

最近の技術から

シミュレーテッド・アニーリングとその応用

大山 永 昭

東京工業大学像情報工学研究施設 〒227 横浜市緑区長津田町 4259

1. はじめに

シミュレーテッド・アニーリングは、モンテカルロ法の一種であり、最適化問題に対する一つの解法として Kirkpatrick らにより 1983 年に提案された¹⁾。彼らは、この手法を VLSI 内の配置問題や巡回セールスマン問題に適用し、その可能性を示したが、アルゴリズム自体は組合せ問題に限らず広く一般的に適用できる能力を有しているため、画像処理の分野でもいくつかの報告がなされている。その代表的なものとしては、Smith らによる符号化開口像法を用いた画像再構成問題への応用²⁾、Nieto-Vesperinas らによる位相回復問題への応用³⁾、さらに Barnard によるステレオ画像におけるマッチング処理への応用⁴⁾等がある。

本稿では、シミュレーテッド・アニーリングの基本原則とその応用例について解説する⁵⁾。

2. 基本原則

シミュレーテッド・アニーリングは、統計熱力学の類推を用いたモンテカルロ法的なアルゴリズムであり、与えられた問題に設定されたコスト関数の大域的な最小点を見つけるために用いられる。

2.1 多数の粒子からなる物理系との対比

与えられた最適化問題における変数 $\{x_i\}$ と最適化を評価する関数 (通常コスト関数と呼ぶ) を、それぞれある物理系における粒子および系のエネルギーにたとえる。今、このコスト関数 E が、 n 個の変数により与えられるとすると、

$$E = E(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1)$$

と書くことができる。画像再構成問題などにおいては、 $\{x_i\}$ は各ピクセル値になり、この E の値を最小にするような $\{x_i\}$ の組を見つけだすことで最適化問題を解く。実際の物理系においては、系の温度が T であるとき多数の粒子はそれぞれ自由エネルギーが最も低い状態で熱平衡となるが、そのとき、系が基底状態より ΔE だけ高いエネルギー状態になる確率は、ボルツマン分布

$$P(\Delta E) = \exp(-\Delta E/kT) \quad (2)$$

になることが知られている。このことは言い換えると、

各粒子の状態が熱的に揺らいでいることになり、これが局所的な最小点にトラップされずに大域的な最小点への到達を可能にしている。したがって、複雑な形をしたコスト関数を用いる最適化問題においては、系の温度を十分に注意深く制御し、準熱平衡状態の連続として冷却を行なう焼き鈍し (annealing) が必要になる。

系の温度を制御する annealing schedule は、大域的な最小点へ到達するためにきわめて重要であるが、その可能性とスケジューリングの方法については、Mitra ら⁶⁾や Szu ら⁷⁾により議論されている。

2.2 アルゴリズムの説明

はじめに求める解 $\{x_i\}$ に、一様な値や解に対する先験的な情報から得られた値等の適当な初期推定を与える。そして、各パラメータに対し順番に微小な変化を加える。たとえば、今 i 番目のパラメータをある微小量 Δx (この量はグレインと呼ばれ、その符号はランダムに選ばれる) だけ変化させるとし、そのときのコスト関数の変化量 ΔE を計算する。もしも $\Delta E < 0$ であれば、この微小変化はより最適解に近いものとして受け入れる。逆に $\Delta E > 0$ のときは、系のエネルギーを増加させてしまうのであるが、これをローカルミニマムから抜け出すために必要な揺ぎと考へて、ボルツマンの確率にしたがって受け入れることにする。このような微小変化をすべてのパラメータに対し繰り返し行なうことで、計算機内に疑似的な熱平衡状態を作り上げる。次に系の温度を少し下げると、エネルギーを上昇させるようなグレインを受け入れる確率も下がるために、系は非平衡状態となって新たな熱平衡状態へと変化して行く。以上のことを、系のエネルギーが十分小さくなるまで実行することで、与えられた問題の最適解を得る。

3. 拘束条件付き画像再構成問題への応用⁸⁾

ここでは、シミュレーテッド・アニーリングが最も有効に働く例として、拘束条件付き画像再構成問題の一つである血管画像の再構成への応用について述べる。

3.1 再構成システムと拘束条件

ここで想定している再構成システムでは、静脈造影による心臓血管などの動きの激しい物体の三次元イメージ

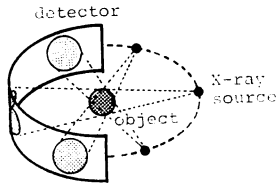


図1 撮像システムの概念図

ングを目的としている。通常のX線CTなどでは、多方向の投影データが必要となるが、この場合には図1に示されるように、複数のX線管球による同時曝射が必要になるため、得られる投影方向数はきわめて少ないものになる。したがって、この再構成問題は強度の ill-condition であり、良好な再構成画像を得るためには強力な拘束条件の導入が不可欠である。

再構成の対象が血管であるということから、次のような拘束条件の導入が考えられる。

- ① 再構成画像の取りうる値が、血管部分と背景部分に対応して、ほぼ二つの領域に分かれる。
- ② 血管は空間的に連続しており、孤立点は存在しない。

拘束条件の①は、造影剤の投与前後の画像間のサブトラクションを用いることで、その導入を可能にする。

3.2 再構成手法と拘束条件を導入したコスト関数

まずはじめに、上記拘束条件を含まない基本的なコスト関数について述べる。物体を1次元に並べなおしたものを \hat{f} 、ディテクタにより得られた強度を、入射X線強度で規格化して負の対数を取ることで得られる投影データを g とすると、この再構成問題は一種の線形逆問題となるため、

$$g = H\hat{f} + n \quad (3)$$

の問題を得る。ここで H は投影の条件を与えるマトリクス、 n はノイズである。求める物体の推定値 \hat{f} は、一般的に用いられるコスト関数

$$E_s = \|g - H\hat{f}\|^2 \quad (4)$$

を最小とするように決められる。ところが、前節で述べたような ill-condition の問題では、 $E_s = 0$ とするような \hat{f} は無限に存在してしまうため、正しく物体を再構成することはできない。そこで、前記の拘束条件を定式化し、コスト関数に加える。実際に用いたコスト関数は、

$$E = E_s + W_h E_h + W_e E_e \quad (5)$$

であり、 E_h, E_e はそれぞれ前記の拘束条件①、②を定式化したもの、 W_h, W_e はその重み係数である。 E_h は各ピクセルが取りうる値の領域の境界にポテンシャルの壁を作るものであり、 E_e は微小変化を加えるある一点の近傍に、血管部のレベルを有するピクセルがあるときには負の値を、そうでなければ正の値を与えるものである。

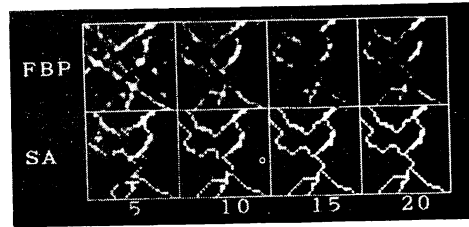


図2 Filtered back projection 法と simulated annealing による再構成像の比較。付記されている数字は、それぞれの場合の投影方向数を示している。SA の 15, 20 方向は、オリジナル画像と同一である。

3.3 シミュレーション結果

上記の有効性を確認するために、計算機シミュレーションを行なった。想定した投影は平行ビームであり、物体は図2の右下に示される2次元の血管像で 32×32 の画素を有している。コスト関数は(5)式を用い、シミュレーテッド・アニーリング (SA) により得られた再構成像を図2の下段に示す。ここで付記されている数字は、投影方向数を示している。図2上段は、解析的な逆変換手法である filtered back projection (FBP) により得られた再構成像である。両者の比較から拘束条件付きの本手法の有効性が十分に確認される。

4. おわりに

本稿では、シミュレーテッド・アニーリングの原理とその応用例として、血管像の再構成について述べた。本手法が持つ利点としては、

- ① コスト関数の局所最小点にトラップされず、大域的な最小点まで到達することができる。
- ② コスト関数の形をかなり自由に設定できるため、拘束条件の導入を容易にする。
- ③ 並列処理の可能性を有している。

等が挙げられるが、まだ十分な研究がなされていないため数多くの研究課題が残されている。今後の研究成果が大いに期待される。

文 献

- 1) S. Kirkpatrick, et al.: Science, **220** (1983) 671-680.
- 2) W.E. Smith, et al.: Opt. Lett., **8** (1983) 199-201.
- 3) M. Nieto-Vesperinas, et al.: J. Opt. Soc. Am. A, **5** (1988) 30-38.
- 4) S. T. Barnard: *Readings in COMPUTER VISION*, Morgan Kaufmann Publ., Inc. (1987).
- 5) 深尾 毅: 信学誌, **70** (1987) 1247-1250.
- 6) D. Mitra: Adv. Appl. Prob., **18** (1986) 747-771.
- 7) H. Szu, et al.: Phys. Lett. A, **122** (1987) 157-162.
- 8) H. Haneishi, et al.: Opt. Lett. to be published.

(1989年3月9日受理)