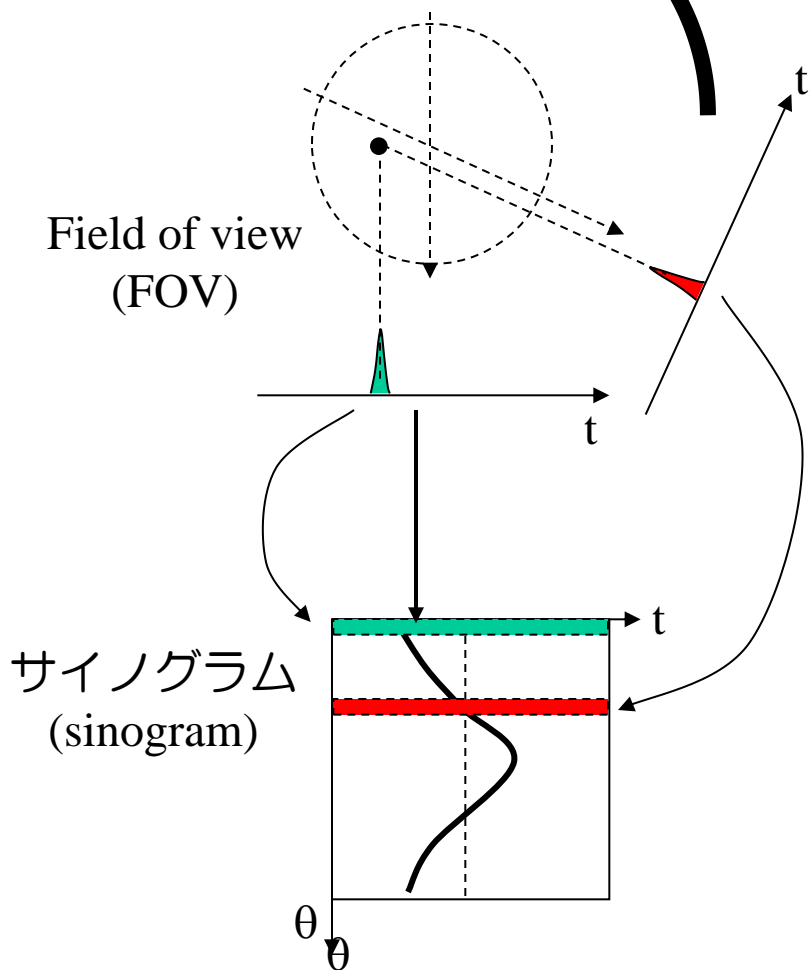


1. フィルタ補正逆投影法

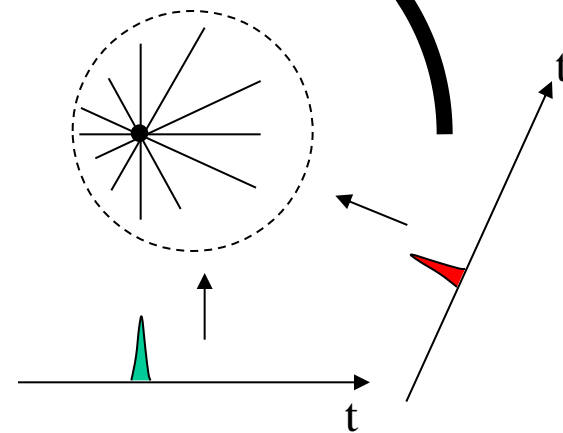
2. 逐次近似による方法

サイノグラム・単純逆投影法

点線源の場合：



単純逆投影法
(backprojection)

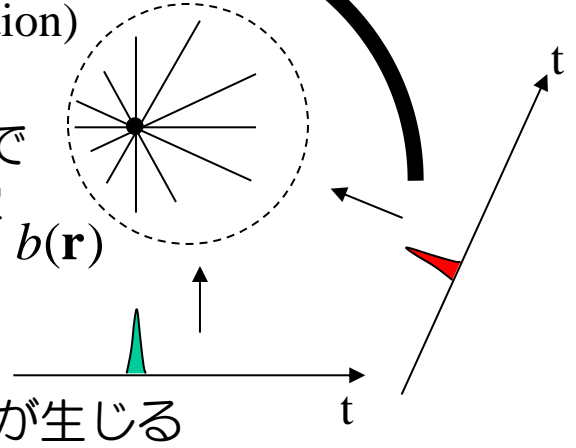


$1/r$ のぼけが生じる

単純逆投影像のスペクトル

単純逆投影法
(backprojection)

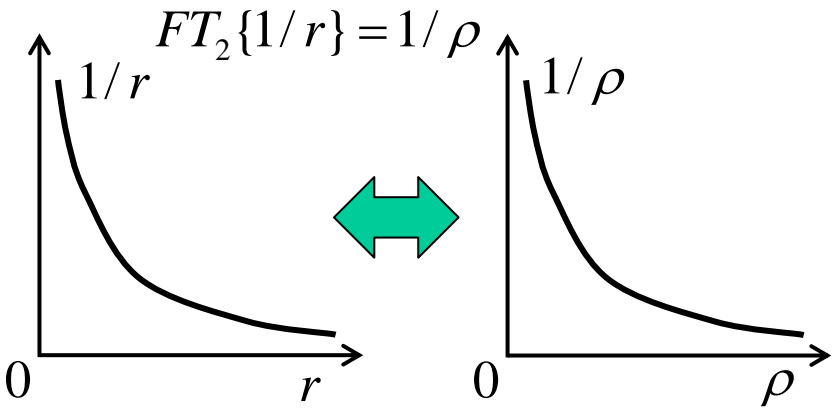
単純逆投影で
得られる像



1/rのぼけが生じる

→ フーリエ空間では
 $B(\rho) = FT_2\{b(\mathbf{r})\} = M(\rho) / \pi\rho$

ここで以下の性質を用いた



2次元フーリエ空間での処理：

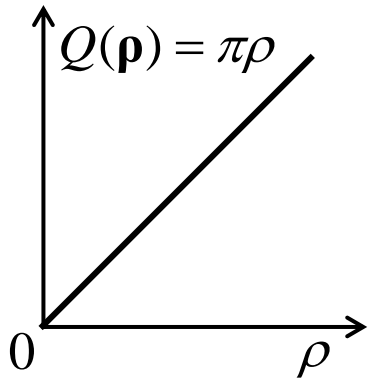
フィルタを

$$Q(\rho) = \pi\rho$$

とし、

$$Q(\rho)B(\rho) = \pi\rho \cdot M(\rho) / \pi\rho = M(\rho)$$

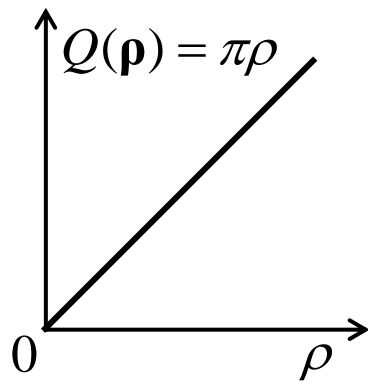
により、所望の画像の2次元フーリエ変換が得られる。



フィルタ補正逆投影法

バックプロジェクション
+
フィルタリング
はともに線形演算。

順番を入れ替えて、
フィルタリング
+
バックプロジェクション
同じことができる。



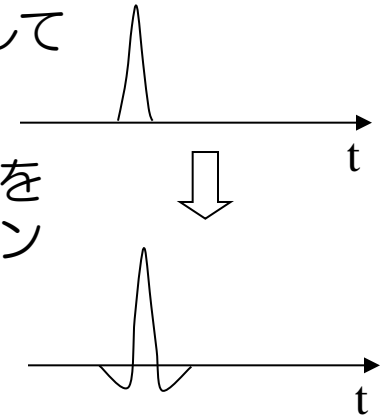
投影データにハイパスフィルタHPFを行ってから、逆投影を行う。

実際には、実空間でコンボリューション処理により、HPFを実施。

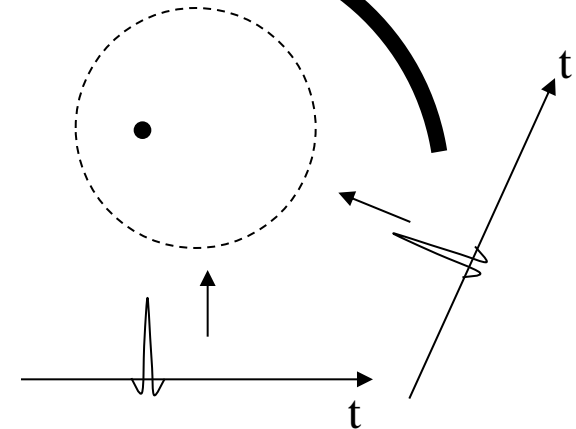
フィルタ補正逆投影法 (Filtered Backprojection)

各投影データに対して

1. t方向に
ハイパスフィルタを
コンボリューション

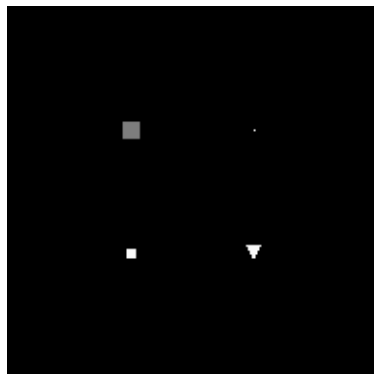


2. 逆投影

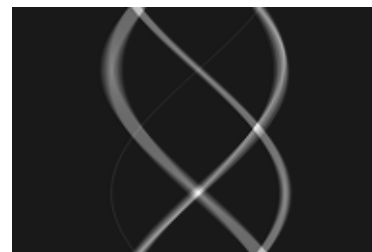


ぼけは生じない

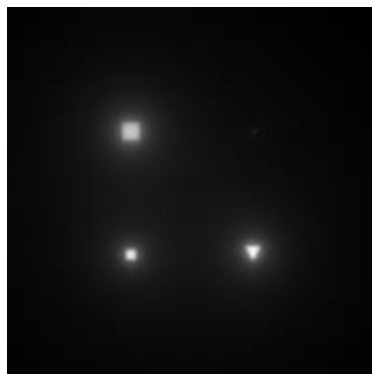
点物体



オリジナル



サイノグラム

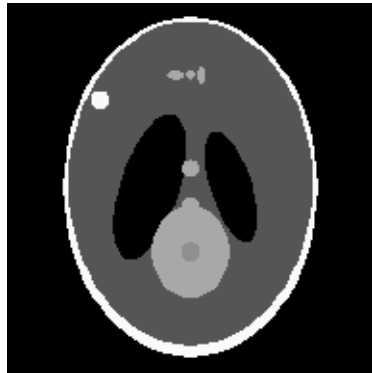


単純逆投影

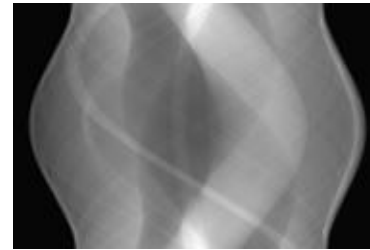


フィルタ補正逆投影

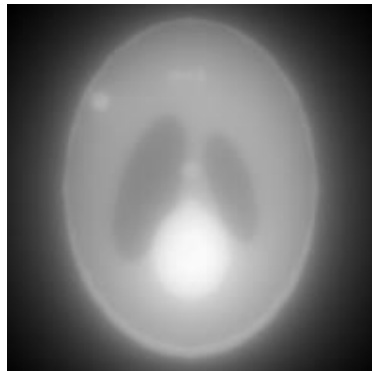
Shepp & Logan phantom



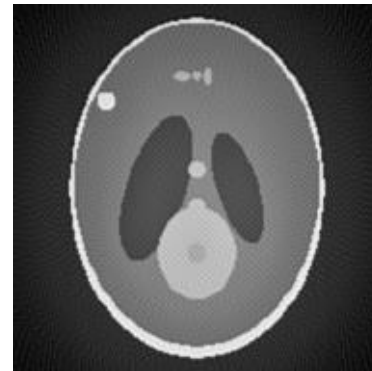
オリジナル



サイノグラム

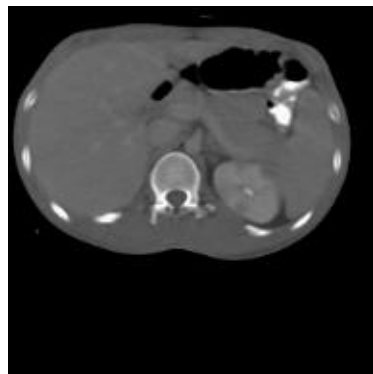


単純逆投影



フィルタ補正逆投影

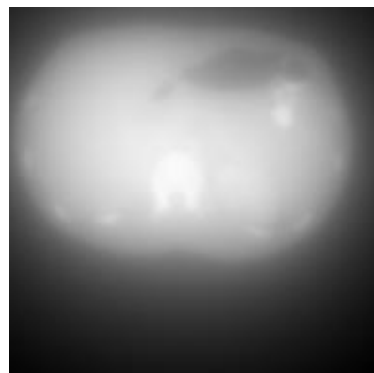
体幹部



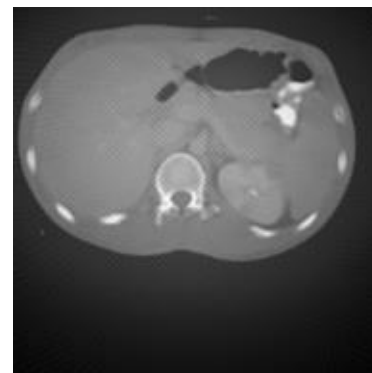
オリジナル



サイノグラム



単純逆投影



フィルタ補正逆投影

1. フィルタ補正逆投影法

2. 逐次近似による方法

問題の定式化—線形方程式による記述—

物体空間（吸収係数分布）と投影データとの関係を線形方程式で記述する。

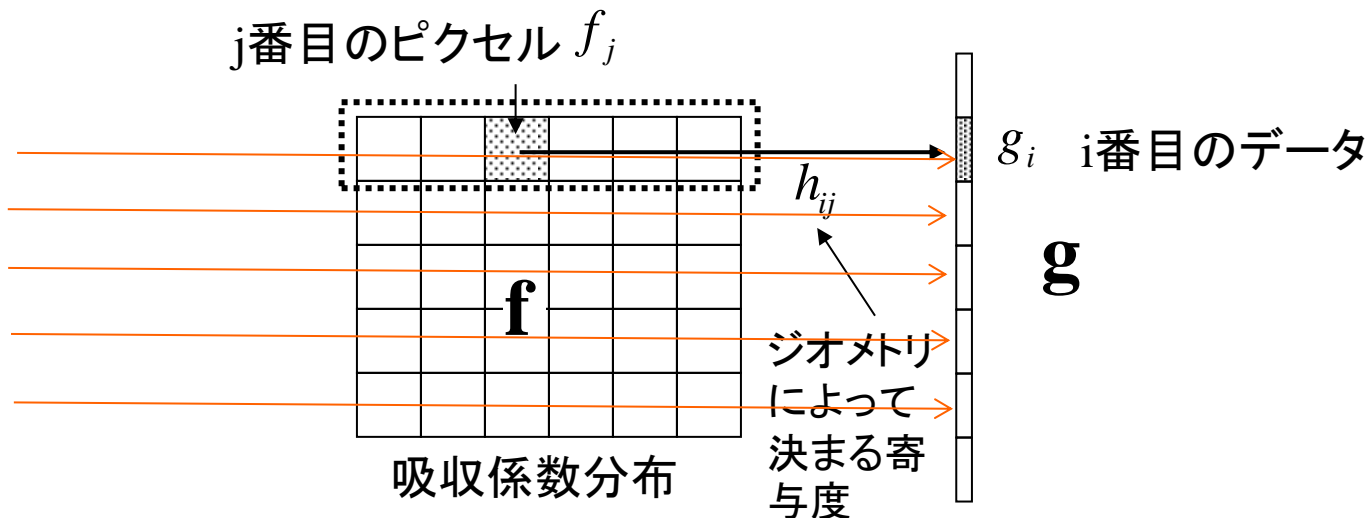
$$\mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{m1} & h_{m2} & \cdots & h_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

1方向だけでなく、
全方向の投影
データを1列にし
たもの。

システム行列

吸収係数分布を
1列にしたもの

ある1方向の投
影の模式図



$$\mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f}$$



$$\begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{m1} & h_{m2} & \cdots & h_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

$m > n$ 、すなわち、over-determinedの場合、最小二乗規範の意味での逆行列が用いられる。

まず、最小二乗規範は

$$\text{minimize } e = \|\mathbf{g} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{f}}\|^2$$

と表される。2乗誤差 e を f の各要素に関して $i=1$ から順に偏微分し、その結果を0とおいていくと、 e の最小値を与える f^{\wedge} に対する条件式がベクトルの次元数だけ決まる。

この複数の条件式をベクトル表記して表すと以下のようなになる。

$$-2\mathbf{H}^T(\mathbf{g} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{f}}) = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{H}^T\mathbf{g} = \mathbf{H}^T\mathbf{H}\hat{\mathbf{f}}$$

により、
↑ 課題： e の偏微分からこの式までを導出せよ。

$$\hat{\mathbf{f}} = (\mathbf{H}^T\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{g}$$

\mathbf{H}^T は逆投影の操作を表す行列である。

$$\mathbf{H}^T\mathbf{g} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix}$$

しかし、実際に $\mathbf{H}^T\mathbf{H}$ の逆行列を計算することは、要素数が大きすぎて困難。
⇒ 逐次近似法を適用する。

SIRT: simultaneous iterative reconstruction technique

一般に、反復修正処理は次式で表される。

$$\hat{\mathbf{f}}^{(k)} = \hat{\mathbf{f}}^{(k-1)} + \gamma \mathbf{q}^{(k)}$$

最も簡単には、k回目の修正ベクトル $\mathbf{q}^{(k)}$ を2乗誤差の勾配の逆方向にとる。

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^{(k)} &= \frac{\partial e_{k-1}}{\partial \hat{\mathbf{f}}^{(k-1)}} \\ &= 2\mathbf{H}^T (\mathbf{g} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{f}}^{(k-1)}) \end{aligned}$$

すなわち、

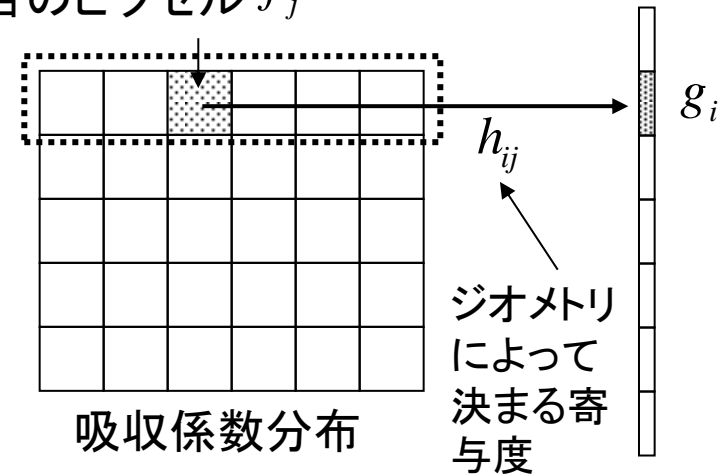
$$\hat{\mathbf{f}}^{(k)} = \hat{\mathbf{f}}^{(k-1)} + \gamma \mathbf{H}^T (\mathbf{g} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{f}}^{(k-1)})$$

差を物体空間に逆投影

真の投影データとの差を計算

k-1回目の再構成画像を投影

j番目のピクセル f_j



逐次近似画像再構成 (EM)

EM Reconstruction Algorithms for Emission and Transmission Tomography

Kenneth Lange and Richard Carson

J. Computer Assisted Tomography 8(2):306–316 (1984)

発表内容

準備

ポアソン分布
最尤推定

EMアルゴリズムの原理

Emission CTへの適用

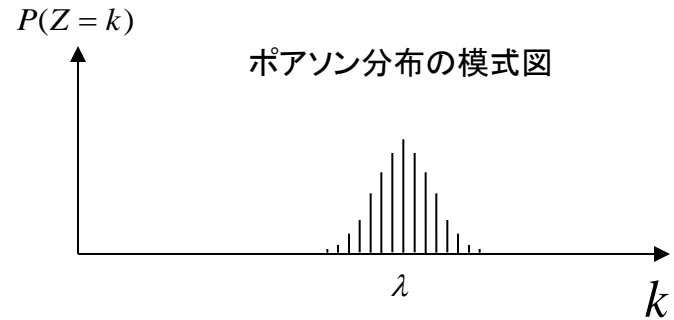
Transmission CTへの適用

Discussion • Conclusions

ポアソン分布の特徴

ポアソン分布:
非負のランダムな整数変数 Z が以下の生起確率
で与えられる分布.

$$P(Z = k) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}$$



ポアソン分布の特徴:

1. Z の平均値は $E(Z)=\lambda$ である.
2. もし, Z_1, \dots, Z_m がそれぞれ独立したポアソン分布をするなら,

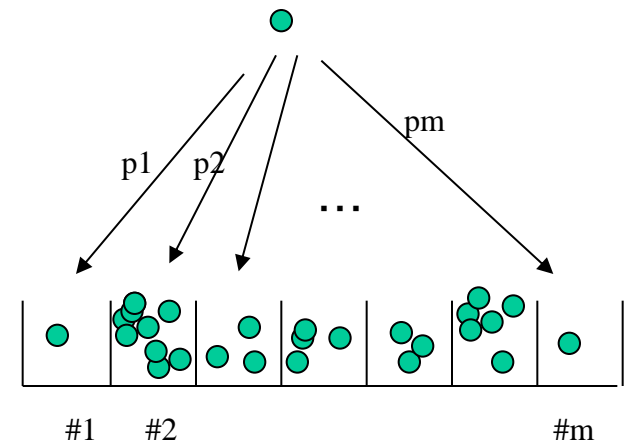
$$Z = \sum_{k=1}^m Z_k$$

もまた, ポアソン分布をなす (ポアソン分布の加法性).

3. 平均 λ のポアソン過程で発生した粒子を, m 個の
カテゴリに, それぞれ確率 $p_k, k=1, \dots, m$ で分配したとすると,
 k 番目のカテゴリ内の粒子数 Z_k はやはりポアソン分布をなし,
その平均値は λp_k となる.

4. Z が与えられたとき, (Z_1, \dots, Z_m) の条件付き確率分布は
トータル数が Z で, セル確率が p_1, \dots, p_m の多項分布となる.

$$P(Z_1, \dots, Z_m | Z) = \frac{Z!}{Z_1! Z_2! \dots Z_m!} p_1^{Z_1} p_2^{Z_2} \dots p_m^{Z_m}$$



最尤推定について

未知パラメータ Φ を使って表される確率分布から、サンプル \mathbf{x} が観測されたとする。このとき、条件付き確率 $p(\mathbf{x}|\Phi)$ を最大にするような Φ を最尤推定という。

例) 分散が1で平均が未知のガウス分布から発生したデータ列 $\mathbf{x}=[x_1, x_2, \dots, x_n]$ が観測されたとする。このときの、もとのガウス分布の平均を最尤法により推定してみる。

平均を μ と仮定したとき、確率 $p(\mathbf{x}|\mu)$ を最大にする μ を求めることがここでの目的である。
この確率は

$$p(\mathbf{x}|\mu) = p(x_1|\mu)p(x_2|\mu)\cdots = \prod_{i=1, \dots, n} p(x_i|\mu) = \prod_{i=1, \dots, n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(x_i - \mu)^2$$

と書ける。この対数をとると、

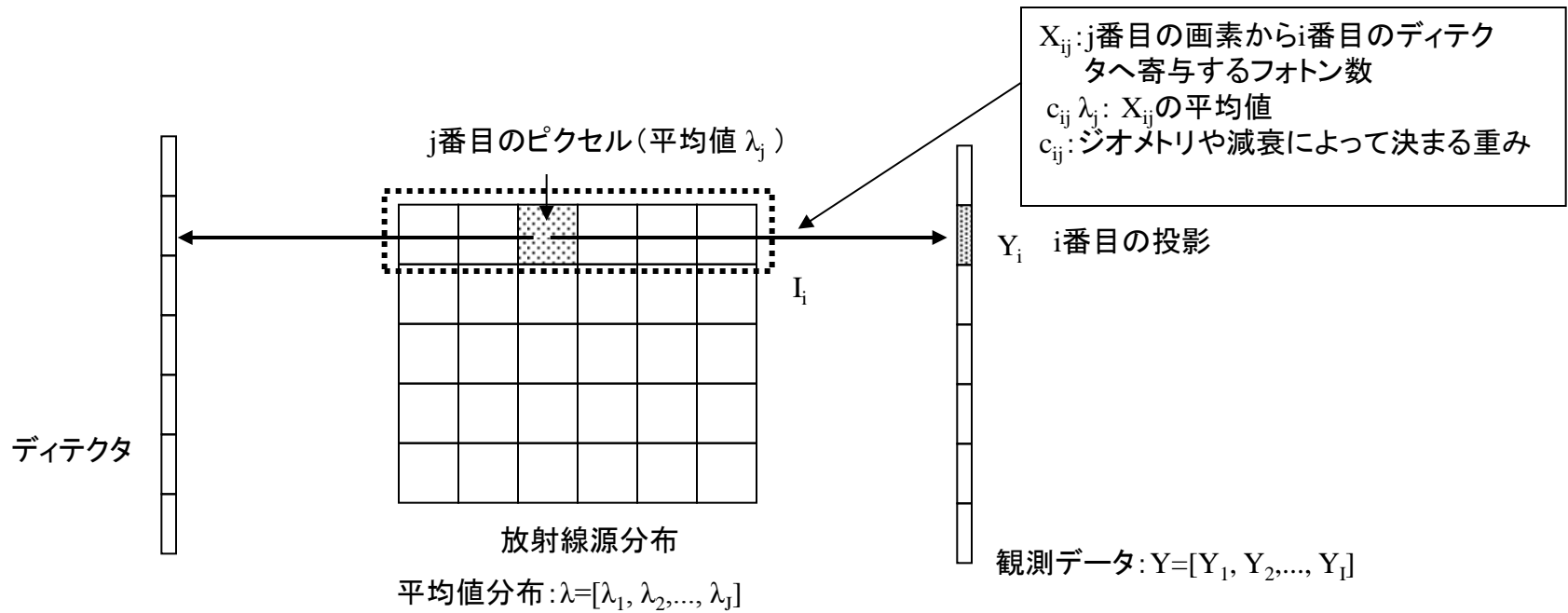
$$\log p(\mathbf{x}|\mu) = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2$$

$p(\mathbf{x}|\mu)$ で最大値をとるとき、 $\log p(\mathbf{x}|\mu)$ でも最大値をとるので、微分して0とおき、 μ について解くと

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

が得られる。 μ の最尤推定はサンプルの平均で与えられることがわかる。

表記の準備と目的の定式化



目的

観測データYから、放射線源パラメータλの最尤推定を行うこと。



$$L(\lambda) \equiv g(Y|\lambda) = \sum_A \prod_{i,j} e^{-c_{ij}\lambda_j} (c_{ij}\lambda_j)^{X_{ij}} / X_{ij}! \quad \text{を最大化する}\lambda\text{を求め}.$$



対数尤度 $\ln(L(\lambda)) = \ln g(Y|\lambda)$ を最大化するλを求め.

目的

最大化の対象となる尤度関数について

$$L(\lambda) \equiv g(Y|\lambda) = \sum_A \prod_{i,j} e^{-c_{ij}\lambda_j} (c_{ij}\lambda_j)^{X_{ij}} / X_{ij}! \quad (1)$$

たとえば、ある*i*について*Y_i*が

$$Y_i = X_{i1} + X_{i2} + X_{i3} + \dots \quad (2)$$

という内訳で構成されていた場合、その確率は以下で与えられる(ポアソン分布の積)。

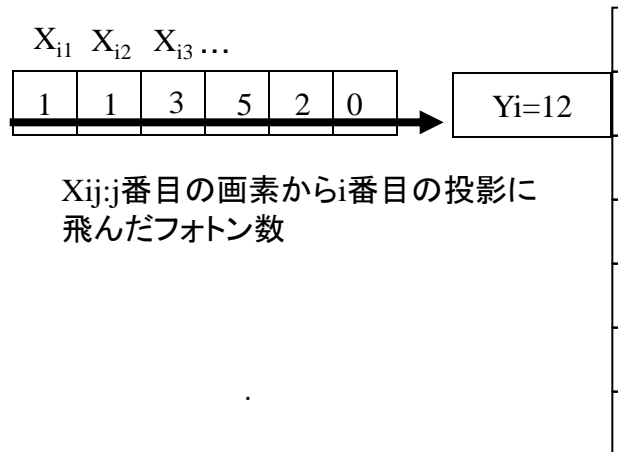
$$p(X_{i1}|\lambda_1)p(X_{i2}|\lambda_2)\dots = \prod_j e^{-c_{ij}\lambda_j} (c_{ij}\lambda_j)^{X_{ij}} / X_{ij}! \quad (3)$$

実際には、他の*i*についても同様の式で表されるので、全体として、観測*Y*が $X=\{X_{ij}\}$ から構成されている確率は、上式を*i*についても積をとったものとなる。

$$\prod_{i,j} e^{-c_{ij}\lambda_j} (c_{ij}\lambda_j)^{X_{ij}} / X_{ij}! \quad (4)$$

一般に $Y=MX$ を満足する*X*は多数存在する。そこで、この式を満たす*X*について、式(4)の総和をとったものが最大化の対象となる尤度関数 $L(\lambda)$ となる(式(1))。

例:



Yを不完全データ, Xを完全データと考えて,
 $L(\lambda)$ の最大化にEMアルゴリズムを適用する.

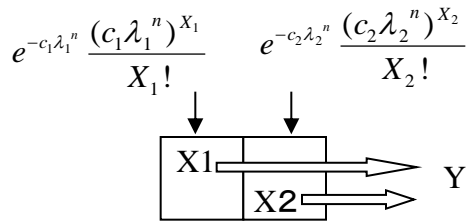
EMアルゴリズムのステップ

E-step $Q(\lambda|\lambda^n) \equiv E(\ln f(X|\lambda)|Y, \lambda^n)$ を計算する.

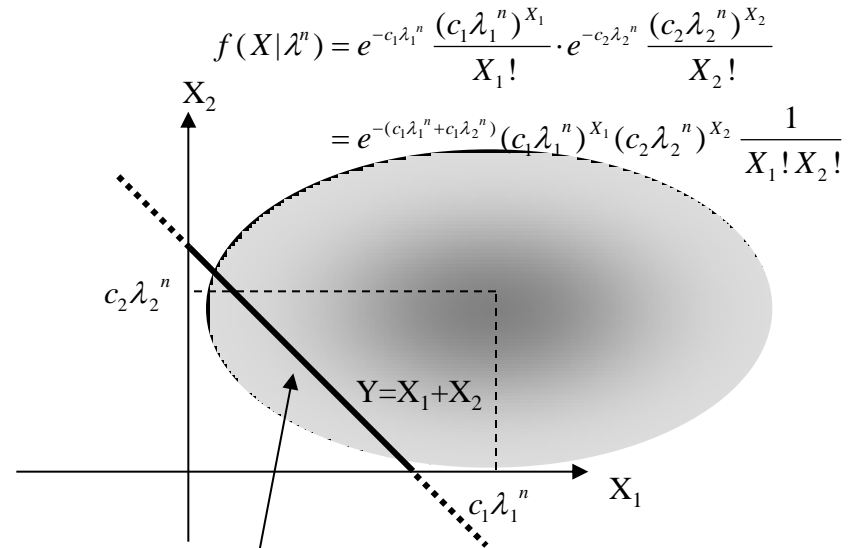
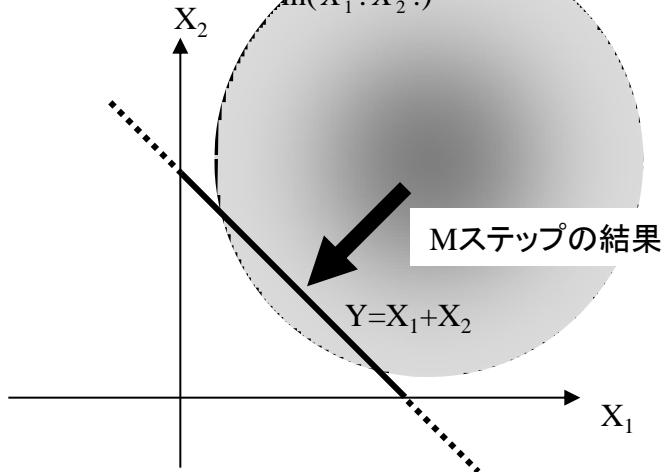
意味: $\ln f(X|\lambda)$ という関数値の, λ^n , Y が与えられたときの期待値を計算する.

M-step $Q(\lambda|\lambda^n)$ を最大にするように λ を決めて, λ^{n+1} と更新する.

2画素, 1投影の場合の模式図



$$\ln f(X|\lambda) = -(c_1\lambda_1 + c_2\lambda_2) + X_1 \ln c_1\lambda_1 + X_2 \ln c_2\lambda_2 - \ln(X_1! X_2!)$$



左図の関数値の期待値を, この範囲で計算
 $f(X|\lambda^n)$ はこの際の確率を表す.

完全データの対数尤度の条件付き期待値:

$$E(\ln f(X|\lambda)|Y, \lambda^n) = -(c_1\lambda_1 + c_2\lambda_2) + \ln c_1\lambda_1 E(X_1|Y, \lambda^n) + \ln c_2\lambda_2 E(X_2|Y, \lambda^n) - E(\ln(X_1! X_2!)|Y, \lambda^n)$$

完全データの尤度関数の条件付き期待値最大化と目的とする対数尤度関数最大化の関係

EMアルゴリズムは以下の関数 Q が常に増加するようにパラメータ λ を更新していくものである。

$$Q(\lambda'|\lambda) \equiv E(\log f(X|\lambda')|Y, \lambda) \quad (1)$$

この作業が、対数尤度 L も最大化することを示すために、まず、以下の関数を考える。

$$H(\lambda'|\lambda) \equiv E(\log k(X|Y, \lambda')|Y, \lambda) \quad (2)$$

このとき、 Y, λ の下での X の条件付き確率 k は、以下のように書ける。

$$k(X|Y, \lambda') = f(X|\lambda') / g(Y|\lambda') \quad (3) \quad (X \text{ と } Y \text{ は } Y=MX \text{ で関係づけられている})$$

この関係を(2)式に代入すると以下の式を得る。

$$\begin{aligned} H(\lambda'|\lambda) &= E(\ln f(X|\lambda') / g(Y|\lambda')|Y, \lambda) \\ &= E(\log f(X|\lambda')|Y, \lambda) - \ln g(Y|\lambda') \\ &= Q(\lambda'|\lambda) - L(\lambda') \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、関数 H に関して、以下の定理が成り立つことが知られている(Jensenの不等式)。

$$H(\lambda'|\lambda) \leq H(\lambda|\lambda) \quad (5)$$

いま式(4)において $\lambda = \lambda^n$ とおき、さらに $\lambda' = \lambda^n$ としたときの式を書き出すと

$$H(\lambda^n|\lambda^n) = Q(\lambda^n|\lambda^n) - L(\lambda^n) \quad (6)$$

一方、 Q を最大化する λ' を $\lambda' = \lambda^{n+1}$ として、同様に(4)式を書き直すと

$$H(\lambda^{n+1}|\lambda^n) = Q(\lambda^{n+1}|\lambda^n) - L(\lambda^{n+1}) \quad (7)$$

この2式の差をとると、以下の式を得る。上記の性質より、右辺は非減少の特性をもつことがわかる。すなわち、左辺に注目して、目的の対数尤度も非減少であることがわかる。

$$L(\lambda^{n+1}) - L(\lambda^n) = \{Q(\lambda^{n+1}|\lambda^n) - Q(\lambda^n|\lambda^n)\} + \{H(\lambda^n|\lambda^n) - H(\lambda^{n+1}|\lambda^n)\} \quad (8)$$

E-step

パラメータ λ の下での完全データ X の生起確率 f は、ポアソン分布にしたがって以下で与えられる。

$$f(X|\lambda) = \exp \left\{ \sum_{j \in I_i} \{-c_{ij} \lambda_j + X_{ij} \ln(c_{ij} \lambda_j) - \ln X_{ij}!\} \right\} \quad (1)$$

対数をとると、

$$\ln f(X|\lambda) = \sum_i \sum_{j \in I_i} \{-c_{ij} \lambda_j + X_{ij} \ln(c_{ij} \lambda_j) - \ln X_{ij}!\} \quad (2)$$

Y_i 、パラメータ λ^n が与えられた下での、この関数値の期待値は、

$$E(\ln f(X|\lambda)|Y, \lambda^n) = \sum_i \sum_{j \in I_i} \{-c_{ij} \lambda_j^n + N_{ij} \ln(c_{ij} \lambda_j^n)\} + R \quad (3)$$

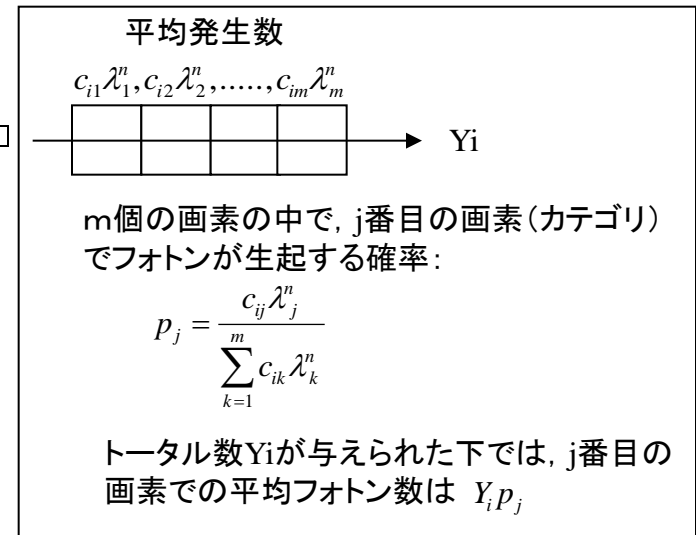
ここで、

$$N_{ij} = E(X_{ij}|Y_i, \lambda^n) = \frac{c_{ij} \lambda_j^n Y_i}{\sum_{k \in I_i} c_{ik} \lambda_k^n} \quad (4)$$

$$R = \sum_i \sum_{j \in I_i} E(-\ln X_{ij} | Y_i, \lambda^n) \quad (5)$$

とおいた。

ここで、(2)式右辺の第1項は、 $Y=MX$ を満たす X の範囲の期待値の計算に関しては定数と同じである。
また、 R は λ を含んでおらず、後のM-stepでは計算に使わない。



PETにおけるEMアルゴリズム(具体的手順) M-step

M-step

E-stepで得られた $\ln E(f...)$ を各パラメータ λ_j で偏微分する.

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_j} E(\ln f(X|\lambda)|Y, \lambda^n) = -\sum_{i \in J_j} c_{ij} + \sum_{i \in J_j} N_{ij} \lambda_j^{-1} \quad (1)$$

これを0とおいて, λ について解くと

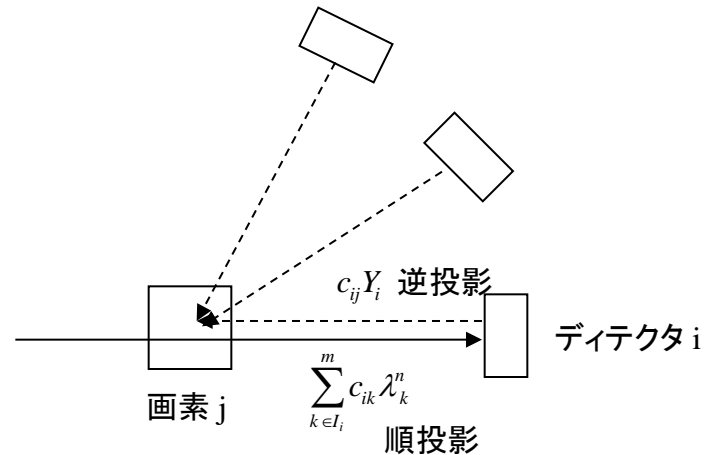
$$\lambda_j^{n+1} = \frac{\sum_{i \in J_j} N_{ij}}{\sum_{i \in J_j} c_{ij}} = \frac{\lambda_j^n}{\sum_{i \in J_j} c_{ij}} \sum_{i \in J_j} \frac{c_{ij} Y_i}{\sum_{k \in I_i} c_{ik} \lambda_k^n} \quad (2)$$

を得る.

ポイント:

1. 非負の条件を自動的に満足している.
(初期値は非負でなければならない)
2. 各イタレーションで, 推定光子数の合計が
観測された光子数の合計に一致している.

$$\sum_i \sum_j c_{ij} \lambda_j^n = \sum_i Y_i$$



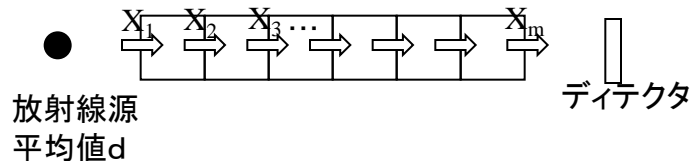
λ の更新の模式図

Transmission Computed Tomography (1)

透過型のCTの画像再構成問題をEMアルゴリズムを用いて解く

目的: 吸収係数分布 μ を求めること.

はじめ, ある線源—ディテクタのライン上での振る舞いに注目する(右図).



この問題では, j 番目の画素に入射する光子の数を X_j と表すことにし, ラインに沿ったベクトル $X=[X_1, X_2, \dots, X_m]$ を完全データとみなす.

そこで, 最初の目標は, E-step, すなわち, 完全データの尤度の条件付き期待値を定式化することとなる.

ある画素を, ひとつの光子が通り抜ける確率は

$$p = e^{-l_j \mu_j}$$

j 番目の画素に X_j 個入射し, そのうちの X_{j+1} 個が通過する確率は, 以下の2項分布に従う.

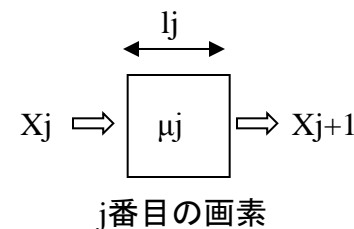
$$p(X_j, X_{j+1} | \mu_j) = \binom{X_j}{X_{j+1}} p^{X_{j+1}} (1-p)^{X_j - X_{j+1}}$$

また, X_1 すなわち, 線源から出る光子数はPoisson分布に従い, 平均を d として,

$$p(X_1) = e^{-d} \frac{d^{X_1}}{X_1!}$$

ベクトル $X=[X_1, X_2, \dots, X_m]$ が生起する確率は,

$$\begin{aligned} f(X|\mu) &= p(X_1|\mu)p(X_2|\mu)\cdots p(X_m|\mu) \\ &= e^{-d} \frac{d^{X_1}}{X_1!} \prod_{j=1}^{m-1} \binom{X_j}{X_{j+1}} (e^{-l_j \mu_j})^{X_{j+1}} (1 - e^{-l_j \mu_j})^{X_j - X_{j+1}} \end{aligned}$$



Transmission Computed Tomography (2)

対数尤度を計算すると

$$\ln f(X|\mu) = -d + X_1 \ln d - \ln X_1! + \sum_{j=1}^{m-1} \left[X_{j+1} (-l_j \mu_j) + (X_j - X_{j+1}) \ln(1 - e^{-l_j \mu_j}) \right]$$

次に、上式の、 $Y=X_m$, μ^n という条件下での期待値の計算を考える。

まず、 X_j の分布は、平均が、

$$E(X_j) = \gamma_j = d \exp\left[-\sum_{k=1}^{j-1} l_k \mu_k\right]$$

のポアソン分布に従う。ここで、 d は線源の平均フォトン数、指数関数の部分は、1個あたりのフォトンが、 j 番目の画素にたどり着く確率を表している。

一方、 X_m を観測した下での X_j の条件付き確率は、

$$P(X_j | X_m) = e^{-(\gamma_j - \gamma_m)} \frac{(\gamma_j - \gamma_m)^{X_j - X_m}}{(X_j - X_m)!}$$

となる(証明略)。これは、フォトン数の差、 $X_j - X_m$ が平均

$$\gamma_j - \gamma_m = E(X_j) - E(X_m)$$

のポアソン分布になることを示している。

Transmission Computed Tomography (3)

よって、その期待値は、

$$E(X_j - X_m | X_m) = E(X_j) - E(X_m)$$

であり、さらに書き換えると、

$$E(X_j | X_m) = X_m + E(X_j) - E(X_m)$$

となる。各ディテクタについて、同様の議論ができるので、上記の議論に、ディテクタの番号*i*をつけることにする。いま、出るフォトンの平均を*N_{ij}*、入るフォトンの平均を*M_{ij}*と書くことにする。すなわち、

$$N_{ij} = E(X_{i,j+1}), M_{ij} = E(X_{ij})$$

これを使って、完全データの対数尤度は、以下のように書ける。

$$\sum_i \sum_{j \in I_i} \{N_{ij} \ln(e^{-l_{ij}\mu_j}) + (M_{ij} - N_{ij}) \ln(1 - e^{-l_{ij}\mu_j})\} + R$$

これをμについて、偏微分して0とおく。

$$0 = \sum_{i \in J_k} -N_{ik} l_{ik} + \sum_{i \in J_k} (M_{ij} - N_{ij}) \frac{l_{ik}}{e^{-l_{ik}\mu_k} - 1}$$

これは、非線形方程式となり、そのままでは容易に解けない。そこで、指数を含む分母の部分のテイラー展開を行い、近似的に更新の式を決める(以下)。

$$\mu_k^{n+1} = \frac{\sum_{i \in J_k} (M_{ik} - N_{ik})}{\sum_{i \in J_k} N_{ik} l_{ik}}$$

Discussion・Conclusions

EMのメリット(解析的手法と比較して)

1. ノイズの特性をイタレーションにおいて考慮できる.
2. 特に低カウントの測定の際にはポアソンノイズが支配的である. EMはこれを考慮できる.
3. 代数学的手法は, 測定における詳細な物理モデルを考慮できる.
4. 非負の条件を容易に導入できる.
5. 評価尺度として最も自然である. (エントロピー最大, 最小2乗, 最小ノルムなどより)

Emission Algorithmについて

以下のような, 各種の物理的因子をアルゴリズムに盛り込める.

1. 投影あたりの計数時間および放射線のdecay
2. 冗長な投影サンプリングとディテクタ効率
3. 空間分解能の位置依存性(SPECTで特に有効)
4. 減衰(c_{ij} に組み込めばよい)
5. 散乱同時計数
6. 偶発同時計数
7. ポジトロンの飛程と角度の効果
8. TOF情報の利用

EMのデメリット

- ・計算時間がかかること.
- ・ピクセル数に比べて投影データ数が小さい場合(Underdetermined)に, 最終画素値が初期値に依存してしまう.
フーリエ法なら, 投影データが少なくても妥当な再構成を生成する.
- ・FOVのみの再構成ができない. フーリエ法では可能.

その後の展開

高周波数成分保存に向けた改良:

MAP (maximum a-posteriori probability)

“Bayesian Reconstructions from Emission Tomography Data Using a Modified EM Algorithm”

Peter J. Green IEEE Trans. Med. Imag. (1990)

“複合ガウス-マルコフ確率場を用いたECT画像再構成” 他
工藤, 斎藤, 信学会D-II (1992)

高速化に向けた改良:

“ A Fast Reconstruction Algorithm for Stationary Positron Emission Tomography Based on
a Modified EM Algorithm”

E. Tanaka, IEEE, Trans. Med. Imag. (1987)

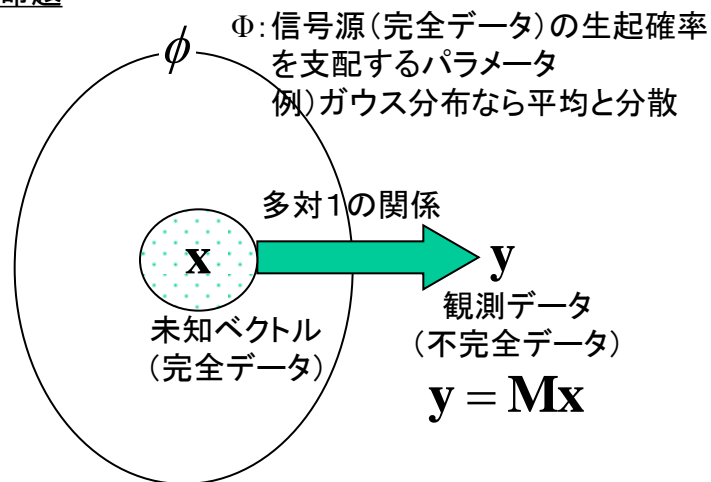
OS-EM

“Accelerated Image Reconstruction Using Ordered Subsets of Projection Data

H. M. Hudson and R. S. Larkin IEEE, Trans. Med. Imag. (1994)

EMアルゴリズムの基本動作

命題



命題: 観測データ \mathbf{y} が与えられたときに、それがもっとも起こりうるような信号源のパラメータ Φ を求めよ.

\mathbf{x} の生起確率は以下の式で与えられているとする.

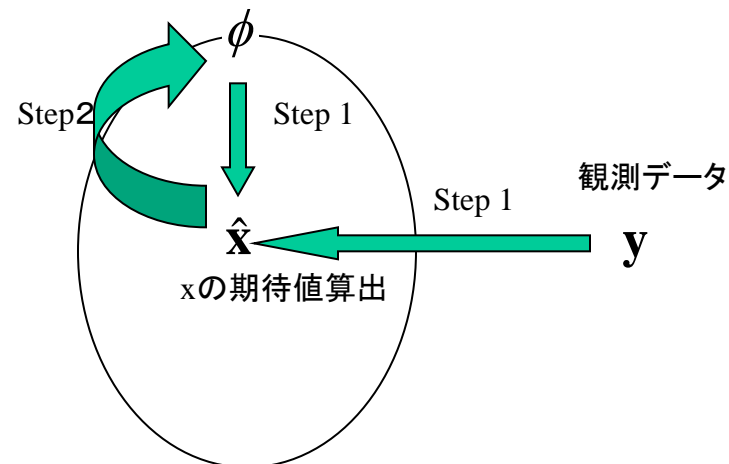
$$f(\mathbf{x}|\phi)$$

\mathbf{y} の生起確率は $\mathbf{y}=\mathbf{M}\mathbf{x}$ の関係を通して f より求まる.

$$g(\mathbf{y}|\phi)$$

命題は「 $g(\mathbf{y}|\Phi)$ を最大にする Φ を求めよ」と同値.

EMアルゴリズム



Step 1: 得られている観測データと p 回目の推定 $\Phi^{(p)}$ から、 \mathbf{x} の期待値 $\hat{\mathbf{x}}$ を算出 (E-step)

Step 2: $\hat{\mathbf{x}}$ から Φ を最尤推定 (M-step)

Step 1とStep 2を繰り返す.

ある動物は5つのカテゴリに分けられ、遺伝的にその生起確率は以下で与えられるものとする。

$$\Phi = \left(\frac{1}{4}\phi, \frac{1}{4}(1-\phi), \frac{1}{4}(1-\phi), \frac{1}{4}\phi \right) \quad 0 \leq \phi \leq 1$$

ここで Φ は遺伝モデルを表すパラメータであり未知とする。いま、個体数 $\mathbf{x}=(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$ を観測したとすると、 Φ のもとでそれが起こる確率は、多項分布に従い、以下で表される。

$$f(\mathbf{x}|\phi) = \frac{(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5)!}{x_1! x_2! x_3! x_4! x_5!} \left(\frac{1}{4}\phi \right)^{x_1} \left(\frac{1}{4}(1-\phi) \right)^{x_2} \left(\frac{1}{4}(1-\phi) \right)^{x_3} \left(\frac{1}{4}\phi \right)^{x_4}$$

ところで、実際に観測される個体数は \mathbf{x} そのものでなく、以下のようなものとする。

$$y_1 = x_1 + x_2, y_2 = x_3, y_3 = x_4, y_4 = x_5$$

\mathbf{x} は完全データ、 \mathbf{y} は不完全データに相当する。

いま、 \mathbf{y} の観測値として

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4) = (125, 18, 20, 34)$$

が得られたとき、元の確率モデルのパラメータ Φ を求めたい。これをEMアルゴリズムにより算出する。

Expectation Step:

期待値ステップは \mathbf{y} が与えられた状態で完全データ \mathbf{x} の期待値 $E[\mathbf{x}|\mathbf{y}, \Phi]$ の計算を行う。

この問題の場合、 (x_3, x_4, x_5) は(18, 20, 34)と一義的に定まっているので、推定すべき期待値は $x_1 + x_2 = y_1 = 125$ を満たす x_1, x_2 である。すなわち (x_1, x_2) の考えられるペア(0, 125), (1, 124), ..., (125, 0)に対して、期待値を計算することになる。

Φ の現在の推定 $\Phi^{(p)}$ を使ってこれらを推定すると以下のようなになる。

$$x_1^{(p)} = 125 \frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\phi^{(p)}} \quad \text{and} \quad x_2^{(p)} = 125 \frac{\frac{1}{4}\phi^{(p)}}{\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\phi^{(p)}}$$

Maximization Step:

最大化ステップは推定された完全データ $\mathbf{x}^{(p)}$ を使って、ちょうどそれが観測データのようにみなして、最尤推定によって Φ を推定することである。具体的には

$$\frac{d}{d\phi^{(p)}} E[\mathbf{x}^{(p)} | \mathbf{y}, \phi^{(p)}] = 0$$

を Φ について解いて

$$\phi^{(p+1)} = \frac{x_2^{(p)} + 34}{x_2^{(p)} + 34 + 18 + 20}$$

を新しい Φ の推定とする。上の2つのステップを繰り返すことによりパラメータ Φ が収束していく。

II Maximum likelihood Estimation of λ given \mathbf{n}^*

目標: 与えられた観測データ \mathbf{n}^* から, 信号源(ポアソン分布に従う)の平均値 λ を求める.

λ を仮定したときに \mathbf{n}^* を観測する確率(尤度)は

$$L(\lambda) = P(\mathbf{n}^*|\lambda) = \sum_A \prod_{\substack{b=1, \dots, B \\ d=1, \dots, D}} e^{-\lambda(b,d)} \frac{\lambda(b,d)^{n(b,d)}}{n(b,d)!} \quad \dots(2.2)$$

ここで, Aに関する総和は,

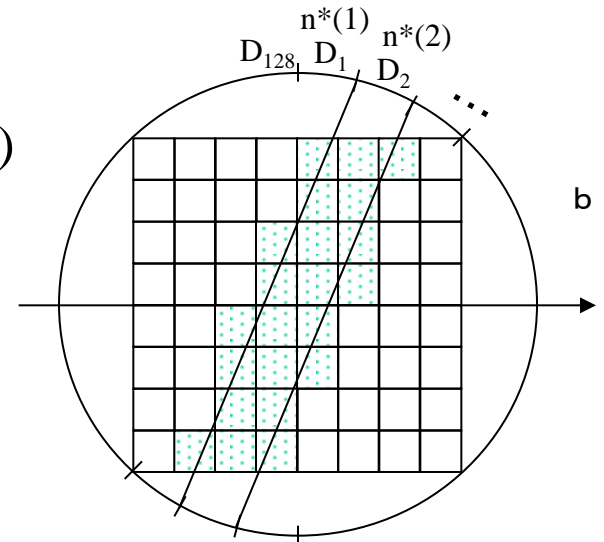
$$n^*(d) = \sum_{b=1}^B n(b,d), \quad d = 1, \dots, D \quad \dots(2.3)$$

を満たすような, $n(b,d)$ のすべての組に対しての総和である.

この関数 $L(\lambda)$ を最大にする λ を求めたいが, このままでは複雑. そこで対数をとって, それを最大にする λ を求めることにする.

$$l(\lambda) = \log L(\lambda)$$

$L(\lambda)$ は $\lambda = \lambda(1), \dots, \lambda(B)$ の関数として上に凸である. このことは式(2.6)~式(2.12)で示される.



証明の方針(手順)

λ に関する1次に微分を調べる. (2.7)~(2.10)により1次微分の式(2.6)が得られる.

さらに2次微分の形を調べる.

この結果, 2次形式が負定値となるため, $l(\lambda)$ が上に凸(concave)であることが言える.

EMアルゴリズムのPETへの適用

E-step: 期待値算出のステップ

$$\begin{aligned}
 \hat{n}(b) &= E[n(b) | \hat{\lambda}^{old}, n^*] \quad \leftarrow \text{算出したい期待値} \\
 &= \sum_{d=1}^D E[n(b,d) | \hat{\lambda}^{old}, n^*] \quad \leftarrow n(b,d) \text{はポアソン分布に従う. ポアソン分布の母数の加法性より.} \\
 &= \sum_{d=1}^D \frac{n^*(d) \hat{\lambda}^{old}(b,d)}{\sum_{b'=1}^B \hat{\lambda}^{old}(b',d)} \quad \leftarrow \text{原文(2.10)式より.} \\
 &= \sum_{d=1}^D \frac{n^*(d) p(b,d) \hat{\lambda}^{old}(b)}{\sum_{b'=1}^B p(b',d) \hat{\lambda}^{old}(b')} \quad \leftarrow \lambda(b,d) = \lambda(b)p(b,d) \dots \text{原文(2.1)式より.} \\
 &= \hat{\lambda}^{old}(b) \sum_{d=1}^D \frac{n^*(d) p(b,d)}{\sum_{b'=1}^B p(b',d) \hat{\lambda}^{old}(b')}
 \end{aligned}$$

M-step: 期待値最大化のステップ

期待値算出で求めたものが, そのまま, ボックスbにおける放射濃度 λ の最尤推定になっている. よって, 以下の式によって, λ を更新する.

$$\hat{\lambda}^{new}(b) = E[n(b) | \hat{\lambda}^{old}, n^*], \quad b = 1, 2, \dots, B$$

記号の説明

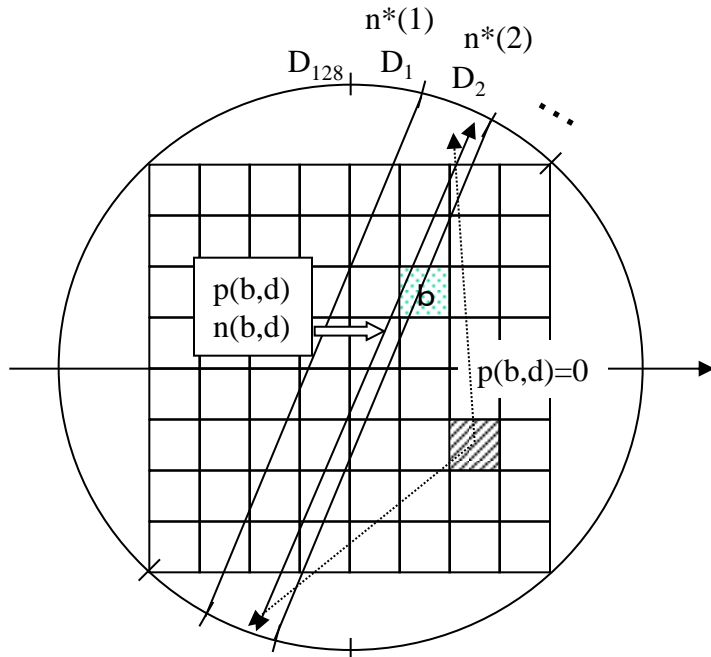
放射線源濃度: $\lambda(x, y, z)$
 (位置 (x, y, z) において放出されるフォトン数の平均値)

離散表現した放射線源濃度: $\lambda(1), \dots, \lambda(B)$ まとめて λ と表す.
 $\lambda(b)$ は b 番目のボックス内から放出されるフォトン数の平均値

観測データ: $n^*(1), \dots, n^*(D)$. まとめて $\mathbf{n}^* = [n^*(1), \dots, n^*(D)]$ と表す.
 $n^*(d)$ は d 番目のディテクタ対で同時計数されたフォトン数

$n(b, d)$: ボックス b から放出されてディテクタ d で検出されるフォトン数

$p(b, d)$: ボックス b から放出されたフォトンがディテクタ d で検出される確率
 (測定系の幾何学的配置から求められるものとする)



ある1回の測定で得られる測定データは以下の式で書ける.

$$n^*(d) = \sum_{b=1}^B n(b, d) \quad \dots(1.5)$$

観測データの期待値は以下の式で表せる.
 (「ポアソン分布に従う変数の和はやはりポアソン分布に従い, その平均値は各々の変数の平均値の和である」という性質から)

$$\lambda^*(d) = E n^*(d) = \sum_{b=1}^B \lambda(b) p(b, d) \quad \dots(1.4)$$

$n^*(d)$ が与えられたときの $\lambda^*(d)$ の最尤推定 ($p(n^*(d)|\lambda(d))$ を最大にする $\lambda(d)$) は

$$\hat{\lambda}^*(d) = n^*(d)$$

となる(証明略).

考えられるひとつの再構成は(1.4)式で $\lambda^*(d)$ のかわりに実測値 $n^*(d)$ を入れて, この線形方程式を解くことである.

以上の方法の問題点

1. ボックスからディテクタへの寄与を $p(b, d)$ で与えているが, 本当は, ボックス内の各位置からディテクタへの寄与は不均一である(各点からディテクタを見込む角度に依存).
 →低解像度のETの場合, あまり問題にしなくてよい.

2. λ に対して(1.4)式のインバースをとると, カウントレートの低いETの場合, 投影ノイズを強調してしまう.
 → $\lambda(b)$ の最尤推定が必要(次章).

III Choice of $p(b,d)$

$p(b, d)$ をどのように計算し、どのように憶えておくか？

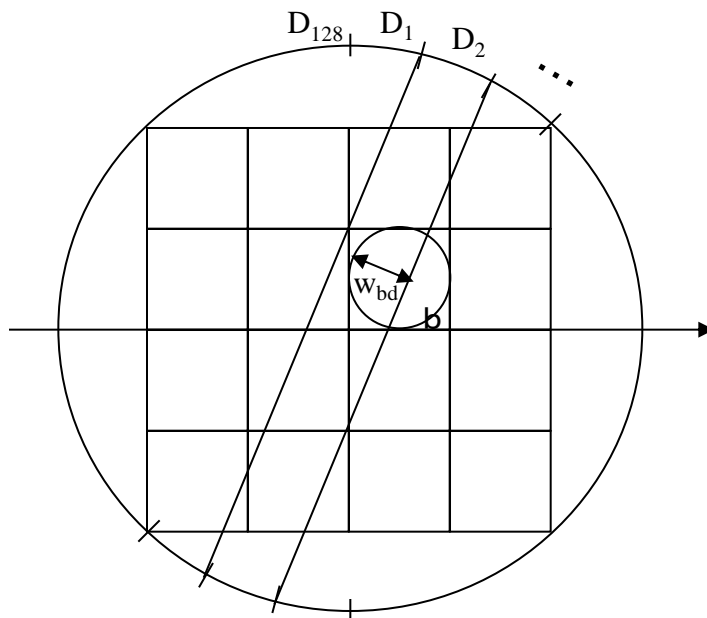
$p(b, d)$ はアルゴリズムの中で、定数なので、一度だけ計算しておき、メモリなどに記憶しておけばよい。しかし実際は数は BD 個ある。 D は 10^4 くらいなので、これは困難。

$p(b, d)$ のほとんどは値が0なので、非0成分のみ記憶する方法がある。しかしプログラミングが面倒。

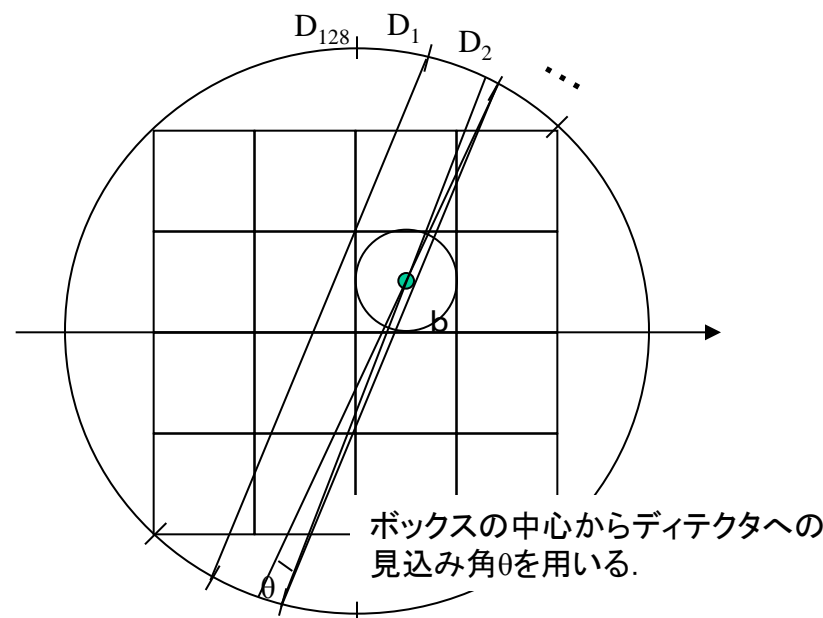
著者らは、必要に応じてその都度計算することにした。このため、簡単に計算できる近似が必要。

$p(b, d) = (2nR)^{-1} \times (\text{bの中心のまわり半径Rの円とディテクタ対dのストリップとの交差部分の幅})$

で与えた。見込み角を用いたより正確な方法と同程度に正確な再構成像が得られた(IV章)。



著者らが主に用いた方法



より正確な方法

II Maximum likelihood Estimation of λ given \mathbf{n}^*

更新手順:

初期推定

$$\lambda^0(b) > 0, \quad b = 1, 2, \dots, B$$

現在の推定からの更新:

$$\hat{\lambda}^{new}(b) = \hat{\lambda}^{old}(b) \frac{\sum_{d=1}^D n^*(d) p(b, d)}{\sum_{b'=1}^B p(b', d) \hat{\lambda}^{old}(b')}, \quad b = 1, 2, \dots, B \quad (2.13)$$

更新演算の解釈

分母は順方向の投影になっている

$$u(d) = \sum_{b'=1}^B p(b', d) \hat{\lambda}^{old}(b')$$

順投影の計算後, そのデータと
観測データを用いて逆投影

$$\sum_{d=1}^D n^*(d) p(b, d) / u(d)$$

$$L(\hat{\lambda}^{new}) \geq L(\hat{\lambda}^{old}), \quad \dots(2.14)$$

が保証されている. また(2, 13)よりトータルカウント数が自動的に保存される(2. 16式).