ_k	r	k
1	0.7663	0.3	200	0.3	8
2	0.7659	4	400	0.3	8
3	0.7663	1.5	200	0.3	8
4	0.7653	0.3	100	0.1	8
5	0.7643	4	100	0.1	8
6	0.7635	4	400	0.1	8
7	0.7630	2	200	0.1	8
8	0.7609	1.5	50	0.1	7
9	0.7607	4	200	0.1	8
10	0.7606	4	200	0.3	8

表 2 クラスタ数 $k = 3$ の時の上位 10 個の平均純度とそのパラメータ (σ, σ_k, r, k はそれぞれガウシアンフィルタの帯域の尺度、類似度行列に使用する核関数の尺度、距離と画素値の類似性の重み付けの尺度、クラスタ数)

番号	純度	σ	σ_k	r	k
1	0.7147	4	400	0.1	3
2	0.7142	4	400	0.3	3
3	0.7140	2	200	0.1	3
4	0.7139	2	200	0.3	3
5	0.7137	2	100	0.3	3
6	0.7136	2	400	0.3	3
7	0.7136	2	400	0.1	3
8	0.7135	0.3	400	0.3	3
9	0.7134	0.3	400	0.1	3
10	0.7132	2	400	0.6	3

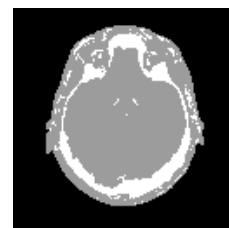


図 3 既存手法による画像分割結果

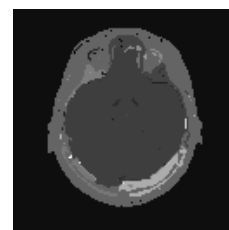


図 4 提案手法による画像分割結果

は、クラスタ数を $k = 3$ に固定した際に、平均純度が最も高いパラメータを採用した。

表 3 提案手法と既存手法の5回試行した平均計算時間(秒)を比較(t_{wa} , t_w , t_{svd} はそれぞれ事前クラスタリングの計算時間, 類似度行列作成時間, 固有値分解計算時間)

	t_{wa}	t_w	t_{svd}	合計計算時間
提案手法	0.01	0.05	2.724	3.278
既存手法	1.024	0.0186	0.0389	2.264

4.5 考察

表 1 では, 番号 8 の $k = 7$ 以外は $k = 8$ となっており, クラスタ数 k が高いほど純度が高くなる傾向が見える. 純度は $\max_h |C_i \cap A_h|$ 以外の $X_{ij} = |C_i \cap A_j|$ が少ないほど純度が高くなる. よって, 画像分割領域を画素からなるクラスタと見なしたとき, 最も交わる正解のクラスタとの交わりが大きく, かつ, それ以外の正解クラスタとの交わりが小さければ純度が高くなるので, 分割領域数を増やせば純度が高くなる.

$k = 3$ に固定した時の平均純度を示した. 表 2 では, $r = (0.1, 0.3, 0.6, 1.0)$ の中でも, $r = 0.1, 0.3$ の時に純度が高い値である. これは表 1 でも同じである. r の値が 0 に近いとき, クラスタリングにおいて画素の近さよりも画素値の類似性が重視される. 表 3 では, 事前分割の計算コストは提案手法が低く, 類似度行列作成と特異値分解の計算コストは既存手法が低い傾向が見える. 事前分割の計算コストは Watershed 過分割と k -means クラスタリングの計算時間量に影響を受ける. 類似度行列作成と特異値分解の計算コストは事前分割数と対応しており, 計算コストは事前分割数に比例する. 既存手法と提案手法の合計計算時間にそれほどの差は見られなかった.

5. おわりに

本研究では, MRI 等の画像を効率的に分割する手法を提案した. 特徴空間において, 線形分離不可能なクラスタとして表される画像分割領域をスペクトラルクラスタリングで求める際, 主要な計算コストとなる類似度行列の生成と固有値分解は事前クラスタリングによって削減できる. 提案手法では, Watershed 過分割領域を事前クラスタとすることで画像のエッジを考慮しながら事前クラスタリングの効率化と事前クラスタ数の指定の回避を達成した.

提案手法のこれらの利点を確認するため, 脳の MRI 断層画像の分割において k -means 事前クラスタリングとの比較実験を行った. 同性能の分割性能で同程度の計算コストだった.

提案手法のエッジを考慮した事前クラスタリングは现阶段の計算方法では類似度行列作成に SuperPixel の重心と SuperPixel 内の平均画素値のみを用いている. SuperPixel 内の画素と外の画素の評価の違いは重心からの距離のみになっている. 図 5 は SuperPixel の境界であるエッジ部分の模式図であり, 黒い画素がエッジで白い画素がそれ以外である. SuperPixel と画素の類似度を計算する時に, エッ

ジから見て in 側の画素と out 側の画素で重み付けを行うことができれば, 画像のエッジを考慮した類似度による画素のクラスタリングができる可能性がある. 提案手法は, クラスタリングにこの可能性を持たせる側面があることに注目されたい.

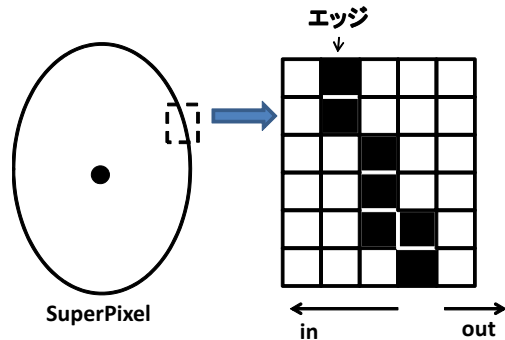


図 5 SuperPixel の境界と内外の画素

参考文献

- [1] J.Canny, "A computational approach to edge detection" IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol.8.No.6, pp.679-698, 1986.
- [2] M. Kass, A. Witkin, D. Terzopoulos, "Snakes: active contour models" International Journal of Computer Vision, pp.321-331, 1988.
- [3] T. Sakai and A. Imiya, "Validation of watershed region by scale-space statistics", SSVM2009, pp.175-186, 2009.
- [4] J. Shi and J. Malik, "Normalized cuts and image segmentation", IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol.22, No.8, 2000.
- [5] 酒井智弥, 井宮淳, "スペクトラルクラスタリングのランダム算法と画像・動画分割への応用", 電子情報通信学会論文誌, vol.j93-D. No.8, pp.1256-1266, 2010.
- [6] T. Sakai and A. Imiya "Practical algorithms of spectral clustering: toward large-scale vision-based motion analysis", Machine Learning For Vision-Based Motion Analysis, Advances in Pattern Recognition, Part 1, 3-26, 2011.
- [7] I. S. Dhillon, Y. Guan, B. Kulis, "Weighted graph cuts without eigenvectors a multilevel approach", IEEE Trans. Pattern Analysis, vol.29, no.11, pp.1944-1957, 2007.
- [8] S. Beucher and C. Lantuejoul, "Use of watersheds in contour detection", In International workshop on image processing: real-time edge and motion detection, 1979.
- [9] J. Cousty "Discrete watersheds: theory and applications to cardiac image segmentation", PhD thesis, 2007.