

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 17 日現在

機関番号：22604

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2012

課題番号：21540396

研究課題名（和文） 新しいモンテカルロ法の確率的画像処理問題への応用

研究課題名（英文） The application of new Monte Carlo methods to the problem of probabilistic image processing

研究代表者

岡部 豊（OKABE YUTAKA）

首都大学東京・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：60125515

研究成果の概要（和文）：新しいモンテカルロ法を用いて、複雑な相転移を示すモデルを調べた。具体的に一般化 XY モデルの相転移がパラメータによらず KT 転移だけであることを示し、さらに転移温度によらない有限サイズスケリング解析を行い、KT 転移のユニバーサリティーを示した。一方、画像領域分割の問題にモンテカルロ法を適用し、その有効性を示した。さらに、graphic processing unit（GPU）をモンテカルロ法の高速計算に適用することを示した。

研究成果の概要（英文）：Complex spin models were studied by new Monte Carlo algorithms. The generalized XY model was shown to be of Kosterlitz-Thouless type regardless of the parameter. The Monte Carlo method was also applied to the problem of image segmentation problems, and it was shown that this method is effective especially combined with the graph-cut method. Moreover, the graphic processing unit (GPU) was successfully applied to the high-speed calculation of Monte Carlo simulation.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
2012年度	700,000	210,000	910,000
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理 物性基礎

キーワード：モンテカルロ法、画像処理、領域分割、Mumford-Shah モデル、グラフカット法、GPU、並列計算

1. 研究開始当初の背景

計算機の発展により、計算機シミュレーションの役割が急速に拡大していることは言うまでもない。物性物理学の研究においては、研究対象の広がり、新しい複雑な現象の出現が顕著である。種々の物質系が示す多様な物理現象を理解する上で、計算機シミュレーションは欠かすことのできない研究手段である。熱平衡状態だけでなく、動的な過程への

関心が増し、ランダム系、複雑系などに問題は広がっている。しかし、緩和の時間スケールが非常に長くなる問題にしばしば直面し、計算機シミュレーションを困難にする。スローダイナミックスの示す物理的問題の本質を解明すると共に、スローダイナミックスを克服する新しいシミュレーション手法を提案することが急務の問題となっている。

一方、画像処理の問題は、画像修復、画像領域分割など、デジタル画像処理、コンピュ

一タの高速化などを背景に、また幅広い応用範囲があることから、精力的に研究が進んでいるが、統計力学との関連も指摘されている。学際的な分野であるので、画像工学、人工知能、情報理論、数学などからのアプローチが進んでいるが、他の研究分野で培われた手法を応用することにより、新しい展開が期待される研究対象である。

2. 研究の目的

スローダイナミックスの問題を克服する方法として、クラスターフリップ法と拡張アンサンブル法の2つの流れの提案があり、本研究者もこれまでいくつかの提案をしてきた。本研究では、これらの新しいモンテカルロアルゴリズムを用いて、これまで困難とされてきたランダム系、フラストレート系、非平衡定常状態転移などの問題に取り組むと共に、さらに有効なモンテカルロアルゴリズムを開発する。また、同時に画像処理の問題への展開をはかることを目的とした。

具体的な問題として、2次元希釈 XY モデルの研究があげられる。希釈と共に浸透閾値で KT 転移が連続的に消失することを示してきたが、これは cosine 型の相互作用のある場合であった。双対性のある Villain 型の相互作用の場合には、その KT 転移温度についてはある関係の予測もあり、展開理論との関係を含めて、精密な計算で検証する。他の問題として、2002 年に提唱された一般化 XY モデルの相転移を論じる。パラメータ q が導入されるが、転移が 1 次転移に変わるか、KT 転移のままであるか、決着していない問題であるので、新しいモンテカルロ法を用いて精度の高い計算を行う。

画像処理については、画像領域分割の問題へのモンテカルロ法の適用の予備的研究を行っていた。Mumford-Shah エネルギーモデルという領域の境界を変化させたときのエネルギー最小化問題として扱う方法が提唱され、ノイズに強く、ロバスト性にすぐれているのが特徴であるが、具体的に最小となる境界を探すことは決して容易ではない。数学者が精力的に研究し、決定論的な数値解法など様々な手法が提案されているが、時間がかかる、局所解につかまる、などという問題を抱えている。我々の予備的研究ではこのエネルギーモデルをイジングモデル等のスピンモデルと同様のものとして捉え、モンテカルロ法によって最小解を探し出す手法を考案した。本研究では、この予備的な計算に工夫を加え、高速計算を実現し、他の方法と比較検討することを目的とした。

3. 研究の方法

本研究では、有効なモンテカルロアルゴリズムを用いて、I. 複雑な相互作用をもつスピン系の相転移、II. 画像処理問題への応用の2つのテーマに関する研究を行ったが、その方法は次のとおりである。

I. 複雑な相互作用をもつスピン系の相転移

Villain 型相互作用を持つ 2 次元希釈 XY モデルの研究を行ったが、転移の次数に注意を払う必要があるため、クラスターフリップによるモンテカルロ計算に加えて、状態密度を直接測定する Wang-Landau 法による計算を相補的に実行した。また、一般化 XY モデルの相転移の研究においても、クラスターフリップ法に加えて、Wang-Landau 法による計算を行った。両者の利点を相補的に用いた研究で、精度の高い議論が可能となる。

II. 画像処理問題への応用

画像領域分割の問題は、画像を分割するだけではなく、画像から対象物の輪郭を取り出し、閉曲線により領域を分割、抽出する問題である。Mumford-Shah エネルギーモデルに基づき画像領域分割の問題を考察するが、従来の解法とは異なり、まず、問題をスピンモデルにマップする。スピンモデルとして見ると、複雑な非線形相互作用をもつ系となるが、この最小解をモンテカルロ法で探し出す。実用的な応用面から見ても、高速に処理することが非常に重要で、シミュレーテッド・アニーリングの適用、ブロックスピン変換のアイディアの応用に加えて、Eden クラスター成長のアイディアをなどの工夫を行った。具体的に、腫瘍のある脳の MRI 画像の腫瘍部分の抽出などの問題に応用する。最近、MRI 画像も 3 次元画像として扱われるようになってきたが、我々のモデルは 3 次元系への拡張が容易に行えるので、3 次元画像の場合も扱った。

4. 研究成果

(1) Villain型相互作用を持つ 2 次元希釈 XY モデル

ランダム性により相転移・臨界現象がどのような影響を受けるか、古くから研究が行われてきた。ランダム系では、理論的に厳密な議論はむずかしいが、1976 年に Wu と Wang により定式化された多体スピン系の双対性の理論をランダム系に応用し、特別な 2 次元系については転移点や内部エネルギーの厳密な議論がなされてきた。議論の多くは 2 次相転移を示す系に対してであるが、最近、Kosterlitz-Thouless (KT) 転移を示す系についても議論が拡張された。2 次元正方格子上のボンド希釈した q 状態 Villain モデルの場合、2 回 KT 転移を示すが、双対性の関係より 2 つの転移温度を関係付ける予想式が

提唱されている。本研究では、モンテカルロシミュレーションを用いて、この双対関係式を定量的に調べた。具体的には、クラスターフリップモンテカルロ法を用いて、異なる距離の相関関数の比の有限サイズスケールリングやその他の解析を行い、2つのKT転移温度を定量的に見積もり、その結果と双対関係式を比較した。その結果、双対関係式は非常に近い近似となっているが、わずかにずれを生ずることを確認した。これは、KT転移を示す系に対しては初めての研究であり、2次相転移の場合の議論とも対応している興味深い結果である。

(2) 一般化XYモデルの相転移

2002年に提唱された一般化XYモデルの問題をとりあげた。2次元XYモデルは準長距離秩序を示すKosterlitz-Thouless(KT)転移を起こすが、一般化モデルについて、一般化パラメータ q を増加させるとKT転移に加えて1次転移が見られるという主張、KT転移以外の転移はないという主張などがある。そこで、ハイブリッドモンテカルロ法とエネルギー状態密度を直接測定するWang-Landau法を用い、このモデルの相転移を精密に調べた。 q の値によらずKT転移だけであることを示し、さらに転移温度によらない有限サイズスケールリング解析を行い、KT転移のユニバーサリティを示した。

(3) モンテカルロ法の画像処理問題への応用

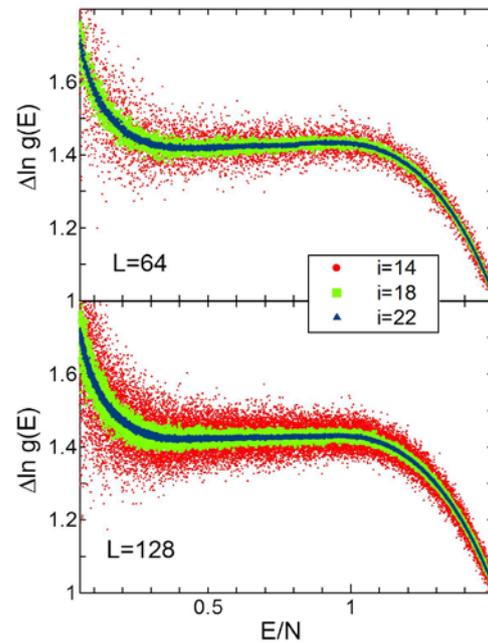
統計力学分野での画像処理は確率的画像処理と呼ばれ、本格的な研究が行われ始めたのはごく最近のことである。従来モンテカルロ法などの確率的手法は実際的な計算効率がよくないと理由で余りとりあげられてこなかったが、最近のモンテカルロ法の手法的な発展を応用すれば新しい展開が期待される。

Mumford-Shahエネルギー汎関数による画像領域分割問題について、モンテカルロ法により低エネルギー解を安定して探索する方法を提案した。さらに、グラフカット法との比較を行った。多値分割の場合、グラフカット法は、初期条件をうまく選べば、大域的なエネルギー最小値に収束するが、一般的にはよい初期条件を探すのが容易ではない。そこで、モンテカルロ法とグラフカット法を組み合わせ合わせたハイブリッド法を提案した。すなわち、モンテカルロ法により求めた解をグラフカット法の初期条件として用いる方法で、画像によらず、計算時間も短く、大域的な最小値に近づくことを示した。さらに2次元画像から3次元画像に拡張し、有効性を示した。

(4) エネルギー状態密度の計算と相転移の次数

エネルギー状態密度を直接測定するモンテカルロ法が広く用いられるようになったが、効率よい手法としてWang-Landauアルゴリズムが知られている。これまで注意を払われてこなかった状態密度の差分量に着目し、これが計算の収束、精度を議論するのに有効な量であることを示し、 $1/t$ アルゴリズムの有効性を議論した。さらに、この量が相転移の次数を判定するのに有効であることを指摘し、熱力学におけるMaxwellの等面積則との関連を議論した。

以下に示すのは、2次元3状態PottsモデルのWang-Landau法により求めた状態密度の差の量で、1次転移を議論できる。



(5) モンテカルロ法のGPUによる計算の高速化

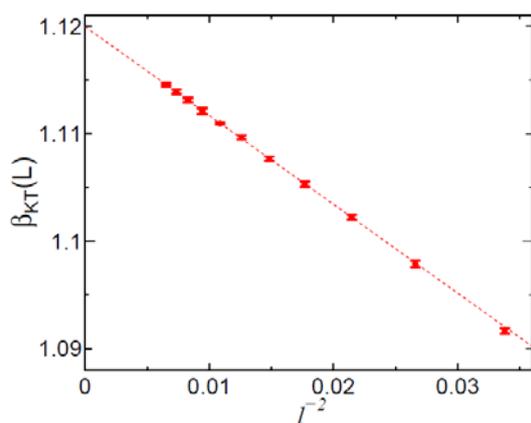
当初の研究計画になかったが、graphic processing unit (GPU) を用いた高速計算の研究を行った。近年、GPUを高速計算に応用することが試みられ、モンテカルロ法への適用もなされるようになった。クラスターフリップアルゴリズムのモンテカルロ法の場合には、これまでGPUによる並列計算は難しいとされてきたが、我々は、クラスターラベリングの効率よい並列化計算を実現することに成功し、スピン系のSwendsen-Wangタイプのクラスターアルゴリズムの計算をGPU上に実装した。2次元イジングモデルの場合に、CPUによる計算の12.4倍の計算速度が得られることを示した。

(6) 2次元XYモデルの大規模高精度計算

前項で示したように、我々は、並列計算用

のクラスターラベリングアルゴリズムを用いてGPU計算を実現した。さらに、複数のGPUを使った大規模なクラスターアルゴリズム・モンテカルロシミュレーションのプログラム改良を行った。具体的な問題として2次元XYモデルを取り上げた。東工大学術国際情報センターのTSUBAME2.0のシステムを用いて、65536×65536という非常に大きいサイズの計算を実行し、従来問題とされてきた対数補正の指数を精度よく決定できた。

以下に、サイズ依存性からKT温度を精度よく決定した図を示す。



5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 11 件)

- 1) Y. Komura and Y. Okabe, "Multi-GPU-based Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional q-state Potts model", *Comp. Phys. Commun.* 184 (2013) 40-44, 査読有
- 2) Y. Komura and Y. Okabe, "Large-Scale Monte Carlo Simulation of Two-Dimensional Classical XY Model Using Multiple GPUs", *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** (2012) 113001 (4pp), 査読有
- 3) Y. Komura and Y. Okabe, "GPU-based Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional classical spin systems", *Comp. Phys. Commun.* 183 (2012) 1155-1161, 査読有
- 4) Y. Komura and Y. Okabe, "Difference of energy density of states in the Wang-Landau algorithm", *Phys. Rev. E*

85 (2012) 010102(R) (4pp), 査読有

- 5) Y. Komura and Y. Okabe, "GPU-based single-cluster algorithm for the simulation of the Ising model", *J. Comp. Phys.* 231 (2011) 1209-1215, 査読有
- 6) Y. Komura and Y. Okabe, "Reply to the Comment on 'Phase transition of a two-dimensional generalized XY model'", *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** (2011) 208002 (2pp), 査読有
- 7) J. Yamamoto and Y. Okabe: Ab initio molecular dynamics simulation on SiN + CH and SiC + NH reactions, *Comput. Theor. Chem.* 963 (2011) 24-33, 査読有
- 8) Y. Komura and Y. Okabe: Phase transition of a two-dimensional generalized XY model, *J. Phys. A: Math. Theor.* 44 (2011) 015002 (12pp), 査読有
- 9) H. Watanabe, S. Sashida, Y. Okabe and H. K. Lee: Monte Carlo methods for optimizing the piecewise constant Mumford-Shah segmentation model, *New J. Phys.* 13 (2011) 023004 (14pp), 査読有
- 10) M. Iwamatsu and Y. Okabe: Stability of critical bubble in stretched fluid of square-gradient density-functional model with triple-parabolic free energy, *J. Chem. Phys.* 133 (2010) 0444706- (1-8), 査読有.
- 11) K. Hanami, T. Umesaki, K. Matsuda, Y. Miyata, H. Kataura, Y. Okabe, and Y. Maniwa: One-Dimensional Oxygen and Helical Oxygen Nanotubes inside Carbon Nanotubes, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79 (2010) 023601-1-4, 査読有.

[学会発表] (計 12 件)

- 1) Y. Komura and Y. Okabe: The Large-Scale Cluster Labeling Algorithm with Multiple GPUs, GTC 2013, GPU Technology Conference 2013, San Jose, California, USA, 2013年3月
- 2) Y. Komura and Y. Okabe: Multi-GPU-based calculation of percolation problem on the TSUBAME 2.0 Supercomputer, SC12, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Salt Lake City, Utah, USA, 2012年11月
- 3) 野本 祐春, 小村 幸浩, 岡部豊「GPUを用いた融液流動を伴う反応生成物の成長と運動のマルチフェーズフィールド法開発」, 日本機械学会 第 25 回計算力学講演会, 神戸ポートアイランド南地区, 2012年10月

- 4) 小村幸浩, 岡部豊「マルチGPUを用いた大規模なSwendsen-Wangマルチクラスターアルゴリズムの開発」, 日本物理学会, 横浜国立大学, 2012年9月
- 5) 小村幸浩, 岡部豊「TSUBAME2.0を用いた, 大規模な領域分割アルゴリズム: パーコレーション問題への応用」, GTC Japan 2012, 東京ミッドタウンホール&カンファレンス, 2012年7月
- 6) 小村幸浩, 岡部豊「古典スピン系におけるGPUコンピューティングの応用」, 第17回計算工学講演会, 京都教育文化センター, 2012年5月
- 7) 佐次田哲, 岡部豊「Mumford-Shah segmentationモデルによる画像領域分割における三手法の数値比較II」, 日本物理学会, 富山大学, 2011年9月
- 8) 小村幸浩, 岡部豊「グラフィック処理ユニット(GPU)を用いたq状態ポッツモデルのマルチクラスターアルゴリズムの開発」, 日本物理学会, 富山大学, 2011年9月
- 9) 佐次田哲, 岡部豊「モンテカルロ法によるMumford-Shahエネルギー汎関数を用いた画像修復」, 日本物理学会, 岡山大学, 2010年3月
- 10) 佐次田哲, 岡部豊「モンテカルロ法による確率的画像領域分割」, 日本物理学会, 熊本大学, 2009年9月
- 11) 佐次田哲, 岡部豊「ベイズ理論に基づく画像処理におけるWang-Landau法を用いた尤度関数の計算」, 日本物理学会, 立教大学, 2009年3月
- 12) 小村幸浩, 岡部豊, 大関真之「2次元q状態Pottsモデルのボンド希釈の相転移」, 日本物理学会, 立教大学, 2009年3月

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

岡部 豊: 首都大学東京・理工学研究科・教授
(研究者番号: 60125515)

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし