

令和 5 年 6 月 25 日現在

機関番号：13801

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K11951

研究課題名（和文）ハイパースペクトルイメージングを有効活用するための数理技術の開発

研究課題名（英文）Developing Mathematical Methods for Applying Hyperspectral Imaging to Earth Observation

研究代表者

水谷 友彦（Mizutani, Tomohiko）

静岡大学・工学部・准教授

研究者番号：00553984

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：ミクセル分解手法の性能を向上させるためにHottopixx法とスペクトル法のアルゴリズムについて研究を行った。Hottopixx法はノイズに対して頑強であることが知られているが、一方で、入力行列に含まれるノイズの量を事前に推定する必要があること、および、計算量が大きいことがミクセル分解に適用する上での課題となっていた。本研究ではHottopixx法のアルゴリズムを改良することでこれらの課題を克服することに成功した。PengらはCOLT2015においてスペクトル法の理論性能を明らかにしたが、その結果の改善に成功した。その解析結果を踏まえてスペクトル法のアルゴリズムを改良し性能を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ハイパースペクトルイメージングは地球表面の観測に活用されている。植生分布の把握や海洋汚染調査などを人が直接実施すると大きなコスト（労力や時間など）が伴うが、人工衛星に搭載されたハイパースペクトルセンサを用いると、一度の観測で広域な領域を調べることができる。そのためコストを大幅に軽減することが可能となる。ハイパースペクトルセンサで取得した画像から、端成分スペクトルと含有率を求めることをミクセル分解と呼ぶ。ミクセル分解はハイパースペクトルイメージングを活用するための基本的な問題である。本研究ではミクセル分解手法のアルゴリズムを改良し、その有効性を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：This research project aimed to enhance the performance of algorithms for unmixing hyperspectral images. In particular, we studied Hottopixx method and spectral method, which are promising approaches to hyperspectral unmixing. Hottopixx method was shown to be robust to noise. But there are two issues: one is that the method requires us to estimate the noise involved in the data matrix before running; and another is that the computational cost is expensive. We revised the algorithm of Hottopixx method, and overcame the issues. In COLT 2015, Peng et al. showed the performance of spectral method. We improved their results by enhancing the structure theorem they showed. Based on the results we obtained, we developed a novel algorithm for spectral method, and studied the performance in theory and practice.

研究分野：知能情報学

キーワード：ハイパースペクトルイメージング ミクセル分解 非負行列分解 スペクトル法 凸最適化

1. 研究開始当初の背景

ハイパースペクトルイメージングとは、対象物から反射される電磁スペクトルをセンサで測定する技術である。その特徴は測定できる波長幅が広いことで、それゆえに対象物のスペクトル特性を詳細に測定できる。ハイパースペクトルイメージングは人工衛星からの地球表面観測に有効な技術で、植生、海洋ならびに耕作地帯の観測、鉱物資源の探索などに利用されている。人工衛星に搭載されたハイパースペクトルセンサを用いると、一度の観測で広域な領域を調べることができる。植生分布の把握や海洋汚染調査などを人が直接実施すると大きなコスト(労力や時間など)が伴うが、ハイパースペクトルイメージングを利用するとそのコストを削減できる。

NASA ジェット推進研究所は1980年代に地球表面観測を目的としてAVIRISセンサを開発し、現在も運用を行っている。このセンサは400 nmから2500 nmの波長を224バンドで撮影することができる。つまり、センサで取得した画像はピクセルごとに224個の測定値を持つ。このような画像はハイパースペクトル画像と呼ばれる。図1はアメリカのある都市をAVIRISセンサで取得した測定値から作成したハイパースペクトル画像である。ハイパースペクトル画像の中に含まれる主要な要素のことを端成分と呼ぶ。図2(左)はUrbanデータをRGB画像に変換したものである。この画像は主にアスファルト、草、木、屋根、メタル、土を含んでおり、これら6つが端成分である。図2(右)はUrbanデータの端成分スペクトルと含有率分布図である。

ハイパースペクトルセンサで取得した画像から、端成分スペクトルと含有率を求めることをミクセル分解と呼ぶ。ミクセル分解はハイパースペクトルイメージングを有効活用する上での基本的な問題である。これまでに数多くのミクセル分解手法が提案されているが、必ずしも得られる結果の精度は高くない。そこで本研究では高精度なミクセル分解手法の開発に取り組んだ。

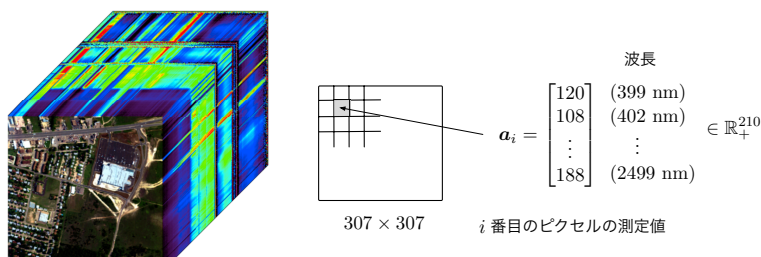


図1 Urban イメージデータ

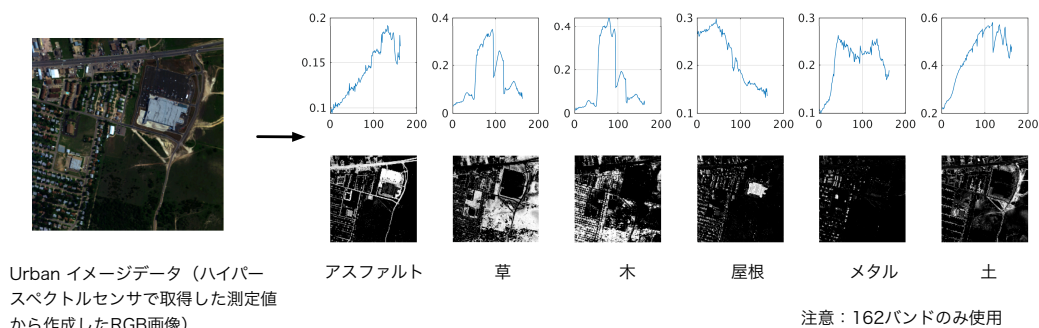


図2 Urban イメージデータの端成分スペクトルと含有率分布図

2. 研究の目的

本研究は高精度ミクセル分解手法の開発を目的とした。次のように二段階で開発を行った。第一段階では線形混合モデルを基盤とするミクセル分解手法の改良、第二段階ではグラフ分割手法に基づくミクセル分解手法の開発に取り組む、という計画を定めた。

(第一段階) 線形混合モデルでは観測スペクトルは複数の端成分スペクトルの非負結合で与えられると仮定する。非負結合の係数は各端成分スペクトルの含有率に対応する。線形混合モデルを仮定するとミクセル分解は非負行列分解(NMF)を求める問題として定式化できる。一つの端成分スペクトルのみ(つまり他の端成分スペクトルと混合していない純粋な端成分スペクトル)

を含んでいるピクセルのことをピュアピクセルと呼ぶ。画像中に各端成分スペクトルに対応するピュアピクセルが存在することを仮定すると、ミクセル分解は分離可能性を仮定した下で非負行列分解 (Separable NMF) を求める問題となる。本研究では NIPS2012 において Bittorf らが提案した Hottopixx 法の改良に取り組んだ。

(第二段階) ミクセル分解においては線形混合モデルの下で計算手法を設計するのが標準的である。これまでに数多くの線形混合モデルに基づく手法が提案されているが、その分解精度には限界があると指摘されている。実際に観測されるスペクトルの生成過程は複雑で、線形混合モデルでは十分に表現できていない可能性がある。そのため、線形混合モデルに基づくミクセル分解手法の精度は必ずしも十分ではないことが多い。本研究ではこの問題点を解消するためにグラフ分割に基づくミクセル分解手法の開発を目指した。この手法では画像に含まれるピクセルの類似関係をグラフで表現する。ピクセル間の類似度は非線形な関数を用いて定量化する。グラフは次のようにして構築する。画像のピクセルはグラフの頂点に対応させて、もし2つのピクセルが似ている場合は、対応する頂点間に辺を置く。このようにして構成したグラフに対してスペクトル法を適用し、辺で密に繋がっている頂点のグループを見つけるという手法の開発に取り組んだ。

3. 研究の方法

(第一段階) Bittorf らが提案した Hottopixx 法はノイズに対して頑強であることが理論的に保証されている。この結果は Hottopixx 法がミクセル分解に対して有効であることを示唆している。一方で、Hottopixx 法ではあらかじめ入力行列に含まれているノイズの量を推定し、それを入力データとして与える必要がある。入力行列に含まれているノイズの量を推定することは容易ではない。そのことが Hottopixx 法をミクセル分解に対して適用する上での障害となっていた。そこで、ノイズの量を入力データとして与えなくても動作するようにアルゴリズムを改良し性能を評価した。

Hottopixx 法では線形混合モデルを Hottopixx モデルと呼ばれる線形計画問題で緩和し、その最適解を利用することでミクセル分解を求める。Hottopixx モデルの問題規模はデータ数の二乗に比例するので、データ数が数百程度でも最適解を計算することが困難になる。そこで、列生成法のアイディアに基づいて、計算効率に優れた実装法を開発した。

(第二段階) スペクトル法をミクセル分解に適用するための基盤を整備するために、スペクトル法の性能解析とアルゴリズムの改良について研究を行った。COLT2015 において Peng らはスペクトル法の性能を理論的に解析した。彼らの解析では構造定理が重要な役割を担っている。そこで構造定理を精緻化することで Peng らの結果の改良を目指した。スペクトル法では、グラフの頂点を線形空間上の点に写すときに主に2種類のスケールリングを利用する。Peng らが解析したスペクトル法は Shi-Malic によって提案されたスケールリングを用いる手法である。一方で、Ng らによるスケールリングを用いる手法の性能については未解決だったので、その解析に取り組んだ。

スペクトル法のアルゴリズムを改良した。スペクトル法ではグラフの頂点を実数空間上の点に対応付けて、その点集合を距離に基づいて複数のグループに分割する。グループ分けには K 平均法を利用するのが標準的である。K 平均法の性能解析はどうしても煩雑になる。そこで K 平均法の代わりに凸最適化に基づくグループ分け手法を組み入れたスペクトル法を設計し、その性能を理論と実験の両側面から評価した。

4. 研究成果

(第一段階) Hottopixx 法では Hottopixx モデルの最適解を利用することでミクセル分解を求める。更に、後処理を施すことで精度の向上を図る。Hottopixx モデルの構築および後処理アルゴリズムを実行するためには、入力行列に含まれているノイズの量が前もって判明していないといけない。そこで、本研究ではノイズの量を指定する必要がない Hottopixx モデルと後処理アルゴリズムを開発した。そして、提案手法は改良前の Hottopixx 法とほぼ同程度のノイズ頑強性を有することを理論と実験で明らかにした。この研究成果をまとめた論文は SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications 誌に受理された。

大規模行列に対して Hottopixx 法を適用できるようにするために、列生成法に基づく計算効率に優れた実装法を開発し、計算機上に実装した。実験を行ったところ、データ数が一万程度の Hottopixx モデルならその最適解を現実的な時間で計算できることを確認した。更に精度を向上させるために後処理技術の改良と外れ値除去の開発を行った。その結果、提案手法は既存手法に比べて高い精度でミクセル分解を実行できることを実験で確認した。図 3 は Urban データに対して提案手法を適用して得られた含有率分布図である。この結果から提案手法は精度良く含有率分布図を推定できることが確認できる。

(第二段階) Peng らはスペクトル法の性能を明らかにしたが、その結果の改善に成功した。具体的には、ギャップの仮定を $\Omega(k^3)$ から $\Omega(k)$ 、近似精度を $O(k^3)$ から $O(k)$ に改善した。この研究結果をまとめた論文は Optimization Letters 誌に受理された。

スペクトル法に凸計画に基づくグループ分け手法を組み入れることでアルゴリズムの改良を行

った. グラフの頂点がクラスター構造を内存しているという仮定の下で, 凸計画に基づくスペクトラル法の出力がどの程度そのクラスターに近くなるかを理論的に評価した. その際, NMF に関する研究で得られた結果を利用した. また, 実験的に凸計画に基づくスペクトラル法の有効性を K 平均法に基づくスペクトラル法と比較することで検証した. この研究成果をまとめた論文は Machine Learning 誌に受理された.

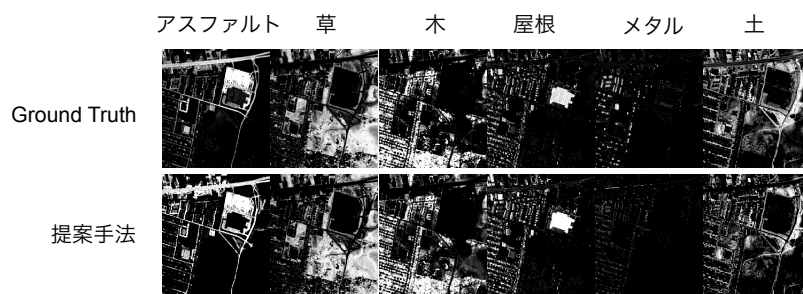


図 3 Urban データに対して提案手法を適用して得られた含有率分布図

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Tomohiko Mizutani	4. 巻 23(3)
2. 論文標題 Refinement of Hottopixx Method for Nonnegative Matrix Factorization Under Noisy Separability	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 1029-1057
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1137/21M1442206	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomohiko Mizutani	4. 巻 15
2. 論文標題 Improved analysis of spectral algorithm for clustering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optimization Letters	6. 最初と最後の頁 1303-1325
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11590-020-01639-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tomohiko Mizutani	4. 巻 110
2. 論文標題 Convex programming based spectral clustering	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Machine Learning	6. 最初と最後の頁 933-964
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10994-020-05940-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 1件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 水谷友彦
2. 発表標題 Hottopixx法によるハイパースペクトル画像のミクセル分解
3. 学会等名 最適化:モデリングとアルゴリズム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 水谷友彦
2. 発表標題 分離可能想定下の非負行列分解に対するHottopixx法の改良
3. 学会等名 OR学会中部支部シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 水谷友彦
2. 発表標題 分離可能想定下の非負行列分解に対するHottopixx法の改良
3. 学会等名 研究集会「最適化：モデリングとアルゴリズム」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 水谷友彦
2. 発表標題 スペクトラル・クラスタリングの性能解析
3. 学会等名 数理最適化の理論・アルゴリズム・応用
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 水谷友彦
2. 発表標題 スペクトラル・クラスタリングの性能解析
3. 学会等名 IBIS2020
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

水谷友彦のホームページ
<https://tomohiko-mizutani.github.io/index.html>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------