

ディープ多層構造型 GMDH-type ニューラルネットワーク

を用いた肺がんの医用画像診断

Medical image diagnosis of lung cancer using deep multi-layered GMDH-type neural network

近藤 正*¹
Tadashi Kondo

近藤 明佳*²
Sayaka Kondo

上野 淳二*³
Junji Ueno

高尾 正一郎*⁴
Shoichiro Takao

*¹ 徳島大学
Tokushima University

*² 徳島医用情報科学研究所
Tokushima medical informatics laboratory

*³ 徳島大学
Tokushima University

*⁴ 徳島大学
Tokushima University

In this study, a deep multi-layered Group Method of Data Handling (GMDH)-type neural network which has the deep neural network architecture is applied to the medical image diagnosis of lung cancer. Deep GMDH-type neural network algorithm has an ability of self-selecting optimum neural network architecture from three neural network architectures such as sigmoid function neural network, radial basis function (RBF) neural network and polynomial neural network. Deep GMDH-type neural network also have abilities of self-selecting the number of hidden layers, the number of neurons in hidden layers and useful input variables. This algorithm is applied to medical image recognition of lung cancer and it is shown that this algorithm is useful for medical image diagnosis of lung cancer and is very easy to apply practical complex problem because deep neural network architecture is automatically organized.

1. はじめに

本研究では、進化論的計算法により複雑な構造をしたニューラルネットワーク構造を自動的に自己組織化するディープ GMDH-type ニューラルネットワークを用いて、肺がんの医用画像診断を行う。本研究で用いるディープ GMDH-type ニューラルネットワークは、発見的自己組織化法によりネットワーク構造を自動的に自己組織化している。ネットワーク構造は、予測誤差評価基準(情報量基準 AIC[Akaike 74]や予測誤差平方和(PSS)[Tamura 80])を最小にするように、シグモイド関数型、ラジアルベース関数型、多項式型などの中から自己選択する。さらに、中間層の数、各層のニューロン数、有益な入力変数などは予測誤差評価基準を最小にするように自己選択する。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークを肺がんの医用画像診断に応用して、その有効性を確認する。

2. 発見的自己組織化の原理

ディープ GMDH-type ニューラルネットワークのアルゴリズム[Kondo 15],[Kondo 98]は、GMDH 法で用いられている発見的自己組織化の原理[Farlow 84],[Ivakhnenko 70]に基づいて、ニューラルネットワークの構造を自己組織化している。以下に発見的自己組織化の原理の概略を示す。

発見的自己組織化の原理では、次に示す5つのステップにより非線形システムの入出力関係式(これをシステムの完全記述式という)を構成する。

1) 原データのトレーニングデータとテストデータへの分割

トレーニングデータはシステムの部分記述式(部分的なシステムの特徴を表す式)のパラメータの推定に用い、テストデータはシステムの完全記述式の構造選択に用いる。

2) 入力変数の組み合わせの発生

すべての入力変数の組み合わせを発生させる。

3) 最適な部分記述式の発生

各々の組み合わせに対して、システムの部分記述式を発生させる。発生したシステムの部分記述式の出力を中間変数と呼ぶ。

4) 中間変数の自己選択

テストデータに対する誤差(テストエラー)を小さくする L 個の中間変数を自己選択する。

5) 多層構造の繰り返し計算の停止

自己選択した L 個の中間変数を、次層の入力変数にセットして繰り返し計算を行い、多層構造を構成していく。この繰り返し計算は、テストエラーが減少しなくなった層で停止する。そして、システム全体の完全記述式は、各層で自己選択した部分記述式を用いて構成する。

以上の手続きにより構成される発見的自己組織化の原理は基本的な概念が進化論的計算法と同じである。

3. 最適なネットワーク構造を自己選択する改良形 GMDH-type ニューラルネットワーク

最適なネットワーク構造を自己選択するディープ GMDH-type ニューラルネットワークの構造を、Fig.1 に示す。中間層の個数、各々の中間層におけるニューロンの個数、有益な入力変数、最適なニューロンの構造は、情報量規準 AIC[Akaike 74]や予測誤差平方和(PSS)[Tamura 80]を最小にするように決定する。

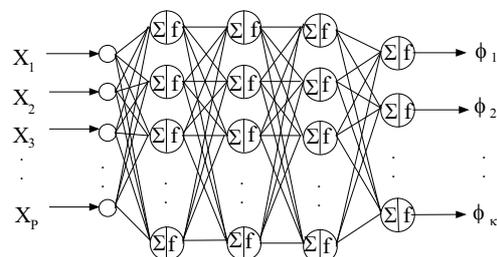


Fig.1 Architecture of the deep GMDH-type neural network

本アルゴリズムの概要を以下に示す。

まず始めに、原データをトレーニングデータとテストデータの 2 つに分割する。

(1) 第1層

$$u_j = x_j \quad (j=1, 2, \dots, p) \quad (1)$$

ここで、 x_j はシステムの入力変数を示す。

*¹ Email: kondomedsci@gmail.com

(2) 第2層

入力変数どうしを組み合わせ、すべての組み合わせを発生させる。ニューロンは1型と2型の2種類を用い、さらに1型と2型に3種類のニューロン構造を発生させて、対象となる非線形システムの特徴に最も適したニューロン構造を、予測誤差が最小になるように自己選択する。

<シグモイド関数型ニューラルネットワークス>

i) 1型ニューロン

Σ : (Nonlinear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_iu_j + w_4u_i^2 + w_5u_j^2 - w_0\theta_1 \quad (2)$$

f : (Nonlinear function)

$$y_k = 1 / (1 + \exp(-z_k)) \quad (3)$$

ii) 2型ニューロン

Σ : (Linear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_3 + \dots + w_ru_r - w_0\theta_1 \quad (r < p) \quad (4)$$

f : (Nonlinear function)

$$y_k = 1 / (1 + \exp(-z_k)) \quad (5)$$

<RBF型ニューラルネットワークス>

i) 1型ニューロン

Σ : (Nonlinear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_iu_j + w_4u_i^2 + w_5u_j^2 - w_0\theta_1 \quad (6)$$

f : (Nonlinear function)

$$y_k = \exp(-z_k^2) \quad (7)$$

ii) 2型ニューロン

Σ : (Linear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_3 + \dots + w_ru_r - w_0\theta_1 \quad (r < p) \quad (8)$$

f : (Nonlinear function)

$$y_k = \exp(-z_k^2) \quad (9)$$

<多項式型ニューラルネットワークス>

i) 1型ニューロン

Σ : (Nonlinear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_iu_j + w_4u_i^2 + w_5u_j^2 - w_0\theta_1 \quad (10)$$

f : (Linear function)

$$y_k = z_k \quad (11)$$

ii) 2型ニューロン

Σ : (Linear function)

$$z_k = w_1u_i + w_2u_j + w_3u_3 + \dots + w_ru_r - w_0\theta_1 \quad (r < p) \quad (12)$$

f : (Linear function)

$$y_k = z_k \quad (13)$$

ここで、各々のニューロンは Σ と f の2個の関数から構成され、 w はニューロンの重み係数、 p は入力変数の個数を示す。ニューロンの重み w の値は、主成分回帰分析[Draper 81]を用いて次のように推定する。

まず、各々のニューロンに対して z_k^{**} の値を計算する。

i) シグモイド関数型ニューロン

$$z_k^{**} = \log_e(\phi / (1 - \phi)) \quad (14)$$

ii) RBF型ニューロン

$$z_k^{**} = (-\log_e \phi)^{1/2} \quad (15)$$

iii) 多項式型ニューロン

$$z_k^{**} = \phi \quad (16)$$

ここで、 ϕ はシステムの入力変数、 ϕ' は0から1の間の値に規準化された出力変数を示す。重み w は、次に示す主成分回帰分析[Draper 81]を用いて推定する。

各々のニューロンに対して、トレーニングデータを用いて、主成分回帰分析により重み w を推定する。主成分回帰分析を用いることにより、層を通過すると発生していた中間変数間の多重共線性を防止することができ、高精度な学

習計算を実行することができる。そして3種類のニューロンを各々の入力変数の組み合わせに対して構成する。

主成分回帰分析を用いたニューロンの学習計算では、入力変数の組み合わせに対して主成分の抽出を行う。(2)式のニューロンの場合を例にとる。

まず、固有ベクトルを計算する。

$$\underline{v} = C \cdot \underline{u} \quad (17)$$

ここで、

$$\underline{v} = (v_1, v_2, \dots, v_5)$$

$$\underline{u} = (u_i, u_j, u_iu_j, u_i^2, u_j^2)$$

\underline{v} は固有ベクトル、 C は固有行列で次式により固有値問題を解くことによって計算する。

$$R \cdot C = C \cdot A \quad (18)$$

ここで、 R は相関行列を表す。次に、変数 z_k を直交回帰分析により計算する。

$$z_k = \underline{w}^T \cdot \underline{v} = w_1v_1 + w_2v_2 + \dots + w_5v_5 \quad (19)$$

この場合、出力変数として z_k^{**} を用いる。そして、PSSを変数選択の評価基準として変数選択型重回帰分析法[Draper 81]を用いて有益な主成分のみを選択する。

次に、構成した3種類の各々のニューロンに対して、PSS値の小さいものを L 個選択する。自己選択した3種類の L 個のニューロンに対して、テストデータを用いて平均自乗誤差(テストエラー)を計算する。平均自乗誤差が小さなニューロン構造を3種類の中から自己選択する。次層の計算では、自己選択したニューロン構造のみを用いてニューラルネットワークスの計算を行う。具体的には、自己選択したニューロン構造を持つ L 個のニューロンの出力値を次層の入力変数にセットして、次層の計算に移る。

(3)3層以上の層

3層以上の層では、第2層と同じ計算を繰り返す。ただし、ニューロンの構造は自己選択した構造のみを使用する。そして、 L 個のニューロンのAICまたはPSSの値が減少しなくなる層で中間層の計算を停止する。中間層の計算を停止した場合、最終の中間層を出力層とする。

以上の手続きにより、多層構造をしたディープ GMDH-type ニューラルネットワークスを構成できる。

4. 肺がんの医用画像診断への応用

本研究では、ディープ GMDH-type ニューラルネットワークスを用いて、肺がんの画像認識とその領域抽出を行った。本研究では、医用画像としてマルチスライスCT画像を用いた。まず最初の手続きとして、肺の正常な領域をディープ GMDH-type ニューラルネットワークスを用いて画像認識させ、これらの領域を抽出した。次に、画像の後処理を行うことにより肺がんを含んだ肺の全体の領域を抽出した。次に、抽出した肺の画像を用いて、新しいディープ GMDH-type ニューラルネットワークを自己組織化することにより肺がんの候補領域を抽出した。なお、本研究では予測誤差の評価基準としてPSSを用いた。

4.1 肺野領域の抽出を行うディープ GMDH-type ニューラルネットワークスの自己組織化

Fig.2に、ニューラルネットワークスを自己組織化するために用いた原画像を示す。ニューラルネットワークスの入力変数としては $N \times N$ 近傍領域の画像特徴量を用いた。これは、平均値、分散、標準偏差、中央値、範囲、最大値、最小値などの基本統計量と位置情報(x と y 座標)である。これらの特徴量の中から、平均値、標準偏差、分散、 x 座標、 y 座標の5変数がニューラルネットワークスにより有益な入力変数として自己選択された。近

傍領域の大きさ N は、3 から 10 の値に対してニューラルネットワークを自己組織化した。その結果、 N が 4 の場合に、最も良い画像認識精度を得た。ニューラルネットワークの出力変数は、0 か 1 の値をとり、対象臓器の領域内部では 1 の値を出力するように学習させた。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークは、ニューラルネットワーク構造としてシグモイド関数型ネットワーク構造を選択した。Fig.3 に、第 2 層で計算された 3 種類のニューロンの誤差を示す。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークの計算は第 8 層で終了した。そして、各々の中間層では 5 個のニューロンが自己選択された。Fig.4 に、各層における PSS 値の変化を示す。層を通過することにより PSS 値は徐々に減少して予測誤差が非常に小さな値に収束した。

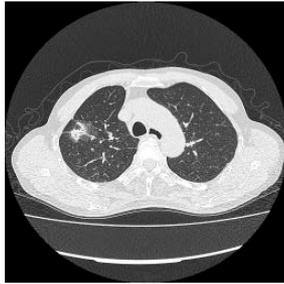


Fig.2 Original image

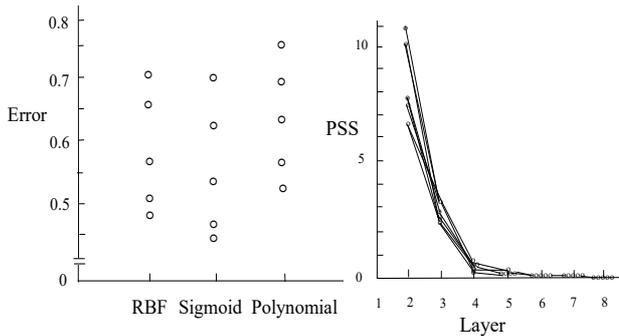


Fig.3 Mean error of three types of neuron (1)

Fig.4 Variation of PSS in the deep GMDH-type of NN(1)

4.2. 肺野領域の抽出結果

自己組織化されたディープ GMDH-type ニューラルネットワークによって肺野領域が出力された。Fig.5 に、ニューラルネットワークの出力画像を示す。肺の正常な領域が抽出されている。肺の内部の正常でない領域と肺の外部の領域(孤立点)はほとんど含まれていないことがわかる。次に、出力画像に対して画像の後処理が行われた。ニューラルネットの出力画像に対する後処理では、画像の膨張処理と収縮処理を行い、肺領域の内部に孤立した部分がある場合や、肺領域の外部にある孤立点が除去された。そして、肺領域の輪郭を $N/2$ 画素分だけ外側に拡張して肺がんを含んだ肺の全体の領域を抽出した。Fig.6 に、ニューラルネットワークの出力画像に後処理を行った画像を示す。原画像との一致性を確認するために、原画像との重ね合わせを行った。Fig.7 に原画像と後処理後の出力画像を重ね合わせ画像を示す。この画像から、ニューラルネットワークによって画像認識された肺領域は、原画像の肺野領域によく一致していることがわかる。そして、肺野領域を、原画像(Fig.2)から後処理後の画像(Fig.6)を差分することにより抽出した。Fig.8 に差分画像(グレイ画像)を示す。このような肺野領域の抽出処理をすべてのスライスに対して行い、レンダリングソフトウェアにより肺野領域を 3 次元表示した(Fig.9)。

4.3. 肺がんと肺血管・気管支領域の抽出を行うディープ GMDH-type ニューラルネットワークの自己組織化

Fig.8 の抽出された肺野領域のグレイ画像を用いて、肺がんの領域抽出を目的にした新しいニューラルネットワークを自己組織化した。ニューラルネットワークの入力変数としては 4.1 のニューラルネットワークと同じものを用いた。近傍領域の大きさ N は、2 から 10 の値に対してニューラルネットワークを自己組織化した。その結果、 N が 2 の場合に、最も良い画像認識精度を得た。ニューラルネットワークの出力変数は、0 か 1 の値をとり、肺がんと肺血管・気管支領域の内部では 1 の値を出力するように学習させた。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークは、ニューラルネットワーク構造として RBF 関数型ネットワーク構造を選択した。Fig.10 に、第 2 層で計算された 3 種類のニューロンの誤差を示す。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークの計算は第 4 層で終了した。Fig.11 に、各層における PSS 値の変化を示す。層を通過することにより PSS 値は徐々に減少して予測誤差が非常に小さな値に収束した。



Fig.5 Output image of the neural network(1)

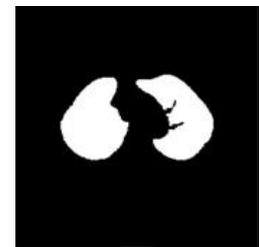


Fig.6 Output image after the first post-processing



Fig.7 Overlapped image

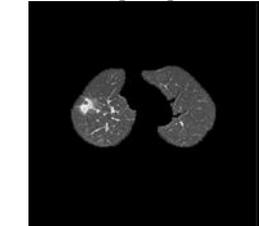


Fig.8 Extracted gray scale image



Fig.9 Extracted 3-dimensional image of lungs

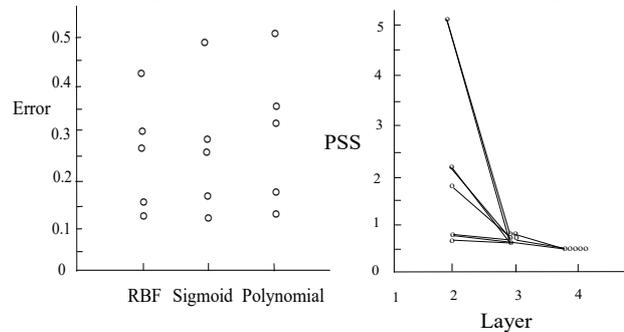


Fig.10 Mean error of three types of neuron(2)

Fig.11 Variation of PSS in the deep GMDH-type NN(2)

Fig.12 に最終層で得られた出力画像を示す。次に、この出力画像に対して画像の後処理を行った。ニューラルネットの出力画像に対する後処理では、画像の収縮処理と膨張処理を行い、肺がん領域の外部にある孤立点が除去された。そして、肺がん領域の輪郭を $N/2$ 画素分だけ外側に拡張した。Fig.13 に、ニューラルネットワークの出力画像に後処理を行った画像を示す。そして、原画像から差分を行うことにより肺がんの候補領域が抽出された。Fig.14 に、肺がんの候補領域を示す。このような処理を、すべてのスライスに行い、レンダリングソフトウェアにより肺がん領域を 3 次元表示した(Fig.15)。

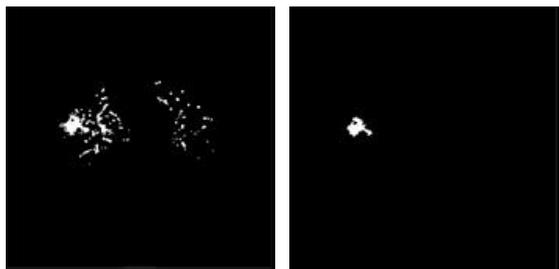


Fig.12 Output image of the neural network(2)

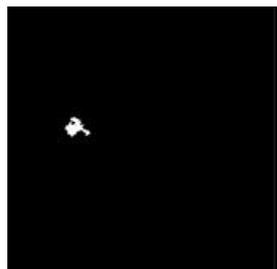


Fig. 13 Output image after the second post processing

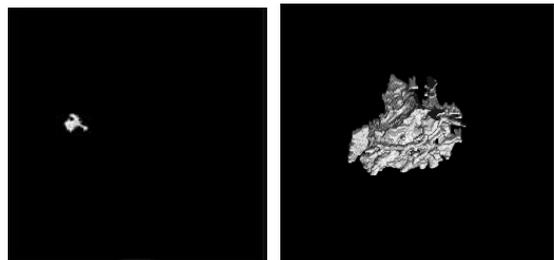


Fig. 14 Candidate regions of lung cancer



Fig.15 Extracted 3-dimensional image of lung cancer

4.4. バックプロパゲーション法を用いて学習する従来形ニューラルネットワークによる肺野領域の抽出結果

バックプロパゲーション法を用いて学習する従来形ニューラルネットワークを用いて肺野領域の画像認識を行い、画像認識結果の比較を行った。ニューラルネットワークは、入力層、中間層、出力層の 3 層構造とした。入力変数や学習データは、ディープ GMDH-type ニューラルネットワークと同じものを用いた。学習では、各々の学習データを 10,000 回学習させた。結合加重の初期値は乱数により設定した。本研究では、中間層のニューロン数(m)を変化させて画像認識を行った。Fig.16 に、 $m=3$ 、 $m=5$ と $m=7$ の場合の出力画像を示す。出力画像は Fig.5 に対応している。これらのニューラルネットワークの出力画像には、孤立点や肺領域でない領域を多く含んでおり、画像認識精度が十分でないことがわかる。また、中間層のニューロン数(m)を変化させた場合に、異なった出力画像が得られた。従来形のニューラルネットワークでは、ネットワーク構造の自己選択機能を持たないため、中間層のニューロンの個数や中間層の個数などの構造パラメータを変化させて、より望ましいネットワーク構造を見つけ出す必要がある。このため、構造パラメータを変化させて、非常に多くの繰り返し計算を行う必要がある。さらに、解が局所解に収束した場合には、よい精度が得られないために結合加重の初期値を変化させてさらに多くの繰り返し計算を行う必要がある。これに対して、ディープ GMDH-type ニューラルネットワークでは、このような構造パラメータを変化させた繰り返し

計算を必要としないため、1 回の計算で複雑な構造をしたニューラルネットワークを自己組織化できる。

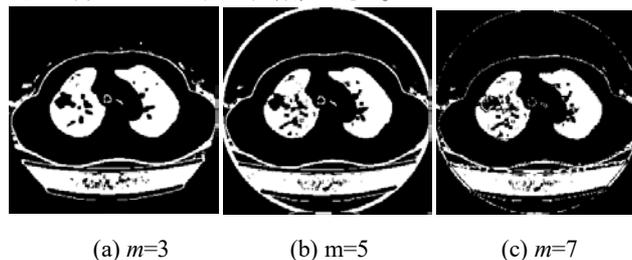


Fig.16 Output images of the conventional sigmoid function neural network

5. むすび

本研究では、ディープ GMDH-type ニューラルネットワークのアルゴリズムを肺がんの画像診断問題へ応用した。ディープ GMDH-type ニューラルネットワークのアルゴリズムは、シグモイド関数型ニューロン、ラジアルベース関数型ニューロン、多項式型ニューロンの3種類のニューロンの中からニューロン構造を自己選択し対象となる医用画像の特徴に最も適したネットワーク構造を自己組織化している。また、発見的自己組織化の原理を用いて、対象の医用画像の特徴に最も適したディープニューラルネットワーク構造を自己選択する機能を備えている。さらに、中間層の個数、中間層のニューロンの個数、有益な入力変数、最適なニューロン構造などの構造パラメータを、情報量基準(AIC)や予測誤差平方和(PSS)を最小にするように自己選択する機能を備えている。このため、実際問題への応用が非常に容易である。本研究では、肺がんの画像診断問題へ応用してその有効性を確認した。

参考文献

- [Akaike 74] H.Akaike: A new look at the statistical model identification, IEEE Trans. Automatic Control, Vol.AC-19, No.6, pp.716-723, 1974.
- [Draper 81] N.R.Draper and H.Smith : Applied Regression Analysis, John Wiley and Sons, New York, 1981.
- [Farlow 84] S.J.Farlow ed.: Self-organizing methods in modeling, GMDH-type algorithm, Marcel Dekker, Inc., New York, 1984.
- [Ivakhnenko 70] A.G.Ivakhnenko: Heuristic self-organization in problems of engineering cybernetics, Automatica, Vo.6, No.2, pp.207-219, 1970.
- [Kondo 15] T.Kondo and J.Ueno: The 3-dimensional medical image recognition of right and left kidneys by deep GMDH-type neural network, Journal of Bioinformatics and Neurosciences, Vol.1, No.1, pp.14-23, 2015.
- [Kondo 98] T.Kondo: GMDH neural network algorithm using the heuristic selforganization method and its application to the pattern identification problem, Proc. of the 37th SICE Annual Conference, pp.1143-1148, 1998.
- [Tamura 80] H.Tamura and T.Kondo: Heuristics free group method of data handling algorithm of generating optimum partial polynomials with application to air pollution prediction, Int. J. System Sci., Vol.11, No.9, pp.1095-1111, 1980.