

講座

画像再構成とパターン認識の数理

Mathematics for Image Reconstruction and Pattern Recognition

1. プラズマのイメージング計測

1. Imaging Diagnostics for Plasma

大館 暁

OHDACHI Satoshi

核融合科学研究所

(原稿受付：2016年6月23日)

1.1 なぜイメージング計測か？

核融合プラズマの挙動が、核融合研究が始まったときに想定されていたよりはるかに複雑であることは、多くの研究者が同意するところだと思う。プラズマ中の少数の計測点での測定では、プラズマの複雑な挙動をとらえるのには不十分であることがわかってきて、より高い空間分解能、より高速な計測を求めて研究開発が進んできた。このように、より高次元の計測が求められるなかで、なぜ2次元の画像を想起されるイメージング計測という概念が広く使われるのだろうか。私見では、人間が外界を認識する手段が2次元の計測装置である「眼」であるため、情報を2次元的に表示することが人間にとって最もわかりやすく、人間のパターン認識力を活かせる手段であるということだと考える。そのためもあって、プラズマの2次元イメージを取得できる様々な手法、マイクロ波から可視光、X線、ガンマ線に至るまで多くのエネルギー領域でのプラズマの2次元的な放射をとらえる計測器が開発されてきた。2次元計測が重要であるもう一つの理由は、磁場を使って閉じ込められたプラズマは磁場に垂直方向の移動が制限されるために、ある断面での画像、例えば環状の閉じ込め装置のポロイダル断面の断層像を推定できれば、プラズマの特徴のかなりの部分を抽出できるということである。

それではプラズマの2次元画像を見るということは、日常の「見る」という行為と同じだろうか。通常我々が物体を眼で見るときにはその不透明な表面をみて形状や動きを判断している。しかし、プラズマは多くのエネルギー領域で透明であり、計測器の信号はプラズマ中の特定の領域(例えば視線)からの信号の重ね合わせであることが多

い。このため、積分された信号から、プラズマ中の局所値を推定する手法が必要となる。この問題が見かけよりもはるかに厄介であることは、これまでプラズマ・核融合学会誌に掲載されてきた一連の岩間尚文氏の解説[1-3]で強調されてきたことであり、今回の講座でも逆変換の手法の最新の発展について解説していただく。数理的に難しい内容を、初学者や私のような実験家にもわかりやすく説明してほしいという無理なお願いに対して、素晴らしい内容の「画像再構成の数理的基礎」(本講座第2章)を用意していただいた。

1.2 今後の講座の展開

本講座では新しい数理的手法の紹介と、新しいイメージング計測技術についての記事を用意している。画像再構成とは逆問題の解法と言い換えることができる。最近開発された新しい逆変換手法の一つである一般化特異値分解を使った手法と、それを使った接線方向からの観測データの逆変換についてOak Ridge National Laboratory (ORNL)のAndreas Wingen氏の解説記事が11月号以降に予定されている。逆変換の手法の中には、互いに直交したパターン(基底)を使って展開する方法がよく用いられる。任意の形状を持った領域の基底を生成できるラプラシアン固有関数法がUC Davisの斉藤直樹氏により紹介される(12月号)。直交基底と非常に関係の深いアダマール変換を使った新しい計測手法について帝京大学の荒川弘之氏より解説いただく(12月号)。画像が得られた後、そこから更に物理的に意味のある対象を選別する必要がある。これを計算機において実現することを目的とした理論・技術が「パターン認識」

である。パターン認識とは識別問題である，という立場から情報数理を用いた研究が大きく進展している。このパターン認識の最近の手法についての解説が九州大学の内田誠一氏により行われる（11月号）。

新しいイメージング計測技術としては，波面センサーをつかって密度揺動の二次的な構造を再構成する新しい計測法についての紹介が核融合科学研究所の秋山毅氏より行われる予定である（12月号）。本講座で紹介する新しい技法はコンピュータショナルフォトグラフィと呼ばれる情報数

理を駆使して計算により画像のブレやボケを取り除く技術とも関連する。

参考文献

- [1] 岩間尚文：核融合研究 68, 586 (1992).
- [2] 岩間尚文：プラズマ・核融合学会誌 74, 1310 (1998).
- [3] 岩間尚文, 大館 暁：プラズマ・核融合学会誌 82, 399 (2006).



おお だち さとし
大 館 暁

核融合科学研究所・ヘリカル研究部・高密度プラズマ物理研究系。専門は磁場閉じ込めプラズマのMHD不安定性，イメージング技法を使った揺動解析。最近，インドでキールティムカと呼ばれている顔しかない幻獣に興味をひかれ，見つけたら写真を撮っています。インドや東南アジアの寺院の屋根の上や門の上などにはよく置かれています。日本の鬼瓦の元になったという人もいて，この幻獣のイメージがどんなふうに関係しているのか，いろいろ想像して楽しんでいます。



2. 画像再構成の数理的基礎

2. Mathematical Basics of Image Reconstruction

岩間尚文, 大館 暁¹⁾

IWAMA Naofumi and OHDACHI Satoshi¹⁾

¹⁾核融合科学研究所

(原稿受付: 2016年6月3日)

画像の再構成ないし画像の逆問題をテーマにして, その数理の基礎を解説する. 観測を表わす物理の関係式から出発して, 観測データにうまく一致する物体画像は何かと方程式を立てる. その解を求めるとき, 解が満たすべき一般的な制約を与えて観測不足を補い, 得られる画像を改善する. その問題の立て方から始まって, Tikhonov 正則化を軸にし, ART・SIRT から最尤推定・ベイズ推定・圧縮センシングのような最新の研究まで, その本質的なところに目を据えながら全体を概観する. 核融合研究のプラズマ撮像を主たる事例に取り上げつつ, 他分野のイメージングにおける魅力的な理論と応用を紹介する.

Keywords:

inverse problem, image reconstruction, Tikhonov, nonlinear constraint, Bayse, l_1 norm, modeling

2.1 はじめに

最近, 数理情報の分野において, イメージング (撮像) のための逆問題の数理解析がめざましく発展している. 医療・生体・材料から地球・宇宙まで, 物の情報を画像として得る要求がますます高まるなかで, 外部から観測して内部を求める数理科学である. 線積分の計測から波動を利用する計測まで研究対象は大きく広がり, 論文誌も豊富になった. 圧縮センシングと称する新しい計算法が大流行し, パターン認識への輸出までである. 研究が進むとともに, 数理の存在が後景から前景に出て, この10年, 画像のための情報処理は著しく前進した.

この進歩を既存の物理計測に取り込もう, また, この進歩を見たときどんな計測の原理を思いつくかというとき, あまりにも豊富な逆問題論文のなかに何が数理の本質であるか, 物理研究者が見通しよく理解することが大切である. 本講座の最初に, そもそも逆問題とは何であるか? 物理計測に対してどのように考えると, 数理の逆問題に到達するか? そして, それをどのように解くか? 解くとはどう意味であるか? 物理計測の現場と数理研究の最前線のあいだに立って, 両者を橋渡しする理解を物理研究者のなかに作りたい. この理解の前進が数理研究の発展をうながすに違いないし, 物理計測の発展の力になるに違いない.

この意図をもって入門的な解説を書こうというとき, 全体を貫く一つの重要な観点がある. 逆問題は, 観測された事実に見合う物体は何かと方程式を立てる. 本来, 方程式は強い. しかし, 式および未知数の数に係わる観測の本来的な事情から方程式の解が不定になる. 一般には悪条件になる. そこで, 数理の制約を加えて解を一意化し, 良条件

にして解く. 観測が的 (ま) を射て精確であるほど, かつ, 加えた数理の制約が合理的であるほど, 方程式路線の強さがものになり, 計測の逆問題は成功に近づく. 出発点の ART から最近の圧縮センシングまで, 逆問題の数理全般をそのような観点でまとめてみたい.

この解説において, 核融合研究におけるデータ少数条件のコンピュータ・トモグラフィ (CT) 計測を実例に取り上げ, 最小2乗法を中心に据える. 逆問題研究が計算の舞台に上がった時期に先頭を走った経過もあるし, 何よりも線積分型 CT は観測不足の効果が明確でわかりやすく, 数理の本質を理解するのに都合がよい. 最小2乗法は線形代数や統計学の考え方を入れやすいし, いまも新しい試みが登場している. これまで本学会誌に掲載された関連の解説 [1-3] と重複を避けつつ, しかし逆問題の基本から改めて書いて, 周辺分野の進んだ事例に目を向けながら, 今日で新鮮な画像再構成の入門的かつ概観的な解説としたい. 核融合研究の計測ひいては科学計測への一つの跳躍台となれば幸いである.

2.2 逆問題とは何か

2.2.1 物理観測の関係式から数理の逆問題へ

イメージング逆問題は計測の数理物理である. 何か未知の物体 (object) がある. その様子を知るために, 私たちは物体から出てくるものを観測する. ときに, 物体に何かを当てて返ってくるものを観測する. この受動的・能動的な観測のいずれにしる, 図1のように物体から出てくるものを検出器で受ける. この図は, 検出器は一つの観測値を出力するつもりで書いている. このとき, 私たちは物体からこの観測値が生まれる物理の関係を数式に書く. 物理の考

author's e-mail: iwama.naofumi@gmail.com

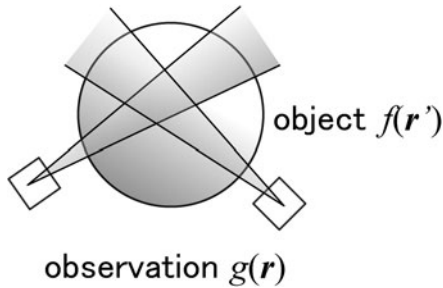


図1 物体 $f(\mathbf{r}')$ と観測量 $g(\mathbf{r})$.

察から得られる理論関係式である。物体は3次元でもよい。各検出器の出力に寄与する物体の領域が1点のみになる計測もあるが、しばしば物体を通過する直線や遠くほど広がる円錐状とか、ときに物体全体にわたることがある。このとき物理関係式は、空間変数に関する物理量の積分になる。時間信号を観測する場合であれば、時間変数に関する積分も加わり得る。

そして、観測者たる私たちは、この関係式を用いて、得られた観測値に合致する未知物理量を求めたい。得られた値に合致する何かを求めるのであるから方程式である。すなわち、物理の関係式が方程式に切り替わる。物体から観測値が生ずる関係式を順方向とすれば、方程式を解いて物体の未知量を求める作業は逆方向である。この逆方向の作業を行う数理問題を「逆問題 (inverse problem)」と言う。正確に言えば「積分の逆問題」である。

このとき、求めるものが画像 (物理量の空間分布) であれば、この作業を一般には画像の復元 (recovery) と言い、積分によって低い空間次元に退化した観測量から元の画像を復元するときに再構成 (reconstruction) と言う。断層像・3次元全体像に係わるトモグラフィ・ホログラフィは、画像解析として見れば再構成である。再生 (restoration) は、現在では、空間次元が変わることなくボケ・歪みを受けたときの復元を意味する言葉に落ち着いたように思われる。復元が最も広い言葉であろう。

2.2.2 逆問題の定式化-観測への合理的な一致-

前節では、「物理の観測」を「数理の逆問題」に持ち込む手順を抽象的に書いた。ことは本質的に数理物理である。この逆問題を解くとき、「情報の数理」とも呼ぶべきものがはいる。なぜ「情報」という言葉がここにはいるか？

観測は、計測が原理的に正しくても、検出器の数・方向など観測の範囲に制限がある。また、測定精度は常に較正不足と雑音に制限される。物体に対する観測が不足し精度があやしいと、積分で表された物理関係式を方程式に切り替えて解くとき、解を明確に決められない。明確に決められないとは、観測の方向が少し変わるとか測定誤差がはいるとかすると“求まる解が大きく変わる”“不安定な撮像になる”“物理研究者として確実な判断ができない”という意味である。慎重に確実なところに留まりたいければ、ほんやりした画像を解とするしかない。

この直感的なことが実際にどうなのか、もう少し具体的に見てみよう。物理関係式が次の場合を考える。

$$\int_D h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = g(\mathbf{r}) \tag{1}$$

この式は、物理量の空間分布 $f(\mathbf{r}')$ に関数 $h(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ が掛かって空間積分された結果、位置 \mathbf{r} に観測量 $g(\mathbf{r})$ が生ずることを表わしている。 D は物体の存在領域であり、 $h(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は物理的な考察から既知とする。この関係式をもとにして、右辺の $g(\mathbf{r})$ が与えられて未知関数 $f(\mathbf{r}')$ を求める方程式に切り替えたとき、これを第1種フレドホルム型積分方程式という。左辺が $f(\mathbf{r}')$ の1次項の積分であるという意味で線形な方程式である。左辺を関数 $f(\mathbf{r}')$ の積分変換と考えてもよい。フーリエ変換やRadon変換はこの積分が特にきれいに書ける場合である。広く物理量の計測はこの形に書けることが多い。自分が取り組む計測はどうか、考えてみることである。左辺が非線形になったときも、線形問題の解法を足場にして解決法を考えることが多い。

非線形になる例を一つあげよう。人体・コンクリートのような誘電体に電磁波が減衰しつつ侵入するとき、その散乱波を観測して複素誘電率の空間分布を求める画像計測を考える (図2)。誘電率をスカラーとし、角周波数 ω の正弦的な時間変化を想定して複素振幅に注目すると、物体から散乱される波の電場 $E_{sc}(\mathbf{r})$ は物体内部の電場 $E(\mathbf{r}')$ とグリーン関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を用いて、

$$E_{sc}(\mathbf{r}) = \int_D G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') c(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}') d\mathbf{r}',$$

$$c(\mathbf{r}') = k^2(\mathbf{r}') - k_b^2 \tag{2}$$

と書ける。ここで k, k_b は物体内部と背景における波数で、 $c(\mathbf{r}')$ はコントラスト関数と呼ばれる。物体内部の電場 $E(\mathbf{r}')$ は未知関数 $c(\mathbf{r}')$ に依存するので、(2)式は本来的に非線形な方程式であるが、Born近似のもとに $E(\mathbf{r}') = E_{inc}(\mathbf{r}')$ (入射電場) とすれば線形になる。電磁波散乱を利用するトモグラフィ・ホログラフィの基本関係式である。

さて、(1)式に戻ろう。いくつかの点 $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$ ($m = 1, 2, \dots, M$) における観測値 $g(\mathbf{r}_m)$ を得たとき、この観測データから $f(\mathbf{r}')$ を求めたい。各 \mathbf{r}_m において次の関係が成立する。

$$\int_D h(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = g(\mathbf{r}_m) \quad (m = 1, 2, \dots, M) \tag{3}$$

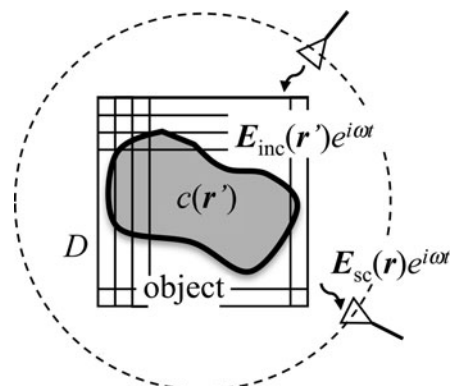


図2 誘電体による電磁波散乱の観測。

この関係から解析的に $f(r')$ を求めることは一般にむずかしい。観測点がバラバラであれば尚更である。しかし、コンピュータによる計算が身近になった現在では、左辺の積分を積和に近似する。

$$\sum_{n=1}^N h(r_m, r'_n) f(r'_n) \Delta r'_n = g(r_m) \quad (m = 1, 2, \dots, M) \quad (4)$$

ここで、 r'_n ($n = 1, 2, \dots, N$) は領域 D を適当に分割した離散点であり、 $f(r'_n)$ は画素値、 N は画素数である。分割の仕方は、逆問題に取り組むものが選ぶ。等分割することが多いが、そうでなくてもよい。

こうして得られた(4)式は線形方程式（1次の連立方程式）である。行列表示を使えば次のように書ける。

$$Hf = g, \quad (5)$$

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & \dots & h_{1N} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & \dots & h_{2N} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ h_{M1} & h_{M2} & \dots & \dots & h_{MN} \end{bmatrix}, f = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}, g = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_M \end{bmatrix} \quad (5')$$

ただし、 $h_{mn} = h(r_m, r'_n) \Delta r'_n$, $f_n = f(r'_n)$, $g_m = g(r_m)$ と置いた。 f は画素値 f_n を成分とする言わば画像ベクトル、 g は観測値 g_m を成分とする言わばデータベクトル、係数行列 H は f から g を生ずる計測の物理を表わし、線積分型 CT では投影行列と呼ばれる。 f のなかの f_n の並べ方は、2次元画像であれば辞書（テレビ）式に画面の左上 (f_1) から右下 (f_N) へ、3次元画像であればさらに奥行きを加えて、走査するのが普通である。また、線形代数学では、特に断らない限り、ベクトルは成分を縦に並べて、列が1つだけの行列として扱う。行列は列ベクトルや行ベクトルを束ねたものと見なすと考えやすい。

さて、得られた観測データ g に対して、(5)式を解こう。(1)式および(3)式の左辺が畳み込みやフーリエ積分で、観測点 r_m が相当に整っていれば、フーリエ変換を利用した解法を考えるし、フーリエ変換の不確定性から分解能を評価できるかも知れない。しかし、観測点に欠損があり疎（スパース）であれば、そうは行かない。フーリエ積分の場合（フーリエ逆問題）、観測データ g がフーリエ空間の原点周辺に限られているとき、その外側を0と置いて逆フーリエ変換するよりも、逆問題解法は高分解能をもたらす。この現象を特に“超分解”と言う。観測されなかった部分に0値を入れたり内挿・外挿したりせず、得られた観測値のみに合致する解をさがす方程式路線の強みが、観測欠損が大きいときに現われる。その強みをものにするには、方程式(5)を解かねばならない。

ここに重要なことがある。物体を外部から観測して内部を求める逆問題においては、観測欠損が特になくても、本質的に、観測が不足する傾向になることに注意しよう。

* このような f' すべての集合を線形作用素 H の零空間と言う。

(5')式は何となく、ベクトル f はベクトル g より長い（従って行列 H は横に長い）かのように書いた。線形方程式(5)において、式の数観測値の数 M 、未知数の数は画素数 N である。物体を外部から観測する画像計測では、検出器を置く空間は物体が占める空間よりも空間次元が低い。3次元物体とそれを囲む球面、2次元物体とそれを囲む円周のたぐいである。物体に対して実現したい分解能にふさわしく検出器を詰めて配置したとき、検出器数 M は画素数 N より少ないのが普通である。そして、観測に努力のいる計測では観測欠損がさらに加わる。核融合研究の計測では観測窓の制限が強いので、そのために $M \ll N$ であると思いがちであるが、実はその前に、このような本質的な事情があることに注意しよう。

2.2.3 解に与える制約-観測と先験的な知識-

一般に線形方程式は、式数が少ないと傾向として“悪条件”になる。そもそも、観測は解の画像が満たすべき制約を与える。いまの場合、一つの観測値が一つの式を与える。観測が多いほど式が増えて解はそれだけ確かになる。方程式の悪条件とは、観測の H および g のわずかな摂動によって、解の画像 f が左右されやすいという意味である。そのようなとき、方程式は悪条件とか不良設定とか言われる。どれほど大きく左右されるか、観測値数の多い $M \geq N$ のときであれば、係数行列 H の特異値を使った評価がある[4]。観測値数 M が小さいほど、悪条件が一般に強まる。式不足 ($M < N$) となれば、解はそもそも不定である。もう少し数式を見てみよう。与えられた g に対して $Hf = g$ を満たす f があるとき、 $H(f+f') = g$ を満たす f' は $Hf' = 0$ すなわち「観測に現れない f' 」である* (0 は成分がすべて0のベクトル)。観測の数が減れば、そのような見えない f' が増える(解の自由度が増す)。端的な例として、線積分型の疎データ CT についてこの事情を図3に示した。解の画像は視線以外で制約を受けないし、関係 $H(f+f') = g$ からして物体 f 及び f' の存在領域(非ゼロ成分の番号)はもっと広く重なってもよいから、解の画像全体が歪むことが許される。偽の像（アーチファクト）も生まれる。これは物理計測の誤りをもたらす。

このような線形方程式の悪条件は、最小2乗法にも持ち

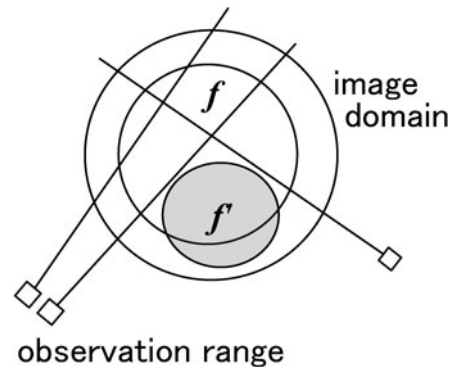


図3 線積分型の疎データ CT. ベクトル f 及び f' の成分が非ゼロの領域を示した。視線が減るほど情報のない領域が拡大し、観測がもたらす制約が減る。

込まれる。連立方程式(5)の左右両辺の差の2乗和を求めると、 $\|Hf-g\|^2$ と書ける。二つのベクトル Hf および g の差 $Hf-g$ は成分同士の差を成分とするベクトルで、そのノルムの2乗を $\|\cdot\|^2$ と書いた。与えられた観測データ g に対して、 $\|Hf-g\|^2$ を最小にする f は新しい線形方程式(正規方程式)

$$(H^T H)f = H^T g \tag{6}$$

の解である[5]。 H^T は行列 H の転置である。 H の要素が複素数であれば H^T は複素転置になるが、ここでは簡単のため、実数部・虚数部への分解を想定して実数問題とする。

さて、この方程式の係数行列 $H^T H$ は正方で、式の数が未知数の数 N と同じになったが、むしろ、ますます悪条件である[4]。特に観測数不足の $M < N$ のときは、行列式が0となり(ランク落ち)、やはり解不定である。式数はまっとうになったものの、係数行列の内実が伴わない。

このように観測が不十分で解不定になった悪条件な方程式に対して、解の画像を確かにし、撮像の性能を上げるには、何らかの観測を増やす(独立性の高いかつ精度の良い式を増やす)のが最善である。しかし、そこに限界があれば、方程式を解く机上の作業において、解が満たすべき合理的な制約を数理において加えるしかない。この操作を「解の正則化(regularization)」と言う。解を正しいところに抑え込むという意味である。数理の操作であるから、「情報」という言葉を使いたくなる。しかしそのとき、物理的に分かっていること(物理の知識)を制約に取り込めば、解はそれだけ良くなるに違いない。どんな試みがなされてきたか、どんな可能性があるか、核融合研究を中心に「解への制約」という観点から見てみよう。

2.2.4 方程式をよく見る-解法の出発点-

本論に入る前に、方程式を解くからにはその準備として、係数行列 H (および $H^T H$) と(6)式の右辺 $H^T g$ の様子を見ておこう。

まず、(5)式および(5')式の第 m 行を横に見ると、

$$g_m = \sum_{n=1}^N h_{mn} f_n$$

となる。この式は“観測値 g_m が物体からどのように生じたか”を表している。 H の要素 h_{mn} は“第 n 画素から g_m への貢献度”である。線積分型 CT であれば、図4のように、第 m 視線(積分路)が通過した画素に対してのみ h_{mn} は0でない値(>0)を取り、他のすべての画素に対して $h_{mn} = 0$ である。よって、 H の各行は要素の大部分が0である。物体の画素数は2次元・3次元的に多いが、1本の視線が通る画素の数はいつも1次元的で少ない。特に3次元CTの H は0要素の比率が非常に大きい大規模な行列となる。行列 $H^T H$ も同様である(0要素の比率は減る)。

さて今度は、係数行列の要素を縦方向(列方向)に見てみよう。 H の第 n 列を見ると、“第 n 画素に各々の観測がどんな h_{mn} をもって及んでいるか”がわかる。線積分型 CT であれば、第 n 画素に多くの視線が通るとき第 n 列に0で

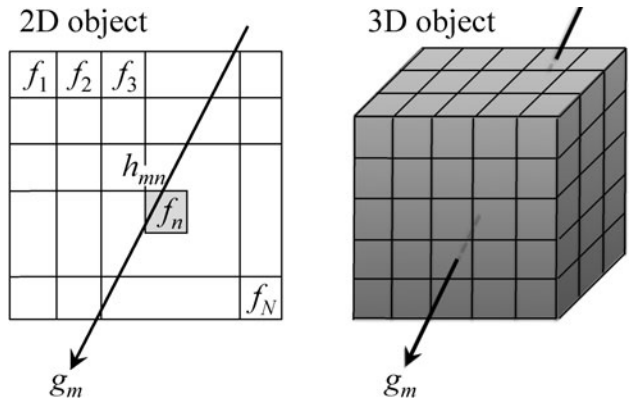


図4 線積分型 CT:理想的な線積分であれば、画素値 f_n が“交わりの長さ” h_{mn} の重みで観測値 g_m に貢献する。3次元の場合も同様。一般に h_{mn} の評価は物理的考察による。

ない h_{mn} が多く、まったく視線が通らなければ第 n 列のすべての h_{mn} が0である。

係数行列 H の内容をこのように横と縦に分析すると、再構成法の選択や再構成画像の分析などに大いに役立つ。畳み込みの逆問題であれば、 H は循環行列的になる。フーリエ変換の逆問題であれば、 H は \sin/\cos の要素でびっしりと詰まる。観測欠損があれば、横方向に式が抜ける。逆問題の多様性がここにあると言ってもよい。

それでは、(6)式の右辺 $H^T g$ について考えてみよう。転置して縦長になった H^T と短いベクトル g の積は、求める画像 f と同じ次元のベクトルになるから、 $H^T g$ はめざす物体領域 D の一つの画像である。この画像 $H^T g$ の第 n 画素は

$$(H^T g)_n = \sum_{m=1}^M h_{mn} g_m$$

と書ける。 H は転置されているので、 h_{mn} の左の添え字 m (H の列方向)についての和である。項 $h_{mn} g_m$ は、観測値 g_m から第 n 画素への“貢献度 h_{mn} ”に応じた見返りである。すべての観測値からの見返りの和が $(H^T g)_n$ である。結局、画像 $H^T g$ は“各観測値を貢献度に応じて領域 D に再分配”して得られる「ひとまずの画像」である。「ひとまず」と言うからには、この画像がしばしば画像再構成の出発点になる。図4の線積分型 CT であれば、投影値 g_m を視線上の各画素に対して長さ h_{mn} に応じて再分配する。本来のアナログ処理では視線上への一様分配である。この作業をすべての投影値について行くと、 $H^T g$ が得られる。この再分配の作業は“逆投影(back-projection)”と呼ばれる。

この逆投影画像 $H^T g$ がどんな風であるか、大型ヘリカル装置LHDの3次元CT[6,7]における实例を見てみよう。図5のように4台のポロメータを配置してプラズマからの放射を受けたとき、プラズマのヘリカルな周期性・対称性を仮定すれば、トーラス全周の1/20の部分(トロイダル角 18° の区間)にすべての視線を集めた撮像システムに仮想的に変換できる。この困難な作業を乗り越え、かつ、放射受信の物理を考慮して、係数行列 H が評価された。CT

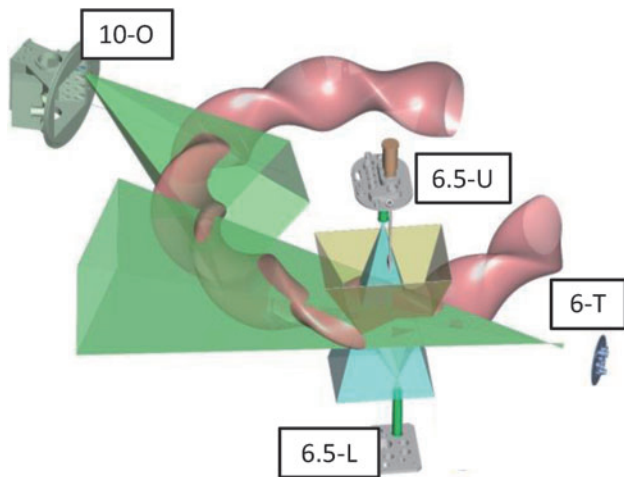


図5 核融合科学研究所の大型ヘリカル装置LHDにおける3次元CTのカメラ配置：ピラミッドビーム型ポロメータ4台を上下(U,L)・外(O)・接線(T)方向からのぞく観測窓に設置[7].

のシミュレーションに用いる原画像 f_0 をファントムと呼ぶが、いま、プラズマの平衡状態における理論画像（図6（上））を f_0 としよう。その投影 Hf_0 を求めると測定誤差のない正確な投影データ g になる。それを再分配して得られる逆投影画像 $H^T(Hf_0)$ を図6（下）に示した。投影値を視線上に再分配したので、視線が集中するところに画像強度が高い。例えば、水平断面 ($\phi=17.5^\circ$) の右端に見られる明るい部分は、ピンホール（扇のかなめ）の近くで視線が集中するためである。相手の物体 f_0 は、同図（上）に示されたように、断面が楕円的で表面が明るいヘリカルな筒である。逆投影画像の歪みを計算で取り除いて、物体画像を正しく復元することが、最小2乗法を採用したときの数理解析の課題になる。この課題を、測定誤差のある環境において、こなさなければならない。

医用CTにおいて、平行ビーム投影を角度欠損なく観測する全周観測であれば、逆投影画像 $H^T g$ はおとなしく等方的にばけた画像になる。そこで、医用CTの標準計算法FBP（Filtered Back-Projection, フィルタ補正逆投影）法はどうするかと言うと、各方向の平行ビーム投影を高周波フィルタに掛けて先に鮮明化してから逆投影したとき、 $H^T g$ が真の画像に近くなるよう高周波フィルタをうまく設計する。小型コンピュータが未発達な時期に、この再構成法がRadon変換の関係式から考案された。電子顕微鏡CTでは、試料の回転角が常に一部欠けるため、 $H^T g$ は一定の特徴ある歪みをもつ。そこで、歪みをよく消すべく高周波フィルタを修正する。この試みをWBP（Weighted Back-Projection）と言う。

電波望遠鏡においては、 $H^T g$ は dirty map と呼ばれる汚い天体画像である。汚くても、アンテナ配置で決まる特別な点広がり関数と天体画像の畳み込みなので、天体画像が点光源の集まりであれば、点光源の候補を見つけては点広がり関数の分だけ差し引いていくと、汚かった画像が結構きれいになる。この方法をクリーン法と呼んでいる。実際的に考えた再構成法である。

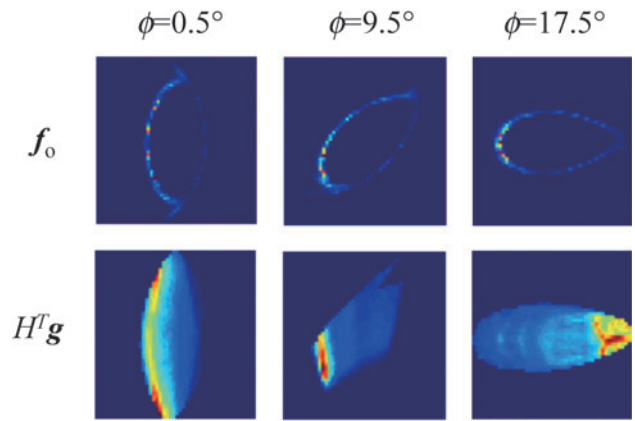


図6 LHDプラズマの（上）理論計算による放射強度分布 f_0 （ファントム）および（下）その逆投影画像 $H^T g$ 。いずれも、3次元画像を3つのトロイダル角 ϕ におけるポロイダル断面像で表示。左がトラス内側[8].

いずれにしろ、 H^T は積分をほどこく方向の g の再分配であり、画像再構成の出発点となる。この理解は非常に役立つ。最小二乗法であれば、簡単な積和計算で再分配画像 $H^T g$ を求めておいて、(6)式を解けばよいのであるが、方程式が解不定ではままたまらない。このことを確認して、本論に入ろう。以下、特に断らなければ $M < N$ （解不定）とし、また、正則化の対象を最小2乗法に限定する。 $M \geq N$ であるが悪条件のとき、また、最小2乗法ではなく(1)式の成立をめざすときも、考え方は基本的に同じである。

2.3 消極的制約から積極的制約へ

2.3.1 一般的な弱い制約（反復解法）

線形方程式 $Hf = g$ を解こうというとき、ガウスやヤコビに始まる線形方程式の反復解法のなかでART（Kaczmarz法）が独特の位置を占めている。Hermanら[9]が直接には電子顕微鏡CTのためにこれを考案したとき、連立方程式の一つの式の残差 $g_m - (Hf)_m$ を見ては更新を進める簡単なアイデアなのに、なぜか高速に収束する。その理由が間もなく分かった。ポーランドの数学者S.Kaczmarzが1937年に重要な証明を行っていた。

ここで一つ注意したいのは、線形方程式を反復法で解くとき、解不定であれば、図7のように初期解 $f^{(0)}$ と更新方法によって収束先が異なることである。ARTは、初期解

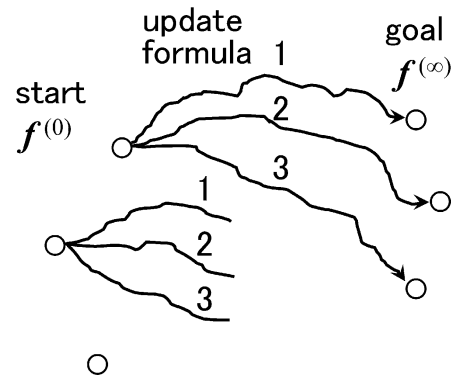


図7 解不定な線形方程式の解更新。

$f^{(0)} = \mathbf{0}$ (画素値がすべて0の一様画像) から出発して、連立方程式のなかの一つの式に注目しては、付録Iのような解更新を行う。Kaczmarzによれば、このとき、各式 $(Hf)_m = g_m$ が表す超平面への垂線の足に最短距離で移行することを繰り返して、 $Hf = g$ の解 f のうちノルム $\|f\|$ 最小 (すなわち $\|f\|^2$ 最小) のものに収束する。 $\|f\|^2$ はベクトル f の成分の2乗和 (全画素値の2乗和) である。ARTのように「係数行列 H の1行」に注目しては解更新を繰り返すのを、一般に Row-action 型反復と言う。並列処理に利用できる可能性がある [10]。

ARTは核融合研究においても、慣性核融合の3次元放射型CTなどに早くから使われた。最近では補償光学望遠鏡において、大気乱流の実時間CTにからむ高速計算研究に取り上げられている [11]。物体の時間発展を追跡するとき、直前の時刻における再構成画像を初期解 $f^{(0)}$ に用いれば計算量は下がるが、Kaczmarz 定理が初期解 $f^{(0)} = \mathbf{0}$ を前提とするからには、あくまでも「やってみて十分良ければ」のアイデアである。また、求める画像が本来的に非負値のとき、反復解法では一般に、解の更新において負値が出れば0に置き換える操作を挿入できる。これも、収束性が大きく損なわれない限りでの便宜的な操作である。大きな負値が出ては0と置き直すいたずらな繰り返しに落ち込んで、不自然な画像に終われば失敗である。

最小2乗法に移ろう。SIRT [9]は、正規方程式 (6) において、すべての式の残差 $H^T(g - Hf^{(k)})$ を同時に考慮して、

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \rho H^T(g - Hf^{(k)}) \quad (7)$$

のタイプの解更新を行う (付録I)。 $\rho (> 0)$ は緩和係数である。もはや Row-action ではなく、また、ARTの更新方向を平均化した方向への更新になる。電子顕微鏡CTでは現在でも、ARTとともに標準的な解法として使われている。初期解と緩和係数 ρ が適切であれば、 $\|f\|$ ないしその変形 (重み付きノルム) を最小化する解に収束する。

ART, SIRT どちらにしても、逆問題を表わす元の線形方程式あるいは正規方程式について、試みの解 (再構成画像) を想定しては順方向計算で残差を求め、残差が減少する方向に解を更新する。この操作をうまく繰り返したとき、結果的に、ノルム最小の再構成画像に到達する。

2.3.2 一般的な弱い制約 (直接解法)

反復解法は、非線形問題を含めて何にでも使えるので便利のように見えるが、不明瞭なものが残る。再構成画像が反復回数やパラメータ設定によって微妙に変わるし、収束しないこともある。計算1回ですばりと直接に解が得られるのであれば、その方がよい。

(5)式の線形方程式 $Hf = g$ において、画素数 N を観測値数 M にまで下げて係数行列 H を正方行列にすれば、逆行列 H^{-1} を用いて $f = H^{-1}g$ が解である。測定誤差も含めて g に忠実な解である。しかし、画素数をまっとうに多くすれば、 H は横に長いので逆行列は存在しない。そこで、行列 H を正規直交展開して無意味な先を切り捨て、縦長の“逆行列” H^\dagger をつくって

$$f = H^\dagger g \quad (8)$$

を解とする。この H^\dagger を一般逆行列と言う。“行列の正規直交展開”と書いたのは、特異値分解 (SVD) のことである。(8)式において、短い M 次元ベクトル g を長い N 次元ベクトル f に変換するからには、 H^\dagger は縦に長い $N \times M$ 行列である。特異値分解がなされた上は、(8)式の行列計算1回だけで直接に解が求まる。こうして得られる画像 f は、正規方程式 (6) の解のうち $\|f\|^2$ 最小のものである [4]。SVD および H^\dagger の内容については、付録IIおよび付録 (IV-8) 式を参照されたい。

2.3.3 制約の強めと調整 (制約付きの最小化)

以上の逆問題解法では、式不足で解不定な線形方程式に対して、結果的に、言わば消極的にノルム最小の解が得られる。これに対して、観測データと合理的に一致することを要求しつつ、始めからノルム最小化を制約として与え、制約に付ける重みを調整する積極策がある。「合理的な一致」を最小2乗当てはめ (fitting) の意味に捉えるとき、Tikhonov 正則化が逆問題の標準解法とも言える地位を占める。

Tikhonov 正則化は、「残差2乗和 $\|Hf - g\|^2$ がある値に等しい」を要求して、この制約のもとにノルム2乗 $\|f\|^2$ が最小になる f を解とする。そのためには、ラグランジュ関数

$$\Lambda(f) = \alpha \|Cf\|^2 + \|Hf - g\|^2 \quad (9)$$

を f に関して最小化すればよい (付録III)。ここで、 C はあとの発展を考えて導入した演算子 (正方行列) で、ひとまず $C = I$ (単位行列) とする。逆問題ではこのように、未定乗数 $\alpha (> 0)$ を第1項に付ける習慣で、 α を正則化パラメータと言う。 f の関数 $\|Cf\|^2$ はペナルティ関数と呼ばれる。

(9)式の $\Lambda(f)$ は凸関数 (下に凸) であり、 $\Lambda(f)$ を最小にする f が存在する。(6)式の導出と同様に、 $\Lambda(f)$ を f の各成分で微分して0と置けば、関係式

$$(\alpha C^T C + H^T H)f = H^T g \quad (10)$$

が得られる。 $C = I$ であれば、 $C^T C = I$ である。(6)式と比較すれば、(10)式は“拡張された正規方程式”である。この解は、 $\alpha C^T C$ が入ったせいで今度は逆行列が存在して

$$f = (\alpha C^T C + H^T H)^{-1} H^T g \quad (11)$$

と書ける。逆行列 $(\alpha C^T C + H^T H)^{-1}$ が、再分配画像 $H^T g$ の歪みやぼけをうまく取り除く演算子になれば成功である。

ここで、(11)式の f を f_T と書こう。いま、 $H C^{-1}$ を特異値分解 (SVD) して生成される特異値 $\{\sigma_m\}$ および2つの正規直交系 $\{u_m\}, \{v_m\}$ を用いると、 f_T は美しい有限級数に書ける [2]。

$$f_T = \sum_{m=1}^M w_m(\alpha) \frac{(g, u_m)}{\sigma_m} C^{-1} v_m, \quad (12)$$

$$w_m(\alpha) = \frac{1}{1 + \alpha/\sigma_m^2} \tag{12'}$$

ここで、 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m)$ は \mathbf{g} と \mathbf{u}_m の内積である。この式は、よく知られた「畳み込みに対するフーリエ変換の解」に対応させて理解できる。どういう意味かと言うと、 $w_m(\alpha) (\mathbf{g}, \mathbf{u}_m) / \sigma_m$ はスカラーだから、右辺はこれを係数とする画像 $C^{-1}\mathbf{v}_m$ の重ね合わせ（線形和）になっている。ということは、 $\{\mathbf{u}_m\}$ 、 $\{C^{-1}\mathbf{v}_m\}$ はそれぞれ観測データ \mathbf{g} と画像 \mathbf{f} の基底系で、 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m) / \sigma_m$ はフーリエ空間における解に対応する。SVDで生成された新しい空間をここで“特異空間”と呼ぶとすれば、 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m) / \sigma_m$ は特異空間における解であり、(12)式の右辺は特異空間から実空間への逆変換ではないか。特異値 σ_m を降順 ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_M$) に並べると、経験的に、 m の増加とともに基底 $C^{-1}\mathbf{v}_m$ 、 \mathbf{u}_m は低周波から高周波に変わる。このとき、 $w_m(\alpha)$ は“周波数番号” m の関数として減少するから、 $w_m(\alpha)$ は高周波成分を削り落とす低域フィルタの役割を果たす。 $C=I$ であれば $\{C^{-1}\mathbf{v}_m\}$ も正規直交系である。このようなフーリエ変換的な解が“任意の線形逆問題”について見つかったのだから素晴らしい。

それでは、再構成画像 \mathbf{f}_T を構成する基底 $C^{-1}\mathbf{v}_m$ がどんな画像かを見ておこう。实例を図8に示した。低周波から高周波に変化するこれら基底の画像に、係数 $w_m(\alpha) (\mathbf{g}, \mathbf{u}_m) / \sigma_m$ を付けて重ね合わせると \mathbf{f}_T になる。正值（黄）から負値（青）の間を振れているから、これらを重ね合わせた画像 \mathbf{f}_T は負値を取り得る。また、係数のなかの内積 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m)$ は正負になり得る。この係数が付いた基底画像の正負値がうまく重なり合って、非負値のプラズマ画像を求めるとき、負値がほとんど出なければ成功である。

さて、 $w_m(\alpha)$ に注目して、(12)式の級数展開が方程式の悪条件にいかに対抗するか、实例を見て考えよう。 $C=I$ として、図5、6の3次元CTに適用したとき、展開係数の様子を図9に、再構成された画像 \mathbf{f}_T を図10に示した。図9(上)を見ると、特異値 σ_m は $m=2,800$ あたりから大きく落

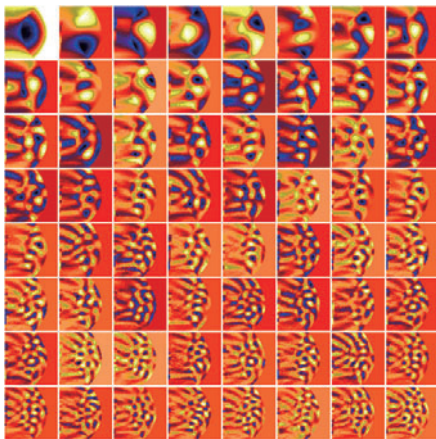


図8 基底画像の实例：プリントン大学球状トカマク NSTX 装置の接線方向からの2次元CT。 $C^{-1}\mathbf{v}_m (m=1, 2, \dots, 64)$ を左上から右下へ辞書的に表示。 C にラプラシアン演算子を使用。

ちて、悪条件の強さを表わす条件数（最大特異値 σ_1 と最小特異値 σ_M の比）が 10^{19} と非常に大きい。投影データ \mathbf{g} に白色雑音を加えているので、 \mathbf{g} のスペクトル係数 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m)$ は同図(中)のように $m > 2,000$ の高周波域では雑音が支配的で、絶対値のレベルはほぼ一定である。これを大幅に小さくなった σ_m で割ったのが特異空間の解だから、この高周波域において雑音増幅が大きく起こる。分子 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m)$ と分母 σ_m とどちらが速く減衰するか、その競争関係で雑音増幅の強い弱いが決まる。この实例では、何もしなければ再構成画像は破壊されるだろう。しかし幸いなことに、このとき図9(上)のように、 w_m が σ_m に負けずに落ちるので、逆変換のスペクトル係数は図9(下)のように周波数の増加とともにおとなしく減衰する。その結果、再構成画像 \mathbf{f}_T は図10のように一応の姿に落ち着く。

信号処理では、この種の w_m を周波数窓 (window) と呼ぶことがある。(12')式において、 $w_m(\alpha)$ の分母を見ればわかるように、正則化パラメータ $\alpha (> 0)$ を増加させるほど削り落としは強まる。 α を増加させると、そもそも(9)式のラグランジュ関数 $\Lambda(\mathbf{f})$ の最小化において第1項に重きが置かれるから、残差2乗和 $\|H\mathbf{f}(\alpha) - \mathbf{g}\|^2$ の大きい解（雑音を含むデータ \mathbf{g} から離れた解）が得られるだろう。この直感的な理解は、 $w_m(\alpha)$ による削り取りが強まることで説明できる（付録IV）。 α を減少させれば逆である。Tikhonov 正則化の定式化において「残差2乗和がある値に等しい」ことを要求したが、 α 値の調整はこの「ある値」の調整である。 α 値の選択には、最小GCV規準が有効である。GCV (Generalized Cross Validation) は \mathbf{f}_T の \mathbf{g} への近接度（忠実さ）を予測理論的に評価する統計学的な量である[3]。

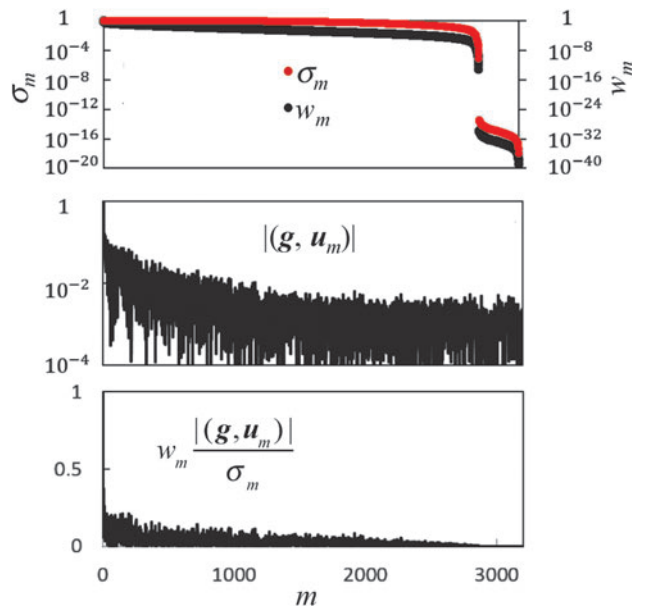


図9 LHDの3次元CT ($M=3,196$, $N=16,188$) のための数値シミュレーション。Tikhonov 解の(上)特異値 σ_m と Tikhonov 窓 w_m 、(中) 投影データのスペクトル係数 $(\mathbf{g}, \mathbf{u}_m)$ 、(下) 再構成画像 \mathbf{f}_T のスペクトル係数。最初の番号 $m=1$ での値を1に規格化した相対表示。GCV 最小の α 値を採用[7]。

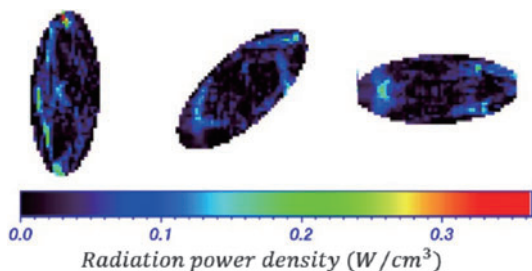


図10 図9(下)のスペクトル係数から得られるLHDプラズマの3次元再構成画像 f_T : 図6と同じトロイダル角 ϕ におけるポロイダル断面像で表示. 負値は黒の底打ちで表示[6].

図10の再構成画像を図6(下)の逆投影画像 $H^T g$ と比べると、逆演算 $(aI + H^T H)^{-1}$ を施した結果、エッジ領域に強い放射をもつ理論画像に近づいている。ノルム2乗 $\|f\|^2$ の最小化だけでは正則化が弱く、正負に振動するアーチファクトが再構成画像に残るが、それでも、放射崩壊がトラス内側から成長し、赤外線放射分布が中央部に集まる崩壊の過程が実験的に観察された。難関を乗り越えて得られた最初の3次元CTである。

雑音増幅を高周波域の削り落としで対抗するという思想は、Wienerフィルタに始まる逆問題の基本である。Wienerフィルタにおけるフーリエ基底系がSVDで生成される基底系に変わったと思えばよい。

ここで一つ補足しよう。以上のように、Tikhonov解における正則化が $w(a)$ による高周波成分の削り取りであるからには、 $w(a)$ をステップ関数 $w_m = 1 (1 \leq m \leq M_C), = 0 (M_C < m \leq M)$ にして切り落としとしても、実用的に良いかも知れない。これを Truncated SVD (TSVD) 法と言う。

$$f_{TSVD} = \sum_{m=1}^{M_C} \frac{(g, u_m)}{\sigma_m} v_m \quad (13)$$

このとき、正則化のパラメータは項数 M_C である。 M_C を特異値が0に落ちる直前の番号にしたのが、実は(8)式の一般逆行列の解である(付録IV)。また、微分演算子 C を用いるときへの拡張が太陽観測のために着想され、数的に検討された[14]。最近の核融合研究では、磁気センサーの信号から磁場および渦電流の空間分布を推定するのにTSVD法が用いられ、最適な打ち切り項数 M_C が実験的に探られている[15]。

TSVD法は(13)式のように最初の M_C 個の項だけを用いるが、“係数行列 H の特異値分解(SVD)”は、基底・特異値のすべてを求めなければならない。もしも、SVDの代わりにQR分解を使えば、使用する最初の M_C 個だけを計算する本当の打ち切りになるので、 H が変化し、 H の分解を何度も行うときには効率的である。ただし、再構成に用いる基底系がSVDによる基底系とは異なる[16]。

2.3.4 物理情報としての滑らかさの制約

ここで、逆問題の原点に戻ろう。線形方程式は解不定であった。解一意化の制約「ノルム2乗 $\|f\|^2$ (画素値2乗和) 最小」は、数学的に好都合であるし、これくらいなら一般性がある許されよう、という程度の理解であろう。しか

し、Tikhonov正則化の重要な観点は、解に対する制約を積極的に取り込むことであった。そこで、画像が滑らかなとき、画像の各点で空間微分を取る演算子 C [17] を用いて、画像全体にわたる2乗和 $\|Cf\|^2$ が最小になるものを採用する。 C を実際の計算に取り込んだD.L.Phillipsの名を冠して呼ぶこともある[2, 3]。

(9)式のラグランジュ関数からすると、考えを切り替えて、「画像の滑らかさの評価 $\|Cf\|^2$ がある値に等しい」とき、 $\|Hf - g\|^2$ 最小の f (観測データ g に最も忠実な画像 f) を採用する」と考えても同じである。 $C = I$ に戻ると、望遠鏡画像であればノルム2乗 $\|f\|^2$ (全光量) がある値としたとき、 $\|Hf - g\|^2$ 最小の画像 f を求めると考えると、物理的に理解しやすい。

それはともかく、線積分型CTにおいて C にラプラシアン演算子を使うと、特に基底 $C^{-1}v_m$ が著しく滑らかになって、滑らかなプラズマ画像の再構成に非常に有利になる。雑音や観測欠損に対して大幅に強くなる。ただし、空間分解能は落ちる傾向になる[6]。この演算子 C の導入だけでなく、Tikhonov型の正則化は工夫次第で色々変形できる。線形であるだけに変形は容易である。例えば、最大エントロピー法の空間分解能を上げるためのPreblur[18]を取り込みたければ、 $f = H_{MA} f'$ (H_{MA} : 移動平均の演算子) を(9)式に代入して、 f' について解けばよい。分解能を上げる領域を指定すべく、行列 H_{MA} の要素を工夫する余地もある。

ラプラシアン演算子 C を用いた再構成の一例を図11, 12に示す。図11(上)のように、LHDプラズマをトラス接線方向から望遠鏡でのぞいて、視線に沿って積分された2次元画像を得るとき、1ポロイダル断面での放射強度分布を計算で復元する。プラズマがトロイダル方向にヘリカルな周期性を持つと仮定すると、1つの視線(直線の積分路)は1ポロイダル断面上の曲がった積分路と等価になる。ある高ベータ値のプラズマ平衡状態に対して、理論計算で得

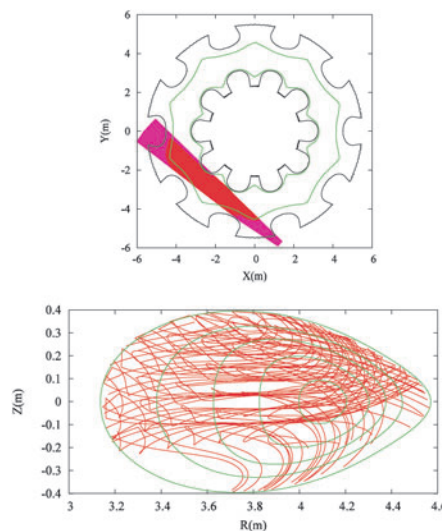


図11 LHDプラズマの接線方向CT: 真空紫外線望遠鏡の(上)実空間および(下)ポロイダル断面に射影された視線配置。緑線は磁気面を表す[19]。

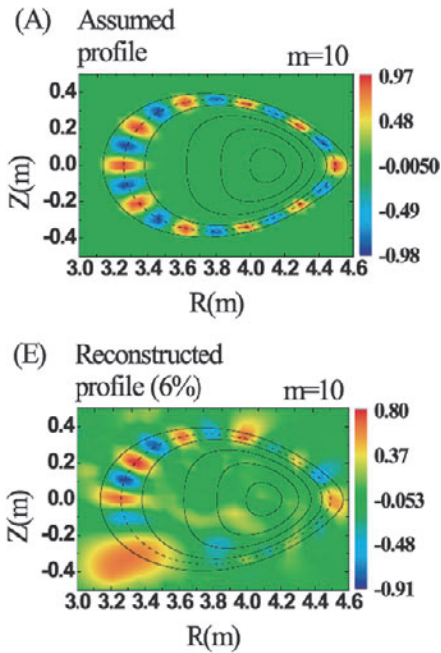


図12 LHD プラズマ揺動の(上)ファントム, (下)6%の雑音を加えた投影データから得た再構成画像. 揺動だから負値がある. 図中の m はポロイダルモード数[19].

られた視線の配置を図11(下)に示す. 結局, この平面において, この曲がった視線パターンによる投影データから2次元画像を再構成するCTと等価になる. 数値シミュレーションを行った一つの結果を図12に示す. 磁気面に沿った方向に10周期の揺らぎを想定したファントム, および, (12)式で得られた再構成画像である. $M > N$ (データ多数)に設定されているが, 交差する積分路のない下部領域で再構成がうまくいかない. 正則化項を $C^T C$ と画面全体に一律に与えた再構成法の限界である. それでも, 磁場容器に形があり理論計算が進歩した“最近の核融合研究ならでは”の特徴ある画像の逆問題である.

ここで, トーラス接線方向からのプラズマ撮像について一つ補足すると, Nguyen van yen ら[20]は, トカマクの接線方向から得た普通の可視光カメラ画像に対して, Wavelet-Vaguelette 多重度解析を用いて, $M = N$ で観測欠損のない画像再生的な復元を行っている.

さて, Tikhonov 型の正則化について, 核融合研究における最近の前進は一般特異値分解 (GSVD) の導入である. 微分演算子 C を用いるとき, 従来の解法は HC^{-1} を特異値分解する. C^{-1} は C の逆行列である. しかし微分演算の行列 C は線形方程式 $Cx = c$ (c は定数ベクトル) が悪条件であるという意味で扱いにくい行列である. 画素数が多くなると, C^{-1} が求まらなくなる. コレスキー分解を利用して難を避ける手だてもあるが[6], GSVD はもう一つの可能性を与える.

いま, (9)式のラグランジュ関数を

$$\Lambda(f) = \|\alpha^{1/2} Cf - \mathbf{0}\|^2 + \|Hf - \mathbf{g}\|^2 \quad (14)$$

と書けば, $\alpha^{1/2} C$ と H , $\mathbf{0}$ と \mathbf{g} が対等の位置を占める. GSVD は, このようなノルム2乗和のために, H および C に対称

性ある分解を行う. P.C. Hansen[21, 22]はGSVDを逆問題に取り込むとともに, α 値を最適化する方法(L-curve)を考案した. 前述のように, α は $\Lambda(f)$ の左右の項のバランスを調整するパラメータである. その α 値を変えて再構成像 f_T を求めたとき, $\ln\|Cf_T\|^2$ と $\ln\|Hf_T - \mathbf{g}\|^2$ を縦軸・横軸に取ってグラフをつくると, L字形の曲線になる. その折れ曲がり点の α 値が最適とする理論である. 赤池情報量規準 (AIC) や GCV と同様に, 数理解析の良さを“残差を見て判断せよ”という考えである. なお, G. Wahba は(9)式の第2項に係数 $1/M$ を付けて GCV を導いた. Hansen が再定義した GCV は, Wahba の GCV の M 倍になることに注意されたい.

核融合研究において, GSVD がトーラス接線方向[23]ならびにポロイダル断面内の2方向[24]に設置されたピンホールカメラによるCT撮像に使用された. HC^{-1} の特異値分解とは用いる基底系が異なるが, 最小化するラグランジュ関数は同じであるから, 正則化パラメータ α が同じ値であれば再構成画像は同じである. GSVD 自体はすでに, 電子サイクロトロン加熱に係わる多チャンネル信号の分析に巧みに使われたことがある[25]. GSVD については, 本講座の第3章で詳しく扱われる.

以上, 2.3.2節の一般逆行列から本節のGSVDにいたる直接解法では, 解 f は観測データ \mathbf{g} に関して線形である. したがって, f の成分は負値を取り得るので, 本来的に非負の画像には不利であるが, 観測系の弱点が正直に現れるので装置の設定・較正 (すなわち H と \mathbf{g} に弱点があるときの補正) において便利でもある. また, ひとたび行列分解をしてしまえば, \mathbf{g} の交換に対して計算は高速である.

2.3.5 非線形な制約 (値・位置・滑らかさの制約)

放射強度の空間分布のように, 画像が物理的に非負であれば, 方程式の解にそのような制約を加えた方がよい. 一般には画素値の上下限がわかっていることもあり得る. このような制約を加えると, 最小2乗問題は非線形になり, 計算は反復アルゴリズムにならざるを得ない.

Hopfield ニューラルネット法[26]は, (9)式の $\Lambda(f)$ に対して, 解更新するなかで負になった画素値 f_n を正值に押し上げる非線形な単調増加関数を計算のなかにひそませる. ニューラルネットでは普通, ニューロン出力値 (画素値) に上界のある sigmoid 関数を用いるが, 正值制約だけのときは馬・竹田[27]が導入した skimmer 関数の方が合理的である.

Hopfield 再構成の実例を図13に示す. 電子顕微鏡CTは平行ビームカメラによる線積分型CTであるが, 試料回転の都合から平行ビームの方向角に $\pm 20^\circ$ ほどの欠損がある. 図13の上段において, 画面全体にわたって電子線が水平方向に欠けている. 逆投影 $H^T \mathbf{g}$ の再分配がこの方向に欠ける結果, SIRTの再構成では円環が歪み, 円環の外側に向けて扇状にアーチファクトが広がる. 2.2.4節のWBP法で述べた「一定の特徴ある歪み」の現れである. Hopfield法の再構成ではこれが大幅に消えて, 分解能も上がっている. 解不定な正規方程式に対して, ノルム最小の解が結果的・消極的に得られるSIRTに対して, 滑らかさの制約を積極

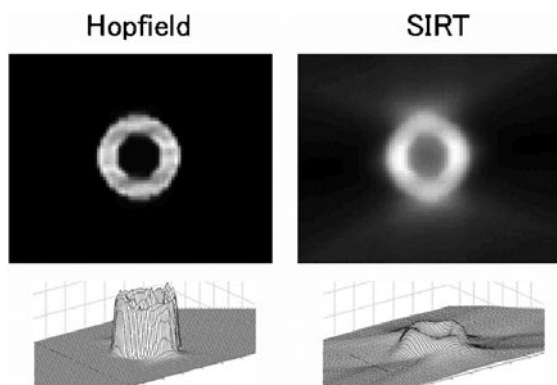


図13 電子顕微鏡 CT の投影角欠損を想定した2次元再構成の数値シミュレーション(ファントムは円環): SIRT法とHopfield法の再構成画像(平面表示と立体表示)[28].

的に与えつつ正值化を加えた著しい効果である。ここでは、投影データに雑音を加えない場合の結果を示した。レーザーを使った位相トモグラフィ[29]にも電子顕微鏡CTと同じタイプの観測欠損がある。

一方、最大エントロピー法(MEM)は、(9)式の $\Lambda(\mathbf{f})$ において、第1項の $\|\mathbf{Cf}\|^2$ を対数のはいいた非線形関数に置き換えて次式とし、画素値 f_n を正值化する。

$$\Lambda(\mathbf{f}) = \alpha \sum_{n=1}^N f_n \ln f_n + \|\mathbf{Hf} - \mathbf{g}\|^2 \quad (15)$$

言わば、負エントロピーの最小化である。Tikhonov正則化との関係を見るために、(15)式の $\Lambda(\mathbf{f})$ を \mathbf{f} の各成分で微分して0と置くと、

$$\frac{1}{2}\alpha \begin{bmatrix} 1 + \ln f_1 \\ \vdots \\ 1 + \ln f_N \end{bmatrix} + \mathbf{H}^T \mathbf{Hf} = \mathbf{H}^T \mathbf{g}$$

となる。 $C=I$ のときの(10)式と比較されたい。この等式を満たす f を求めるために、ニュートン法を素直に適用し、初期解 $\mathbf{f}^{(0)}$ を値1の一様画像とすると、次の解 $\mathbf{f}^{(1)}$ は

$$\mathbf{f}^{(1)} = \left(\frac{1}{2}\alpha \mathbf{I} + \mathbf{H}^T \mathbf{H} \right)^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{g}$$

となる。これは、正則化パラメータを $\alpha/2$ としたときのTikhonov解($C=I$)である。 $\mathbf{f}^{(0)}$ の値がネイピア数 e であれば $1/2$ は消えるので、Tikhonov解であることが重要である。値1(または e)が求める画像の平均値からいかに離れていようと、次の反復解はTikhonov解になる。画像の負値を消す作業がここから始まる[30]。この最小化計算において、変数の数 N (画素数)をデータ数 M ($\ll N$)に減らして解を求める効率的なニュートン法手順が、核融合研究において考案された。また、最小GCV規準の拡張も試みられた。GCVの分母に含まれる影響(influence)行列に再構成画像を入れる近似である[3]。

なお、Hopfield法にしろMEMにしろ $\Lambda(\mathbf{f})$ 最小の解は一意になっているから、図7とは違って、初期解の与え方は局所最小の問題を除いて重要でなくなる。

ここで一つ注意しよう。このように非負値制約を加えたとき、単に負の画素値が0に押し上がるだけではない。線積分型CTであれば、積分路に沿った画素値の和が観測値にうまく一致する画像を求める。したがって、正の観測値に対して、正負値の和が一致した画像と比べると、非負値だけの和が観測値に一致する画像は大きな正値も消える。明暗の振れ幅が減って、画像全体が落ちつく。画像の再構成に大局的な変化が起こる。

もう一つ注意すると、ノルム2乗 $\|\mathbf{f}\|^2$ やエントロピーによる正則化は、隣接する画素値のあいだの変化率を考慮していない。 $\|\mathbf{f}\|^2$ (f_n の2乗和)にしろ(15)式の第1項にしろ、画面全体にわたる画素値の総和的な量に過ぎない。「平均値からの変動が少ないほど関数が小さい」という凸関数の性質(Jensen不等式)に頼っている。そのため、 $C=I$ のTikhonov正則化とMEMは、正值制約の効果を除けば、正則化の程度(分解能と信頼度)に大して差はない。 $\|\mathbf{f}\|^2$ 最小は、画面全体にわたる「画素値の分散」最小に近いように思われる。

これに対して、微分演算子 C を用いた $\|\mathbf{Cf}\|^2$ 最小化は、隣接画素の変化を直接に評価するので、正則化は強い。核融合研究では、この正則化項をさらに

$$\frac{[\text{画像 } f(\mathbf{r}) \text{ の空間微分}]^2}{f(\mathbf{r})}$$

の空間積分に置き換える手法が線積分型CTのために考案され、関数の形式的な対応から“フィッシャー情報量の最小化”と呼ばれる[3]。プラズマのCT撮像では、プラズマ中心から離れた周辺部で積分路が少なく、強い正則化が必要になる。そして、その領域でおとなしく $f(\mathbf{r}) \cong 0$ となるのであれば、これを正則化項の分母に取り込んで、周辺領域で解の抑えを強化できる。分母に $f(\mathbf{r})$ が入ってラグランジュ関数は非線形になるので、求解は反復アルゴリズムになり、解更新のなかに便宜的な正值化の手だてを挿入できる。

トカマク装置において、Odstrcilら[31]は上式における $f(\mathbf{r})$ の微分(gradient)を磁気面に沿う方向に設定する試みを行った。Gaoら[32]は微分をラプラシアンに拡張するとともに、MEMにおけるのと同様な近似GCVを導入して α 値の最適化を行った。

2.3.6 モデル関数の強い制約

もしも求める画像がある型の関数になっていると見できれば、その知識を持ち込むに越したことはない。その関数(関数モデル)の線形変換が観測データにうまく最小2乗近似するよう、モデルの未知パラメータを決定すればよい[33]。そうすることで、多数の画素値を未知数とする悪条件な線形方程式が、少数のパラメータを未知数とする小規模な問題に変わり、良条件で解ける可能性がある。

馬・竹田[27]はニューラルネット(多層パーセプトロン)を使って、人工衛星による電離層の透過型CTに画期的な成功を得たが、この方法も本質的にある種の非線形な級数モデル当てはめになっている[34, 35]。地表に平行な積分路を欠いた観測条件において、どのような基底の重ね

合わせかという観点の分析があってよいように思われる。

さて、“線形な逆問題”の線形性を維持する関数モデルの代表は、係数を未知パラメータとする級数展開である。いま、求める物体の画像 $f(\mathbf{r}')$ を基底 $b_n(\mathbf{r}')$ の重ね合わせ

$$f(\mathbf{r}') = \sum_{n=1}^{N_B} a_n b_n(\mathbf{r}') \quad (16)$$

で表わしたとする。 a_n は展開係数、 N_B は項数である。この級数表現を(1)式の $f(\mathbf{r}')$ に代入すれば、

$$g(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_B} a_n B_n(\mathbf{r}), B_n(\mathbf{r}) = \int_D h(\mathbf{r}, \mathbf{r}') b_n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (17)$$

となる。これは観測量 $g(\mathbf{r})$ の級数展開であり、 $b_n(\mathbf{r}')$ の線形変換 $B_n(\mathbf{r})$ が基底になっている。線積分型 CT では、基底 $b_n(\mathbf{r}')$ の投影 $B_n(\mathbf{r})$ が投影の基底になる。そして、ありがたいことに、係数 a_n は $f(\mathbf{r}')$ と $g(\mathbf{r})$ の両者に共通である。この便利な関係を使うと、画像の再構成は簡単である。(17)式の級数が観測データにうまく合うように a_n ($n = 1, 2, \dots, N_B$) を決めたら、(16)式に用いて画像 $f(\mathbf{r}')$ が求まる。離散化した計算でも同じである。物体画像に適した基底系を使えば項数 N_B が小さくて済むから、 a_n を決める正規方程式は小規模になる。

線積分型 CT の Cormack 級数展開は、 $\{b_n(\mathbf{r}')\}, \{B_n(\mathbf{r})\}$ とともに直交基底系であることで知られる。基底系が完備であれば「どんな画像でも項数を増やせば」という一般性のある強さが得られるが、どうせ有限な項数 N_B で打ち切るから、実のところ、完備性は本当には必要でない。

線積分型 CT では、基底の台 (support) が広く、かつ、少ない項数で済むのであれば、級数展開法はまとまった観測欠損に際立って強い。核融合の磁場閉じ込め研究において、ピンホールカメラがわずかに 2~3 方向の限られた観測では、標準解法の FBP 法は見るからに使いえないし、ART では正則化が弱すぎてアーチファクトに悩まされる。観測の精度からして最小 2 乗法の導入は当然として、どうしたらよいか？ これがプラズマ CT 計測の出発点であった。そして、プラズマの周辺部で 0 に減衰するフーリエ・ベッセル展開が採用され、AIC による最適化が先進的に導入された[36]。基底の様子が文献[3]に図示されている。

定義域が円の基底系を用いると、プラズマ領域が非円形するとき、それを覆うだけの円を画像領域とすれば、項数 N_B が増える。そのために正規方程式が悪条件になれば、正規方程式に Tikhonov 正則化を加えるのもよい。しかし、もっと有効と思えるのは、磁気面座標の空間で再構成することであろう。このとき、実空間で直線の積分路が、再構成を行う空間において曲線になる。図11 (下) のようなものである。断面が非円形だからと言って、直交 2 方向カメラだけの撮像において、画素値をそのまま未知数とする風潮には疑問を感じる。

また、(4)式のように積分を積和で近似するとき、画素値が等しいことが自明な画素を一つに合体すれば、未知数の数が減り、すべての解法において有利になる。特に磁気面に沿って画素値が一定とみなして良ければ、画像再構成

は 1 次元問題に帰着する。関数モデルの当てはめに匹敵する解への強い制約である。

なお、電子顕微鏡の単粒子解析 (ウイルス粒子 1 個の CT 再構成) において、粒子の投影画像を集める労力を減らすために、粒子の 3 次元構造を表わす球ベッセル展開が使われている。項数は 1,000 前後で、投影像の SN 比は低い。老舗の核融合系にとって注目に値するが、AIC がなぜか使われていない[37]。

2.4 新しい制約がもたらす可能性

2.4.1 参照画像との距離最小化

核融合装置のプラズマについて、近年は理論シミュレーションが著しく進歩した。画像はほぼこれくらいだという見通しがあれば、その知識を解の制約に取り込みたいものである。一つの方法として、未知画像と理論画像の距離を考え、観測データに対して “ $\|Hf - g\|^2 = \text{ある値}$ ” という条件のもとに、距離最小の解を採用しよう。参照すべきものという意味で理論画像を \mathbf{f}_{ref} と書き、距離にあたるものを $d(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}})$ とすると、ラグランジュ関数は

$$\Lambda(\mathbf{f}) = \alpha d(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}}) + \|H\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 \quad (18)$$

となる。理論に引っ張られ過ぎないように、 α 値をうまく調整する。理論画像にぼかしの幅を持たせるとか、1 ビット画像に変換して \mathbf{f}_{ref} にするのも一案であろう。 $d(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}})$ として、ユークリッド距離の 2 乗

$$d_E(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}}) = \|C(\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}})\|^2, C = I \quad (19)$$

とか Kullback-Leibler (KL) 距離

$$d_{\text{KL}}(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}}) = \sum_{n=1}^N f_n \ln \frac{f_n}{e f_{\text{ref},n}} \quad (19')$$

とかを思いつく。分母に e を入れたのは、 $\mathbf{f} = \mathbf{f}_{\text{ref}}$ のとき $d_{\text{KL}}(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}})$ を最小にするためである。

(19)式の $d_E(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{ref}})$ を用いるとき、 $\Lambda(\mathbf{f})$ 最小の解は Tikhonov 解の簡単な拡張になる。演算子 C を付けた表現を書けば、

$$\mathbf{f}_T = (\alpha C^T C + H^T H)^{-1} H^T (\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{ref}}) + \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (20)$$

が解となる (付録 V)。 $\mathbf{f}_{\text{ref}} = \mathbf{0}$ と置けば、上式は(11)式に帰着する。ここで、 $H\mathbf{f}_{\text{ref}}$ は参照画像 \mathbf{f}_{ref} の観測量 (線積分型 CT であれば投影像) であることに注意しよう。(20)式は、これを差し引いた観測データ $\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{ref}}$ から再構成を行い、得られた画像に \mathbf{f}_{ref} を加えればよいことを意味する。ということは、(12)式に照らして、ただちに次の級数表現が得られる。

$$\mathbf{f}_T = \sum_{m=1}^M w(\alpha) \frac{(\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{ref}}, \mathbf{u}_m)}{\sigma_m} C^{-1} \mathbf{v}_m + \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (21)$$

ここで、 HC^{-1} の特異値分解と $w(\alpha)$ は(12)式と同じである。GCV の表式も変わらない。 C に微分演算子を用いてもよい。GSVD および Hopfield 法に \mathbf{f}_{ref} を入れる拡張も、同じように考えればよい。

他方、(19')式のKL距離 $d_{KL}(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{ref})$ は、エントロピーから相互エントロピーへの拡張に相当する。 \mathbf{f}_{ref} を $f_{ref,n} = 1/e$ ($n = 1, 2, \dots, N$) の一様画像とすればMEMに帰着する。核融合研究では、JT60-Uトカマクにおいて、ELM雑音でデータ欠損の生じたフーリエ分光（1次元フーリエ逆問題）で効果を上げた[30]。CT撮像についても文献[18]で試されているが、当時と比べて理論計算は著しく進歩した。距離の取り込みは、観測の制限から起こる情報の不足を理論で補うための有望な方法のように思われる。

また、電波望遠鏡の画像再構成において、MEMが高い分解能や広がった天体のための良い特性があるものの、再構成画像の信頼性（安定性）においてクリーン法に及ばないとされて久しい。とすれば、クリーン法の再構成画像を \mathbf{f}_{ref} とするのとも一案であろう。

2.4.2 最尤推定

ものごとの理解を統計学に拡張しよう。ある観測データ \mathbf{g} が得られたとき、生起確率最大のものが得られたと考えてみる。フィッシャーが考案した最尤推定である。画像逆問題について考えてみよう。未知画像が \mathbf{f} であるという条件のもとで、 $H\mathbf{f}$ の各成分に対して、例えば互いに独立な正規性の測定誤差が加わって \mathbf{g} が生起したとする。誤差の平均値を0、分散を σ^2 とすると、その条件付き確率は

$$P(\mathbf{g}|\mathbf{f}) = \prod_{m=1}^M \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{[g_m - (H\mathbf{f})_m]^2}{2\sigma^2}\right] \\ = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{g} - H\mathbf{f}\|^2\right] \quad (22)$$

と書ける。これを尤度 (likelihood) と言う。両辺の対数を取って、得られた観測データ \mathbf{g} を固定して $\ln P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ を最大にする \mathbf{f} は何かと考えると、 $\|H\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$ の最小化すなわち最小2乗法に帰着する。

計数測定であれば、カウント数 g_m が期待値 $(H\mathbf{f})_m$ のポアソン分布に従うと考えると、条件付き確率は

$$P(\mathbf{g}|\mathbf{f}) = \prod_{m=1}^M \frac{1}{g_m!} [(H\mathbf{f})_m]^{g_m} \exp[-(H\mathbf{f})_m] \quad (23)$$

となる。この対数の最大化は

$$\Phi_{ML}(\mathbf{f}) = \sum_{m=1}^M [(H\mathbf{f})_m - g_m \ln(H\mathbf{f})_m] \quad (24)$$

を最小化する \mathbf{f} を求めることに帰着する。期待値最大化という言葉も使われる。ここでも、観測データが得られた具体的な値 g_m ($m = 1, 2, \dots, M$) に固定されていることに注意されたい。

(24)式の $\Phi_{ML}(\mathbf{f})$ は \mathbf{f} の凸関数である。その最小点を求めるために、解を乗法的に更新する反復アルゴリズムが、X線CTが実用化しさらにSPECT/PETが期待された時期に考案された[38]:

$$\mathbf{f}^{(k+1)} = D^{(k)} \mathbf{f}^{(k)} \quad (25)$$

ここで、 $D^{(k)}$ は対角行列である。線積分型CTの言葉を使うと、投影データ \mathbf{g} と $\mathbf{f}^{(k)}$ の投影 $H\mathbf{f}^{(k)}$ との対応する成分

間の比 $\rho_m^{(k)} = g_m / (H\mathbf{f}^{(k)})_m$ ($m = 1, 2, \dots, M$) を求める。この比を成分とするベクトル $\boldsymbol{\rho}^{(k)}$ と、成分がすべて1となったベクトル \mathbf{e}_c の逆投影画像 $H^T \boldsymbol{\rho}^{(k)}$ および $H^T \mathbf{e}_c$ を求める。これら二つの逆投影画像における画素値の比

$$d_n^{(k)} = (H^T \boldsymbol{\rho}^{(k)})_n / (H^T \mathbf{e}_c)_n \quad (n = 1, 2, \dots, N) \quad (25')$$

を $D^{(k)}$ の対角要素とする。(25)式の乗算更新からすると、 h_{mm}, g_m すべてが非負の逆問題であれば、初期解 $\mathbf{f}^{(0)}$ のすべての成分を非負に設定すると、画素値はおのずと非負になる。統計学的考察から、非負値制約を満たす再構成法が一つ得られた。

$\Phi_{ML}(\mathbf{f})$ は非線形関数であるから、その最小化において式不足による悪条件が解不定という明確な形を取らない。しかし、悪条件から自由であるとは思えない。観測欠損の大きい逆問題においてどんな再構成特性となるか？ 藤沢ら[39]は、4方向の平行ビームカメラを用いたプラズマ乱流の光放射CTに用いている。他のいくつかの再構成法と比較した例としては、T. Craciunescuら[40]による大型装置JETの中性子放射型CTへの適用がある。論文には、直交2方向のピンホールカメラ配置において、数種類の数値ファントムに対する再構成画像が示されている。非負値制約を与えた再構成像には安定性が感じられる。しかし、再構成法の法則性に照らした分析がいま一つ見えない。Tikhonov正則化については、分解能不足になるファントムがあり、また、データ数が $M = 19$ と少ないからGCVが働かないとも述べている。こういうときは、高番号の基底がどんな画像か、残差の様子はどうか、踏み込んで調べたいものである。電離層の波動観測において、わずか $M = 9$ の画像逆問題でGCVがきれいに働いた経験が筆者(岩間)にはある。少ない基底でも物体をよく表現できて“残差が雑音的になれば”ということではなからうか。

それはともかく、(22)式と(23)式の尤度を見れば、 $\Phi_{ML}(\mathbf{f})$ の最小化は $\|H\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$ の最小化と対応している。とあれば、 $\Phi_{ML}(\mathbf{f})$ に正則化の項を取り付けてみたくなる。例えば、前節の距離を導入して、

$$\Lambda(\mathbf{f}) = ad(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{ref}) + \Phi_{ML}(\mathbf{f}) \quad (26)$$

を最小化するという類いである。医用CTではこれが本格的に取り上げられ、後述の l_1 ノルム化を含めて、大規模画像のための反復アルゴリズムが精力的に開発されている[41, 42]。健康な人体画像を \mathbf{f}_{ref} に用いて、画像の質を上げると同時に病変検出に効果を上げるといった使い方がされている。

2.4.3 ベイズ推定への拡張

最尤推定を考えたからには、もう一歩進もう。素直な考えとして、観測データ \mathbf{g} が与えられたとき、未知画像 \mathbf{f} は何であるか？ この確率は条件付き確率 $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ である。これが最大になる \mathbf{f} を求めてはどうか？ ベイズ定理を使うと、前節で扱った $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ と次式でつながる。

$$P(\mathbf{f}|\mathbf{g}) = \frac{P(\mathbf{g}|\mathbf{f})P(\mathbf{f})}{P(\mathbf{g})} \quad (27)$$

ベイズ推定論では、 $P(\mathbf{f})$ を事前確率、 $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ を事後確率と言う。観測データ \mathbf{g} が生起する前および後の \mathbf{f} の生起確率という意味である。この定理は、具体的な \mathbf{g} が生起したことによって、観測者にとって画像 \mathbf{f} の生起確率が変わることを表現している。

さて、この事後確率 $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ が最大になる \mathbf{f} を求めるとき、分母の $P(\mathbf{g})$ は \mathbf{f} と無関係な定数である。そして、仮に $P(\mathbf{f})$ を \mathbf{f} によらない定数、すなわち、先験的な知識がまったくなくてどんな画像も等確率で生起すると見なせば、“ $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ の最大化” は前節の “ $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ の最大化” (最尤推定) に帰着する。言い換えれば、 $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ の最大化による \mathbf{f} の推定は、右辺の分子の右端に $P(\mathbf{f})$ が付いただけ最尤推定の拡張である。確率 $P(\mathbf{f})$ は、観測を行う前から、「物体画像 \mathbf{f} がそもそも \mathbf{f} である確率」であるから、ここに物理の知識を入れる可能性を感じる。

いま、観測データに正規性の測定誤差が加わっているとして、 $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ に(22)式を用い、(27)式の両辺の対数を取って符号を変えると、次式が得られる。

$$-\ln P(\mathbf{f}|\mathbf{g}) = -\ln P(\mathbf{f}) + \frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \text{const.} \quad (28)$$

ここで $P(\mathbf{f})$ が \mathbf{f} に依らない定数であれば、右辺の最小化は最小二乗法であり、解は不定であった。このとき、(9)式に始まるラグランジュ関数の文脈からすると、右辺の初項 $-\ln P(\mathbf{f})$ は正則化の項ではないか。

実際、 $P(\mathbf{f})$ が参照画像 \mathbf{f}_{ref} の周りの正規分布であると見なして、

$$P(\mathbf{f}) \propto \prod_{n=1}^N \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_0^2} (f_n - f_{\text{ref},n})^2\right] = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_0^2} \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}}\|^2\right] \quad (29)$$

を(28)式の右辺に用いると、

$$-\ln P(\mathbf{f}|\mathbf{g}) = \frac{1}{2\sigma_0^2} \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}}\|^2 + \frac{1}{2\sigma^2} \|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 + \text{const.}$$

となる。よって、この $-\ln P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ の最小化 ($P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ の最大化) は、 $\alpha = \sigma^2/\sigma_0^2$ を正則化パラメータとする Tikhonov 正則化である。また、同様にして、 $P(\mathbf{f})$ をラプラス分布

$$P(\mathbf{f}) \propto \prod_{n=1}^N \exp\left[-\frac{\sqrt{2}}{\sigma_0} |f_n - f_{\text{ref},n}|\right] \quad (30)$$

と見なせば、後述の l_1 ノルム正則化になり、 $\alpha = 2^{3/2}\sigma^2/\sigma_0$ が正則化パラメータになる。

勢いづいて、もっと言えば、エントロピーを \exp の肩に乗せたものを事前確率 $P(\mathbf{f})$ と形式的に見なせば、最大エントロピー法 (MEM) にもなる。こんなことは“形式論に過ぎる”と思うとそうでもない。Ertl ら[18]はこのベイズ推定論から、MEMにおける正則化パラメータの決定法を考えた。GCVの近似を使うのとは別の試みである。観測欠損の大きいプラズマCT撮像では、残差の2乗平均値を検出器雑音の2乗平均値よりも小さくする(観測データに近づける)方がプラズマの形がよく出る傾向が見られる。こ

の事情に答える努力がなされた。

以上のベイズ定理を介した“最尤推定から事後確率最大化へ”の拡張について、最近、興味深い論文が出ている[43, 44]。2.3.5節のフィッシャー情報量最小化のところ述べてように、核融合研究のCT撮像では、領域周辺部において正則化(平滑化)を強める必要がある。Liら[43]に従って、(29)式の前確率を拡張し、画像値 f_n ($n = 1, 2, \dots, N$) が共分散行列 Σ_f の N 次元正規分布

$$P(\mathbf{f}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2} |\Sigma_f|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} (\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}})^T \Sigma_f^{-1} (\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}})\right] \quad (31)$$

で生起するものと見なそう。 Σ_f の (k, l) 要素は、2つの画素値 f_k および f_l がともに生起すると考えたときの共分散 $c(k, l)$ (相関) である。特定の第 k 画素に注目したとき、第 l 画素がこの画素から離れるとともに、 $c(k, l)$ がガウス関数で減衰するものとする。簡単のために等方的に減衰するとして、減衰の特徴的な長さを λ_k としよう。そして、第 k 画素が積分路不足(情報不足)の領域にあれば λ_k 値を大きく設定し、積分路が多い領域では λ_k 値を小さく設定すると、領域に応じた画像平滑化が得られるのではないか。

そのように考えた(31)式の前確率 $P(\mathbf{f})$ と(22)式の場合付き確率 $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ を(27)式の分子に用いて、この $P(\mathbf{f}|\mathbf{g})$ を最大にする \mathbf{f} を求めると、次式が得られる(付録VI)。

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) = (\sigma^2 \Sigma_f^{-1} + H^T H)^{-1} H^T (\mathbf{g} - \mathbf{H}\mathbf{f}_{\text{ref}}) + \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (32)$$

ここで、左辺のベクトル $\boldsymbol{\theta}$ は、右辺の $\sigma^2 \Sigma_f$ に含まれる未知パラメータ λ_k と σ^2 (観測データ \mathbf{g} の正規性誤差の2乗平均値) をまとめて便宜的に表したもので、敢えて書けば $\boldsymbol{\theta} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N, \sigma^2]^T$ である。上式を(20)式の Tikhonov 正則化の解 \mathbf{f}_T と比べると、正則化項の $\alpha C^T C$ が $\sigma^2 \Sigma_f^{-1}$ に置き換わっている。 \mathbf{f}_T をこのように拡張した上で、 $\sigma^2 \Sigma_f^{-1}$ に含まれる $\boldsymbol{\theta}$ をうまく決めれば、再構成画像 $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ が求まることになる。

それでは、 $\boldsymbol{\theta}$ をどう決めるか? Liらは $\boldsymbol{\theta}$ の最尤推定を採用する。すなわち、観測データ \mathbf{g} に正規性の誤差が加わったとし、(22)式右辺の \mathbf{f} に $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ を代入すれば、尤度 $P(\mathbf{g}|\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}))$ すなわち $P(\mathbf{g}|\boldsymbol{\theta})$ は

$$P(\mathbf{g}|\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{\sigma^2} \|\mathbf{g} - \mathbf{H}\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})\|^2\right] \quad (33)$$

となる。よって、これが最大になるよう $\boldsymbol{\theta}$ (空間的に非一様な相関距離 λ_k ($k = 1, 2, \dots, N$) および σ^2) を決める。実際の計算では、この $P(\mathbf{g}|\boldsymbol{\theta})$ の最大化に共役勾配法を用い、 λ_k , σ^2 を更新するなかで、 $\sigma^2 \Sigma_f^{-1} + H^T H$ をコレスキー分解して得られる行列を用いて、正規乱数を画像 $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta})$ に再分配して共分散を評価する手続きを入れているように見える。計算は十分に高速とのことである。

Liらの計算結果を図14, 15に示す。図14(左)の視線配置(すなわち投影行列 H)において、ファントムの投影に乱数を加えて作成した投影データ \mathbf{g} に対して、最尤推定で

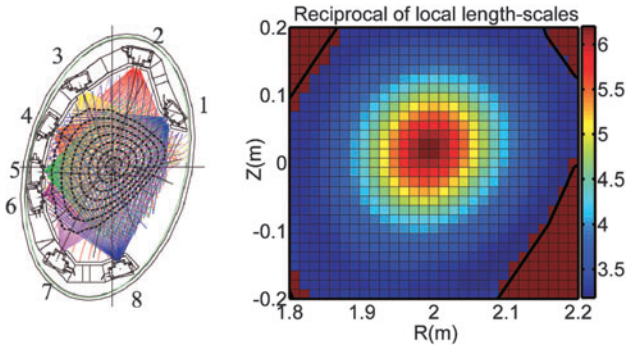


図14 Max-Planck研究所のステラレータ装置W7-ASの軟X線放射型CT：(左)ポロイダル断面に設置されたピンホールカメラ8台の視線配置，(右)求められた平滑化パラメータ $1/\lambda_k$ の空間分布[43].

決定された $1/\lambda_k$ の位置分布を図14 (右) に示す。平滑化がプラズマ中央部で弱く、周辺部で強くなるよう決定されたことがわかる。Tikhonov 正則化において、平滑化の強さが位置によって変わる画期的な拡張である。この平滑化パラメータ分布に対応する再構成画像が図15 (左) に示されている。同図 (右) の MEM の画像と比べると、周辺部において安定化している。例えば大半径 $R=1.9$ m の断面を見ると、物理計測として有意義なだけ改善されている。この効果は実験データについても確認された。この再構成法を図11, 12の接線方向投影からの再構成にすぐにも使ってみたくなるし、2方向カメラ配置のような強い観測欠損に対してどこまで強いかわかめたくなる。

この再構成においては、 $f_{\text{ref}} = \mathbf{0}$ と置かれた。 $\sigma^2 \Sigma_f^{-1}$ を最尤推定で決めたとあれば、(32)式の Tikhonov 的な解 $f(\theta)$ は線形であるから、再構成画像は負値を取り得る。Tikhonov 正則化において、 $C^T C$ を共分散行列の逆行列 Σ_f^{-1} に置き換えること自体は、すでに2002年頃、補償光学望遠鏡の Shack-Hartman 波面センサーの逆問題に導入され、Kolmogorov の大気乱流理論にもとづく共分散行列が Σ_f に使われてきている[45]。その解法が、プラズマ CT 撮像の事情に合わせて拡張されたことになる。

ここで、級数展開法における赤池理論を振り返ってみよう。物体の画像 f を基底画像 b_n の重ね合わせ

$$f = \sum_{n=1}^{N_B} a_n b_n \quad (34)$$

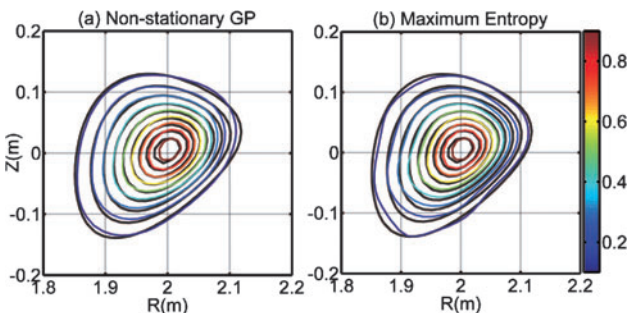


図15 W7-AS プラズマの再構成画像：(左)新しいベイズ再構成法，(右)最大エントロピー法[43].

とする。(16)式の級数モデルの離散表現である。このとき、(22)式の $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ は

$$P(\mathbf{g}|\mathbf{f}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \left\| \mathbf{g} - \sum_{n=1}^{N_B} a_n H b_n \right\|^2 \right] \quad (35)$$

となる。右端の Hf において、演算子 (行列) H の線形性を用いた。 Hb_n は基底 $B_n(\mathbf{r})$ の離散表現である。パラメータ a_n ($n=1, 2, \dots, N_B$) および σ^2 を θ で表わすと、未知ベクトル f が未知の θ に集約されているから、上式の $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ は $P(\mathbf{g}|\theta)$ と書いてよい。そして、(35)式を見ればすぐわかるように、 $P(\mathbf{g}|\theta)$ の θ に関する最大化は a_n の最小2乗推定に帰着し、残差の2乗平均値が σ^2 の推定値になる。赤池は(34)式のような級数モデルに限ることなく、モデル一般に関して、データ数 $M \rightarrow \infty$ の漸近的な量としてモデルの良さを表わす規準 (AIC) を発見した。Liらのベイズ再構成法において、正規分布の共分散 $c(k,l)$ を含む(32)式が級数モデルに相当し、(33)式の最大化が最小2乗推定に相当する。AICによる最適化に当たるものがない。

Liらは、久しぶりに、統計学の基礎の上に新しい再構成法を提案している。彼らが参考にした原典から「非正常ガウス過程」が名称に使われ、かつ、論文は難解に書かれている。以上の解説が、CT計測の実績を踏まえた、誤りのない紹介であれば幸いである。

ベイズ理論は、道を発見する一つの思考法である。下川ら[46]は脳の3次元拡散光CTにおいて、多階層に拡張したベイズ定理を用いて独自の試みを行った。拡散光CTの視線は、脳の表面のある位置から別の位置に達する曲線である。そのため、脳の表面付近に視線が集まる。このときTikhonov解では、奥に位置するはずの活動部位が図16 (b)のように脳の表面に浮き上がる。視線が多いのにその走り方に偏りがあって、逆投影の再分配が効いているのであろうか。このアーチファクトが生まれる領域で正則化を強めると、同図 (c) のように活動部位は下がる。さらに、多階層のベイズ定理から正則化の重み付けに工夫を加えて、2つの活動部位の分離に成功した。Liらと同じ方向性をもつ

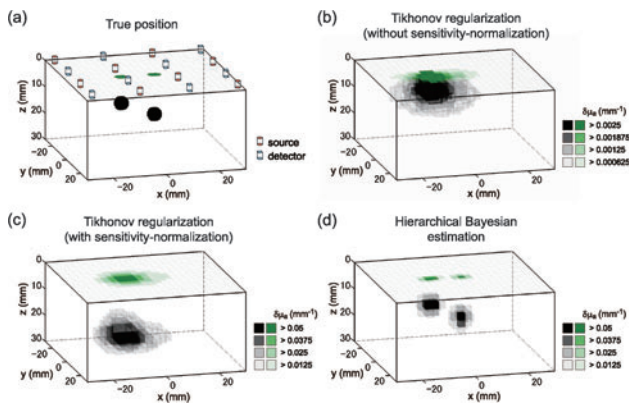


図16 拡散光トモグラフィの3次元再構成：(a)送受信点の配置とファントム，(b)Tikhonov解 ($C=I$)，(c) C を視線の多い領域で強い正則化を与える対角行列に変更した再構成像，(d)ベイズ理論から分解能を改善した再構成像。脳表面へのある種のマッピング (topography) が緑色で示されている[46].

た研究である。

2.4.4 圧縮センシング

ART および Tikhonov 正則化の原点にもどろう。解不定の方程式 $Hf = g$ および 最小2乗法の正規方程式 $(H^T H)f = H^T g$ に対して、合理的な解を発見するために、消極的にしろ、積極的にしろ、 $\|f\|^2$ ないし $\|Cf\|^2$ の最小化を求めてきた。

ここでベクトルのノルム $\|\cdot\|$ は成分の2乗和の平方根である。ベクトル f であれば、

$$\|f\| = \left(\sum_{n=1}^N f_n^2 \right)^{1/2} = \left(\sum_{n=1}^N |f_n|^2 \right)^{1/2} \quad (36)$$

である。これを l_2 ノルムと言う。これに対して

$$\|f\|_1 = \sum_{n=1}^N |f_n| \quad (37)$$

と定義される $\|f\|_1$ を l_1 ノルムと言う。ラグランジュ関数 $\Lambda(f)$ において、正則化項の l_2 ノルムを l_1 ノルムに置き換えた解法がめざましく登場している。(19)式の $d_E(f, f_{ref})$ も上式に応じて変わる。

滑らかさを要求して微分演算を用いるのであれば、画像 $f(r)$ の例えば勾配 (gradient) $\nabla f(r)$ の大きさを l_1 ノルムで表わし、画素全部にわたる総和を取る。第 n 画素での偏微分の値を $f_{x,n}$, $f_{y,n}$ と表わせば

$$\sum_{n=1}^N (f_{x,n}^2 + f_{y,n}^2)^{1/2} \quad (38)$$

となるが、これに正則化パラメータ α をつけて正則化項に用いる。偏微分は隣接画素値の差で近似する。この試みは Rudin ら[47]に始まり、Total Variation (TV) の最小化と命名された。

このような l_1 ノルムを用いると、暗い背景のなかに狭い物体がある疎 (スパース) な画像に対して、再構成の分解能が上がる。画像が疎で一定の条件が満たされれば、たとえ観測数不足 ($M < N$) であっても画像を正しく復元できる、あるいは高い確率で復元できるという一連の定理が D.L. Donoho, E.J. Candes らによって証明された。ちょうど10年前のことである。 l_1 ノルム (更に l_0 ノルム) を正則化に用いる再構成法を総称して圧縮センシングと言う。画像をスパースにする変換を入れて定式化すると、応用対象が広がる。ノルムの変更がなぜ高性能をもたらすかについて、基礎的な解説がいくつかある[48-50]。

l_1 ノルムを用いた $\Lambda(f)$ は非線形である。(37)式の $\|f\|_1$ は原点で微分できない。 $\Lambda(f)$ 最小化の解更新において、正しい解への収束を保証する代理関数とか、0に近い画素値を0と置くしきい値関数を入れた高速な反復アルゴリズムが研究されている。 $Hf = g$ の正則化では線形計画法が使われる。

この圧縮センシングの応用研究がいま、まさに盛りである。最近では、電波望遠鏡の画像再構成 (2次元フーリエ逆問題) に持ち込まれ[51]、さらに超長基線干渉計について最初の成功が得られ、地球サイズの電波望遠鏡計画に役

立つことが期待される[52,53]。フーリエ逆問題の大きな研究対象は医用MRIであるが、圧縮センシングによって撮影時間や磁場勾配が楽になる。電子顕微鏡CTにおいても、撮像対象が固体材料であれば成功した[49,54]。工藤ら[49]の場合、TV最小化を用いて、120枚は必要になる試料回転の撮影数を1/10に減らしてなお、従来よりも鮮明な再構成画像を得ている。顕微鏡技術として素晴らしい成果である。生物対象の場合は、氷包埋された試料の表面・回転その他に係わる投影データの較正に課題が残るように見える。

核融合研究においても、現象によって、また、放射受信に波長分解を入れれば、例えば図6(上)のようにプラズマ画像は疎であり得る。また、注目すべきものとして、画像の点広がり関数が非一様で不明なとき、係数行列 H を推定しつつ画像 f を再生する逆問題を Blind Deconvolution (BD) と言うが、 f 推定と H 推定の両側に l_1 ノルム正則化を取り込む研究がある[55]。Wiener フィルタを使い L-curve も使った BD の成功例として、文献[56]は l_2 ノルムの範囲であるが教育的である。限られた範囲であっても、測定系の H を推定できるとすれば、物理計測として見逃せない。

2.4.5 大規模線形方程式の高速解法

30 m 望遠鏡計画では、未知数12,000個の逆問題計算を1 ms で実行する高速計算が求められる。一般の逆問題でも画像が3次元になれば、係数行列 H が大規模になる。2次元CTでも、時間変化するプラズマの時間軸を加えた3次元再構成を行えば大規模になる。このとき、線積分型CTのように H が疎 (要素の大部分が0値) であれば、0要素の積和を省略すれば、計算は格段に効率的になる[57]。疎な H を特異値分解 (SVD) して、正規直交ベクトルが詰まった密な行列に変換するのは、数値計算として矛盾がある。 H が疎な線形逆問題に有効な反復アルゴリズムが本格的に研究されている。特に Krylov 部分空間を用いる計算法は、例えば図17のように際立って高速である。

この蓄積を生かして、 l_2 ノルム正則化のための高速な反復計算ソフトウェアが最近、整備された。この反復計算において、低過ぎる画素値を適当な値に置き換える簡単な制

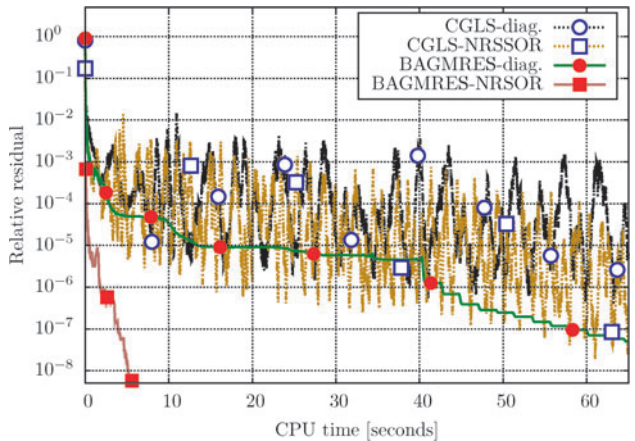


図17 ある最小2乗問題に対する収束の速さ：他の解法と比べて、Krylov 部分空間を用いる新しい解法 (左下) は残差が急速に減少する[58]。

限を入れただけで、画素値の高い方が自動的に下がり画像全体が落ちつく非線形な現象がおもしろく観察された。MEMによる正值化と同様な現象が、Tikhonov正則化でも起こる[59]。また、直接解法を含めて、 l_2 数値の高い蓄積を生かした一連の優れたアルゴリズム研究がなされている[60, 61]。現在の逆問題研究は、圧縮センシングがすべてではない。

2.4.6 ラプラシアン固有関数

級数展開法についても、新しい重要な研究動向がある。斎藤[62]による、「任意の境界を持つ領域」を定義域とする正規直交系(ラプラシアン固有関数系)の生成である。どの程度に任意な領域かという点、地図の上で4つの大きな島と小さいいくつもの島からなる日本列島の土地(入り組んだ海岸線の内側)でもよい。海岸線において、ディリクレやノイマンの境界条件が使える。2.3.6節において、級数展開法は大きな観測欠損に強い、定義域が円になるよう磁気面座標を使ってはどうか、と書いた。最近の核融合研究におけるヘリカルな形状やエッジを含む3次元の磁気容器を考えると、これまで望めなかった可能性を感じる。体系的な解説が斎藤[62]にある。また、本講座の第6章で斎藤氏自身による解説がなされる。

2.4.7 辞書-パターン認識との融合

正規直交展開の係数の並びは画像のスペクトルであるから、ラプラシアン固有関数系は使い方によって画像のパターン認識にも使える。パターン認識と言えば、辞書(dictionary)と呼ばれる新しい手法が登場している。簡単に言うと、多数の典型画像 d_i を列ベクトルにもつ横に長い辞書行列 B_D をつくる。 d_i に係数 a_i を付けた線形結合(重ね合わせ画像)は次のように書ける。

$$B_D \mathbf{a} = \begin{bmatrix} d_1 & d_2 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} = \sum_i a_i d_i \quad (39)$$

ここで、 \mathbf{a} は a_i を成分とする列ベクトルで、上式の右辺は(34)式の右辺と同じ形である。そこで、一つの画像 f が入ったとき、「残差2乗和 $\|f - B_D \mathbf{a}\|^2$ がある値に等しい」を要求して、 l_0 ノルム $\|\mathbf{a}\|_0$ が最小となるよう係数ベクトル \mathbf{a} を決める。形式的にラグランジュ関数を書けば

$$\Lambda(\mathbf{a}) = \alpha \|\mathbf{a}\|_0 + \|B_D \mathbf{a} - f\|^2, \quad \|\mathbf{a}\|_0 = \sum_i |a_i|^0 \quad (40)$$

であるが、 $\|\mathbf{a}\|_0$ を“0でない a_i の個数”と特に定義する。その最小化の結果、端的に一つの a_k になれば、画像 f は明るさ違いの d_k であったと認識できる。一つにならなくても、画像 f の分類(clustering)に使えるだろう。項数が少なく済むという意味で高圧縮にするために、画面を部分画面に分割し、特異値分解を使うなど、辞書をつくる学習の手順が開発されている。そして、良い辞書ができれば、画像再構成の基底系に使えるだろう。逆問題解法とパターン認識の融合である[63, 64]。

2.5 計測の前進とともに

以上、解に与える制約という観点で、Tikhonov正則化を軸に再構成法の発展をあとづけ、これからの発展性を見た。しかし逆問題の魅力・多様性・発展の原動力は、そもそも(1)式のような観測の関係式を現実の物理計測のなかに見出すところにある。

観測の関係式が分かると、逆問題の基本を踏まえて工夫するところに多様な解法研究が生まれる。前節までに取り上げてきた解法がすべてではない。積分方程式を直接に解いて、波源の位置や正弦波のパラメータを得る方向の研究は重要である[65, 66]。また、 $Hf = g$ の f に制約を与えつつ g の欠損部を推定して漸近的に解に至るPOCS法[67]があるし、画面の一部を詳細に再構成するLocalトモグラフィへの取り組みがある。そして、いわゆるInterior問題に対する微分逆投影法[68]は、逆問題における観測欠損への攻めとして本質的に重要なものを提起している。医用CTのための諸解法の最も体系的な解説が文献[42]にある。非線形な(2)式を用いるマイクロ波散乱CTでは、解に対する電磁波伝搬のシミュレーション(FDTD解析)を行っては解を更新する反復法が追求されている[69, 70]。

他方、実験・観測の側からは、例えばベクトルトモグラフィのように、産業計測としても重要な新しいCT技法が実験室プラズマの計測研究から生まれる[71]。また、重力レンズ現象を用いる質量密度分布推定とか、プラズマ波動を用いる日震学のCTでは、理論物理の考察から(1)式のような関係式を導くところに高度な研究がある。補償光学望遠鏡においては、レーザーガイド星を用いる波面補償のトモグラフィック計算に、解への制約として風速推定を加える研究が進んでいる[72]。ミュー粒子を用いる火山等のトモグラフィは最近のトピックスである。図18に日震学の成果の一つを示す。物理科学、そして生体イメージングから産業計測の非破壊試験まで、計測の課題に応じて解法をかみ合わせ、新たに工夫して、画像逆問題の研究は豊富に発展しつつある。

2.6 おわりに

逆問題解法は“観測データに対して方程式を立てる”。

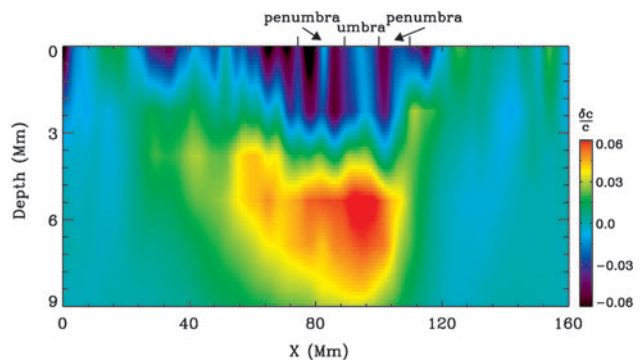


図18 太陽観測衛星「ひので」のデータから再構成された黒点内部の様子：音速(摂動分)の3次元空間分布の鉛直断面。日震波CTでは3次元流れ場も推定される。「ひので」が黒点スケールの高分解を可能にした[73]。

観測結果に合理的に一致する解を得るために、観測の物理を考慮した方程式を立てる。そして、観測不足のために式が不足して解が不定になったとき、また、独立性の高い観測が不足するために式数はあっても解が悪条件になったとき、合理的な制約を与えて解を改善する。この路線は、医用CTのFBP法に対するARTの優位性から始まって今日のめざましい成果まで、解に与える制約を積極化し改善することによって、成功を勝ち取ってきた。そういう観点で一つの論を通して見た。論の流れを図19に示した。発展史的にまとめた図になっている。今日目で見れば、ベイズ推定論から全体を語ることもできるだろう。「結果から原因を探る数学」と言うこともできる。格好の入門書として文献[74]を紹介したい。

最後に、プラズマの電磁波計測に目を向けよう。核融合の磁場閉じ込め研究において、プラズマの動的な挙動と異常輸送は大きなテーマである。レーザー光やマイクロ波を用いて、動的構造因子 $S(\mathbf{k}, \omega)$ の測定がなされてきた。周知のように、 $S(\mathbf{k}, \omega)$ は電子密度の揺らぎ $n_e(\mathbf{r}, t)$ のパワースペクトル $\langle |n_e(\mathbf{k}, \omega)|^2 \rangle$ であるが、これは期待値を取られた強度的な量であり、複素量 $n_e(\mathbf{k}, \omega)$ の位相は消えている。言い換えれば、プラズマの瞬時的な姿が消えている。この電磁波計測の基本が築かれた頃は、高速なプラズマ現象のための信号の時間サンプリングはできなかった。検出器も事実上ひとつであった。しかし現在では、検出器は面に集積され、信号の並列サンプリングができています。驚くべき進歩である。このとき、目標を $S(\mathbf{k}, \omega)$ に限定すれば、多チャンネル信号のデータからすぐに相互スペクトル $S(\mathbf{r}, \omega)$ を求めておいて、位置の差ベクトル \mathbf{r} についてフーリエ変換することになる。このとき $S(\mathbf{r}, \omega)$ の \mathbf{r} に欠損があれば、逆問題解法を使えばよい。しかし $S(\mathbf{r}, \omega)$ は既に、揺らぎの位相を消す“期待値の操作”を施してしまった量である。

一方、マイクロ波によるトモグラフィ・ホログラフィは(2)式のグリーン関数表現に基づいて、各時刻における

$c(\mathbf{r})$ (すなわち誘電率) の3次元の姿そのものを求める。また、物体表面からの反射を利用する合成開口レーダ(SAR)も、各時刻における表面の3次元的な形状そのものを求める。ホログラフィおよびSARでは、一方向からの観測であっても、入射波の周波数を変えて奥行き情報を得る。いずれにしても、求まるものは、ある時刻における物体の姿そのものである。その姿を計算で求めるとき、逆問題解法が活躍している。

プラズマにおいても、電磁波の正常波モードについてはヘルムホルツ波動方程式が成り立つ。同時に、固体と比べて密度が桁はずれに低いので、普通の入射波パワーでは観測されるものが限られる。電磁波の協同散乱の理論[75]は、個々の電子による散乱から出発しながら、パワーの期待値 $S(\mathbf{k}, \omega)$ をゴールと見なして、式の運びを急ぎ過ぎるものを感じず。期待値を取るまえのところに、プラズマ計測を革新する“かぎ”が隠れているのではなからうか。

謝辞

自然科学研究機構・新分野創成センターのもとに開催された「画像逆問題の数理解析研究会」が国内外の優れた研究者との交流の場になり、本稿を書くにあたって非常に役立った。参加された諸氏に厚く謝意を表します。

参考文献

- [1] 岩間尚文：核融合研究 68, 586 (1992).
- [2] 岩間尚文：プラズマ・核融合学会誌 74, 1310 (1998).
- [3] 岩間尚文, 大舘 暁：プラズマ・核融合学会誌 82, 399 (2006).
- [4] 中川 徹, 小柳義夫：最小二乗法による実験データ解析 (東大出版会, 1982).
- [5] 金谷健一：これなら分かる最適化計算 (共立出版, 2005).
- [6] 佐野竜一：総研大物理科学研究科博士論文, 2015年3月.
- [7] R. Sano, B.J. Peterson *et al.*, Rev. Sci. Instrum. 87, 053502 (2016).
- [8] M. Teranishi *et al.*, Ann. Rep. NIFS 2011-2012, p. 155.
- [9] G.T. Herman *et al.*, Comput. Biol. Med. 6, 273 (1976).
- [10] Y. Censor *et al.*, *Parallel Optimization-Theory, Algorithms, and Applications-* (Oxford Univ. Press, Oxford, 1997).
- [11] R. Ramlau *et al.*, Inverse Problems 28, 095004 (2012).
- [12] O.N. Strand, SIAM J. Num. Anal. 11, 798 (1974).
- [13] C.L. Byrne: *Applied Iterative Methods* (A K Peters, Wellesey, 2008).
- [14] P.C. Hansen, T. Sekii *et al.*, SIAM J. Sci. Statist. Comput. 13, 1142 (1992).
- [15] M. Itagaki *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion 53, 105007 (2011); *ibid.*, 54, 125003 (2012).
- [16] 岩間尚文 他：大同工大紀要 42, 93 (2006).
- [17] 杉原正顕 他：線形計算の数理 (岩波書店, 2009).
- [18] K. Ertl, W. von Linden *et al.*, Nucl. Fusion 36, 1477 (1996).
- [19] T. Ming, S. Ohdachi *et al.*, Plasma Fusion Res. 6, 2406120 (2011).
- [20] R. Nguyen van yen *et al.*, Nucl. Fusion 52, 013005 (2012).
- [21] P.C. Hansen, SIAM Review 34, 561 (1992).
- [22] P.C. Hansen, *Rank-deficient and Discrete Ill-posed Problems*

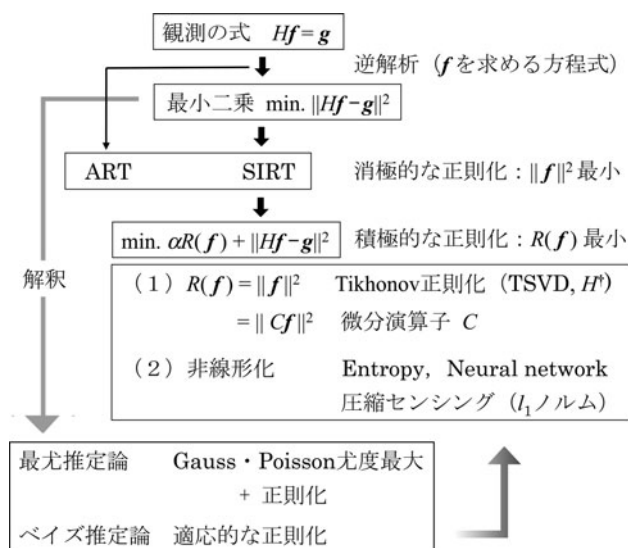


図19 解に与える制約.

- (SIAM, Philadelphia, 1998); *ibid.*, *Discrete Inverse Problems -Insight and Algorithms-* (SIAM, Philadelphia, 2010).
- [23] A. Wingen *et al.*, J. Comp. Phys. **289**, 83 (2015).
- [24] J. Bielecki *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **86**, 093505 (2015).
- [25] A. Manini *et al.*, Nucl. Fusion **43**, 490 (2003).
- [26] N. Iwama *et al.*, J. Plasma Fusion Res. SERIES **8**, 691 (2009).
- [27] 馬笑峰, 竹田辰興: プラズマ・核融合学会誌 **82**, 287 (2006).
- [28] 寺西大, 村田和義 他: *private communication*.
- [29] S. Tomioka *et al.*, Proc. SPIE **9401**, 94010J (2015).
- [30] A. Isayama *et al.*, Jpn J. Appl. Phys. **42**, 5787 (2003).
- [31] M. Odstrcil *et al.*, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A **686**, 156 (2012).
- [32] J.M. Gao, Y. Liu *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **84**, 093503 (2013).
- [33] 例えば H. Tanabe *et al.*, Nucl. Fusion **53**, 093027 (2013).
- [34] 寺西大 他: FAN2010, S5-1-4, Paper No. 95 (2010).
- [35] N. Iwama, M. Teranishi *et al.*, Ann. Rep. NIFS 2009-2010, p. 178.
- [36] Y. Nagayama, J. Applied Phys. **62**, 2702 (1987).
- [37] J. Lee, P. Doerschuk *et al.*, IEEE Trans. Image Process. **16**, 2865 (2007).
- [38] L.A. Shepp *et al.*, IEEE Trans. Med. Imag. **1**, 113 (1982).
- [39] A. Fujisawa *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 025005 (2016).
- [40] T. Craciunescu *et al.*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **601**, 374 (2009).
- [41] E.A. Rashed and H. Kudo, Phy. Med. Biol. **57**, 2039 (2012).
- [42] 工藤博幸: 医用工学ハンドブック (日本医用画像工学会, 2012) 第2章.
- [43] D. Li *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **84**, 083506 (2013).
- [44] D. Li, Y. Liu *et al.*, Nucl. Fusion **56**, 036012 (2016).
- [45] B.L. Ellerbroek *et al.*, Inverse Problems **25**, 063001 (2009).
- [46] T. Shimokawa *et al.*, Optics Express **20**, 20427 (2012).
- [47] L.R. Rudin *et al.*, Physica D **60**, 259 (1992).
- [48] 田中利幸: IECIE Fundamentals Rev. **4**, 39 (2010).
- [49] 工藤博幸 他: 顕微鏡 **51**, 48 (2016).
- [50] 山内結子編集: 特集 スパースモデリングの発展 - 基礎から応用まで -, 電子情報通信学会誌 **99**, 369 (2016).
- [51] F. Li, T.J. Cornwell *et al.*, A&A **528**, A31 (2011).
- [52] 本間希樹: 電子情報通信学会誌 **99**, 400 (2016).
- [53] S. Ikeda *et al.*, Publ. Astron. Soc. Japan **68**, 45 (2016).
- [54] R. Leary *et al.*, Ultramicroscopy **131**, 70 (2013).
- [55] 野島優輔, 韓先花, 陳延偉: 信学技報 **115**, 77 (2015).
- [56] Y.X. Tu, A. Wernsdörfer, S. Honda *et al.*, IEEE Trans. Biomed. Eng. **44**, 1102 (1997).
- [57] 二宮市三 編: 数値計算のわざ (共立出版, 2006).
- [58] K. Morikuni and K. Hayami, SIAM J. Matrix Anal. Appl. **34**, 1 (2013).
- [59] N. Iwama, Y. Hosoda, K. Abe, K. Morikuni *et al.*, Ann. Rep. NIFS 213-2014, p. 465.
- [60] L. Reihel, <http://www.math.kent.edu/reichel/publications.html>
- [61] J.G. Nagy, <http://www.mathcs.emory.edu/nagy/research/pubs.html>
- [62] 斎藤直樹: <https://www.math.ucdavis.edu/saito/lapeig/>
- [63] 中静真: 数理解析研究所講究録 **1743**, 65 (2011).
- [64] 岩本佑太郎, 韓先花他: 電子情報通信学会論文誌 **J98-D**, 1312 (2015).
- [65] T. Nara, Math. Problems in Eng. **2013**, 413980 (2013).
- [66] S. Ando *et al.*, IEEE Trans. Signal Process. **37**, 3317 (2009).
- [67] 塩谷浩之 他: 計測と制御 **50**, 332 (2011).
- [68] H. Kudo *et al.*, Phys. Med. Biol. **53**, 2207 (2008).
- [69] J.E. Johnson, T. Takenaka *et al.*, IEEE Trans. Biomed. Eng. **56**, 2232 (2009).
- [70] T. Takenaka and T. Moriyama, Optics Lett. **37**, 3432 (2012).
- [71] H. Tanabe *et al.*, Plasma Fusion Res. **8**, 240588 (2013).
- [72] 大野良人: 東北大理学研究科博士論文, 2016年3月, <http://www.astr.tohoku.ac.jp/%7Eakiyama/>
- [73] J. Zhao, A.G. Kosovichev, and T. Sekii, Astrophys. J. **708**, 304 (2010).
- [74] 上村豊: 逆問題の考え方 (講談社, 2014).
- [75] 宮本健郎: 核融合のためのプラズマ物理 (岩波書店, 1976).

付録I ART, SIRTの解更新

ART (Algebraic Reconstruction Technique) は, 線積分型 CT における (1) 式をいきなり (5) 式のように離散化する解法という意味で採用された, 今日では総称的に過ぎる名称である. SIRT (Simultaneous Iterative Reconstruction Technique) とともに, 線形方程式 $Hf = g$ に対して, 次の特定の反復解法を指す.

第 k 回目の解 $f^{(k)}$ に加える修正項を Δf とする.

$$f^{(k+1)} = f^{(k)} + \Delta f \quad (\text{I-1})$$

[i] ART の Row-action 更新:

$$f^{(0)} = 0 \quad (\text{I-2})$$

$$\Delta f = \frac{g_m - (Hf^{(k)})_m}{\|h_m\|} h_m \quad (m = 1, 2, \dots, M) \quad (\text{I-3})$$

ここで h_m は H の第 m 行ベクトルの転置である. 第 m 式の残差 $g_m - (Hf^{(k)})_m$ を求め, その行における係数 h_{mn} の比率を考慮して $f^{(k)}$ の各画素値に分配する. Kaczmarz 定理は上式によるが, 実際には Δf に緩和係数を付ける. この分配を独立性の高い式 (検出器) の番号 m を選びつつ行うと, 収束が速い. また, 一つの行 m について更新したとき, 新しい $f^{(k)}$ をすぐに次の行 $m+1$ の更新に用いれば加速される. 画素数の多い画像の再構成では, このような調整が効果的になる.

[ii] SIRT の同時更新:

文献[9]によれば

$$f^{(0)} = D_\rho^{-1} H^T g \quad (\text{I-4})$$

$$\Delta f = D_\rho^{-1} H^T (g - Hf^{(k)}) \quad (\text{I-5})$$

とする. D_ρ は正値の対角要素を持つ対角行列である. 線積分型 CT であれば, 逆投影画像 $H^T g$ から出発して, 視線の多く通る画素ほど小さく重み付けるある行列 D_ρ を用いると, $\|D_\rho^{1/2} f\|$ 最小の解に収束する. 数理系ではこの種の解法を Landweber 反復法と言う. D_ρ^{-1} を単なる緩和係数 $\rho (> 0)$ とし, 初期解を 0 とすることが多い. このとき, ρ 値が係数行列 H に関係するある条件を満たせば一般逆行列の解 $H^\dagger g$ に収束する [12, 13]. 付録の (VI-1) 式における

Σ_g^{-1} (重み付き最小2乗法の重み行列)と違って, 上式の D_ρ^{-1} は H^T の左に付くことに注意されたい.

付録II 行列 H の特異値分解と切り捨て

行列 A の特異値分解 $A = U\Sigma V^T$ は, 図II-1 に示すように, Σ を対角化すると同時に二つの正規直交系 $U = \{u_m (m = 1, 2, \dots, M)\}$, $V = \{v_n (n = 1, 2, \dots, N)\}$ を生成する. $u_i^T u_j$ および $v_i^T v_j$ はベクトル間の内積であるのに対して, $u_m v_m^T$ は A と同じ $M \times N$ 行列である. 仮に行列をそのまま画像と見なし, “画像の内積” を “対応する画素値の積の総和” とすれば, A の最後の級数表現は $u_m v_m^T$ を基底とする “画像” A の正規直交展開である. この関係を利用した画像や多チャンネル信号の特徴抽出が核融合研究でも早くからなされてきた. 自然科学のなかで先頭を走る部類であったように思う. 一般逆行列において「先を切り捨てる」とは, この級数表現において, 特異値 σ_m が事実上の0になった先の項を切り捨てることである.

A を係数行列とする線形方程式において, 最大特異値と最小特異値の比 $\kappa = \sigma_1/\sigma_M$ を条件数と言う. κ が大きいほど方程式は悪条件である. 正規方程式(6)のように $A^T A$ を係数行列とすると, $A = U\Sigma V^T$ を用いると $A^T A = V(\Sigma^T \Sigma) V^T$ となる. 図に示された Σ からすると, $\Sigma^T \Sigma$ は $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_M^2, 0, \dots, 0$ を対角要素とする N 次対角行列である. これを行列 $A^T A$ の固有値分解と言う. 固有値 (対角要素) は A の特異値 σ_m の2乗であり, 番号 M より先は理論的には0である (ランク落ち). よって, 正規方程式(6)は元の方程式 $Hf = g$ よりも悪条件である. 行列 A が縦に長いときは, 図において U が大きく, V が小さくなって, Σ の右側の0部が下側に移る.

Singular Value Decomposition

$$\begin{aligned}
 H &= U \Sigma V^T \\
 M \times N & \\
 &= \left[\begin{array}{ccc} \cdots & \boxed{u_m} & \cdots \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc|ccc} \ddots & & 0 & & & \\ & \sigma_m & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 0 & & \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} \cdots & \boxed{v_n} & \cdots \end{array} \right]^T \\
 &= \left(\sum_{m=1}^M \sigma_m u_m \right) V^T = \sum_{m=1}^M \sigma_m u_m v_m^T \\
 & \qquad \qquad \qquad M \times N
 \end{aligned}$$

orthonormal vectors $u_m^T u_n = \delta_{mn}$, $v_m^T v_n = \delta_{mn}$
 singular values $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_M \geq 0$

図II-1 横に長い $M \times N$ 行列 A の特異値分解.

付録III Tikhonov 正則化における観測と制約

(9)式のラグランジュ関数 $\Lambda(f)$ は, 解への制約と観測との関係を考えるとき, 都合のよい形になっている. 物体に対して新しい観測値が得られると, 不定な解に対する制約が増える. いま, 新しい行ベクトル p^T による観測値 $q = p^T f$ (p と f の内積) を得て, $(q - p^T f)^2$ の最小化を制約に加えると, ラグランジュ関数は新しい未定乗数 β を使って,

$$\Lambda(f) = \alpha \|Cf\|^2 + \beta (q - p^T f)^2 + \|Hf - g\|^2 \tag{III-1}$$

となる. このとき, $\beta p^T f$ と βq を行列 H とベクトル g のどこかの行 (例えば最下行) にそれぞれ組み込めば, 上式は

$$\Lambda(f) = \alpha \|Cf\|^2 + \|H'f - g'\|^2 \tag{III-2}$$

の形に書ける. このとき, β は重み付き最小2乗法の重み付けと等価になって, 第2項に組み込まれる. 逆に(9)式の H および g (既存の観測) の一部を取り出して第1項に移すこともできる. 観測はすなわち解に制約を与え, 良い観測は解を改善する.

付録IV Tikhonov 解の性質

(12)式において, 内積 (g, u_m) は $g^T u_m$ または $u_m^T g$ と書ける. 内積はスカラーだから, ベクトル $C^{-1} v_m$ の右に移して g をくくり出せば,

$$f_T = \left[\sum_{m=1}^M w_m(\alpha) \frac{1}{\sigma_m} C^{-1} v_m u_m^T \right] g \tag{IV-1}$$

となる. この表式を(11)式と比較すれば, 大括弧の中が $(\alpha C^T C + H^T H)^{-1} H^T$ に等しいことが分かる. また, 再構成画像 f_T が基底系 $\{C^{-1} v_m\}$ を用いた有限級数になる一方, 観測データ g は正規直交系 $\{u_m\}$ を用いた次の有限級数になる.

$$g = \sum_{m=1}^M (g, u_m) u_m \tag{IV-2}$$

そして, 低域フィルタ $w_m(\alpha)$ によって削り捨てられた部分

$$g - Hf_T = \sum_{m=1}^M [1 - w_m(\alpha)] (g, u_m) u_m \tag{IV-3}$$

が残差である. この表現から, Parseval 公式を思い出しつつ, ただちに残差2乗和の表現

$$\epsilon^2(\alpha) = \|Hf_T - g\|^2 = \sum_{m=1}^M [1 - w_m(\alpha)]^2 (g, u_m)^2 \tag{IV-4}$$

が得られる. (12')式から, この $\epsilon^2(\alpha)$ は α とともに単調に増加する. すなわち, 正則化を強めるほど, 再構成画像がデータから離れる. この単調性は, 実際のデータ処理において, 計算が誤りなくなされたかの検定に役立つ.

また一般に, 線形逆問題では, (16)-(17)式のように, 解の基底 $b_n(r')$ の線形変換が観測データの基底 $B_n(r)$ になるが, Tikhonov 正則化では

$$H(C^{-1}\mathbf{v}_m) = \sigma_m \mathbf{u}_m \quad (m = 1, 2, \dots, M) \quad (IV-5)$$

が成り立つ。線積分型 CT の言葉で言えば、求める画像の基底となる画像 $C^{-1}\mathbf{v}_m$ の投影が投影の基底 \mathbf{u}_m になる。 σ_m は \mathbf{u}_m のノルムを 1 にする規格化の係数である。 $C=I$ のとき、この一対の基底系 $\{C^{-1}\mathbf{v}_m\}, \{\mathbf{u}_m\}$ がそれぞれ正規直交系である。この性質は、Radon 逆問題における Cormack 級数展開に匹敵する。Tikhonov 正則化においては、“任意”の線形逆問題に対して、項数が有限の範囲で完備性がある。

ここで、 $w(\alpha)$ をステップ関数に置き換えて TSVD 法に移ると、(IV-1)式および(IV-3)式に対応する表現

$$\mathbf{f}_{\text{TSVD}} = \left[\sum_{m=1}^{M_C} \frac{1}{\sigma_m} C^{-1}\mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^T \right] \mathbf{g} \quad (IV-6)$$

$$\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{TSVD}} = \sum_{m=M_C+1}^M (\mathbf{g}, \mathbf{u}_m) \mathbf{u}_m \quad (IV-7)$$

が得られる。このとき $C=I$ と置き、 M_C を特異値が 0 に落ちる直前の番号にすると、 \mathbf{f}_{TSVD} が一般逆行列の解になるとすれば、(IV-6)式を(8)式と照合して、一般逆行列 H^\dagger は

$$H^\dagger = \sum_{m=1}^{M_C} \frac{1}{\sigma_m} \mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^T \quad (IV-8)$$

と書けるはずである。適当な教科書で確かめられたい。右辺の $\mathbf{v}_m \mathbf{u}_m^T$ は縦長の $N \times M$ 行列である。一般逆行列の解は Tikhonov 型の解のなかで最も正則化が弱い。

付録V 微分演算子・参照画像を入れた Tikhonov 解 ラグランジュ関数

$$\Lambda(\mathbf{f}) = \alpha \|C(\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}})\|^2 + \|H\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 \quad (V-1)$$

を最小化する \mathbf{f} を求めよう。この最小化は、 $\|H\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$ 最小化の正規方程式(6)を踏まえれば、簡単な書き換えで得られる。

ベクトル \mathbf{a} のノルム $\|\mathbf{a}\|$ の定義から、 $\|\mathbf{a}\|^2 = (\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \mathbf{a}^T \mathbf{a}$ が成り立つ。二つのベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} を縦に積み上げたベクトルについて、次の関係がある。

$$\left\| \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \right\|^2 = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^T & \mathbf{b}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} = \sum_k a_k^2 + \sum_k b_k^2 \quad (V-2)$$

よって、

$$\Lambda(\mathbf{f}) = \left\| \begin{bmatrix} H\mathbf{f} - \mathbf{g} \\ \alpha^{1/2} C(\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{ref}}) \end{bmatrix} \right\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} H \\ \alpha^{1/2} C \end{bmatrix} \mathbf{f} - \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \alpha^{1/2} C\mathbf{f}_{\text{ref}} \end{bmatrix} \right\|^2 \quad (V-3)$$

である。最後の表現は、縦に大幅に長くなった新しい H および \mathbf{g} に関する最小 2 乗法に相当する。縦長になったから解は一意になる。(6)式と照合すれば、上式の $\Lambda(\mathbf{f})$ を最小化するための正規方程式はただちに

$$\begin{bmatrix} H \\ \alpha^{1/2} C \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} H \\ \alpha^{1/2} C \end{bmatrix} \mathbf{f} = \begin{bmatrix} H \\ \alpha^{1/2} C \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \alpha^{1/2} C\mathbf{f}_{\text{ref}} \end{bmatrix} \quad (V-4)$$

と書ける。縦に積み上げた行列・ベクトルの転置と積がどうなるか手元で確認すれば、上式は

$$(\alpha C^T C + H^T H) \mathbf{f} = H^T \mathbf{g} + \alpha C^T C \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (V-5)$$

と書き下せる。右辺を少し整理して、逆行列を両辺の左から掛けると、(20)式が得られる。

付録VI ベイズ理論による正則化の一般式

Liら[43]は、ベイズ定理を使って Tikhonov 解を(32)式のように拡張したが、論文には重み付き最小 2 乗法を取り込んだ式を書いている。(22)式の $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ において、各データ g_m に加わる互いに独立な正規性誤差の分散を σ_m^2 とする。このとき、 $P(\mathbf{g}|\mathbf{f})$ はこれら σ_m^2 を対角要素とする対角行列 Σ_g をもつ多次元正規分布になる。その結果、(32)式は次式のように一般化される。

$$\mathbf{f}(\theta) = (\Sigma_f^{-1} + H^T \Sigma_g H)^{-1} H^T \Sigma_g^{-1} (\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{ref}}) + \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (VI-1)$$

ここで、 H^T の右に Σ_g^{-1} に入るのは、重み付き最小 2 乗法を用いるときの普通の表現である。対角行列の逆行列は、対角要素をそれぞれ逆数にするだけであるから、 σ_m^2 の小さいデータ g_m に大きな重みが付く。重み付き最小 2 乗法をやめて $\Sigma_g = \sigma^2 I$ と置くと、 $\Sigma_g^{-1} = \sigma^{-2} I$ であるから、上式は

$$\mathbf{f}(\theta) = \sigma^{-2} (\Sigma_f^{-1} + \sigma^{-2} H^T H)^{-1} H^T (\mathbf{g} - H\mathbf{f}_{\text{ref}}) + \mathbf{f}_{\text{ref}} \quad (VI-2)$$

となる。右辺の左端の σ^{-2} をすぐ右の括弧のなかに組み込めば、上式は(32)式に帰着する。Liらは、(VI-1)式の $\mathbf{f}(\theta)$ を導いた上で、実際の実験データ処理では重み付き最小 2 乗法を使わず、さらに $\mathbf{f}_{\text{ref}} = \mathbf{0}$ としている。

再構成画像を非負値にしたければ、ポアソン分布についてベイズ推定論を立てるのも方法であろう。



いわま なおふみ
岩間 尚文

1972年名古屋大学博士課程修了(工学)。同大学の助手・助教授を経て、富山県立大学・大学院の創設ならびに大同大学情報学部の新設に加わる。NINS 新分野創成センターのイメージングサイエンス創成に貢献し、現在は核融合科学研究所の共同研究員として働いている。夏になれば、自由が得られるのがうれしい。



3. パターン認識入門～人工知能の基盤技術

3. Pattern Recognition and Image Informatics

内田 誠一

UCHIDA Seiichi

九州大学大学院システム情報科学研究院

(原稿受付：2016年6月23日)

パターン認識とは、画像などのメディアデータおよび各種センサ信号を対象として、それらの分類および類似性解析の根幹を担う技術である。計算機科学の分野では、人工知能の中心的課題の一つとして非常に活発な研究がなされている。本章では、パターン認識の基本的な考え方を平易かつ直感的に論ずる。また、パターン認識の根幹課題である「識別」について、最近傍法、サポートベクトルマシン (SVM)、ディープニューラルネットワーク (DNN) という代表的な3つの手法の概要を紹介する。

Keywords:

Pattern recognition, classification, feature extraction, nearest neighbor, support vector machine, deep neural networks

3.1 はじめに

パターン認識とは、「人間の持つ多様な認識機能」を計算機において実現することを目的とした理論・技術である。「そもそも『認識』とは何か」という議論は古くギリシャ哲学からの命題にもなっているが、本稿の範囲では「これは何ですか?」という問いに答える分類技術と違って差し支えない。例えば、バスが写った画像を計算機に入力して「これはバスです」と答えさせるタスクがパターン認識 (この例の場合は画像認識) である。なお、認識は知能の重要な機能であるため、パターン認識はいわゆる人工知能の一分野と位置付けられている。

プラズマ研究の分野でのパターン認識応用としては、画像認識を連想するのではないだろうか。プラズマのイメージング計測ではプラズマを様々な手法で画像化する。このためイメージ画像から物理法則を抽出する際に、パターン認識の技法は非常に有用なツールになると考えられる。また画像だけでなく、物理現象の様々な測定値もやはりパターンとみなすことができる、それらを分類したり、同一視したりする場合には、本章で述べる方法が利用できる。

パターン認識が扱う問題を形式的に定義すると以下のようになる: 「入力されたパターン x が、事前に設定された C 個のクラス (分類先) のうちのどの1つに属するかを決定する」。パターンという用語はデータと読み替えたほうが分かりやすいかもしれない。冒頭の例では、パターン x が画像であり、 C 個のクラスが認識したい物体 (Visual object) の種類の集合である。この様子を図1に示す。左側が入力パターン x の例であり、右側がクラスである。

パターン認識の興味深い点は、「人間にはほとんど無意識にできるのに、計算機には非常に難問である」という事

実である。本稿の読者は今まさに文字を読んでいる。すなわちこれは各文字 (画像) がどの文字種であるかを逐次認識していることになる。実はその前に、どこに文字があるかという検出問題 (画像の一部が文字か文字でないかを分類する問題に相当) や、文字行から各文字に「切り出す」処理もやっている。そのことを意識しながら本稿を読んでいる読者はいないと思われる。一方、計算機にとってこれは難問中の難問である。実際、認識のために「ここに1文字がある」と切り出すためには、その前に「その黒画素の塊が1文字である」と認識しなくてはならない。したがってパターン認識は、切り出しと認識という、いわゆる「卵と鶏の問題」を内包しているのである。紙面上の文字はまだ簡単なほうである。我々が日々目にしている情景は実に様々な物体で構成されており、それらを個々に切り出しな

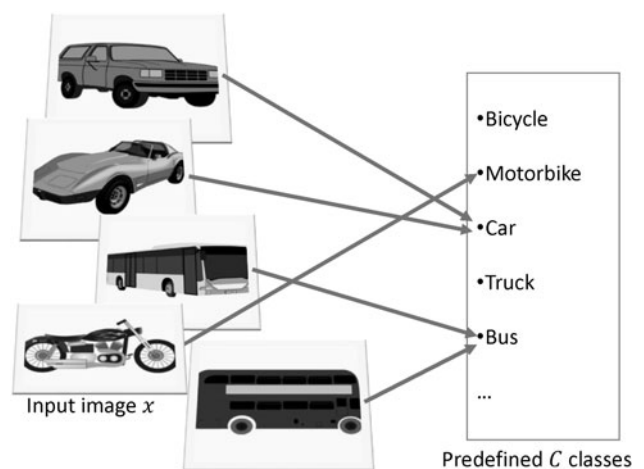


図1 パターン認識の目的 (画像認識の場合)。

が認識する技術は、現在でもやはり難問として君臨している。

難問とはいえ、計算機によるパターン認識が実用されるケースはますます増えている。ハガキの郵便番号認識、バーコードリーダー、デジカメの顔検出、指紋照合などは、実用化されて久しい。昨今では、これらに加えて、スマートフォンの音声入力、画像検索（画像をクエリとした検索）、自動運転、家庭用ロボットなどが挙げられる。これらいわゆる人工知能として喧伝されている実用技術の多くは、最近の劇的な認識精度向上により初めて実用化に至ったものである。

こうした認識精度向上の背後には、次の三つの理由が存在する。すなわち、第一に大規模なデータセットの整備、第二にディープニューラルネットワークのような複雑な認識手法の開発、そして第三にオープンサイエンス、である。オープンサイエンスの考え方により、これら大規模データと認識手法のソースコードが「誰でもダウンロードしてすぐに使える」ようになってきている。こうして参入障壁が低くなったことで、パターン認識研究は今後しばらく加速度的な進歩を遂げるものと予想されている。

本稿の主目的は、パターン認識の基本的な考え方を平易かつ直感的に論ずることにある。したがって具体的なソフトウェアやライブラリの使い方といったハウツーについては論じないし、数式を用いた手法の詳細解説についても割愛する。本稿で興味を持った読者は、必要と思われる手法について、Webや専門書を当たっていただければ幸いある。そういう場合に、本稿で述べた基本的な考え方が役に立つことを願うばかりである。なお、本稿は完全なる初学者を対象としており、物理学や数学のエキスパートである本誌の読者には、極めて冗長に思われる個所も多いと思われる。専門分野の違う筆者による解説ということでご容赦いただきたい。またパターン認識の中心的役割を果たす識別法については、最近傍法、サポートベクトルマシン(SVM)、ディープニューラルネットワーク(DNN)という代表的な3手法について各々章を設け、極力平易に解説した。

パターン認識についてさらに学びたい読者は、入門書として定評のある[1]や、より実用的な入門書として[2]などがある。さらに体系的に学びたい場合は、バイブルとされる[3,4]を勧める。後述のサポートベクトルマシンや

ディープニューラルネットワークのように個別の手法についても、それらの重要性から、良質の入門書が近年多数発刊されている。

本誌においても今年5月号に、“核融合プラズマ研究におけるデータマイニングの活用”という小特集が組まれている。同特集の文献[5]においては、パターン認識を含めた様々な解説がなされていて参考になる。同文献に比べて、本稿は特にパターン認識にフォーカスし、その基本となる「考え方」に重点を置いて解説したものである。

3.2 パターン認識の問題設定

パターン認識は、「入力されたパターン x が、事前に設定された C 個のクラスのうちのどの1つに属するかを決定する」問題である。このシンプルな問題でも、何を認識対象とするか(3.2.1節)、その場合のクラスは何か(3.2.2節)、パターン x をどのように表現するか(3.2.3節)、どのようにクラスに割り当てるか(3.2.4節)といった、バリエーションがある。さらに実際にパターン認識システムを実装して性能評価までする場合には、どのようなデータを準備する必要があるか(3.2.5節)、またどのように認識手法を評価するか(3.2.6節)、といった課題もある。人工知能が喧伝され、「何もかも自動にできる」ように誤解されがちであるが、実際にはこのように事前に考えなくてはならないことは結構ある。再考や試行錯誤など泥臭い作業も往々にして必要になる。

以下、図2に従って、最初に考えるべきことから順に、どのようにパターン認識問題を設定していくかを解説する。その後次節以降にて、実際の問題の解き方について解説する。

3.2.1 対象とするパターン ～何を認識するか?

最初に考えるべきことは、当然ながら、「何を認識するか」すなわち対象の設定である。3.1章で述べた実応用例からもわかるように、パターン認識の対象には実に様々なものがある。画像や音声といったメディアデータ、行動データ、人流や交通流データ、気象観測データ、文書データ、体重・身長・血圧のようなバイタルデータもある。物理実験で得られる測定データも対象となりうるであろう。詳細に見ればさらにバリエーションは多い。実際、画像だけを取り上げても、さらに多様なものがある。顔画像、文字画像、航空写真や衛星画像、情景画像、監視画像、人物画像、物

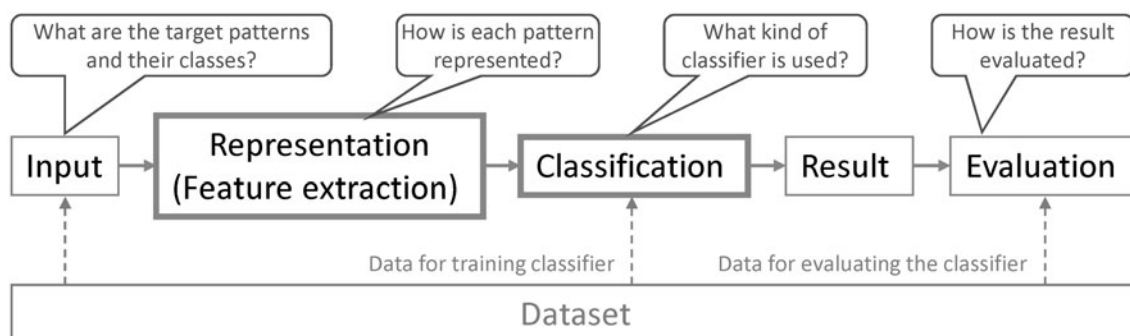


図2 パターン認識の問題設定。

体画像（例えば商品画像）、虹彩・指紋・掌静脈、そして動画像といった具合である。

3.2.2 クラスの設定 ～何に認識するか？

次に考えるべきことは、パターンを「何に認識するか」すなわち分類先としてのクラスの設定である。対象とするパターンとクラスが定めれば、まずはパターン認識問題の目的が定まることになる。

冒頭で述べたように、パターン認識では C 個のクラスを「事前に」設定しておく必要がある。性別認識の場合、男と女の2クラスとなる。手書き数字認識の場合、“0”から“9”までの10クラスである。同じ文字認識でも漢字認識となると数千のクラスとなる。図1の例では、乗り物の種別がクラスとなっている。音声認識では、数十クラスの音素（およそ単一の発音記号に対応するレベル）が最初の認識対象である。ただしそれだけで終わることはなく、次に一連の音素の認識結果を組み合わせることで単語を認識する。さらに一連の単語の認識結果を組み合わせることで文を認識する場合もある。

以上のことからわかるように、パターン認識では事前に設定されたクラス以外の認識結果を与えることはできない。人間であれば、想定外の入力についても「なんとなく想像で」認識できるのとは対照的である。なお、「事前に想定されたどのクラスでもない」という $C+1$ 番目のクラスを設定することもある。これは棄却（リジェクト）と呼ばれる。無理にいずれかのクラスに認識してしまうよりは、「わからない」と答えてほしい場合には有効である。

問題によっては、クラスの設定そのものが自明でないこともある。例えば感情認識をする場合、我々の様々な感情を有限のクラスで表現する必要がある。マウスや線虫などの生物の行動様態を認識する場合も、妥当なクラスを事前に確定できないだろう。こうした場合は、次のようなボトムアップな方針でクラスを設定する方法が考えられる。まずパターン（データ）を大量に集める。次に、それらを似たものどうしを集めていくつかのグループに分ける（いわゆるクラスタリング）。そして最後に各グループについて、そこに属するパターン群に適したクラス名をつければよい。グループ分けには、 k -平均法[5]などのクラスタリング法が利用できる。ただしこの方針でも、いくつのグループに分けるかは自明ではないので、試行錯誤が必要になる場合もあるだろう。

やや特殊な形態として、1クラスだけを仮定する場合もある。異常認識はその例である。異常認識では、どんな異常が起こるかが事前にわからないことが多い。そこで、計算機には「正常なケース」だけを教えて認識できるようにしておき、正常と認識できなければ異常と判断するという対応が採られる。結果的に正常・異常の区別をしているので2クラス認識とも言えるが、その原理から1クラス認識と呼ばれることが多い。

もう一つの特徴的な形態として、顔画像からの年齢認識や画像内の対象計数のように、クラスが数値・数量で表される状況がある。これは、入力パターン x に対して適切な数値 $y \in \mathbb{R}$ を返す関数 $y = h(x)$ を決定する問題である。従っ

て、 C 個の（すなわち離散有限個の）クラスに分類することを目的としたパターン認識というよりは、一種の回帰問題として扱うほうが自然であろう。

3.2.3 特徴抽出～パターンを表現する

ここまで「何を何に認識するか」という目的を定めたので、次は内側に入って「どのように認識するか」を考えることになる。この「内側」で最初に考えるべきことは、特徴抽出（feature extraction）と呼ばれる作業である。これはパターンをどう表現するかという問題である。簡単な作業に見えるかもしれないが、実は認識性能を左右する非常に重要な鍵となる。

3.2.3.1 特徴ベクトル

最も一般的なパターンの表現形態は、複数の数値の組すなわちベクトル表現である。これは「特徴ベクトル」と呼ばれる。例えば、風邪をひいているかいないかを認識する場合は、各人（体温、咳の回数）の2次元ベクトルもしくは（体温、咳の回数、喉の赤さ）の3次元特徴ベクトルで表現することが考えられる。高血圧か否かを推定する場合なら、血圧値という1次元ベクトルすなわちスカラーで表現してもよいだろう。

画像のようなメディアデータは、高次元ベクトルとなることが多い。例えば 100×100 画素からなるグレースケール画像ならば、 $100 \times 100 = 1$ 万個の画素値（各画素の明るさ）があるので、それらすべてを列挙したベクトル（ビットマップ特徴と呼ばれる）は1万次元となる。通常我々が生きる物理空間内の1点が高々数次元の低次元ベクトルで表現されるのに対し、パターン認識では非常に高次元なベクトルが現れることも珍しくない。

注意すべきは、多くの場合、次元の異なるパターンを同一の認識手法では扱えない点である。例えば 50×50 画像は2500次元ベクトルとなるので、 100×100 画像と一緒に扱うことはできない。したがって、大きさの異なる画像を扱う場合には、事前に拡大縮小処理を行って同一の大きさ（すなわち次元数）にしておく必要がある。

関連して、系列データ、特に時系列データからの特徴抽出も単純ではない。各時刻の特徴が D 次元のベクトルであり、系列長が T で一定ならば、全体を1つの $D \times T$ 次元ベクトルと見なせる。これをそのまま特徴ベクトルにはせず、文献[6]のように周波数解析を行い、低周波数のスペクトルを改めて特徴ベクトルとしてもよい。いずれにせよ、実際には、系列長 T が一定しない場合のほうが多い点が問題になる。この場合、上記のサイズの違う画像を扱う場合と同様、長さが強制的に T となるように正規化する（もしくは打ち切る）方法が最も単純である。また系列の順序情報を放棄し、 T 個の D 次元ベクトルの集合と見なし、 T 個中どのようなベクトルが何回出現しているかをヒストグラム表現する方法もある。一方、後述する最近傍法の枠組みならば、系列長の異なるパターンであっても、それらの間に距離（もしくは類似度）さえ計算できれば識別可能であるので、特徴抽出の段階では次元を統一する必要はない。実際、音声認識やジェスチャ認識の多くはこの方法に依っている。

3.2.3.2 特徴空間

各パターンを D 次元のベクトルで表現できれば、1つのパターンは D 次元空間の1点と見ることができる。この空間のことを (D 次元)「特徴空間」と呼ぶ。先の(体温, 咳の回数)の特徴の場合, 各人は2次元空間の1点になる。同様に, 100×100 画像ならば, 図3上側に示すように, 1万次元特徴空間の1点として表される。このような高次元空間に違和感を覚える読者も多いかもしれない。しかし, パターンの分布(3.2.3.3項)や識別手法を理解するうえで, 非常に便利なので, 是非慣れていただきたい。

3.2.3.3 パターンの分布

今, N 個のパターンを準備したとすると, それらの特徴空間において N 個の点群となる。もしそれらが同一クラスのパターンの集合ならば, 互いに類似した特徴を持つだろうから, ベクトルとしても類似したものとなり, 結果的に特徴空間において密集した点群になるだろう。さらに異なるクラスのパターン集合を準備したなら, それらは先の点群から離れたところに, やはり密集した点群を成すであろう。

この密集の様子すなわち「パターンの分布」を把握できれば, 認識精度の予測が可能になる。例えば, 2つのクラス A と B を仮定し, 各クラスのパターン分布が正規分布だったとする。その平均はそのクラスの最も平均的なパターンであり, それに類似したパターンが頻出することになる。分散はそのクラスに属するパターンの変動の大きさに相当する。もし2クラスの平均が近ければ, 分布がオーバーラップしている可能性が高い。分散が大きければなおさらである。この分布がオーバーラップしている部分は, 要するにクラス A でも B でもありうるわけで, 区別がつかない部分であり, したがって原理的に正しく認識できない部分である。よって, この A, B の2クラス認識問題は難しいということになる。逆に2分布が離れていれば容易であろう。

3.2.3.4 特徴が一意でないこと

ここで, 「パターンの特徴表現は一意ではない」という事実を今一度確認しておきたい。先述の例では, 風邪を認識するために(体温, 咳の回数)“もしくは”(体温, 咳の回数, 喉の赤さ)とした。これ以外にも, 体温のみを特徴としてもよいし, 血糖値を加えてもよい。さらに, 奇異に見えるかもしれないが, (体温, 咳の回数, 体温×咳の回数)や(体温, 咳の回数×体温, 咳の回数×体温×体温)でもよい¹⁾。このように「特徴はこれにすべし」という絶対的な決まりはない。実際, 極端な例ではあるが, 風邪を認識するために, 身長を使っても, 形式的には何の問題もない。

画像についても, 多種多様な特徴表現が存在する。図3は画像の特徴表現の例である。上段は最も基本的なビットマップ特徴である。先述したように, 100×100 画像が1万次元の特徴ベクトルとして表現されている。いわゆるフィルタリング処理により, 画像をぼかしたり, ノイズ除去を行ったり, 逆にエッジ(明るさが急激に変化する箇所)を強調したりすると, 画像の大きさは変わらないために次元数は変わらず1万であるが, パターンの分布の様子は大きく変わることになる。したがってこのような画像加工も一種の特徴抽出と言える。さらに図3下段のように, 抜本的に異なる表現形式もある。これは画素値ヒストグラム特徴であり, 画像中に画素値(明るさ) i の画素の個数を列挙してできたベクトルである。グレースケール画像の多くは256段階の明るさで表現されているので, この特徴ベクトルは256次元となる。

このように特徴表現が変われば, 特徴空間の次元が変わる。その変わり方は時に劇的ですからある。上記の画像の例では1万次元空間と256次元空間である。空間の大きさは次元数のべき乗なので, 単に「約40倍」と言うだけでは済まない差異がある。

さらに重要なことは, 特徴表現が変われば, パターンの

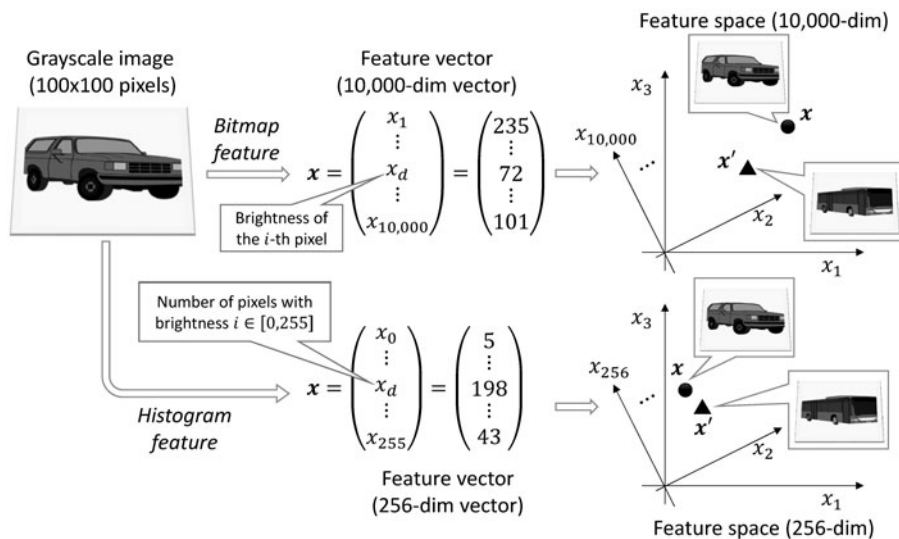


図3 特徴ベクトルと特徴空間。

1 この「最初からある特徴を組み合わせて別の(より高次元の)特徴を作る」という考え方は, パターン認識において重要なテクニックの一つである。形式的には, 原特徴ベクトル x に対しベクトル値関数 $f(x)$ を作用させていることになる。本稿では詳述できないが, パターン認識において「カーネル」という用語が出てくれば, このテクニックが暗に使われていることが多い。

分布も変わる点である。特に、分布が変われば、3.2.3.3で述べたように、オーバーラップの状況も変わる点に注意されたい。各人を身長という1次元特徴だけで表現したとき、風邪クラスと健康クラスの2クラスは大いにオーバーラップするだろう。一方、同じ1次元でも体温のほうがよりオーバーラップが少ないだろうし、(体温、咳の回数)の2次元にすればさらにオーバーラップは少ないだろう。オーバーラップの度合いはそのまま認識精度に影響する。以上より、特徴表現が認識性能を左右する非常に重要な鍵となることがわかる。

3.2.3.5 どのような特徴が望ましいのか？

パターン認識の困難さの一つは、各認識タスクについて、どのような特徴が最適なのか、自明ではないという点である。上に述べたように一意でないので、様々に考える特徴表現の中から、何とかして望ましいものを見出す必要がある。ここでどのような特徴が望ましいのであろうか？ 一般には以下の3つの性質を満たすものである。

1. クラスが違えば大きく異なる。
2. 同じクラスであれば、多少異なるパターンであっても類似する。
3. 次元が低い。

第一の性質は自明であろう。風邪クラスの人と健康クラスの人で、身長はそう変わらないだろうが、体温は大きく変わるだろうから、後者のほうが望ましい。「分布の平均が各クラスで大きく異なる特徴」と言ってもよいだろう。その言い方を借りれば、第二の性質は、「各クラスの分布の分散が小さくなる特徴」となる。これは、同じクラスに属するならば、個々のパターン間の差異に鋭敏に反応することなく、なるべく似たような特徴になってほしい、という意味である。そうすれば結果的に各クラスはコンパクトな分布となり、オーバーラップは減るだろう。

困ったことに、この第一と第二の性質は矛盾した要請となっている。第一の性質を「パターンの差異に対して敏感」、第二の性質を「パターンの差異に対して不感」と言い直せば、その矛盾がより明確になる。ただし、全く絶望的というわけでもない。すなわち、前者は「クラス間の差異」、後者は「クラス内の差異」という違いがある。従って、我々が為すべきは、クラス内で起こりそうな差異には不感でクラス間の差異には敏感な特徴を見出すこととなる。

第三の性質「次元が低い」は、要するに、限られたパターンでは、高次元空間内のパターン分布を把握できないことに起因した要請である²。先に認識精度を確保するためにはパターンの分布の把握が重要であると述べた。我々は無限にパターンを準備することができないので、有限の N 個のパターンから、分布を推定する必要がある。ここで、パターンの次元 D が N より大きければ、必ず N 個のデータは超平面上に分布するようになってしまう。(例えば2次元空間の2点は必ず直線上にあり、3次元空間の3点は必ず平面上にある。)したがって、真の分布が非常に複雑であっても、パターン数 N が少なければ、その真の分布を

正しく把握できず、単に(D 次元空間の線形部分空間である)超平面上にあるように誤解してしまう。

これは、いわゆる「次元の呪い[6]」と呼ばれる状況である。特徴空間の体積は、パターンの次元 D に対して指数関数的すなわち爆発的に増加する。この広漠なる空間に少数の点群しかなければ、分布が把握できず、その状態で認識規則を設定しても、十分な認識精度が得られない可能性が高い。先の(体温、咳の回数)と(体温、咳の回数、喉の赤さ)についても、パターン数が少なければ、前者のほうが高い認識精度を達成する可能性すらある。また、画像を1万次元で表すと、相当量のパターンがなければ、それらの分布を正しく把握できないことになる。

3.2.3.6 望ましい特徴をどう見出すのか？

ここまでの議論を受け、読者は、「結局、望ましい特徴をどうやって見出すのか？」と疑問に思うだろう。「特徴抽出に王道なし」という言葉があるように、残念ながら、この問題に対する絶対的な方法を存在しない。ただし、無策というわけでもない。具体的な対処法は次の通りである。

1. 対象とするパターンの性質をよく見て、経験的に(すなわち職人技で)決める(ヒューリスティクス)
2. なるべく多くの特徴を一旦列挙しておいて、その中から有効そうなものだけを選択する(特徴選択)
3. なるべく多くの特徴を一旦列挙しておいて、それらから良さそうな特徴を合成する(低次元部分空間)
4. すべてを機械学習の枠組みに任せる。

紙数の都合上、各対処法について詳述はできないが、機械学習による特徴抽出の方法については、3.5章でその一例を述べる。特徴選択については、利用する特徴を試行錯誤しながら徐々に増やしていく方法(山登り法)が最も単純である。要するに加えて性能が上がる特徴を選択する方法である。より洗練された方法であるRandom Forestや決定木("C4.5"が代表的な構成アルゴリズム)に関する解説を当たっていただきたい。低次元部分空間については、主成分分析(PCA)と強く関連する部分空間法[1]やFisherの線形判別法[1]が基本である。

3.2.4 パターンのクラスを決定する～パターンの識別

特徴抽出が終われば、いよいよ「パターン x が C 個のクラスのうちのどの一つに属するか」を決定することになる。この処理を(狭義の)パターン認識と呼ぶこともあるが、本稿ではより明確にすべく「識別(classification)」と呼ぶ。この決定規則すなわち $x \in \mathbb{R}^D$ から $c \in [1, C]$ への写像は、識別器(classifier)と呼ばれる。

図4は特徴空間による識別の様子である。このように特徴空間は、識別境界(classification boundary)と呼ばれるクラス間境界により分断される。入力 x のクラスは、分断された領域のいずれに入るかによって定まる。また同図に示しているように、識別器は学習パターン(後述するように「例題」)を用いることで学習すなわち設計される。そしてその識別器により識別境界が与えられることになる。

パターン認識研究の長い歴史の中で、実に様々な識別手

² 本誌記事[5]で触れられている「過学習」も本質的には同じ原因で生じている。

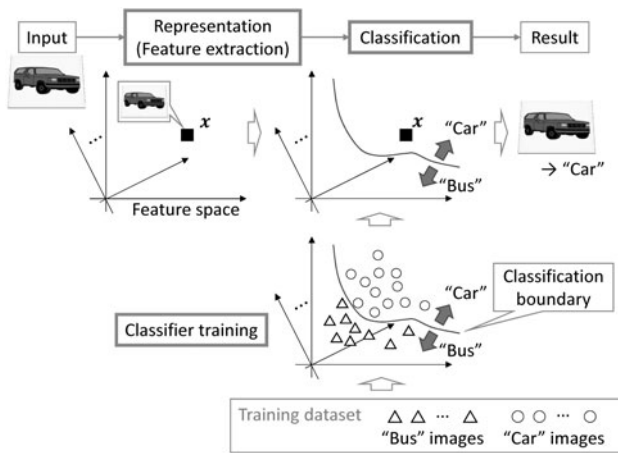


図4 識別器の学習と利用.

法が提案されてきた。「いろいろな識別手法があるようだが、自分の課題に対して一体どれを使えばいいのか？」—

実は各課題に対してどの識別手法を選ぶかは中々の難問である。準備可能な学習パターンの量、対象の分布の複雑さ、クラス数、実装の手間など、様々な要因によって選択すべき認識手法も変わってくる。

本稿では、互いに性質が大きく異なり、かつ代表的な次の3つの手法について解説する。

- ・最近傍法 (3.3章)...長所: 原理が非常に単純。学習パターン (後述) が多ければ、高い認識性能が見込める。
- ・サポートベクトルマシン (SVM) (3.4章)...長所: 学習パターンが少ない場合に有効。識別に真に必要な学習パターンだけを自動選択するので、効率的。
- ・ディープニューラルネットワーク (DNN) (3.5章)...長所: 学習パターンが十分あれば、非常に高い認識性能が得られる。

3.2.5 学習パターンとテストパターン

3.2.5.1 学習パターン

ある認識課題に対して、実際に特徴を設計したり識別器を設計したりするためには、何らかの「例題」が必要である。ここで例題とは、「このパターン x なら、このクラス c に認識してほしい」という、事前に正解クラスが分かっているパターンのことである。これを学習パターンと呼ぶ。手書き数字認識ならば、複数人に依頼して書いてもらった“0”から“9”の画像が学習パターンとなる。 N 個の学習パターンの集合を $\{x^1, \dots, x^n, \dots, x^N\}$ と表す³。各学習パターンに正解が付随していることを明示したければ、 $\{(x^1, c^1), \dots, (x^n, c^n), \dots, (x^N, c^N)\}$ と表してもよい。これら学習パターンをできる限り正しく認識できるように (すなわち x^n の写像結果が c^n となるように)、特徴抽出や識別器を構築することになる。

一般に、学習パターンは多ければ多いほど良い。先述の通り、学習パターンは「例題」であるから、なるべく見習

うべきお手本が多いほうがよいわけである。その一方で、学習パターン数 N が数万、数十万となると、それぞれに正解クラスを付与するのも大変になるし、そもそも集めること自体が困難な場合も多い⁴。

3.2.5.2 テストパターン

構築したパターン認識システムの性能を評価する場合、学習パターンとは別のパターン集合を準備する必要がある。これはテストパターンと呼ばれ、それらをどのくらい正しく認識できるかによって、識別性能を評価する。このため、テストパターンについても、学習パターン同様、正解クラスがわかっている必要がある。また、正しい精度評価のためには、やはりなるべく多くのテストパターンが必要になる。

3.2.5.3 学習パターンとテストパターンの関係

正しい精度評価のためには、学習パターンとテストパターンを混ぜないほうがよい。すなわち、評価に用いるテストパターンを、識別器設計用の学習パターンとして利用してはならない。簡単に言えば、混ぜてしまうと「カンニング」になってしまう。例えば3.3章で述べる最近傍法の場合、学習パターンをそのままテストパターンとして用いると、すべてのテストパターンは100%精度で正しく認識できてしまう。これは決して歓迎すべき状態ではない。すなわち、本当に未知のパターンに対する評価になっていないので、現実的な状況での精度評価になっていない。

一方、学習パターンとテストパターンが大きく異なる分布を持って、妥当な精度評価にはならない。例えば、A国で集めた顔画像を学習パターンとして顔認識システムを構築し、その精度評価をB国民でやると、精度は過少評価されるだろう。やはり同一の国に住む別の人の顔を使うべきであろう。

3.2.5.4 パターンが少ない場合の対処法

もし少数の学習パターンしか集まらない場合、高い識別性能を望むのは難しくなる。3.2.3.5項で述べた「次元の呪い」の問題も発生し、パターンの分布が把握できなくなるためである。とはいえ、物理や生物などサイエンスの分野では、実験コストもあり、パターンを大量に集めることが難しいケースも多いと思われる。もちろん、認識率が多少低くても客観的な評価としては十分な場合もあるだろう。しかし、やはり高い認識率が必要な場合もあるだろう。

パターンが少ない状況に対する万能薬は存在しないが、3.4章で述べるSVMは、少数学習データでも比較的良好な識別性能を与える手法である。また例えば手元にある学習パターンから人工的にパターンを生成することは、データ拡張 (data augmentation) とも呼ばれ、工学の分野 (特にDNNを使う際に) でよく行われる。画像認識の場合、学習パターンの画像を上下左右に反転させたり、数画素ずらしたり、回転させたりすると、学習パターンを相当数増

3 本稿では下添え字がベクトルの何番目の要素かを表すため、上添え字により何番目の学習パターンかを表す。べき乗と混乱しないよう注意されたい。

4 ただし最近ではCrowd Sourcingと呼ばれる方法で、大量の学習データが集められている。これは、インターネット上に正解クラスを付与してほしいパターンを置いておき、実際に付与してくれた人に謝礼等の報酬を払うシステムである。Amazon Mechanical Turkがその代表格である。

やせる。

精度評価の際に、学習・テストパターンの両方を合わせても少数しかない場合もある。この場合、パターン集合の使い方を工夫することで、極力妥当な精度評価を行える[1]。例えば交叉検定法 (cross-validation) では、まず全パターン集合を L 個の部分集合に分割する。そしてその部分集合のうちの1つを除いた $L-1$ 個分を学習パターン集合として識別器を構築し、その除いた1つをテストパターン集合として評価を行う。評価に用いる部分集合を変えながら、同様の評価を L 回繰り返す、得られた L 個の評価値を平均することで、最終的な評価値と見なす。

3.2.6 評価指標

構築したパターン認識システムを性能評価する際、最も代表的な指標は「認識率」(recognition rate) である。要するに、すべてのテストパターンのうち、正しく識別されたものの割合である。

より詳細な評価が必要な場合、混同行列 (confusion matrix) も便利である。例えば病気の診断の場合、健康な人を病気と誤認識した場合と、病人を健康と誤認識した場合とでは、同じ誤認識であっても後者のほうが深刻である。このように誤認識毎に重要度が異なる場合は、認識率という単一指標よりも詳細な評価が必要になる。混同行列は、クラス c を c' に誤認識した個数を c 行 c' 列の要素とした $C \times C$ 行列である。どのクラスに誤認識が多いかだけでなく、どのクラスがどのクラスに間違いやすいかもわかる。理想的な識別器ならば、混同行列が対角行列になる。

認識に要する時間すなわち計算量を評価指標とする場合もある。後述の最近傍認識の場合、一般にデータ数を増やせば増やすほど認識率は向上する。その一方で計算量が膨大になり、実用に供するのが難しくなる。

3.3 最近傍法によるパターン認識

3.3.1 最近傍法の原理

先に3.2.4節で「『わかりやすさ優先』ならば最近傍法」

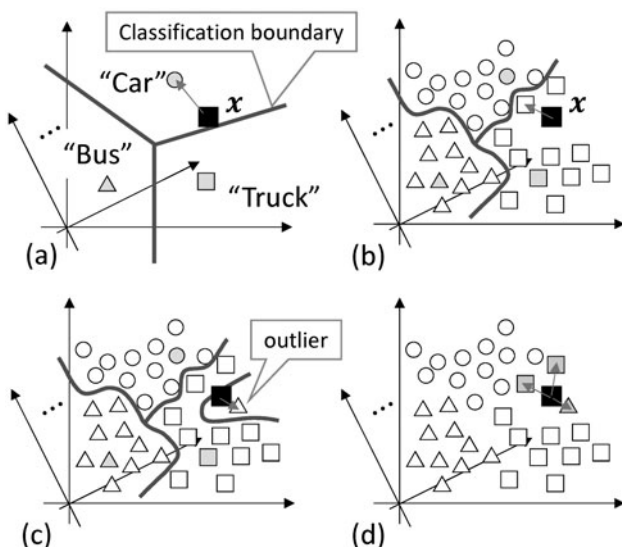


図5 最近傍法。(a)学習パターンが少数の場合。(b)多数の場合。(c)アウトライアの影響。(d) k -最近傍法 ($k=3$)。

と述べたように、最近傍法は最も基本的かつ初歩的なパターン認識の原理である。いま N 個の学習パターン $\{x^1, \dots, x^n, \dots, x^N\}$ があつたとする。最近傍法とは、その名の通り、入力 x に最も近い学習パターン x^n のクラスを識別結果とする方法である。より形式的には、 $\min_n \|x - x^n\|$ を与える x^n のクラスに識別する。ここで $\|\cdot\|$ はベクトルのノルムである。ユークリッドノルムであれば、 $\|x - x^n\|$ は入力 x と学習パターン x^n のユークリッド距離である。このため、最近傍法は最短距離法とも呼ばれる。

図5 (a)は最近傍法による識別の様子である。ここでは、各クラスに1つの学習パターンが与えられた状況での、ユークリッドノルムによる識別を示している。同図で入力 x への最近傍は"Car"のクラスの学習パターンなので、入力 x は"Car"に識別される。このように、入力 x があるクラスに識別されたのは、最近傍の学習パターンがそのクラスに属していたことに因る。したがって同パターンを観察すれば識別の理由を容易かつ直感的に理解できる。この点は後述する他の手法にはない長所である。

最近傍法によるクラス間の識別境界は、同図(a)に示すように、隣接する学習パターン間の垂直二等分線 (正確には超平面) で構成される。このことは、垂直二等分線がそれら学習パターンからの等距離点の集合であることから理解できる。全学習パターンとして見ると、学習パターンの位置を母点として特徴空間をボロノイ分割したことに相当する。

以上のように x と x^n の距離を測る代わりに、近さすなわち類似度を測る方法もある。この場合、内積 $\langle x, x^n \rangle$ もしくはそれを正規化した $\langle x, x^n \rangle / \|x\| \|x^n\|$ が利用される。後者は2つのベクトル x と x^n がなす角度 θ に関する $\cos \theta$ に等しいので、コサイン類似度とも呼ばれる。

3.3.2 最近傍法と学習データ数

もし学習パターンが十分にあり、かつ計算量が多くても構わない場合、最近傍法は単純ながら強力な認識手法になりうる。図5 (b)は同図(a)から学習パターンが増えた状況を表している。1クラスあたり多数の学習パターンが与えられたことで、複雑で正確な識別境界が得られる。この図の例では、入力 x は"Truck"に識別されることになり、結局(a)の状況で"Car"に識別されたのは誤りだったことになる。

ただし、学習パターンが増えると、その中にアウトライア (outlier) が含まれるリスクも増える。アウトライアとは観測ノイズ等の影響で、本来のクラス分布から離れたところに (往々にして孤立的に) 存在するパターンを指す。図5 (c)は、アウトライアによる悪影響の様子である。このように入力 x はただ一つのアウトライアにより誤識別に転じる可能性がある。さらに悪いことに、同図では、アウトライアのクラスに誤識別される領域が右側に広がっていることも示している。

3.3.3 最近傍法の拡張

最近傍法は非常に単純な方法であるため、拡張性も高い。例えば、先のアウトライアについては、 k 最近傍法[1]に拡張することで解決できる。これは、最近傍だけでなく上

位 k 個の近傍パターンを求め、それらの多数決でクラスを決定する方法である。図 5 (d) はその様子である。近傍数 $k=3$ とすることで、アウトライアの悪影響を回避できていることがわかる。 k 近傍法は単純な拡張ながら非常に強力な方法である。ただし近傍数 k の設定については絶対的な指標はなく、試行錯誤的に定める必要がある。

他の拡張として、ユークリッド距離以外の距離の利用が考えられる。具体的には、絶対値距離 (L_1 距離, マンハッタン距離とも呼ばれる) やマハラノビス距離 [1] が挙げられる。後者は $(x-x'')^T \Sigma^{-1}(x-x'')$ と表される。これは、 x'' を平均とし、 Σ を共分散行列とする (D 次元) 正規分布を考えたとき、その分布の広がり方に比例した距離となっている。

3.2.3.1項で触れたように、距離を工夫することで、長さが一定しない系列パターンの認識にも利用できる。具体的には、編集距離 (edit distance) もしくはほぼそれと等価な DP マッチング距離 [7] を使えば、 x と x'' の系列長が違ったとしても、両者間の距離を計算できるため、最近傍法が適用可能となる。

3.3.4 最近傍法の高速度化

先述の通り、最近傍法による識別精度は、学習パターン数 N の影響を直接受ける。そして一般に N が大きいほど精度は良くなる。ただし、最近傍パターンを見つけるための計算量は N に比例するため、 N が数百万といったオーダーになると、計算量を低減させて高速化を図る必要が生じる。

高速化の第一の方針は、学習パターンのうち、不要なパターンを除外する方法である。図 5 (b) の識別境界を見ると、その構成に影響しているのはクラス境界付近のパターンだけであり、それ以外の影響はないことがわかる。すなわちクラス境界以外のパターンを除外しても識別境界は変わらず、結果的に識別性能も変わらない。実際には、高次元の特徴空間において、どの学習パターンがクラス境界にあるかは自明ではない。そこで Condensing や Editing と呼ばれる手法 [8] が伝統的に使われている。

高速化の第二の方針では、真に最近傍のパターンを見つけなくてもよいと考える。近似最近傍探索 (Approximate Nearest Neighbor, ANN) と呼ばれ、k-d tree のような空間分割に基づく方法 [8] が代表的である。他にもハッシュ関数に基づく方法 (特に Locality Sensitive Hashing, LSH) がある [9]。

3.4 サポートベクトルマシン

3.4.1 サポートベクトルマシンの原理

SVM も非常によく用いられる識別器の一つである。その原理は、最近傍法と大きく異なる。具体的には、最近傍法では学習パターン x'' をそのまま使っていたのに対し、SVM では学習パターンを使って「識別関数 $g(x)$ 」なるものをあらかじめ構成しておき、その識別関数 $g(x)$ のみを

用いて識別を行う。具体的には、入力 x について $g(x) > 0$ であればクラス 1 に、 $g(x) < 0$ であればクラス 2 に識別する。このように、SVM は基本的に 2 クラス識別 (すなわち $C=2$) を対象としている。なお $g(x)=0$ がクラス間の境界となる。

SVM の最も簡単な場合は「線形 SVM」と呼ばれ、 $g(x)=w^T x+b$ と表される。要するに傾き w 、切片 b の (超) 平面である。この場合、識別境界は $g(x)=w^T x+b=0$ であるから、やはり線形である。2 次元特徴であれば、その 2 次元特徴空間 (平面) を真っすぐな直線で分断することになり、3 次元特徴であれば平面で分断することになる。要するに真っすぐな包丁で特徴空間をクラス 1 と 2 に分けているイメージである。

特徴ベクトル x が 1 次元の場合 (例えば血圧だけから高血圧か否かを決める場合) はさらに簡単で、 $g(x)=wx+b$ という直線となる。ここで傾き w 、切片 b の値は事前にわかっていないので、学習パターン $\{x^1, \dots, x^n, \dots, x^N\}$ を使って設定する必要がある。その際の制約条件は、 x'' がクラス 1 に属するのなら $g(x'')=wx''+b \geq 1$ となり、クラス 2 なら $g(x'')=wx''+b \leq -1$ とする⁵。(図 6 では、 Δ で表されたクラス 1 のパターンの箇所については、直線 $g(x)$ が 1 より上を通ってほしい、ということになる。) すべての学習パターン x'' についてこの条件を満たせば、先の「入力 x について $g(x) > 0$ であればクラス 1 に、 $g(x) < 0$ であればクラス 2 に識別」が (少なくとも学習パターンについては) 実現することになる。

SVM の原理の面白い点の一つは、以上の条件を満たす w と b の値を、最適化の枠組みで求めていることである。具体的には傾き w を最小化する問題を解く。この様子を図 6 に示す。全部の学習パターンについて条件制約を満たす範囲で傾きを最小化する⁶と、最終的には図中の "Optimal solution" が識別関数として求まる。これ以上傾きを最小化しようとする、制約条件が満たせなくなる点に注意されたい。

3.4.2 サポートベクトルマシンの長所

こうして得られた識別関数について重要な点は次の 2 つの性質である。

1. 識別境界がクラス 1 と 2 の分布の間隙の中央を通過している。
2. 全部で $N=8$ 個の学習パターンのうち、識別関数の構成に寄与しているのは、クラス境界に面している 2 個だけである。

この第一の性質こそが SVM の識別性能を高めている理由である。どちらかのクラスのパターン分布辺縁付近ぎりぎりではなく、両方のクラスからもできる限り遠いところに識別境界があることを意味する。学習パターンを分離識別するだけの意味であれば、識別境界が中央にある必要はない。しかし、認識システムの実際の使用状況を考えると、学習パターンよりもより曖昧すなわち他のクラスに混同さ

⁵ これら不等式制約において、 ≥ 1 や ≤ -1 の代わりに $\geq \epsilon$ や $\leq -\epsilon$ としても結果は変わらない。ここで ϵ は任意の正数である。

⁶ 図 6 の例における学習パターンは完全に 2 分割できるので、すべての制約条件を満たす解がある。しかし 2 クラスのパターンが境界付近時入り混じると、このような解は存在しなくなる。次節 3.4.2 においてこうした場合の対処法について述べる。

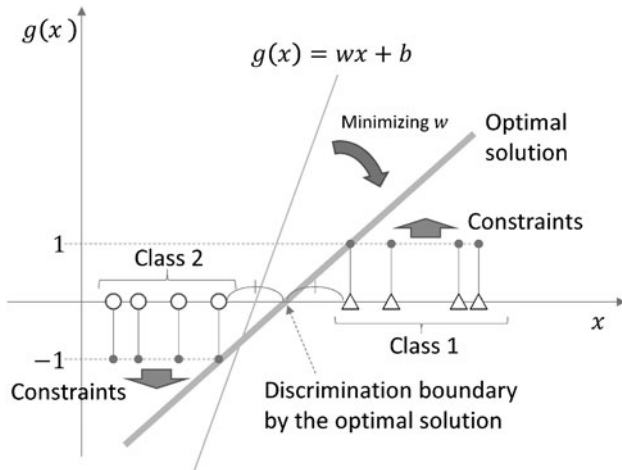


図6 SVMの原理.

れそうなパターンが入力されうる。識別境界を中央に置くことで、こうしたパターンが誤識別されるリスクを最小化できる。このような（学習パターン以外の）入力に対しても高い識別性能を維持することを「汎化」(generalization)と呼ぶ。

第二の性質は、SVMの効率の良さを示している。3.3.4節でも述べたように、識別に重要なのはクラス分布の中央付近ではなく、むしろ境界付近の（曖昧な）パターンである。図6からもわかるように、SVMが自動的に選択し利用するのはまさにこうした境界付近の少数のパターンである⁷。識別関数がこの少数のパターンだけで構築されるということは、識別時にはその程度のパターンの情報だけが利用され、他のパターンは不要ということになる。

SVMは、以上の2つの性質により、比較的少数の学習パターンでも効率的にクラス間境界を捉える能力および汎化能力を併せ持っていることがわかる。この点が、少ない学習パターンでも高い識別精度を達成できるというSVMの強みを生んでいる。

3.4.3 サポートベクトルマシンの拡張

SVMについて、次の3つの拡張法についてその概要を述べる。第一にソフトマージン（完全に分離できない場合を許す）、第二に非線形化（すなわち識別境界を非直線に）、そして第三に多クラス化である。いずれも概念的な記述に留める。数式を含めた詳細については、専門書（例えば[2, 10]）をご覧いただきたい。その際、本稿での直感的な議論が役に立つことを願う。

3.4.3.1 ソフトマージン

先述の通り、基本的なSVMでは、「 x^n がクラス1なら $g(x^n)$ は1以上、クラス2なら-1以下」を絶対的な制約条件として w と b を求めていた。しかし、図6のいずれかの○とが入れ替わったとしたら、こうした制約条件を満

たすことは不可能になる。したがってSVMは構築できないことになってしまう。

そこで開発されたのがソフトマージンである。要するに、「制約は絶対満たさなくてもいいが、もし満たせなかったら、満たせなかっただけペナルティを与える」という考え方である。一種の緩和であり、SVMとしては w と b の最適化に加えて、ペナルティの最小化も同時に解くことになる。

3.4.3.2 カーネルによる非線形化

3.4.1節で述べた線形SVMでは、識別境界も真つすぐになる。しかし分布が複雑に入り組んでいる場合は、真つすぐな境界で2クラスを正しく分断できるとは限らない。ソフトマージンで対処してもよいが、もう一つの考え方はSVMの非線形化である。包丁の比喩を用いるならば、線形SVMが真つすぐな包丁であったのに対し、非線形なSVMならば曲がった包丁で特徴空間を二分できる。

SVMの非線形化の方法は少々トリッキーである。基本となる考え方は、パターンの高次元化である。すなわち x そのままではなく、それを高次元化した $\varphi(x)$ を考える。例えば $x = (x_1, x_2)^T$ について $\varphi(x) = (x_1, x_2, x_1x_2)^T$ と3次元化することを考える。これにより、元の2次元の特徴空間では線形SVMで識別できなかった場合でも、3次元の空間では線形識別できる可能性が上がる⁸。このように識別関数側を複雑にせず、識別される側を高次元化により識別されやすくする。さらにSVMでは高次元化により増える計算量を抑えるために、カーネルトリックという巧妙な方法を利用している。

3.4.3.3 多クラス化

SVMは基本的に2クラス認識問題用であるため、多クラスを扱う場合には工夫が必要となる。最もよく用いられるのが1-vs-othersという方式である。具体的には、「クラス c とそれ以外」という2クラス用SVMをすべての $c \in C$ について準備しておく。そして、入力 x をそれら C 個のSVMで識別し、最も高い識別関数値を与えたクラス c に識別する。他には、総当たり型の1-vs-1方式や、最初から多クラスを前提として提案された「多クラスSVM」があるが、1-vs-othersが利用されることが多い。

3.5 ディープニューラルネットワーク

3.5.1 古くて新しいディープニューラルネットワーク

「ディープラーニング」「深層学習」などの呼称で、昨今では人工知能の代名詞とされているディープニューラルネットワーク(DNN)を最後に紹介したい。DNNはパターン認識にも利用できる。そして、DNNの一形態である畳み込みニューラルネットワーク(Convolutional neural networks, CNN)は、画像認識において従来を大きく上回る

⁷ 特徴空間が高次元になると、境界を構成するパターンの割合は、一般に増加する。したがってこの利点は多少弱まることになるが、それでもできる限り境界を選択しようとするSVMの方針は有効である。なお境界の割合が多くなる理由は、「次元の呪い」の副次的効果として起こる「球面集中現象[1, 6]」と呼ばれるもので、要するにすべてのパターン間が似たような距離になる状況である。

⁸ 例えば $x^1 = (0, 0)^T$ と $x^2 = (1, 1)^T$ がクラス1、 $x^3 = (1, 0)^T$ と $x^4 = (0, 1)^T$ がクラス2の場合、元の2次元空間では直線で二分できないが、この φ による3次元空間なら平面で二分可能となる。

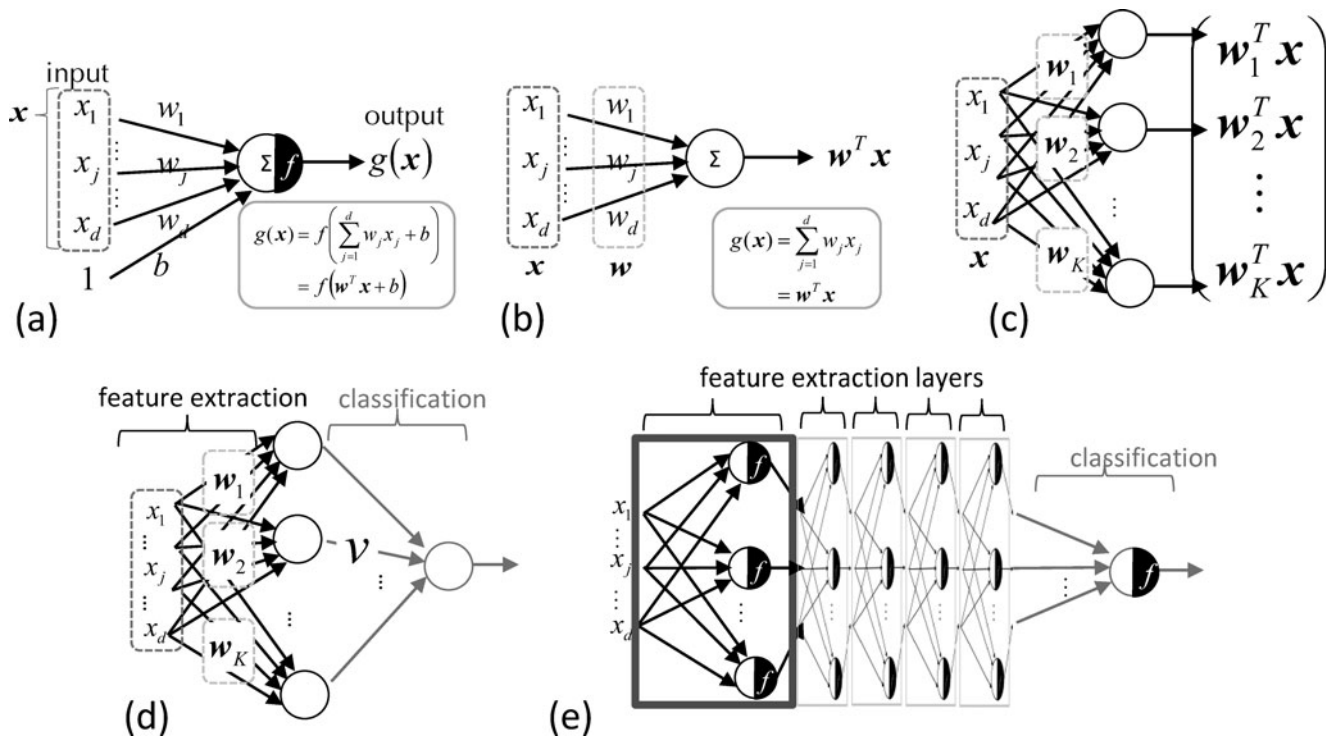


図7 DNNの概要.

性能を達成し、昨年（特定の認識課題ではあるが）人間の画像認識能力を超えたという報告もなされている。

実はDNNの考え方は古い。実際、CNNの原型であるネオコグニトロン[11]はすでに1979年に発表されている。それが再度注目されている理由は大きく二つある。第一は大量の学習パターンが入手可能になった点である。今や学習パターン数Nは時としてトータル数万~百万のオーダーで利用可能であり、それがDNNを構成する大量のパラメータの学習を可能にしている。第二は数々の細かな工夫である。例えば、従前はニューラルネットワークの構造を大規模化（正確には深層化）すると、学習が思ったように進まないという問題（Vanishing gradientと呼ばれる）があったが、最近のDNN/CNNでは解決が図られている。

3.5.2 ディープニューラルネットワークの基本的考え方

最近DNN/CNNについては解説書が数多く出版されている[12,13]。以下では、それら解説書よりもさらに平易な解説を試みる。

3.5.2.1 ニューロンのモデルと内積

DNNやCNNに限らず、およそニューラルネットワークと名がつく数理モデルは、図7(a)に示す「ニューロン」を組み合わせたものである。数式的には $g(x)=f(w^T x+b)$ であり、SVMのところ(3.4.1節)で述べた線形識別関数との違いは、わずかに非線形関数 f が最後に施されているか否かである。各ニューロンについて、その w と b を適切に定めることをニューラルネットの「学習」と呼ぶ。

ここで理解を容易にするために f と b を無視すると、図7(b)が得られる。これからニューロンの本質は $w^T x$

すなわち2ベクトル x と w の内積であることがわかる。以下に述べるように内積には二つの意味がある。この事実が、同形式のニューロンを複数組み合わせることで、パターン認識が実現することの原理を与えている。

3.5.2.2 内積の機能(1): 特徴抽出

内積 $w^T x$ は、2ベクトル x と w の方向が似ているほど内積値は大きくなる。要するに x と w の類似度である。ここでこの「 w に対する類似度」が、 x の特徴の一つとなりうる点は重要である⁹。3.2.3.1では、風邪かどうかを認識するために、各人を（体温、咳の回数）の2次元特徴で表す例を述べた。この体温も咳の回数も、その人を観察することで得られる特徴である。一方、その人が「患者Aや健康者Bに似ている」の程度も2次元特徴になりうる。前者を絶対的な特徴と呼べば、後者は相対的な特徴と言えよう。内積はまさにこの相対的な特徴である。ここで基準とする w を図7(c)のように K 個(w_1, \dots, w_K)考えた場合、それらとの K 個の内積値が得られ、それらは x を表現する K 次元ベクトルと考えることができる。

3.5.2.3 内積の機能(2): 識別関数

今一度、3.4.1節で述べた線形識別関数を見ると、 $g(x)=w^T x+b$ の正負で x の識別結果が与えられるようになっていた。ここでも b を無視すると、ベクトル x と w の内積となっている。すなわち内積は、特徴抽出だけでなく、識別の機能も持っていることがわかる。

3.5.2.4 内積に次ぐ内積~多層ニューラルネットワーク

パターン認識の基本構成が特徴抽出→識別であったことを思い出せば、3.5.2.2項で特徴抽出したのちに、3.5.2.3

9 本文では非線形関数 f を無視したが、一般に f は、類似度の大きくなりすぎ、もしくは小さくなりすぎを抑制する機能を持つ。単純な機能であるが、これがなければ図7(d)は本当に内積すなわち線形演算だけからなるネットワークとなり、ニューロンが数多くあっても、結果的に単一のニューロン（内積）に帰着してしまう。

項で識別すれば、内積だけでパターン認識が完成することがわかる。図7(d)はその全体像である。混乱を避けるために同図では識別時の内積対象を v で表している。この全体像、いわゆる多層ニューラルネットワークもしくはmulti-layer perceptronと呼ばれるものである。1990年代に「ニューロ」ブームを起こしたのがこの形式である。

学習パターン x に対して正しい識別結果が得られるように (w_1, \dots, w_K) および v というパラメータ集合を「学習」する必要がある。本稿ではその詳細まで論じられないが、誤差逆伝搬法が一般に用いられる。これは一種の勾配法であり、識別誤りが少なくなる方向にこれらパラメータ集合を修正する方法である。勾配法に共通する弱点として局所解への収束があるが、ニューラルネットワークでも同様のリスクが存在する。

3.5.2.5 深層化のメリット

DNNとは、図7(e)のように、前記の多層パーセプトロンの特徴抽出層を何重にも増やして深層化したものである。したがって、DNNといえども内積演算が基本である。では何重にもすることでどのような効果があるだろうか？先に述べたように、内積による特徴抽出では、元々 D 次元ベクトルの x を (w_1, \dots, w_K) との内積により K 次元ベクトルに変換していることに相当する。要するに D 次元空間を K 次元空間に(非線形)変換していることになる。空間が変換されれば分布が変わる。したがって深層化の目的は、直感的に言えば、何回も空間変換を施すことで混在して分離しにくいところを少しずつ「ほぐして」分離しやすくすることにある。もちろん、よく「ほぐれる」ように各層の (w_1, \dots, w_K) を決めてやる必要があり、その問題は先述のように誤差逆伝搬法で解かれる。

3.6 まとめ

本章では、パターン認識の基本的な流れと、その中心となる識別手法を3種類紹介した。パターン認識の具体的な課題を扱う際、「まず何を考えなくてはならず、そして実際に解く際には多くの選択肢がある」ことを感じていただければ幸いである。その一方で、概念的な説明が多かったために、「自分の課題について、結局、どのような特徴抽出

を行い、どのような識別方法を用いればよいか、よくわからない」というご意見もあろうかと思われる。残念ながら、パターン認識には万能薬がない。すなわち、3.2.3.6をはじめ、本章の随所で述べたように、課題の性質に応じた設計が必要になってくる。このため、その性質を見抜く経験も必要だろうし、さらに試行錯誤も必要になるであろう¹⁰。

本章では画像認識を例として多用したが、その前段階として必要となる画像情報処理については全く触れていない。もし画像情報処理についての概要が必要であれば、本章と同じように極力平易に書いた解説[14]をご覧くださいければ幸いである。

本記事の執筆にあたり、応用力学研究所の稲垣教授に有益なコメントをいただきました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- [1] 石井健一郎 他：わかりやすいパターン認識（オーム社，1998）。
- [2] 荒木雅弘：フリーソフトではじめる機械学習入門（森北出版，2014）。
- [3] R.O.Duda *et al.*, *Pattern Classification* (2nd Edition), (Wiley-Interscience, 2000) (邦訳：パターン識別) (アドコム・メディア，2001)。
- [4] C. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*, (Springer, 2006) (邦訳：パターン認識と機械学習，上・下) (丸善，2014)。
- [5] 前田新一：プラズマ・核融合学会誌 92, 334 (2016)。
- [6] 宝珍輝尚 他：プラズマ・核融合学会誌 92, 347 (2016)。
- [7] 内田誠一：電子情報通信学会技術研究報 rpPRMU2006-166 (2006)。
- [8] 和田俊和：情報処理 46, 912 (2005)。
- [9] 古賀久志：IEICE Fundamentals Review 7, 256 (2013)。
- [10] 竹内一郎，烏山昌幸：サポートベクトルマシン（講談社，2015）。
- [11] 福島邦彦：電子通信学会論文誌 J62-A, 658 (1979)。
- [12] 岡谷貴之：深層学習（講談社，2015）。
- [13] 山下隆義：イラストで学ぶディープラーニング（講談社，2016）。
- [14] S. Uchida, *Development Growth and Differentiation* 55, Issue 4, 523 (2013)。



うちだ せい いち
内田 誠 一

1990 九大・工・電子卒。1992同大学院修士課程（情報）了。セコム株式会社勤務を経て、現在、同大学院システム情報科学研究院情報知能工学部門教授。博士（工学）。

画像パターン・時系列パターンの解析・認識に関する研究に従事。最近はバイオイメージ・インフォマティクスなど分野を越えた協働研究を積極的に実施中。2007 IAPR/ICDAR Best Paper Award, 2009電子情報通信学会論文賞, 2016データサイエンスアワード他受賞。

10 必要あれば、著者までご遠慮なくご質問いただきたい。



4. ラプラシアン固有関数とその画像データ解析への応用

4. Laplacian Eigenfunctions and Their Application to Image Data Analysis

斎藤 直樹

SAITO Naoki

カリフォルニア大学デイヴィス校数学科

(原稿受付：2016年8月26日)

本章では、ユークリッド空間上の領域で定義されたラプラス作用素、およびそれと可換な積分作用素の固有値・固有関数の基礎、またそれらの画像データ解析への応用、特に脳の海馬の形状認識、およびラプラシアン固有関数といわれる「患者対応基底関数」との関係について考察する。

Keywords:

eigenvalues and eigenfunctions of Laplace operators, integral operators commuting with Laplacians, boundary value problems, Fourier analysis, image analysis, shape recognition

4.1 始めに (フーリエ解析について)

読者もすでに充分ご承知のことと思われるが、数学・物理・工学等の分野におけるフーリエ級数・変換の重要性・普遍性はどこに帰着するのであろうか？ 筆者は、「与えられた関数やデータを既知の基本的な関数を用いて分解し、それらの線形結合（あるいは積分）として元の関数やデータを表すことができる」という性質であると考えている。ここにいう「既知の基本的な関数」とは、もちろん、様々な周波数のサイン（正弦）・コサイン（余弦）関数のことである。与えられている関数やデータを解析するにあたり、その定義域や台に注意することは、常に重要である。例えば、一次元の連続関数 $f(x)$ が、長さ l の閉区間 $I := [0, l]$ で定義されているとしよう。一般に I 上で定義された関数を考察・解析するには、 I 上の自乗可積分空間 $L^2(I) := \{f: I \rightarrow \mathbb{C} \mid \|f\|_2 := \sqrt{\int_I |f(x)|^2 dx} < \infty\}$ を考え、そこにおける正規直交基底 $\{\phi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ を使い、関数 f をその展開係数列 $\{c_k(f) = \langle f, \phi_k \rangle := \int_I f(x) \overline{\phi_k(x)} dx\}_{k \in \mathbb{N}}$ (この数列は、自乗総和可能列の空間 $\ell^2(\mathbb{N})$ に属する) を使って、 $f(x) \sim \sum_{k \in \mathbb{N}} c_k(f) \phi_k(x)$ として表せば、 f の様々な性質を、数列 $\{c_k(f)\}_{k \in \mathbb{N}}$ を調べることにより解析することができる。詳細は[1-5]等を参照されたい。ここで問題になるのが、どのような $L^2(I)$ の正規直交基底を用いるかということである。

もし $f(x) \in C(I) \subset L^2(I)$ が周期 l の周期関数とみなすことができれば、すなわち $f(0) = f(l)$ であるならば、 $f(x)$ の $C(I)$ から $C(\mathbb{R})$ への周期的拡張を考えることができる。この場合、最も自然で便利な $L^2(I)$ の正規直交基底は、フーリエ基底 $\{\frac{1}{\sqrt{l}} \exp(2\pi i k x / l)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ である。また、境界条件が齊次ディリクレ境界条件 $f(0) = f(l) = 0$ の場合は、フー

リエ正弦関数系 $\{\frac{\sqrt{2}}{l} \sin(\pi k x / l)\}_{k \in \mathbb{N}}$ 、齊次ノイマン境界条件 $f'(0) = f'(l) = 0$ の場合は、フーリエ余弦関数系 $\{\frac{1}{\sqrt{l}}\} \cup \{\frac{\sqrt{2}}{l} \cos(\pi k x / l)\}_{k \in \mathbb{N}}$ が適している。ところが、与えられた関数・データが、予めこれらの境界条件を満たしているとは限らない。一般には、むしろそのような境界条件を満たしている方が稀であると言える。その場合、無理に上記の正規直交系を使うと、何が起るであろうか？ 通常のフーリエ基底を例にとって考えよう。与えられた関数 $f(x) \in C(I)$ で、 $f(0) \neq f(l)$ と仮定しよう。すると、 f のフーリエ基底関数による展開係数は、

$$c_k(f) := \frac{1}{\sqrt{l}} \int_0^l f(x) e^{-2\pi i k x / l} dx, \quad k \in \mathbb{Z},$$

で与えられる。この場合、 $\{c_k(f)\}_{k \in \mathbb{Z}}$ のサイズの減衰が非常に遅くなってしまふ。さらに詳しく言うと、 $k \rightarrow \pm\infty$ のとき、 $|c_k(f)| \sim O(1/|k|)$ となる上、いわゆるギブズ現象 (Gibbs Phenomenon) が生じる[3-5]。これは、与えられた関数 f が周期境界条件を満たさないため、 f 自体は I 上で連続関数であっても、 f の周期的拡張は不連続関数となるからである。なぜ展開係数のサイズの減衰が遅いとまづいのか？ それは、実用上、関数の正規直交系による展開は、有限項で打ち切る必要があるからであり、設定されたレベルの近似誤差を得るためには、減衰が速い展開級数の方が、減衰の遅いものよりもより少数の項で打ち切ることができるからである。以上のことは、たとえ $f(x)$ が I 上で非常に滑らかな、すなわち $C^\infty(I)$ に属する関数であっても、 $f(0) \neq f(l)$ である限り、そのフーリエ展開係数のサイズの減衰は $O(1/|k|)$ と f が I 上で単に連続な場合と変わらない。なお、 $f \in C(I)$ で $f(0) \neq f(l)$ であっても、 f をフーリエ余弦関

数で展開すると、その展開係数のサイズの減衰は、 $O(1/k^2)$ となる。これは、 f を y -軸について偶対称に $x \in [-l, 0]$ まで拡張し、その結果得られた $[-l, l]$ 上での関数をさらに周期 $2l$ で実軸上全体に周期的拡張した関数を考えると、それは $C(\mathbb{R})$ に属し、その周期 $2l$ のフーリエ基底展開と元の I 上での関数 f のフーリエ余弦展開が一致するからである。また、このことが、JPEG 画像圧縮規格[6]で離散コサイン変換 (DCT) が採用されている大きな一因であることを指摘しておく (DCTの様々なタイプや性質については、[7]の一読をお薦めする)。データ解析における境界条件の重要性についてのさらに詳しい解説、特に、与えられたデータが上記のような通常の境界条件を満たさないときは、どのようにフーリエ解析を進めればよいかについては、[8-10]とそこでの参考文献を参照されたい。

さて、このようなフーリエ基底が、 $L^2(I)$ 上での正規直交基底として自然に現れるのは、なぜであろうか？ それは、 I 上での簡単な物理的な問題を考えると明確になる。例えば、 I を針金とみなしたときの熱の拡散を記述する熱方程式や I を弦とみなしたときの振動を記述する波動方程式の初期値・境界値問題を考えよう。すると、これらの問題を変数分離法で解くときに現れる空間変数 $x \in I$ に依存する成分 $u(x)$ が、次の2階常微分方程式の境界値問題で記述され、境界条件が、周期的/斉次ディリクレ/斉次ノイマンの場合、フーリエ基底/正弦関数系/余弦関数系がそれぞれ解となっていることがわかる：

$$\begin{cases} -u''(x) = \lambda u(x), & x \in (0, l); \\ u(0) = u(l) & \text{周期条件の場合;} \\ u(0) = u(l) = 0 & \text{斉次ディリクレ条件の場合;} \\ u'(0) = u'(l) = 0 & \text{斉次ノイマン条件の場合.} \end{cases} \quad (1)$$

なお、上記の境界値問題はいわゆる正則スツルム・リウヴィル型境界値問題 (regular Sturm-Liouville boundary value problem) の最も単純なケースである。一般に、正則スツルム・リウヴィル型境界値問題の解集合は $L^2(I)$ 上の正規直交基底系を形成するという事実はよく知られている [11-13]。ここで、 k 番目の固有値 λ_k は、周期的境界条件の場合は、 $(2\pi k/l)^2$, $k \in \mathbb{Z}$ ；斉次ディリクレ条件の場合は、 $(\pi k/l)^2$, $k = 1, 2, \dots$ ；斉次ノイマン条件の場合は、 $(\pi k/l)^2$, $k = 0, 1, \dots$ 、となるのが容易にわかる。このとき、固有値に区間 I の情報が反映されている、すなわち、固有値が区間長 $|I|=l$ に依存することを注意しておく。

以上、与えられた関数・データが一次元上の長さ l の区間 I で与えられている場合を考察したが、 d 次元上の一般の開領域 $\Omega \in \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3, \dots$ 、のときは、どのような状況になるであろうか？ 例として、画像データが図1のイラストレーションのような場合を考えよう。このとき、背景の部分だけのデータを解析したい、あるいは、目・鼻・口以外の顔の皮膚の部分のデータのみ、あるいは目の部分のデータのみを解析したいとすると、従来の二次元空間におけるフーリエ正弦・余弦関数系では、歯が立たない。

一般形状の $\Omega \in \mathbb{R}^d$ 上では、(1)式は以下のようなヘル

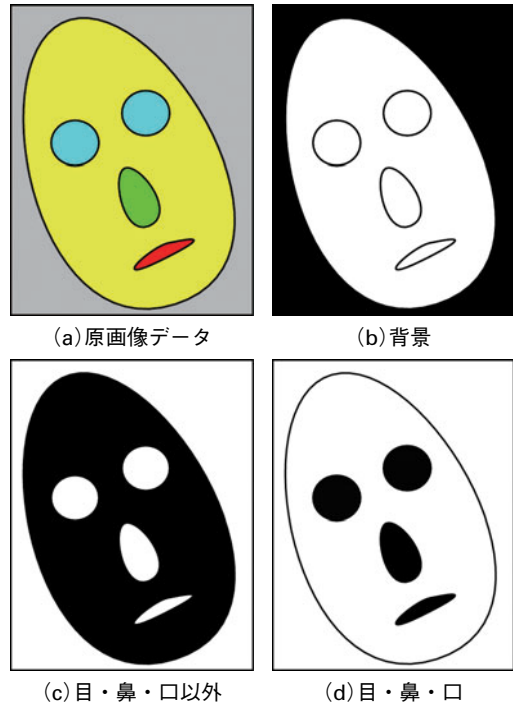


図1 顔の画像データのイラストレーション。

ムホルツの偏微分方程式による境界値・固有値問題に一般化される：

$$\begin{cases} -\Delta(x) = \lambda u(x), & x \in \Omega; \\ u|_{\partial\Omega} = 0 & \text{斉次ディリクレ条件の場合;} \\ \partial_\nu u|_{\partial\Omega} = 0 & \text{斉次ノイマン条件の場合.} \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 $\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_d^2}$ であり、 \mathbb{R}^d 上でのラプラス作用素あるいはラプラシアンと呼ばれる二階の偏微分作用素である。また、 $\partial_\nu u|_{\partial\Omega}$ は、領域境界 $\partial\Omega$ における、領域の外側に向けた法線微分 $\nu(x) \cdot \nabla u(x)$, $x \in \partial\Omega$ のことである。ここで、周期的境界条件は、 Ω が矩形領域のときしか意味をもたないことを注意しておく。

Ω が矩形領域の場合は、一次元のフーリエ正弦・余弦関数のテンソル積が(2)の解となり、 $L^2(\Omega)$ の正規直交系になることは容易に理解されよう。しかしそれ以外の場合は、どうであろうか？ Ω が \mathbb{R}^2 上の単位円板、 \mathbb{R}^3 上の単位球面、 \mathbb{R}^3 上の偏長楕円体の場合、(2)式にそれぞれ適切な座標変換・変数分離を行った後の境界値問題の固有関数解は、数理論理でしばしば現れるベッセル関数、球面調和関数、偏長楕円体関数となることが知られている [14-18]。

それでは、一般形状の $\Omega \in \mathbb{R}^d$ の場合は、どうであろうか？ もしも、(2)のように境界条件がはっきり指定されている場合ならば、大きく分けて二つのアプローチを考慮することができる。一つは、(2)を有限要素法 (FEM) などを用いて離散化して近似解を求める方法 [19-21]、もう一つは、グリーン関数 [14-18] を用いて積分方程式に変換し、さらにそれを離散化して近似解を求める方法 [22, 23] である。前者は、疎 (スパース) な線形方程式・固有値問題を

解くことに帰着し、計算速度は速いがそのシステムの条件数が大きくなる。一方、後者の条件数は一般的には低く、数値解析上安定して計算できるものの、密な線形方程式・固有値問題になるため、計算速度は遅くなる。また、上記に述べた特殊な形状（円板・球など）の場合以外の一般形状の有界領域においてディリクレあるいはノイマン境界条件を満たすグリーン関数を構成することは難しい。また、どちらの手法にしても境界条件を明確に指定する必要がある。しかしながら、数理解物理の境界値・固有値問題を解くのではなく、領域上で観測された関数・データを解析するのが目的であるならば、上述したように、その関数・データがディリクレあるいはノイマン境界条件を最初から満たしていることは稀である。したがって、これらの従来の手法と異なる手法の開発が重要となる。

4.2 ラプラシアンと可換な積分作用素

筆者は、前節で述べた動機から、一般形状領域上で関数・データが与えられたとき、境界条件を最初から陽に指定しなくても済むようなラプラシアン固有関数の構成法およびその数値解法を提案した[24]。ここでは、その概要について述べる。

前節でも述べたが、積分作用素を用いた解法の方がラプラシアンのような微分作用素を直接扱う解法よりも、数値的には安定している[22, 23]。ここで、ラプラシアン $\mathcal{L} := -\Delta$ を直接扱うことに伴う困難を克服するための鍵となるのは、それと可換な積分作用素 \mathcal{K} 、すなわち $\mathcal{K}\mathcal{L} = \mathcal{L}\mathcal{K}$ を満たすような \mathcal{K} を探すことである。なぜならそのような \mathcal{K} を見付けることができれば、以下の定理によって、 \mathcal{K} の固有関数と \mathcal{L} の固有関数が一致するので、 \mathcal{L} の固有関数を直接 \mathcal{L} を解析することによって求める必要がなくなるからである。

定理2.1 ([25, p. 63]). \mathcal{K} と \mathcal{L} を交換可能な二つの $L^2(\Omega)$ の作用素とし、そのうちの一方は重複度が有限な固有値を持つと仮定する。そのとき、 \mathcal{K} と \mathcal{L} はその固有値に対応する固有関数を共有する。すなわち、 $\mathcal{L}\varphi = \lambda\varphi$ と $\mathcal{K}\varphi = \mu\varphi$ となる $\varphi \in L^2(\Omega)$ が存在する。

それでは、 $\mathcal{L} = -\Delta$ で事前に境界条件を設定したくないとき、 \mathcal{K} としてどのようなものを考えればよいであろうか？ グリーン関数をその核とするグリーン作用素 \mathcal{G} は、境界値問題の偏微分作用素の逆作用素であり、当然その偏微分作用素と可換である。しかしながら、上述したように、画像データ解析では、境界 $\partial\Omega$ 上でデータの値が 0（ディリクレ条件）になったり、法線微分が 0（ノイマン条件）になったりするとは限らず、またそのような境界条件を満たすグリーン関数を構成するのも難しい。そこで、以下のような、ラプラシアンの基本解（自由空間におけるグリーン関数とも呼ばれる）を考える。

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \begin{cases} -\frac{1}{2}|\mathbf{x} - \mathbf{y}| & d = 1; \\ -\frac{1}{2\pi} \log|\mathbf{x} - \mathbf{y}| & d = 2; \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{2-d}}{(d-2)\omega_d} & d > 2. \end{cases}$$

上式で $\omega_d := \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ は \mathbb{R}^d における単位球の表面積、 $|\cdot|$ は通常のユークリッドノルムを表す。ここで、(3)式を積分核とする積分作用素 $\mathcal{K}: L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ を以下のように定義する：

$$\mathcal{K}f(\mathbf{x}) := \int_{\Omega} K(\mathbf{x}, \mathbf{y})f(\mathbf{y})d\mathbf{y}, \quad f \in L^2(\Omega). \quad (4)$$

するとこの \mathcal{K} について次の定理が成り立つ。

定理2.2 ([24]). (4)式で定義された積分作用素 \mathcal{K} はラプラシアン $\mathcal{L} = -\Delta$ と可換である。その共通の固有関数 φ は、以下の「非局所的」な境界条件を満たす：

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega} K(\mathbf{x}, \mathbf{y})\partial_{\nu} \varphi(\mathbf{y})d\mathbf{s}(\mathbf{y}) &= -\frac{1}{2}\varphi(\mathbf{x}) \\ + \text{pv} \int_{\partial\Omega} \partial_{\nu} K(\mathbf{x}, \mathbf{y})\varphi(\mathbf{y})d\mathbf{s}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、pv はそれに続く広義積分のコーシーの主値、 $d\mathbf{s}(\mathbf{y})$ は境界上の点 $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ における面積要素を表す。

ここで注意しておくが、積分作用素 \mathcal{K} の固有関数を求めるには、(5)式の境界条件を気にする必要は全くない。これが微分作用素 \mathcal{L} の固有関数を \mathcal{L} から直接求めるときとの大きな違いの一つである。

系2.3. 定理2.2における \mathcal{K} , \mathcal{L} の共通の固有関数 $\varphi(\mathbf{x})$ は領域 Ω の外部に自然に拡張でき、以下の偏微分方程式を満たす：

$$-\Delta\varphi = \begin{cases} \lambda\varphi & \mathbf{x} \in \Omega; \\ 0 & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega}, \end{cases}$$

また、 φ , $\partial_{\nu}\varphi$ ともに、領域内部から外部へ境界 $\partial\Omega$ を跨いで連続である。さらに、 $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ のとき、 $\varphi(\mathbf{x})$ は次の漸近式を満たす：

$$\varphi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \text{const} \cdot |\mathbf{x}|^{2-d} + O(|\mathbf{x}|^{1-d}) & d \neq 2 \text{ の場合}; \\ \text{const} \cdot \ln|\mathbf{x}| + O(|\mathbf{x}|^{-1}) & d = 2 \text{ の場合}. \end{cases}$$

系2.4 ([24]). (4)式で定義された積分作用素 \mathcal{K} は $L^2(\Omega)$ 上でのコンパクトな自己共役作用素であり、したがって(3)式で定義されたその積分核 $K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は以下のように固有関数展開される：

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \mu_j \varphi_j(\mathbf{x}) \overline{\varphi_j(\mathbf{y})}.$$

さらに $\{\varphi_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ は $L^2(\Omega)$ の正規直交基底を成す。

注意2.5. (3), (4)式で定義される積分作用素の固有値を大きい順に $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots$ とし、それに対応する固有関数を φ_j , $j = 1, 2, \dots$ としよう。そのとき、 φ_j は定理2.2により $-\Delta\varphi_j = \lambda_j\varphi_j$ と境界条件(5)を満たすが、このヘルムホルツ方程式の固有値は逆に小さい順 $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$ になってい

ることを注意しておく．実際， $\lambda_j = \mu_j^{-1}$ という関係がある．

4.3 積分作用素の離散化とラプラシアン固有関数の数値計算法

さて，コンピュータ上で取り扱う都合上，ほとんどすべての画像データは離散化されているのが現状である．それに対応するために，(3)式の積分核と(4)式の積分作用素を離散化する必要がある．まず，対象となる一般形状領域 $\Omega \in \mathbb{R}^d$ は， N 個の互いに素な微小矩形領域 $\Delta\Omega_i \in \mathbb{R}^d$ ， $i = 1, \dots, N$ ，の集合で近似されるものと仮定する（正確に言えば， Ω も各 $\Delta\Omega_i$ も開集合であるから， $i \neq j$ のとき $\Delta\Omega_i \cup \Delta\Omega_j = \emptyset$ で， $\overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^N \overline{\Delta\Omega_i}$ ということである）．ここで， $\Delta\Omega_i$ の中心点を $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ ，その体積を $w_i \in \mathbb{R}_+$ ， $i = 1, \dots, N$ ，と表す．さらに観測された離散画像データは， N 次元のベクトル $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ として与えられ，その i 番目のデータ点 $\mathbf{f}[i]$ は連続画像データ $f(\mathbf{x})$ の $\Delta\Omega_i$ の中心での値 $f(\mathbf{x}_i)$ （あるいは $\Delta\Omega_i$ 上での f の平均値）としてサンプルされたものと仮定しよう．これらの仮定の下で，(4)式の積分作用素の固有値問題 $\mathcal{K}\varphi = \mu\varphi$ を以下のような簡単な数値積分で近似する：

$$\sum_{j=1}^N K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \varphi(\mathbf{x}_j) w_j = \mu \varphi(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

上式を行列・ベクトル表示すると $\mathcal{K}\varphi = \mu\varphi$ と簡単に表すことができる．ここで， $K = (K_{ij}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ， $K_{ij} := w_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ ， $\varphi := (\varphi_1, \dots, \varphi_N)^T \in \mathbb{R}^N$ ， $\varphi_i := \varphi(\mathbf{x}_i)$ である．一般には， $\Delta\Omega_i$ の大きさ・体積を i に依存させる，すなわち大きさの違う微小矩形集合によって Ω を近似することも考えられるが，ここでは簡単のため， $\Delta\Omega_i$ ， $i = 1, \dots, N$ は，すべて同一形状の微小矩形であると仮定する．すると，重み w_j は j に依存しないので， K が対称行列となることがわかる．

ここで，以上の手法の例として，図1cの顔の目・鼻・口以外の部分を領域 Ω とした場合の，可換積分作用素の固有関数を実際に計算してみよう．まず，図1cのフレーム全体の矩形を，簡単のため， $[0, 1] \times [0, 1]$ と仮定し，これを横方向を105 縦方向を135，すなわち， $105 \times 135 = 14,175$ 個の微小矩形集合に分割する．各微小矩形を添字 i, j を使って $\Delta\Omega_{ij}$ と表す．その面積は $\Delta x \times \Delta y = 1/105 \times 1/135$ で，中心座標は $((i-0.5)\Delta x, (j-0.5)\Delta y)$ ， $i = 1, \dots, 105$ ， $j = 1, \dots, 135$ である．次に，このフレーム全体を覆う微小矩形集合のうち， Ω と共通部分をもつものを取り出す．この場合は，その共通部分の微小矩形の数は $N = 7,533$ 個である．以上の情報を基に， $7,533 \times 7,533$ の行列 K を計算し，その固有ベクトルを計算する．図2は，そのうちの四つの固有ベクトルを表示したものである．図2から，顔の輪郭や目・鼻・口の近傍に固有関数のエネルギーが集中していないこと，また固有値が大きくなるにつれて固有関数の波数が高くなっていることがわかる．

さて，一般に $N \times N$ の密行列の固有値・固有ベクトルを計算するには， $O(N^3)$ の手間がかかる[26, 27]．したがって， N が大きい場合（例えば $N > 10^4$ ）は，高速数値解法を使う方が望ましい．ここで，(3)式の積分核が重要にな

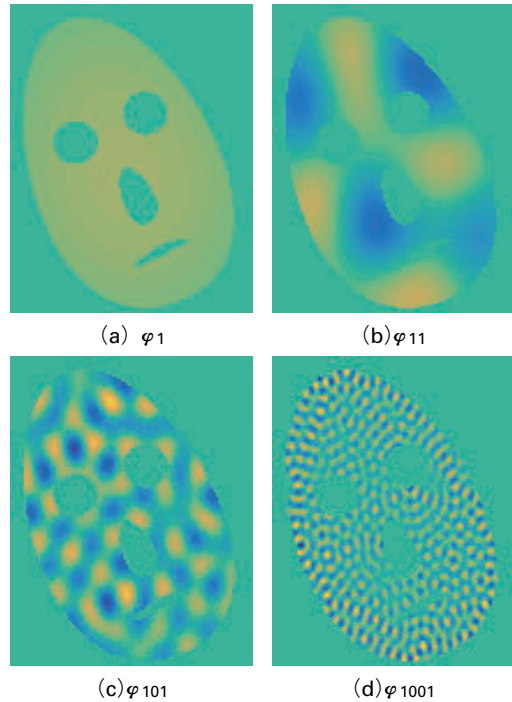


図2 図1cの黒い部分を Ω としたときの可換積分作用素の固有ベクトルの例．

る．これは，上述したようにラプラシアンの基本解に他ならず，Greengard-Rokhlin の提案した高速多重極法 (Fast Multipole Method; FMM) [28, 29] を使用することにより，行列・ベクトルの積 $K\varphi$ を高速に計算できる．そしてこれを基にしてランチョス法に代表される反復解法[26, 27]を使えば， k 個の固有値・固有ベクトルの計算量は $O(N(k + \log N))$ のレベルまで下げることができる．詳しくは，[30]を参照されたい．

4.4 ラプラシアン固有関数の医用画像データ解析への応用

この節では，前節で述べた可換積分作用素から導出されたラプラシアン固有関数の画像データ解析への応用として，脳のMRI画像から抽出された海馬の形状識別についての Faisal Beg と彼のグループの研究結果[31]を概説する．ここでの領域形状の解析は，ラプラシアン固有関数そのものを使う応用ではなく，ラプラシアン固有値を使ったものであることを注意しておく．もちろん，海馬上で何か計測データ（例えば，拡散テンソル画像 (DTI) で使われる水分子の拡散運動の異方性情報など）があれば，ラプラシアン固有関数を使って，そのデータのスペクトル解析を行うことができるが，この節では取り扱わない．

ラプラシアン固有値を使った形状解析は，[31]以前にも行われており，例えば，有限差分法 (FDM) を用いて二次元領域のラプラシアン固有値系列を計算し，固有値の比からなる特徴ベクトルを構成して，植物の葉などの認識を行った研究[32, 33]，また "Shape-DNA" の名のもとで，多様体上で定義されたラプラシアン (ラプラス・ベルトラミ作用素と呼ばれる) の固有値系列を FEM により計算し，それを特徴ベクトルとして形状解析を提案した論文[20]，さ

らにそれを応用して脳の尾状核の形状認識を行った研究[21]などがあげられる。これらの著者も指摘しているように、医用画像データを含む多くの画像データを解析するにあたり、境界条件を陽に設定しない方が望ましい。特にディリクレ境界条件は、医用画像データの場合、物理的に非現実的であり、第1節で述べたようなギブズ現象も起こってしまう。ところが、FDMやFEMでは、境界条件を陽に設定しなければならない。したがって、可換積分作用素を使えば、この難点をかわすことができるのである。

Begらの研究の目的は、海馬（人間の長期記憶と空間学習能力において重要な役割を果たす）の形状情報を使って、アルツハイマー型の軽度認知障害のある患者（mild dementia of the Alzheimer type; DAT）と認知的に正常な被験者（Cognitively Normal; CN）とを識別できるかどうかを考察することである。データとしては、18人のDAT患者と26人のCN被験者の左脳の海馬部分に相当するボクセル（voxel）を3DのMRI画像から抽出したものをを用いた。海馬部分のボクセル数は個人個人によって異なるが、 $12,000 < N < 16,000$ の範囲である。図3に一人のCN被験者と一人のDAT患者の海馬とそれを領域とした可換積分作用素の（つまりラプラシアン）固有関数 φ_2, φ_3 の計算結果を示す。海馬自体の色（緑・薄紫）は、CN被験者とDAT患者の違いを示す人工的な色である。これらの3Dの海馬の中央で輪切りにしたときのラプラシアン固有関数の値の分布（正値から負値に行くに従って黄→赤→白というグラデーションである）を輪切り面と平行な平面に投射している。ラプラシアン固有関数自体は、領域自体を自然に分割するのにも使われる。これは、著名なクーラントの節領域定理（The Courant Nodal Domain Theorem）[15, Sec.6.6]に基づいている。図3でも、 φ_2, φ_3 の節（零交差曲線）が海馬をそれぞれ2つ、3つの領域に自然に分割していることがわかる。

さて、与えられた領域 Ω 上のラプラシアンの固有値を使って、 Ω の幾何学的情報（体積、表面積など）およびトポロジカルな情報（穴がいくつ空いているかなど）を抽

出・推定する分野は、**スペクトル幾何学**と呼ばれており、レイリー卿の「部屋で響く倍音からその部屋の体積を推定する」問題、ゾンマーフェルトとローレンツの黒体放射問題に対するワイルの回答、カッツの「太鼓の形を叩いた音から推定する」問題など、歴史的にも大変興味深い。詳しくは、優れた解説[34, 35]および浦川の著作[19, 36, 37]を参照されたい。

Begらは[31]において、以下のような手法を用いて、CN被検者とDAT患者の海馬の形状識別実験を行った。

1. k 個の可換積分作用素の固有値 $\mu_1 \geq \dots \geq \mu_k$ を各海馬につき計算（Begらは $k = 999$ と設定した）。
2. 各海馬につき、固有値の比からなる次のような特徴ベクトルの計算：

$$\left(\frac{\mu_2}{\mu_1}, \frac{\mu_3}{\mu_1}, \dots, \frac{\mu_k}{\mu_1} \right)^T \in \mathbb{R}^{k-1}. \quad (6)$$

3. 主成分分析（Principal Component Analysis; PCA 例えば[38, Sec.3.4.1, Sec.14.5.1]などを参照のこと）により特徴次元を $k-1$ から k' に圧縮（Begらは $k' = 14$ と設定した）。
4. Leave-one-out 交差検証（Cross-Validation; CV）とサポートベクターマシン（Support Vector Machine; SVM 例えば[38, Chap.12]および本講座第3章の内田による解説などを参照のこと）を使った識別結果の計算。

ここで注意2.5を考慮すると、ラプラシアン固有値 $\{\lambda_j\}_{1 \leq j \leq k}$ を使うことにより、(6)式は、 $(\lambda_1/\lambda_2, \dots, \lambda_1/\lambda_k)^T$ となる。この特徴ベクトルはもともと[32]で植物の葉の形状分類に使われたが、これが形状認識において有効なのは、以下の理由による。

まず、合同な二つの領域におけるラプラシアン固有値が（したがって可換積分作用素の固有値も）一致することは簡単にわかるが、ラプラシアン固有値の比はさらに次のような**スケール不変性**をもつ：

$$\frac{\lambda_j(a\Omega)}{\lambda_i(a\Omega)} = \frac{\lambda_j(\Omega)}{\lambda_i(\Omega)} = \frac{\mu_j(\Omega)}{\mu_i(\Omega)} = \frac{\mu_j(a\Omega)}{\mu_i(a\Omega)},$$

ここで、 $a\Omega$ は領域 Ω を等方的に a 倍に拡大 ($a > 1$) あるいは縮小 ($0 < a < 1$) した領域を表す。すなわち、(6)式のような固有値の比からなる特徴ベクトルは、形状の合同変換およびスケール変換に関して不変の形状特徴を表している。

Begらの実験結果は、以下の通りである：精度（accuracy）77.3%；感度（sensitivity）66.6%；特異度（specificity）84.6%。これらは、それぞれ、正しい識別結果を得た人数の割合；DATと正しく識別された患者の真のDAT患者に対する割合；そしてCNと正しく識別された被験者の真のCN被験者に対する割合を示す。Begらは他にも三つの方法でこれらの数値を計算し、比較したところ、(6)式を使った上記の手法は、精度で2番目、感度で3番目、特異度で1番目という結果を得た。詳しくは、[31]を参照され

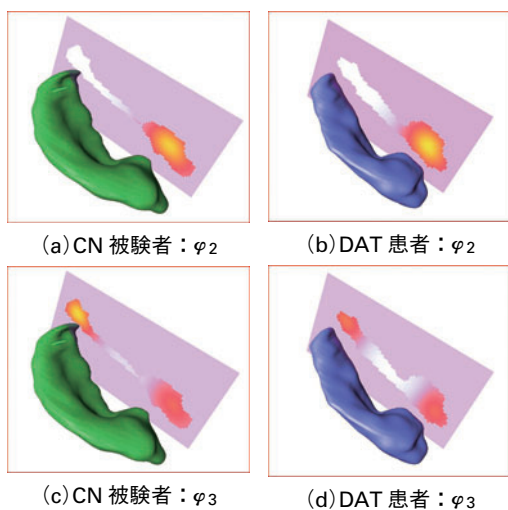


図3 あるCN被験者とDAT患者の海馬におけるラプラシアン固有関数の例。

たい。

最後に、可換積分作用素の固有値・固有関数は、この節に述べた海馬の画像データ解析以外にも、気候変動モデル[39]や人間の目の画像の特徴解析[24]など、様々な分野で応用されていることを指摘しておく。

4.5 患者対応基底関数との関係

ここでは、Wintersらが提案した、いわゆる「患者対応基底関数」(patient-specific basis functions)[40]とラブラシア固有関数との関係について考察する。

まず、「患者対応基底関数」について概説しておこう。元々 Winters らの目的は、乳房のマイクロ波イメージングにおいて、Region Of Interest (ROI, または関心領域とも呼ばれる) の部分のイメージングを高速化するというものであった。その基になるアイデアは、「各 ROI 上の画像データを個人個人の患者に対応・適応した少数の基底関数を用いて近似する」というものである。これは、各 ROI における観測値をボクセルの集合上でのサンプルとして表現するのに比べ、「効率的」であると考えられる。もちろん、ここで「効率的」というのは、そのような基底関数をどれくらい速く計算できるか、また、 $k(\ll N)$ 個の基底関数を使って、どの程度の近似を得られるのかに強く依存する。さて、[40]には直接的には書かれていないが、「患者対応基底関数」を計算するということは、本質的には、ROI 上で観測されたデータの自己相関関数が ROI 上に制限された正規分布であると仮定し、そこでのカルーネン・ロエーヴ変換 (Karhunen-Loève Transform; KLT)¹の基底を求めることと等価である。

以下、簡単のため、一次元モデルを例にとり、詳しく見て行こう (実際、[40]での三次元モデルは一次元モデルのテンソル積として求められている)。第1節と同じく、 $I := [0, 1]$ とし、ROI として $\Omega \subset I$ を考える。まず、 I を N 個の長さ $\Delta x = |I|/N = 1/N$ の等部分区間に分解し、その中心座標を $x_j := (j-1/2)\Delta x$, $j = 1, \dots, N$ と表す。ここで以下のような $x = x_j$ を中心にもつガウス関数を定義する：

$$g_j(x|\sigma) := \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-x_j)^2}{2\sigma^2}\right), \quad x \in I.$$

[40]では $\sigma = 0.75\Delta x$ と設定されており、 $g_j(x|\sigma)$ と $g_{j+1}(x|\sigma)$ は充分な重なりをもつことがわかる。ここで、第 j 列が、ガウス関数 $g_j(\cdot|\sigma)$ をサンプル点 $\{x_i\}_{1 \leq i \leq N}$ で離散化したベクトル $\mathbf{g}_j := (g_j(x_1|\sigma), \dots, g_j(x_N|\sigma))^T$ となるような行列 $G \in \mathbb{R}^{N \times N}$ を定義する。さらに、ROI を $\Omega = (x_{m_0} - \Delta x/2, x_{m_1} + \Delta x/2) \subset I$ とする I の開部分区間と仮定しよう。ここで Ω の区間長は $|\Omega| = (m_1 - m_0 + 1)\Delta x$ であるが、その中に含まれているサンプル点の数は、 $|\Omega|_0 := m_1 - m_0 + 1$ である。 Ω の (離散的) 指示関数ベクトル $\mathbf{x}_\Omega \in \mathbb{R}^N$ を以下のように定義する：

$$\mathbf{x}_\Omega[j] := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|\Omega|_0}} & m_0 \leq j \leq m_1 \text{ の場合;} \\ 0 & \text{それ以外の場合.} \end{cases}$$

まず、この \mathbf{x}_Ω を Ω 上の画像データの直流 (DC) 成分を表す基底ベクトルとして保存する。これは、「 Ω 上の観測データの直流成分はその平均値に比例するので保存しておきたい」という、画像データ解析の実践者からの要請である[40]。 \mathbf{g}_j を Ω に含まれるサンプル点での値のみに打ち切ったベクトル、すなわち

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_\Omega \circ \mathbf{g}_j &:= (\mathbf{x}_\Omega[1] \cdot \mathbf{g}_j[1], \dots, \mathbf{x}_\Omega[N] \cdot \mathbf{g}_j[N])^T \\ &= \left(0, \dots, 0, \frac{\mathbf{g}_j[m_0]}{\sqrt{|\Omega|_0}}, \dots, \frac{\mathbf{g}_j[m_1]}{\sqrt{|\Omega|_0}}, 0, \dots, 0\right)^T \end{aligned} \quad (7)$$

を第 j 列とする行列 $G_\Omega := [\mathbf{x}_\Omega \circ \mathbf{g}_1 | \dots | \mathbf{x}_\Omega \circ \mathbf{g}_N] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ を定義し、さらに、 \mathbb{R}^N 上での一次元部分空間 $\text{span}\{\mathbf{x}_\Omega\}$ の直交補空間を考え、 G_Ω のそこへの射影を考える：

$$\tilde{G}_\Omega := (I_N - \mathbf{x}_\Omega \mathbf{x}_\Omega^T) G_\Omega, \quad (8)$$

ここで、 I_N は \mathbb{R}^N 上の単位行列である。なお、 G_Ω の各列ベクトルは、(7)式からもわかるように、 Ω の外側に対応する要素はすべて0であるから、 $\text{rank}(G_\Omega) = \text{rank}(\tilde{G}_\Omega) + 1 = |\Omega|_0$ となる。 \tilde{G}_Ω の各列ベクトルはもちろん \mathbf{x}_Ω と直交しているが、列ベクトル同士は直交していない。したがって、これらの列ベクトルの張る線型空間の正規直交基底を求めるために、 \tilde{G}_Ω の特異値分解 (Singular Value Decomposition; SVD) $\tilde{G}_\Omega = U \Sigma V^T$ を計算する (なお、特異値分解は様々な応用問題において非常に重要な役割を果たす；詳しくは [26, 27]などを参照されたい)。ここで、元々のイメージング・システムとの関係を見てみよう。 I 上の全画像データ $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ が $A\mathbf{f} = \mathbf{b}$ という線型方程式系を満たすものとする。ここで $A \in \mathbb{R}^{m \times N}$ はイメージング・システムを表す行列、 $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ は観測データであり、この線型方程式系から \mathbf{f} を求めるというプロセスがイメージングであるとしよう。上記の直流成分ベクトルと最初の $k-1$ 個の左特異ベクトルを使って $N \times k$ の行列 U_k を $U_k := [\mathbf{x}_\Omega, U(:, 1:k-1)]$ と定義する。ここで、 $U_k^T U_k = I_k$ となること、また、 $k > |\Omega|_0$ の範囲の k は考える必要はないことを注意しておく。Winters等はこの U_k の列ベクトルを「患者対応基底関数」と呼び、画像データ \mathbf{f} をこれら k 個の基底ベクトルを用いて、 $\mathbf{f} \approx U_k \tilde{\mathbf{f}}_k$ と近似し、 $\tilde{\mathbf{f}}_k \in \mathbb{R}^k$ を線型方程式系 $A U_k \tilde{\mathbf{f}}_k = \mathbf{b}$ から求めることを提案した[40]。この手法の数値的精度と計算効率は、この k 項の「患者対応基底関数」による近似誤差 $\|\mathbf{f} - U_k \tilde{\mathbf{f}}_k\|_2$ と $k(\leq |\Omega|_0)$ というトレードオフ・パラメータに強く依存していることが理解されよう。

ここで、行列 \tilde{G}_Ω の SVD を再考しよう。左特異行列 U は、明かに $\tilde{G}_\Omega \tilde{G}_\Omega^T U = U \Sigma^2$ という固有値問題の解であり、これは、 U の列ベクトルが、標本自己共分散行列が $\frac{1}{N} \tilde{G}_\Omega \tilde{G}_\Omega^T$ の場合の KLT 基底をなすことを示している。対

1 離散的な定常確率過程の場合は、KLT と上述した PCA は等価であるが、確率過程の解析においては、KLT という用語の方がよく使用される。

応する標本自己相関行列は $\frac{1}{N}G_{\Omega}G_{\Omega}^T$ であり、これはすなわち、「患者対応基底関数」とは、「 Ω 内のサンプル点 x_j を $1/|\Omega|_0$ の等確率でランダムに選び、 $x_{\Omega} \odot g_j$ を生成する」という \mathbb{R}^N 上の定常確率過程を対角化する基底であることを意味している。

さらに、この確率過程の各標本ベクトル $x_{\Omega} \odot g_j$ は、ガウス関数を平行移動した後、その台を Ω 上のみに制限したものであるから、これを対角化するような基底ベクトルは、 Ω 上の離散サイン変換 (DST) の基底ベクトルであることがわかる (このようなランダムな平行移動を基にした定常確率過程の KLT 基底については、[41, Sec. 1.10] も参照のこと)。さらに正確にいうと、DST の基底ベクトルを直流成分ベクトル x_{Ω} と正規直交化するように変換したものである。この状況を明示するために、 $N = 201$, $m_0 = 11$, $m_1 = 191$, $|\Omega|_0 = 181$, として実際に数値計算を行った。その結果および他の基底関数と比較を図 4 に示す。

ここで「患者対応基底関数」とラプラシアン固有関数のそれぞれの長所・短所についての筆者の考えを述べたい。まず、「患者対応基底関数」についてであるが、その長所としては、 Ω 上の直流成分ベクトル x_{Ω} を含むことがあげられる。短所としては、図 4 a からもわかるように、直流成分ベクトル以外の患者対応基底ベクトルはディリクレ境界条件を満たすことを強要されるため、1) ROI の境界 $\partial\Omega$ 近傍の画像特徴を近似するのに効率的ではないということ；2) ギブズ現象が起こること；そして 3) 複雑な 3D の形状をなしている ROI の場合に、一次元の患者対応基底ベクトルのテンソル積を使用するのは効果的ではない、ということがあげられる。これに対して、(交換可能な積分作用素から得られる) ラプラシアン固有関数の長所は、 $\partial\Omega$ 近傍の画像特徴を近似するのにより効率的であること、また複雑な 3D 形状の ROI の場合にも積分核が (3) 式なので、領域内のサンプル点 (ボクセルの中心点) 間の距離さえわかれば、計算できることがあげられる。短所は、直流成分ベクトルを含んでいないことである。しかし、この短所は、比較的簡単に克服できる。積分核を離散化した行列 K を直接対角化するかわりに、(8) 式と同じように、 $\text{span}\{x_{\Omega}\}$ の直交補空間への写像 $(I_N - x_{\Omega}x_{\Omega}^T)K$ を構成し、その固有ベクトル系に直流成分ベクトルを含めればよいのである。

以上の長所・短所、および第 1 節で述べた DCT の長所を考慮すると、比較的単純な 3D 形状の ROI の場合には、領域に適応した離散コサイン変換基底のテンソル積の使用を推薦できる：直流成分ベクトルも含んでいる上、高速フーリエ変換を用いることにより計算効率も良いからである。また、DCT (正確に言えば、DCT Type II[7]) は、第 1 節でも述べたように、JPEG 画像圧縮規格に採用されているのみならず、定常確率過程が単純マルコフ過程の極限の (すなわち、隣接したサンプル点でのデータの相関が 1 に近づく) 場合の KLT 基底にもなっていることを指摘しておきたい[42]。ただし上記に述べたように、ROI が複雑な 3D の形状の場合の一次元基底関数のテンソル積に関する問題は依然として残る。さらなる比較研究が待たれる

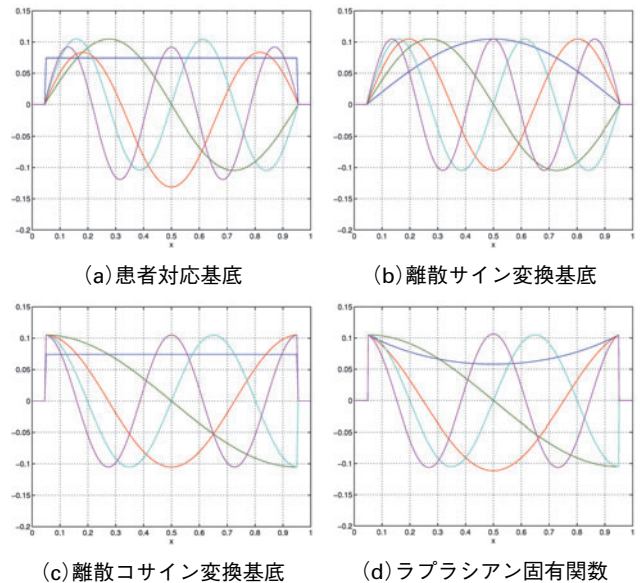


図 4 $\Omega = [0.0475, 0.9525] \subset I = [0, 1]$ のときの様々な基底ベクトル。それぞれの基底のうち、最低周波数に対応するものから 5 番目に低い周波数に対応するものまでを表示している。

ところである。

4.6 終わりに

本論文では、主に、ラプラシアン固有関数と境界条件の重要性；ラプラス作用素と可換な積分作用素によって、境界条件を陽に設定しなくても、ラプラシアン固有関数を計算することができる筆者の[24]の手法；Beg らによるその海馬の形状分析への応用[31]；そして、ラプラシアン固有関数と Winters らの「患者対応基底関数」[40]との関係、について述べた。

頁数制限の関係上、曲率のある領域 (多様体) 上におけるラプラシアン固有関数、すなわちラプラス・ベルトラミ作用素の固有関数については、解説できなかった。詳しくは、[37, 43, 44]等を参照されたい。また、最近特に注目されているグラフ上でのラプラシアン固有関数とその応用についても、残念ながら解説できなかった。詳しくは、[36, 43, 45, 46]等を参照していただければ幸いである。

謝 辞

本研究は、アメリカ合衆国海軍研究局 (Office of Naval Research) からのグラント N00014-12-1-0177, N00014-16-1-2255, およびアメリカ国立科学財団 (National Science Foundation) からのグラント DMS-1418779 の支援を受けた。サイモン・フレイザー大学の Faisal Beg 教授には、図 3 の本論文での使用を快諾していただいた。また本論文は、2013年 9 月 4 日に行った筆者の核融合科学研究所・総合研究大学院大学における夏季集中講義を元になっている。この講義の開催をオーガナイズしていただいた長山好夫先生、「患者対応基底関数」とラプラシアン固有関数の関係についての研究を示唆していただいた岩間尚文先生、そして原稿の閲読をされ有益なコメントをいただいた大館暁先

生と九州大学の稲垣滋先生に感謝いたします。

参考文献

- [1] 新井仁之：フーリエ解析学 講座 数学の考え方第17巻 (朝倉書店, 2003).
- [2] 黒田成俊：関数解析 共立数学講座第15巻 (共立出版, 1980).
- [3] H. Dym and H.P. McKean, *Fourier Series and Integrals* (Academic Press, 1972).
- [4] G.B. Folland, *Fourier Analysis and Its Applications* (Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2009).
- [5] M.A. Pinsky, *Introduction to Fourier Analysis and Wavelets* (Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2009).
- [6] W.B. Pennebaker and J. L. Mitchell, *JPEG Still Image Data Compression Standard* (Van Nostrand Reinhold, 1993).
- [7] G. Strang, *SIAM Rev.* **41**, 135 (1999).
- [8] N. Saito and J.-F. Remy, *Appl. Comput. Harm. Anal.* **20**, 41 (2006).
- [9] K. Yamatani and N. Saito, *IEEE Trans. Image Process* **15**, 3672 (2006).
- [10] 斎藤直樹：ウェーブレットによる画像処理, 薩摩順吉・大石進一・杉原正顕 (編)；応用数理解ハンドブック, 512 (朝倉書店, 2013).
- [11] 吉田耕作：積分方程式論第2版 (岩波書店, 2001).
- [12] 池部晃生：数理解物理の固有値問題, 離散スペクトル, 数理解析とその周辺第15巻 (産業図書, 1976).
- [13] 小谷真一, 俣野 博：微分方程式と固有関数展開 (岩波書店, 2006).
- [14] 寺沢寛一：自然科学者のための数学概論増訂版 (岩波書店, 1983).
- [15] R. Courant and D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, Vol. I (Wiley-Interscience, New York, 1953. Wiley Classics Edition published in 1989).
- [16] R. Courant and D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, Vol. II (Wiley-Interscience, New York, 1962. Wiley Classics Edition published in 1989).
- [17] P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Part I (McGraw-Hill, Inc., 1953. Republished by Feshbach Publishing in 2005).
- [18] P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Part II (McGraw-Hill, Inc., 1953. Republished by Feshbach Publishing in 2005).
- [19] 浦川 肇：ラプラシアン of 幾何と有限要素法 朝倉数学大系第3巻 (朝倉書店, 2009).
- [20] M. Reuter *et al.*, *Computer-Aided Des.* **38**, 342 (2006).
- [21] M. Niethammer *et al.*, *Global medical shape analysis using the Laplace-Beltrami spectrum*. In N. Ayache *et al.*, editors, *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention--- MICCAI 2007*, Part I, Vol. 4791 of Lecture Notes in Computer Science, pp. 850-857 (Springer, 2007).
- [22] K.E. Atkinson, *The Numerical Solution of Integral Equations of the Second Kind*, Vol. 4 of Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [23] R. Kress, *Linear Integral Equations*, Vol. 82 of Applied Mathematical Sciences. 3rd edition (Springer-Verlag, 2014).
- [24] N. Saito, *Appl. Comput. Harm. Anal.* **25**, 68 (2008).
- [25] B. Friedman, *Principles and Techniques of Applied Mathematics* (John Wiley & Sons, Inc., 1956. Republished by Dover Publications, Inc. in 1990).
- [26] G.H. Golub and C.F. Van Loan, *Matrix Computations*, 4th edition (The Johns Hopkins Univ. Press, 2013).
- [27] L.N. Trefethen and D. Bau, III, *Numerical Linear Algebra* (SIAM, 1997).
- [28] V. Rokhlin, *J. Comput. Phys.* **60**, 187 (1985).
- [29] L. Greengard and V. Rokhlin, *J. Comput. Phys.* **73**, 325 (1987).
- [30] X. Xue, On a Fast Algorithm for Computing the Laplacian Eigenpairs via Commuting Integral Operators. PhD thesis, Dept. Math., Univ. California, Davis (2007).
- [31] M.F. Beg *et al.*, *Stat. Methods Med. Res.* **22**, 439 (2013).
- [32] M.A. Khabou *et al.*, *Pattern Recognition* **40**, 141 (2007).
- [33] M.B.H. Rhouma *et al.*, *Shape recognition based on eigenvalues of the Laplacian*. In P.W. Hawkes, editor, *Advances in Imaging and Electron Physics*, Vol. 167, chapter 3, pp. 185-254 (Academic Press, 2011).
- [34] W. Arendt *et al.*, *Weyl's law: Spectral properties of the Laplacian in mathematical physics*, In W. Arendt and W.P. Schleich, editors, *Mathematical Analysis of Evolution, Information, and Complexity*, chapter 1, pp. 1-71 (Wiley-VCH Verlag, 2009).
- [35] D.S. Grebenkov and B.-T. Nguyen, *SIAM Rev.* **55**, 601 (2013).
- [36] 浦川 肇：ラプラス作用素とネットワーク (裳華房, 1996).
- [37] 浦川 肇：スペクトル幾何 数学の輝き第3巻 (共立出版, 2015).
- [38] T. Hastie *et al.*, *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*, 2nd edition (Springer-Verlag, 2009).
- [39] T. DelSole and M.K. Tippett, *J. Climate* **28**, 7420 (2015).
- [40] D.W. Winters *et al.*, *IEEE Trans. Medical Imaging* **28**, 969 (2009).
- [41] Y. Meyer, *Oscillating Patterns in Image Processing and Non-linear Evolution Equations*, Vol. 22 of University Lecture Series (Amer. Math. Soc. Providence, RI, 2001).
- [42] R.J. Clarke, *IEE Proceedings, Part F*, **128**, 359 (1981).
- [43] 浦川 肇：応用数理 **12**, 29 (2002).
- [44] S. Rosenberg, *The Laplacian on a Riemannian Manifold*, Vol. 31 of *London Mathematical Society Student Texts* (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [45] 斎藤直樹：応用数理 **25**, 6 (2015).
- [46] J. Irion and N. Saito, *Applied and computational harmonic analysis on graphs and networks*. In M. Papadakis *et al.*, De Ville, editors, *Wavelets and Sparsity XVI*, Proc. SPIE9597, 2015. Paper # 95971F.

講座執筆紹介

第4章



さいとう なおき
齋藤直樹

1982年東京大学工学部計数工学科卒業。1984年同大学大学院工学系研究科計数工学専攻修士課程修了。1984-86年日本シュルンベルジェ(株)。1986-97年シュルンベルジェードル研究所(米・コネティカット州)。1994年イェール大学大学院数学科・応用数学博士課程修了。Ph.D. 1997年-2001年カリフォルニア大学デイヴィス校数学科准教授。2001年同校教授、現在に至る。応用・計算調和解析の研究に従事。趣味は多種の楽器演奏。https://plus.google.com/+NaokiSaitoMathMusicも参照して下さい。

第5.1章



あきやま つよし
秋山毅志

核融合科学研究所 准教授。色々興味はあるのですが、ここ最近には主にレーザーを使った計測器の開発・設計をしています。核融合研究の共同研究や、自然科学研究機構の分野間連携研究プロジェクト、日米協力、ITERなど、様々な先生方と一緒に仕事をさせていただく機会が増えました。技術面でもマネジメントの面でも、いつも目からウロコのことばかりで、共同研究や分野間交流の重要性を実感しております。



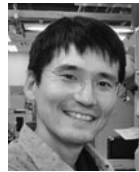
はやの ゆたか
早野裕

自然科学研究機構国立天文台先端技術センター・准教授。専門は補償光学、光学赤外線天文観測装置の研究開発。近年は補償光学をさらに発展させ、生体ライブイメージング、プラズマ計測などへの応用にも挑戦している。



はつとり まさゆき
服部雅之

自然科学研究機構基礎生物学研究所(2013年～)研究員。補償光学を中心に、光学に関する研究を続けている。早稲田大学理工学部 助手(1998年～)、通信総合研究所 研究員(2001年～、現、情報通信研究機構)、自然科学研究機構国立天文台研究員(2003年～)。近年は、すばる望遠鏡の補償光学系に携わったのち、生物の研究所で光学顕微鏡用の補償光学の研究を本格的に進めている。



たまだ ようすけ
玉田洋介

基礎生物学研究所 助教。2005年京都大学大学院生命科学科博士課程修了。専門は発生生物学で、「細胞の運命がいつ、どのように変わるか?」という疑問を、主に植物の受精や幹細胞化に着目して解明しようとしている。細胞の運命が変わる瞬間を精細に観察するために、様々な光学系を顕微鏡に取り入れようと勉強中。

第5.2章



あらかわ ひろゆき
荒川弘之

帝京大学福岡医療技術学部診療放射線学科 助教。現在はプラズマ乱流・計測の研究と共に、医療用CTの被ばく減少・画質改善へ向けた研究も行っています。別の分野では、研究に対してアプローチの仕方が異なっていたり、一歩も二歩も進んだ手法が用いられていたりしていろいろ勉強になります。様々な分野の研究手法を取り入れながら新しい研究を進めていけたらと日々考えています。



5. 新たな計測へ

5. Prospect for New Diagnostics

5.1 波面センサーによる密度揺動計測

5.1 Electron Density Fluctuation Measurements with a Wavefront Sensor

秋山毅志, 早野 裕¹⁾, 服部雅之²⁾, 玉田洋介²⁾

AKIYAMA Tsuyoshi, HAYANO Yutaka¹⁾, HATTORI Masayuki²⁾ and TAMADA Yosuke²⁾

核融合科学研究所, ¹⁾国立天文台, ²⁾基礎生物学研究所

(原稿受付: 2016年8月22日)

光の波面の再構成法と, そのプラズマ計測への応用について述べる. 波面センサーの一つであるシャックハルトマン波面センサーは, 光の波面 (等位相面) を集光スポット位置の変化として2次元検出するセンサーである. 元々, 望遠鏡の解像度を向上させる波面補償光学で開発が進められた機器であるが, 近年ではプラズマの電子密度・揺動計測手法に適用が開始されている. 本講座ではその波面センサーの原理とこれまでの適用例を紹介しつつ, プラズマの電子密度・密度揺動計測の試みを解説する.

Keywords:

Wavefront sensor, telescope, microscope, plasma, fluctuation measurement

5.1.1 はじめに

プラズマの屈折率は電子密度に依存するため, プラズマ中を透過するレーザー光の位相速度は電子密度によって変化する. それを利用したのが干渉法による電子密度計測であり, プラズマ内, 及び外を透過したレーザー光 (それぞれ, 探査光, 参照光) の間に生じた位相変化から電子密度を評価する. ここで用いられる光検出器は, 電磁波の位相を直接検出することができないため, 位相変化を強度変化等に変換して検出を行う. 例えば, 電子密度干渉計測で最も初歩的なホモダイン干渉計は, 探査波と参照波を重ね合わせ, それによって生じる強度 (コントラスト) 変化から位相の変化を評価する. 電子密度揺動計測手法の一つである位相コントラスト法[1]は, 電子密度揺動で散乱された1次光と, 非散乱成分であるゼロ次光との間に, 位相差板を用いて位相差を与え, 位相変化を強度変化に変換して揺動成分の検出を行っている.

本講座で紹介するシャックハルトマン波面センサー[2]は, 観測光波面 (等位相面) の2次元形状を強度分布変化として測定する. 後述のように, 波面センサーは元々大型望遠鏡にて空気揺らぎによる解像度の低下を解決するための「補償光学」[3, 4]の構成要素として開発が進められ, 大きな進歩を果たした技術である. その後, 波面センサーは眼の収差測定に適用され[5], 現在実際の医療現場で使用されている. また, 近年では生体の顕微鏡観察のライブイメージング[6]に取り入れられ, 解像度の改善に大きな成

果を挙げている.

本稿では, プラズマ分野では比較的目新しい技術である, 波面センサーの原理と現在の利用例について紹介する. 更に, 現在筆者らが進めているプラズマの揺動計測手法としての試みについても紹介する.

5.1.2 波面計測の原理

5.1.2.1 波面センサー

光の波面形状を測定する波面センサーには, シャックハルトマン波面センサー, 波面曲率センサー, ピラミッドセンサーなどがある[2]. ここでは, 最も広く用いられているシャックハルトマン波面センサーについて原理を紹介する.

シャックハルトマン波面センサーは, CCDやCMOSなどの撮像素子とその前面に配置したマイクロレンズアレイからなる. 観測対象からの光の波面が歪みの無い平面波であった場合, 図1に示すように撮像面にはマイクロレンズアレイの形状に応じた等間隔の集光スポット (ハルトマンスポット) が形成される. 観測対象物, 若しくは何らかの擾乱によってレーザー光断面に位相変化が生じて波面が乱れた場合, 各レンズアレイに対する光束の入射方向が変わるため, ハルトマンスポット位置は不規則になる. この位置の変化より, 入射波面形状の情報を得ることができる.

5.1.2.2 波面再構成

前述のハルトマンスポットの位置情報から, 以下のようにして波面を再構成することができる[4]. ゼルニケ多項

corresponding author's address: National Institute of Natural Science, National Institute for Fusion Science, Toki, Gifu 509-5292, Japan

corresponding author's e-mail: takiyama@nifs.ac.jp

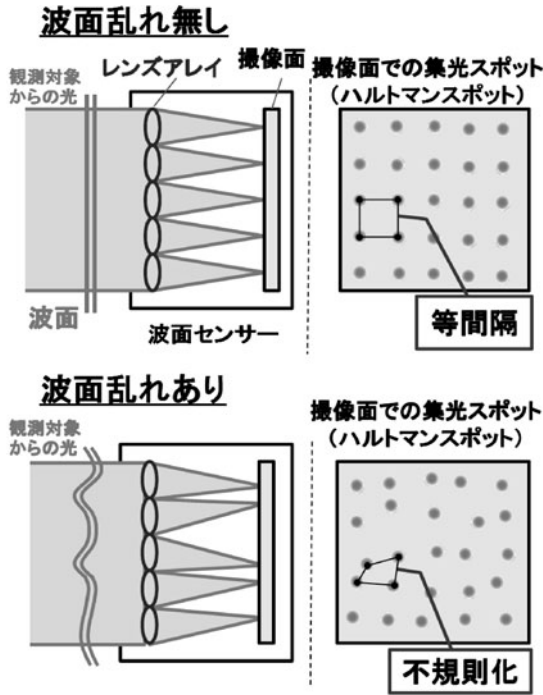


図1 シャックハルトマン波面センサーの測定原理.

式 $Z_n^m(X, Y)$ を用いて、入射等位相面 $W(X, Y)$ を近似的に

$$W(X, Y) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^i c_i^{2j-i} Z_i^{2j-i}(X, Y) \quad (1)$$

と表現する。ゼルニケ多項式は光学分野でよく用いられる直交多項式であり、図2 [7]に示すような関数形で、各項が収差に対応する。例えば、 Z_0^0 は平面波、 Z_1^{-1} 、 Z_1^1 は波面の傾き成分、 Z_2^{-2} 、 Z_2^2 は非点収差成分、 Z_3^{-1} 、 Z_3^1 はコマ様収差、 Z_4^2 は球面収差など、サイデルの収差に良く対応している。

ハルトマンスポットの変位を $(\Delta x, \Delta y)$ 、マイクロレンズの焦点距離を f とすると、波面と位置ずれの関係は

$$\frac{\partial W(X, Y)}{\partial X} = \frac{\Delta x}{f}, \quad \frac{\partial W(X, Y)}{\partial Y} = \frac{\Delta y}{f} \quad (2)$$

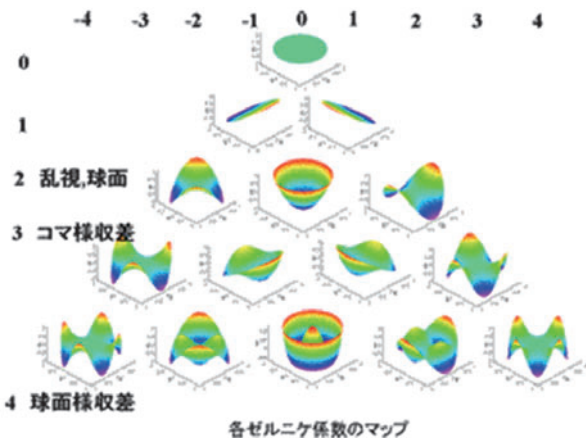


図2 ゼルニケ多項式の3次元表示 [7].

で与えられる。式(1)を式(2)に代入し、ゼルニケ係数 c_n^m を最小二乗法で求めることにより、波面を再構成することができる。

5.1.2.3 プラズマの電子密度評価

プラズマ計測に波面計測を適用し、電子密度を評価する場合は、以下のような簡易的な波面再構成手法も利用できる。これは、電子密度計測では計測系が持つ各種の収差の大きさを定量化することは重要ではなく、プラズマの有無での相対的な波面の変化を求めれば良いためである。図3に示すように、レンズ直径(ここではレンズ間隔と同じ)を d 、入射光の波長を λ とする。 i 番目のレンズアレイにおいて、プラズマが無い場合の等位相面に対する位相差を $\Delta\phi_i$ と置くと、ハルトマンスポットの変位との関係は、

$$\Delta x_i = f \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\Delta\phi_i}{d} \quad (3)$$

となる[8]。これより、 k 番目のレンズアレイ位置における位相差 ϕ_k は、

$$\phi_k = \sum_{i=1}^k \Delta\phi_i = \sum_{i=1}^k \frac{2\pi d}{f\lambda} \Delta x_i \quad (4)$$

と与えられ、プラズマによって生じた位相変化は、ハルトマンスポットの位置の変位量として求めることができる。プラズマによる位相変化 ϕ は、

$$\phi = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \lambda \int n_e dl \quad (5)$$

で与えられるため、位置変化から算出した位相変化より、電子密度が評価できる。また、後述の通り、電子密度の揺らぎは、ハルトマンスポット位置の揺らぎとなって観測される。

5.1.3 波面計測の利用例

5.1.3.1 大型天体望遠鏡

夜空の星が瞬いて見えるのは、大気の揺らぎによって天体からの光の波面が乱されるためである。天体はほぼ無限遠に存在する上に宇宙空間は擾乱がないため、大気圏に到

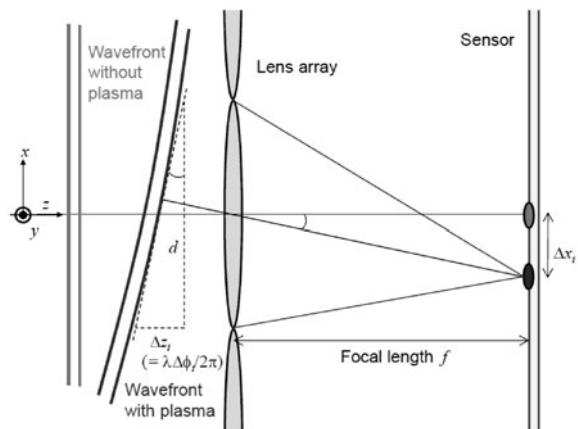


図3 ハルトマンスポットの変位と位相変化の関係.

達する光の波面はほぼ平面波とみなせる。一方、地上の大気は空間的に温度や密度、大気圧にムラがあり、これらは屈折率の不均一性をもたらす。大気圏に到達した平面波は、大気中を伝播することで、屈折率の不均一性によって屈折が生じたり、等位相面に乱れが生じたりすることになる。

望遠鏡は口径を大きくすればするほど解像度が上がるため、これまで大口径化が進められてきた。しかし、地上の望遠鏡の実際の解像度は、回折限界で決まる値よりも低く、これは大気揺らぎによる波面乱れが原因である。等位相面である波面に乱れがある場合、点光源からの光は回折限界で決まるスポットに収束せず、広がり歪みを持つことになる。したがって、実際の望遠鏡の解像度は大気による波面乱れが決めている。マウナケア山など高山の上に建設されている。すばる望遠鏡をはじめとする大型望遠鏡は、大気揺らぎの影響の少ない立地を選んでいる。しかし、それでも波面乱れの影響は大きい。そこで考案されたのは、大気によって乱された波面を平面波に戻す「補償光学」であり、その概念図を図4に示す[9]。補償光学は、先に述べた波面形状を測定する波面センサー、乱れた波面形状を補正する可変形鏡、及び両者を繋ぐ帰還制御装置からなる。可変形鏡は薄いミラー面の裏側に取り付けられた多数のアクチュエーターにより、ミラー表面形状を任意に変えることができる特殊なミラーである。望遠鏡に入射した光を波面センサーへ分岐し、制御装置で乱れた波面形状の再構成とそれを平面に戻すための最適ミラー表面形状を演算する。その信号を元に実時間で可変形鏡の形状を変え、波面の乱れを補正している。すばる望遠鏡では2000年より補償光学系の運用を開始し[10]、これまで大幅な解像度の改善

補償光学を用いた望遠鏡の高解像化

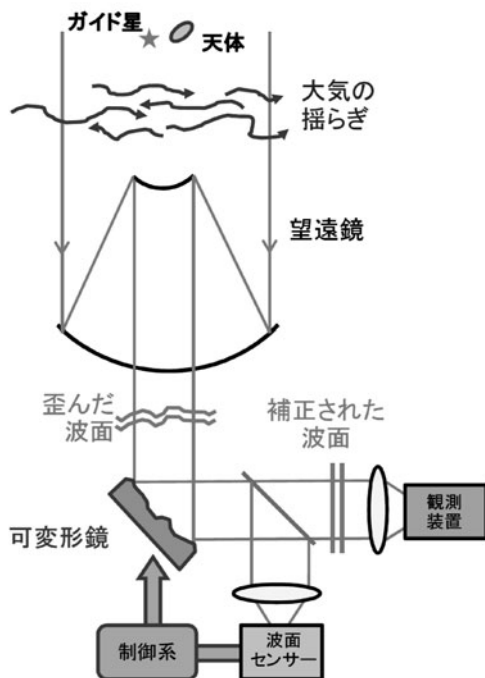


図4 補償光学系を導入した大型望遠鏡[9].

に成功している。その一例が図5であり、補償光学系によって二重連星を分離することに成功している[9].

5.1.3.2 細胞のライブイメージング計測

「ライブイメージング」とは、蛍光タンパク質などを標的とし、細胞を生きたまま顕微鏡で観察する技術である。組織を加工して対象物のみ観察する従来のイメージングと異なり、ライブイメージング観測では図6に示すように蛍光体（ここでは葉緑体）からの光は様々な構造体を通り抜ける。それぞれの細胞内小器官は、異なる屈折率を持つため、位相変化の不均一性や境界で屈折が生じる。また、細胞内に存在する微小な油滴や多糖などはより高次の光の乱れを引き起こす。このように、大気揺らぎによる望遠鏡での解像度低下と同様に、細胞内構造体は顕微鏡の解像度の劣化をもたらす。

この課題に対して玉田、早野、服部らは、自然科学研究機構の「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」を通し、大型望遠鏡で開発した補償光学を元に顕微鏡に合わせた独自の工夫を加えて応用し、解像度の向上を図った。図7に示すように、補償光学を動作させた場合は蛍光タンパク質で標識した細胞核の境界が鮮明になり、またクロマチン（染色質）と呼ばれるDNAとタンパク質の複合体の構造に起因するスペックルが明瞭に観察できるようになった[11]。補償光学顕微鏡では観測対象物からの光が微弱であるため、微弱光に対する波面センサーの検出感度向上が課題の一つとなっている[4].

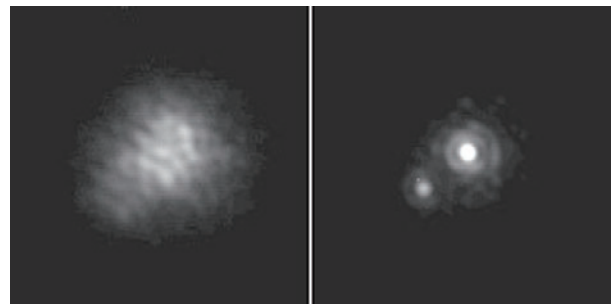


図5 補償光学系の有無による星像の改善例（二重星 HR 1852）。左：補償光学を動作させていないとき、右：補償光学が動作しているとき[9].

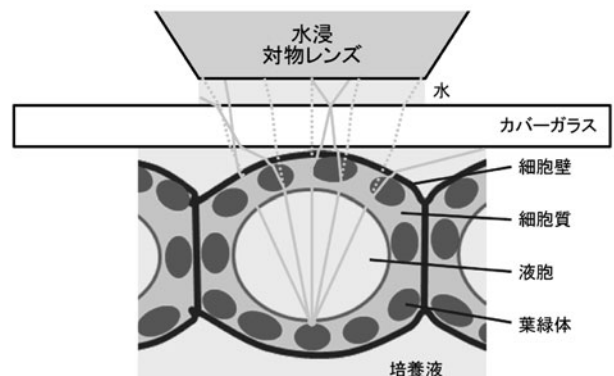


図6 細胞の顕微鏡観察での光線屈折。細胞下部から対物レンズに伸びる点線は、光が乱れなく対物レンズに入射した場合の光線、実線は光が細胞内小器官によって乱された場合の光線の模式図をそれぞれ示す。

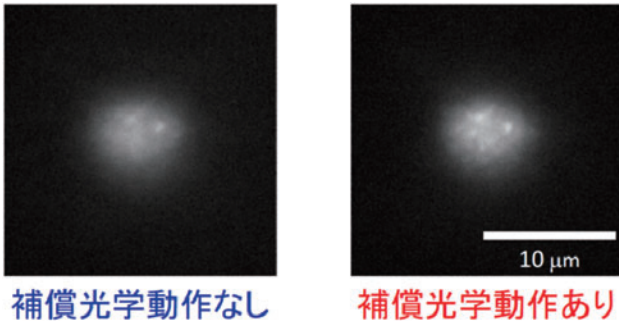


図7 補償光学有り無しでの細胞核の蛍光像。

5.1.3.3 眼球の収差の測定

近視や乱視は眼の収差によって引き起こされ、その補正には古くからメガネやコンタクトレンズが使われている。これに対し、屈折矯正手術とは眼の収差を手術的に矯正する方法であり、LASIC（レーシック）として広く知られるようになった。最近では、図8のように眼の収差を予め測定し、その収差を最小にするよう矯正手術するのに波面センサーが利用されている。

5.1.4 プラズマ計測への適用

5.1.4.1 アークプラズマ計測

大電流遮断器では機械的な遮断を行った後も、発生するアーク放電によって電流遮断ができないことがあるため、ガス吹き付け等による消弧が行われている。そのアークプラズマの消弧過程では電子密度が重要な寄与を果たしていると考えられており、効果的な消弧手法の開発には電子密度の測定が必要とされている[12]。遮断器での電子密度計測では、高電圧放電であるために静電プローブの利用は難しい。また、再現性の無い過渡的なプラズマであることから、計測位置が定点であるトムソン散乱計測は限定的な使用になる。一方、波面計測による電子密度は非接触計測であり、プラズマの発生領域よりレーザー光を十分広げておくことで、放電経路が放電毎、また時間的に変化しても計測が可能である[8]。

図9に波面センサーを用いたアークプラズマの電子密度計測の光学系を示す[13]。大気中の放電の場合、計測される位相変化は式(5)にイオン密度及び中性粒子密度の寄与が加わる。ただし、それらは電子密度項と違って波長依存が無いため、図9のように2波長同時計測によって、波長

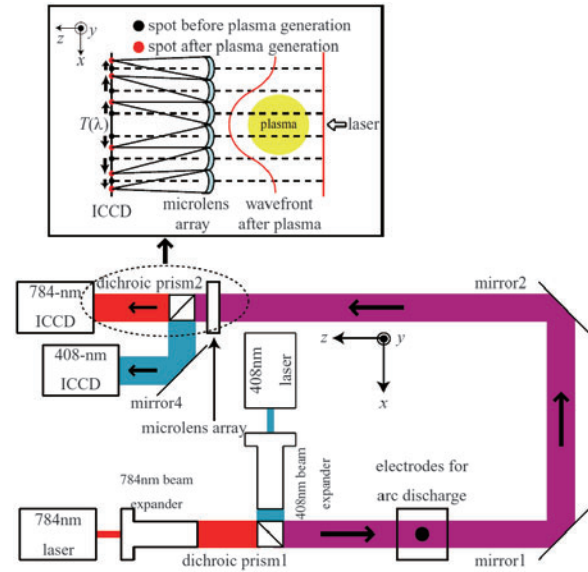


図9 波面センサーによるアークプラズマの電子密度計測の光学系[13]。

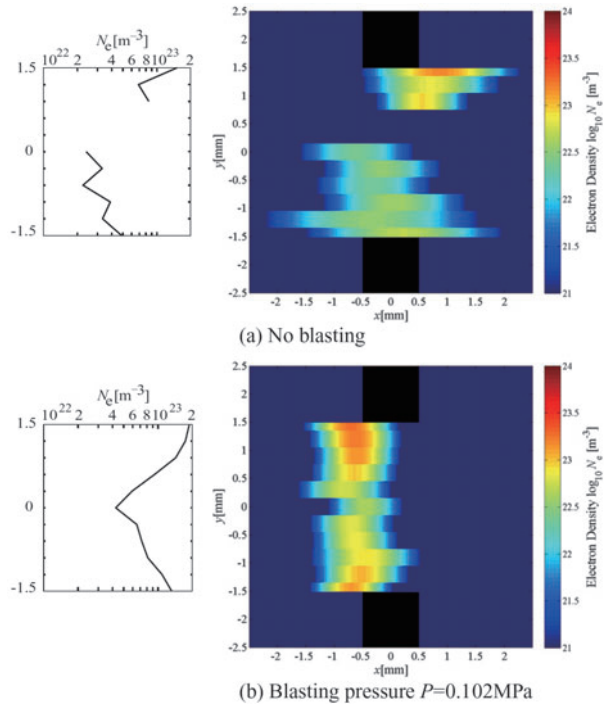


図10 波面センサーによるアークプラズマの2次元電子密度分布。空気の吹きつけ(a)無し、(b)有り[13]。

依存のある電子密度成分を非波長依存成分から分離して評価することができる。また、遮断器でガスによる点弧、消弧特性を研究する上で、中性粒子密度がわかることも有益である（イオン密度の寄与は十分小さい）。図10に波面センサーで計測した、ギャップ間に発生したアークプラズマの2次元電子密度分布を示す。消弧を効果的にするために空気の吹きつけの有無を比較すると、空気吹きつけをした場合はプラズマ径が細くなる様子を捉えることに成功している。

5.1.4.2 プラズマ揺動計測

プラズマの揺動はエネルギーの散逸を引き起こし、核融

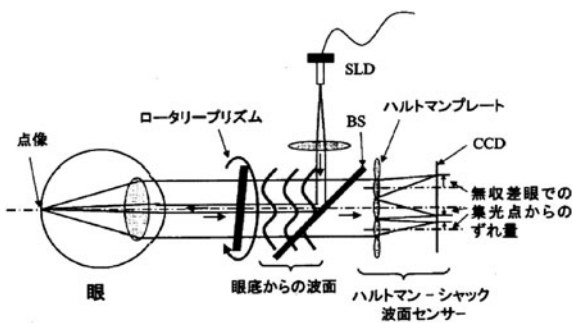


図8 波面センサーを用いた眼の収差測定[7]。

合プラズマでは高温高密度化を妨げる要因となっている。古くから揺動の物理機構の理解のため、様々な揺動計測法が開発されてきた。自然科学研究機構「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」により、筆者らの研究グループは波面センサーによる電子密度揺動計測を提案している。波面センサーによる電子密度計測は、前章5.1.4.1のアークプラズマ計測で既に実証済みである。揺らぎ計測という点では、大型望遠鏡で大気揺らぎの計測・補正で実績があり、位相変動をもたらす媒質が大気かプラズマかの違いだけである。波面センサーによる電子密度揺動計測は、他の手法であれば複雑な光学系、変調技術を要するのに対し、前章5.1.4.1と同様に非常にシンプルな光学系で揺動の情報を得られることが利点である。レーザー光軸に沿った線積分情報であるものの、カメラ計測により、容易に電子密度揺動の2次元像が得られる点でも、波面センサーによる密度揺動計測は有益である。

密度揺動の周波数は数 kHz から MHz 程度であるのに対し、CCD または MOS を使う波面センサーのフレームレートは kHz 程度しかなく、そのままでは周波数の高い揺動計測は難しい。これらの撮像素子では、各ピクセルに入射した光子が露光時間中に積算される。そのため、揺動周期数より十分長い露光時間をとることで、その間のハルトマンスポットの微小かつ高周波の位置変動が各ピクセルに強度情報として蓄積され、図11に示すようにハルトマンスポット径の広がりとして現れる。つまり、密度揺動が大きいとハルトマンスポット径が大きくなり、スポット径の広がりに対応する2次のモーメントをハルトマンスポット毎に評価することで、フレームレートより高速の密度揺動でも揺動振幅の二乗平均平方根に近い値を得ることができる。このように、波面センサーは、探査光の位相揺らぎを強度変化、とりわけハルトマンスポット「形状」から測定し、2次元の電子密度揺動分布が得られる可能性を持つ。

現在、九州大学応用力学研究所の直線プラズマ装置 PANTA にて、原理実証実験を進めている。波面センサーを構成する撮像素子、及びレンズアレイの帯域は、近赤外領域までであるため、光源レーザーには波長 1064 nm の YAG レーザー、若しくは 635 nm の半導体レーザーを用いている。PANTA 装置で予想される波面の変動は、概ね波長の 1/700 程度であるのに対し、市販の波面センサーの感度は 1/100 程度である。そのため、波面分解能の向上が課題であり、プラズマ計測に合わせた撮像素子、及びレンズアレイの最適化を進めている。

5.1.5 まとめと展望

補償光学の重要な構成要素である波面センサーは、すばるをはじめとする大型望遠鏡や顕微鏡観察での解像度向上のみならず、現在では医療用途など様々な分野で適用が進められている。これに伴って、市販の波面センサーも増え、性能も年々向上してきている。シャックハルトマン波面セ

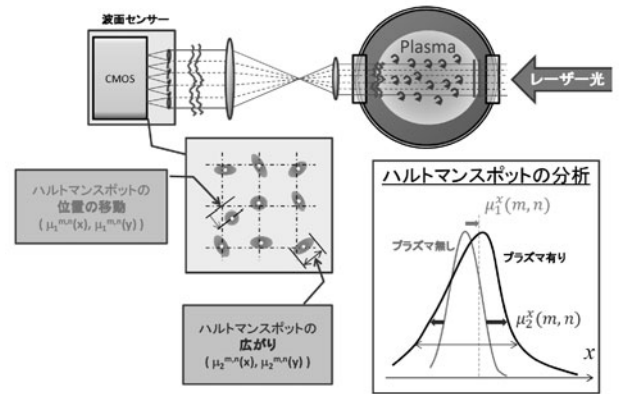


図11 波面センサーを用いたプラズマの密度揺動計測の光学系と、密度揺動によるハルトマンスポットの変化。

ンサーは、探査光の位相変化を集光スポットの位置・形状変化に変換して計測するもので、プラズマの電子密度、及びその揺動の2次元計測法として大きな可能性を有している。波面計測はプラズマ計測手法として適用が始まったばかりであり、現状ではセンサーの最適化が十分ではない。現在、稲田らや筆者らによってプラズマ計測のために様々な改良が行われており、今後、分野横断的な協力の下、センサー性能の向上とその応用研究が期待される。

謝辞

本節を執筆するにあたり、波面計測によるアーク放電プラズマの電子密度計測について、埼玉大学の稲田優貴博士と議論し、大変有益な情報、コメントをいただきました。心より感謝申し上げます。本節で扱った顕微鏡観察への補償光学導入、及びプラズマ電子密度揺動計測は、自然科学研究機構「若手研究者による分野間連携研究プロジェクト」、及び九州大学応用力学研究所共同研究の支援によるものです。

参考文献

- [1] K. Tanaka *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **79**, 10E702 (2008).
- [2] Jose Luis Santos and Faramarz Farahi, *Handbook of optical sensors* (CRC Press, 2014).
- [3] 家 正則：光学 **22**, 408 (1993).
- [4] 服部雅之, 早野 裕：光学 **44**, 370-378 (2015).
- [5] 広原陽子 他：VISION **13**, No.2, 99-105, 2001.
- [6] T. Murata *et al.*, Nat. Commun. **4**, 1967 (2013).
- [7] <http://www.lasik.gr.jp/old/update2/main.html>
- [8] 福地哲生 他：電気学会論文 A **122**, 11 (2002).
- [9] 国立天文台提供：http://subarutelescope.org/Pressrelease/2002/01/16/j_index.html
- [10] http://subarutelescope.org/Pressrelease/2000/12/02/j_index.html
- [11] 玉田洋介：光学 **44**, 384 (2015).
- [12] Y. Yokomizu *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **22**, 129 (1989).
- [13] Y. Inada *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 325204 (2014).

講座執筆者紹介

第4章



さいとう なおき
齋藤直樹

1982年東京大学工学部計数工学科卒業。1984年同大学大学院工学系研究科計数工学専攻修士課程修了。1984-86年日本シュルンベルジェ(株)。1986-97年シュルンベルジェードル研究所(米・コネティカット州)。1994年イェール大学大学院数学科・応用数学博士課程修了。Ph.D. 1997年-2001年カリフォルニア大学デイヴィス校数学科准教授。2001年同校教授、現在に至る。応用・計算調和解析の研究に従事。趣味は多種の楽器演奏。https://plus.google.com/+NaokiSaitoMathMusicも参照して下さい。

第5.1章



あきやま つよし
秋山毅志

核融合科学研究所 准教授。色々と興味はあるのですが、ここ最近には主にレーザーを使った計測器の開発・設計をしています。核融合研究の共同研究や、自然科学研究機構の分野間連携研究プロジェクト、日米協力、ITERなど、様々な先生方と一緒に仕事をさせていただく機会が増えました。技術面でもマネジメントの面でも、いつも目からウロコのことばかりで、共同研究や分野間交流の重要性を実感しております。



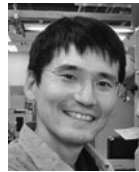
はやの ゆたか
早野裕

自然科学研究機構国立天文台先端技術センター・准教授。専門は補償光学、光学赤外線天文観測装置の研究開発。近年は補償光学をさらに発展させ、生体ライブイメージング、プラズマ計測などへの応用にも挑戦している。



はつとり まさゆき
服部雅之

自然科学研究機構基礎生物学研究所(2013年～)研究員。補償光学を中心に、光学に関する研究を続けている。早稲田大学理工学部 助手(1998年～)、通信総合研究所 研究員(2001年～、現、情報通信研究機構)、自然科学研究機構国立天文台研究員(2003年～)。近年は、すばる望遠鏡の補償光学系に携わったのち、生物の研究所で光学顕微鏡用の補償光学の研究を本格的に進めている。



たまだ ようすけ
玉田洋介

基礎生物学研究所 助教。2005年京都大学大学院生命科学科博士課程修了。専門は発生生物学で、「細胞の運命がいつ、どのように変わるか?」という疑問を、主に植物の受精や幹細胞化に着目して解明しようとしている。細胞の運命が変わる瞬間を精細に観察するために、様々な光学系を顕微鏡に取り入れようと勉強中。

第5.2章



あらかわ ひろゆき
荒川弘之

帝京大学福岡医療技術学部診療放射線学科 助教。現在はプラズマ乱流・計測の研究と共に、医療用CTの被ばく減少・画質改善へ向けた研究も行っています。別の分野では、研究に対してアプローチの仕方が異なっていたり、一歩も二歩も進んだ手法が用いられていたりしていろいろと勉強になります。様々な分野の研究手法を取り入れながら新しい研究を進めていけたらと日々考えています。



5. 新たな計測へ

5. Prospect for New Diagnostics

5.2 アダマール変換光学系による空間分布計測

5.2 Spatial Structure Measurement by Hadamard Transform Optics

荒川 弘之

ARAKAWA Hiroyuki

帝京大学福岡医療技術学部診療放射線学科

(原稿受付：2016年8月5日)

アダマール変換光学系を用いた空間分布計測について解説を行う。アダマール変換光学系は、空間分布計測を行う場合に、幾何学的、時間的な制約がある場合に有用な手法である。前半において、アダマール行列を基礎としたアダマール変換光学系を用いる、1次元空間分布及び2次元空間分布（画像）の再構成手法の考え方を説明する。後半では、具体的な応用例として、アダマール変換光学系をレーザー誘起蛍光法（LIF）へ応用した手法を紹介する。

Keywords:

Hadamard transform, spatial structure, 2D measurement, laser induced fluorescence

5.2.1 はじめに

磁化プラズマ中の構造形成機構解明や、産業分野においてプラズマを用いて制作される製品の質を高める為に、プラズマ中の不均一性の計測を行うことが必要である。測定が必要とされるパラメータは様々であるが、微弱光の検出が必要とされる場合には、S/N（信号とノイズの強度比率）が悪くならざるを得ない。S/Nを改善するには時間方向や空間方向に積分する必要がある。条件付平均法[1]や、ロックインアンプは強力なツールであり、S/Nの改善が可能である。しかし、これらの方法は、長時間の計測が必要であるという弱点がある。統計誤差のみを考慮した場合、例えば10倍S/Nを改善しようとする、単純計算で100倍の時間が必要である。この方法では、空間構造を1点ずつ測る場合、実験の効率が著しく低くなってしまふ。

本稿においては、微弱光の検出を行う必要のある分野において、しばしば用いられる、アダマール変換を基礎とした光計測手法 - アダマール変換光学系 - について、その基本とプラズマ計測への応用を紹介する。アダマール変換光学系では、光の透過と遮断を行う規則的な“マスク”を用いて、効率的に空間分布計測を行うことができる。この手法は符号化開口法の一つであり、本稿では、その基礎的な、1次元空間分布及び2次元空間分布（画像）の再構成手法の考え方を説明する。プラズマへの応用例としては、レーザー誘起蛍光法（LIF）への応用を紹介する。

5.2.2 アダマール変換光学系

5.2.2.1 アダマール変換とは

アダマール変換光学系を説明する前に、アダマール変換について簡単に概要を説明しておこう[2]。アダマール変換は、“アダマール行列”を用いた行列演算を示す。以下にアダマール行列の性質とその例を示す。

アダマール行列（H行列と呼ぶ）は、

- (1) 正方行列で、
 - (2) H行列の要素は+1か-1かのいずれか、
 - (3) 任意の2つの行ベクトルは、すべて直交する、
- という特徴がある。

H行列の次数が1次、2次、4次、8次の例を以下に示す（-は、-1を示す.）。

$$H_1 = [1] \quad (1)$$

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$H_4 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & - & 1 & - \\ 1 & 1 & - & - \\ 1 & - & - & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$H_8 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & - & 1 & - & 1 & - & 1 & - \\ 1 & 1 & - & - & 1 & 1 & - & - \\ 1 & - & - & 1 & 1 & - & - & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & - & - & - & - \\ 1 & - & 1 & - & - & 1 & - & 1 \\ 1 & 1 & - & - & - & - & 1 & 1 \\ 1 & - & - & 1 & - & 1 & 1 & - \end{bmatrix} \quad (4)$$

次数 n の H 行列を用いて、 $2n$ の H 行列を作成することができる。

$$H_{2n} = \begin{bmatrix} H_n & H_n \\ H_n & -H_n \end{bmatrix} \quad (5)$$

n 次のアダマール行列を H_n とすると、エルミート行列かつユニタリ行列であり、 $H_n H_n^T = H_n^T H_n = n I_n$ を満たす (I_n は n 次の単位行列である)。このアダマール行列が特徴的な性質を持っている為に、アダマール行列を用いる行列演算であるアダマール変換は、それ自身、無線通信の一種である CDMA (符号分割多元接続, Code Division Multiple Access), 画像圧縮などの身の回りの技術として広く用いられている。これらの詳細は専門書を参照されたい[2]。

5.2.2.2 アダマール変換光学系

本節ではアダマール変換を用いたアダマール変換光学系の原理を示す[3]。アダマール変換光学系においては、 S 行列という H 行列から求めた行列を用いる。 $n-1$ 次の S 行列を、 n 次の H 行列を用いて作ることができる。作り方は、 n 次の H 行列の 1 行目と 1 列目を削除し、要素の $+1$ を 0 へ、 -1 を 1 へ変換する。この操作で 2, 4, 8 次の H 行列から作った 1, 3, 7 次の S 行列を以下に示す。

$$S_1 = [1] \quad (6)$$

$$S_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$S_7 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

S 行列により“マスク”(アダマールマスクと呼ぶ)を作成することで光計測へ適用する。アダマールマスクは、 S 行列の列を一つずつに分け、1 は光を透過し、0 は光を遮蔽する様に作成される。例として 7 次の S 行列を用いた 1 次元のアダマールマスクを図 1 に示す[4]。

アダマールマスクを計測したい(空間構造を持つ)光と検出器の間に置くことで、光が透過される部分のみの値が“重ね合わされて”計測される。図 2 (a)に、7 次のアダ

マールマスクの 1 つを用いた例を示した。比較のため、図 2 (b)にアダマールマスクを用いずに、ある一点のみ光が透過するようなマスクを用いた光計測の例を示す。図 2 (a)と(b)の大きな違いは、光の強度がマスクに均一に照射されると仮定すると、検出される光の量が 4 倍になっていることである。これは、アダマール変換が通常の方法よりも S/N が良くなることの要因となっている。S/N 改善に関して、詳しくは 5.2.2.4 節で示す。

図 2 (a)の光学系を数式により表現する。元の求めたい m 点の空間分布を ϕ_m とし、 m 種類のアダマールマスク S_m を用いて計測した計測値を η_m とすると、

$$\eta_m = S_m \phi_m \quad (9)$$

と表すことができる。例えば、式(8)の 7 次のアダマールマスクを用いて 7 点の空間構造を得たい場合、図 1 で示した 7 種類のそれぞれのアダマールマスクを用いて光計測を行う必要がある。アダマールマスクを用いた光の計測では、マスクで透過される光が“重ね合わされて”いるため、そのままでは求めたい空間構造は得られない。このため、一連のアダマールマスクを用いて得られた計測値により元の空間構造を再構成する。再構成は、(9)式より、 S_m の逆行列 S_m^{-1} を用いて、

$$\phi_m = S_m^{-1} \eta_m \quad (10)$$

とすることで再構成できる。これが、アダマール変換光学系を用いた分布計測の基本である。

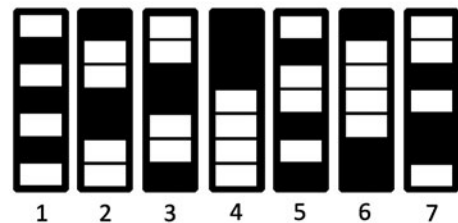


図 1 式(8)で示した 7 次の S 行列を用いたアダマールマスク [4]。白い部分が光の透過(1)、黒い部分が光の遮蔽(0)を示す。

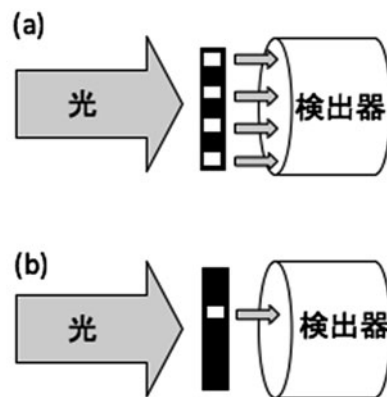


図 2 光の空間構造を計測する際の(a)アダマールマスクを用いた光検出体系。(b)空間 1 点ずつ光検出を行う体系。

5.2.2.3 アダマール変換光学系による2次元分布計測

前節では1次元の空間分布を得るためのアダマール変換を行ったが、2次元の空間分布(画像)を得るためのアダマール変換の説明を行う[3]。とは言え、2次元の空間分布を得る場合も1次元の場合とほぼ同じである。計測手法も、1次元配列の場合(図2)と同じく、アダマールマスクを通して、一つの計測器でそれを検出するというを行う。1次元分布計測との違いは、アダマールマスクの並べ方だけである。

図3に2次元分布を得る為の、アダマールマスクの作成順序を示す。図3(a)は、15次のS行列を示している。図3(a)の中の15行目を取り出して、アダマールマスクとしたものが、図3(b)である。図3(c)は、図3(b)を用いて作成した、3×5のアダマールマスクである。作成方法として、図3(b)のアダマールマスクを3つに分割し、それぞれを(i), (ii), (iii)とする。その後、縦に並べることによって、マスクを作っている。2次元分布を得る際には、その他のS行列の行においてもそれぞれアダマールマスクを作成し、すべてのアダマールマスクを入れ替えて計測することで得られる。よってこの場合は、15回マスクの入れ替えが必要である。

より高次のS行列を用いた2次元分布計測手法を考えてみよう。例えば64次のH行列から作られた、63次のS行列で考えてみると、分布の分割数として、様々な組み合わせが可能となる。分割のやり方として、1×63や3×21、

6×7の他、その転置行列である63×1, 21×3, 7×6といった組み合わせも可能である。しかし、この場合、2次元分布計測を得るために、原理的には63回もアダマールマスクの入れ替えが必要になる。このため、他分野においては、アダマール変換を用いた2次元分布計測の場合は、マスクの入れ替えに Spatial Light Modulator (SLM) と呼ばれる液晶技術を用いたマスクを用い、電氣的に高速なマスクの入れ替えを可能とした方法がしばしば適用されている[5]。

ここまでは、アダマールマスクを通して、一つの計測器で計測する場合を考えた。一つの計測器のみを用いるアダマール変換光学系においては、計測点が多くなるにつれて、マスクの入れ替えで多数の計測が必要となる。このため、アダマールマスクと複数の計測器の組み合わせで2次元計測を効率化させる場合も考えてみる。例えば、2次元検出で、4つしか計測器が得られなかった場合(4画素数分)において、もっと沢山の計測点(画素数) - 例えば、60点 - がほしい場合、計測器にそれぞれ15次のアダマールマスクを用いることができれば、15回のアダマールマスクの入れ替えで、60画素(4計測器×15次のアダマールマスク)の2次元分布(画像)の計測が可能である。

5.2.2.4 アダマール変換光学系によるS/Nの改善

ここでは、アダマール変換光学系を用いることの利点の一つであるS/Nの改善の原理について説明する。簡単のため、空間構造3点を計測する場合を考える[3]。

まず、空間構造3点を一点ずつ計測する方法を考える。元の求めたい3点(真値)の分布を ϕ_i ($i = 1, 2, 3$), 計測値を η'_i ($i = 1, 2, 3$) とすると、

$$\begin{cases} \eta'_1 = \phi_1 + e_1 \\ \eta'_2 = \phi_2 + e_2 \\ \eta'_3 = \phi_3 + e_3 \end{cases} \quad (11)$$

となる。ここで、 e_i ($i = 1, 2, 3$) は、それぞれの計測のエラーである。求めたい値 ϕ_i の予測値 $\hat{\phi}'_i$ は、

$$\begin{cases} \hat{\phi}'_1 = \eta'_1 \\ \hat{\phi}'_2 = \eta'_2 \\ \hat{\phi}'_3 = \eta'_3 \end{cases} \quad (12)$$

となる。

ここで、予測値と真値との差は、

$$\hat{\phi}'_i - \phi_i = e_i \quad (13)$$

となるが、平均操作によって、エラーは0に向かっていくと仮定すると、

$$E[\hat{\phi}'_i - \phi_i] = 0 \quad (14)$$

と表される。さらに、エラーはそれぞれ独立で、かつ大きさはどれも同じであると仮定して、予測値と真値との差の二乗平均(分散)を下記の様におくことにする。

$$E[(\hat{\phi}'_i - \phi_i)^2] = \sigma^2 \quad (15)$$

次に、空間分布計測を3次のS行列を用いた場合につい

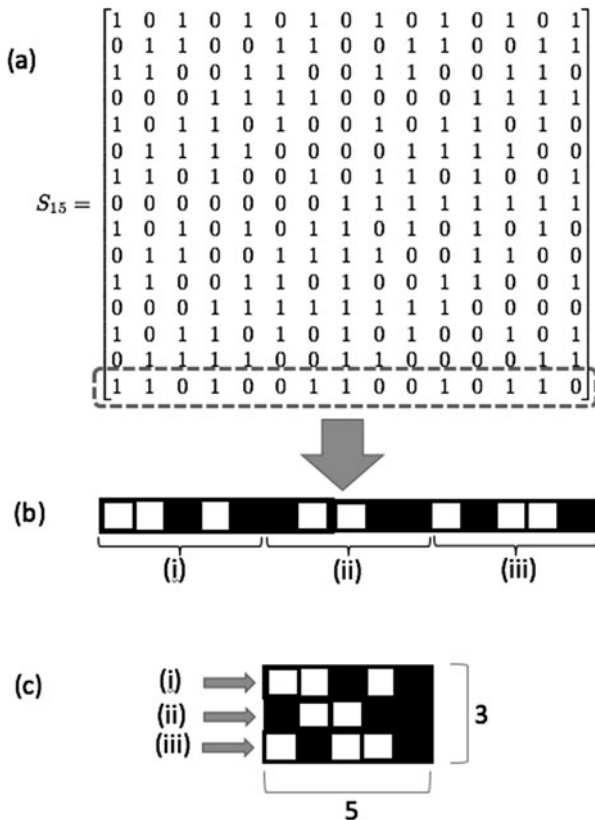


図3 (a)15次のS行列、(b)15行目のS行列を用いた1×15の1次元アダマールマスク。(c)3×5の2次元アダマールマスク。

て、どの程度ノイズが改善されるか考えてみる。

S_3 のアダマールマスクを用いた場合の、計測値 η_i ($i=1, 2, 3$) をそれぞれ示すと、

$$\begin{cases} \eta_1 = \psi_1 & + \psi_3 + e_1 \\ \eta_2 = & \psi_2 + \psi_3 + e_2 \\ \eta_3 = \psi_1 + \psi_2 & + e_3 \end{cases} \quad (16)$$

となる。ここで、 e_i ($i=1, 2, 3$) は、それぞれの計測のエラーである。求めたい値 ψ_i の予測値 $\hat{\psi}_i$ は、エラーの大きさがわからないので、 $e_i = 0$ として上式を解くと、

$$\begin{cases} \hat{\psi}_1 = \frac{1}{2}(\eta_1 - \eta_2 + \eta_3) \\ \hat{\psi}_2 = \frac{1}{2}(-\eta_1 + \eta_2 + \eta_3) \\ \hat{\psi}_3 = \frac{1}{2}(\eta_1 + \eta_2 - \eta_3) \end{cases} \quad (17)$$

となり、エラーの分散は、式(14)の仮定と式(15)の分散 σ^2 を用いて、

$$E[(\hat{\psi}_i - \psi_i)^2] = \frac{3}{4}\sigma^2 \quad (18)$$

となる。よって、一点計測を行う場合よりも、分散が小さくなっている (エラーが小さくなっている)。ことがわかる。

これを一般化すると [3], エラーの分散 (二乗平均) は、次数 n に対して、

$$\frac{4n}{(n+1)^2}\sigma^2 \approx \frac{4}{n}\sigma^2 \quad (19)$$

となり、次数が大きくなるほど、分散は小さくなる。よって、S/N は以下のファクターで大きくなるのがわかる。

$$\frac{n+1}{2\sqrt{n}} \approx \frac{\sqrt{n}}{2} \quad (20)$$

式(20)より、アダマール変換光学系は、その計測点数が多くなるほど、それを1点1点個別に計測する場合よりも S/N がよくなる手法であることがわかる。

一方、多点同時計測可能な計測器を用いることができる (その検出器の数やサイズが目的の計測の要求を満たす) 場合を考えてみよう。アダマール変換光学系は、その計測点数の数だけマスクを入れ替える必要があるが、同時計測できる計測器は一度にまとめて計測することができる。例えば、 n 点の空間構造を計測するために、 n 回の計測を行うことを想定する。この場合、アダマール変換光学系は、マスクを変えながら合計 n 回計測するが、多点同時計測では、 n 回同じ体系で計測する。この場合、多点同時計測の S/N 改善は、 \sqrt{n} で良くなる一方、アダマール変換光学系では式 (20) より、S/N 改善は $\sqrt{n}/2$ に留まる。よって多点同時計測を行ったほうが S/N は良いことになる。このため、空間的・金銭的に多点同時計測が可能であれば、アダマール変換光学系を用いる手法よりも、多点同時計測を行

う方が良い。

5.2.3 アダマール変換光学系の応用

5.2.3.1 HLIF (Hadamard Laser Induced Fluorescence) 法

アダマール変換光学系のプラズマ計測への応用例として、著者らが開発したレーザー誘起蛍光 (LIF: Laser Induced Fluorescence) 法へ適用した手法-HLIF (Hadamard Laser Induced Fluorescence) 法-を紹介する [4]。LIF 法は、プラズマ中の原子・分子の特定順位の励起波長に相当するレーザー光を照射し、得られた蛍光のドップラーシフトとドップラー広がりを計測することで、局所的なプラズマ流れと温度の絶対値を見積もることができる [6, 7]。蛍光の発光量は、プラズマ密度に依存するため、原理的に微弱な光となってしまふ。このため、通常の LIF 法においては、空間分布計測を行う場合、分布の別の場所を計測するために、レーザー光軸や受光レンズ位置等を変更する必要がある。このため、手動でこれを行う場合、位置分解能はせいぜい数 mm である [8]。一方、微弱光検出器である、光電子増倍管を多数並べた光電子増倍管アレイ等の 1 次元または 2 次元計測装置が近年の技術進歩によって制作が可能になった [9]。光電子増倍管アレイを用いることで、計測分解能を上げることができる。しかし、計測点の数と位置分解能は、検出器の数とそのサイズに依存してしまう。また、検出器の費用が高くなってしまふ。HLIF 法を用いることで、1 つの検出器であっても、空間分布を効率的に計測することができる可能性がある。

HLIF 法の具体的な適用として、直線磁化プラズマ発生装置を想定した。例えば、九州大学にある LMD-U や PANTA [10] では、直径約 10 cm、長さ約 4 m の円柱状アルゴンプラズマを RF 波 (7 MHz, 3 kW)、磁場約 0.1 T で生成している。典型的な電子密度は約 10^{18} m^{-3} 、電子温度は約 3 eV である。これに HLIF を適用したイオン温度分布計測体系を図 4 に示す。HLIF 法は、LIF 光の受光系に、アダマールマスクを追加したものになる。LIF 法は、周波数掃引可変レーザー、レーザー光伝送光学系 (レンズ・ミラー)、受光光学系 (レンズ・ミラー)、光検出器 (光電子増倍管、最近では SiPM)、データ収集システムなどが必要である。ここでは、 m 点の分布計測を行うと仮定する。レーザー光軸上の励起光は受光レンズとアダマールマスクを通過して検出器で受光される。HLIF 法では、 m 点の分布を

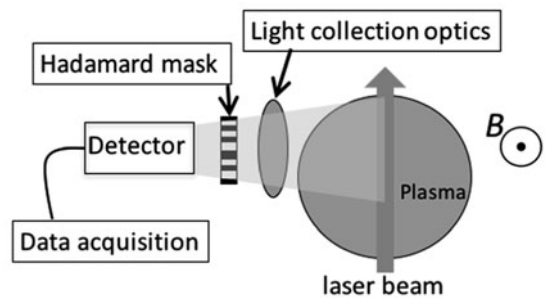


図 4 HLIF (Hadamard Laser Induced Fluorescence) 法の計測体系 [4].

行う場合、アダマールマスクを m 個使い、マスクを入れ替えながら計測する（マスクの例は図1を参照）。

一方 LIF 法はレーザー波長を掃引する必要があるため、レーザーの波長ごとに光検出を行う必要がある。このため、計測の数としては、マスクの数 m と、レーザーの波長掃引数 j により、 $m \times j$ 個の異なったデータから m 点の蛍光強度分布を得ることができる（図5(a)）。特定の波長ごとに逆変換（式(10)）を用いることで、それぞれの径方向位置での蛍光強度分布を得ることができる（図5(b)）。蛍光強度分布が得られれば、そのドップラーシフトとドップラー広がりから、プラズマの速度と温度の情報を得ることができる。

本計測手法の特徴として、光学系を動かさずに、アダマールマスクを入れ替えるだけで温度（または速度）分布計測が可能である。このため、実験の効率と再現性が著しく向上する。また、前節で示した通り、通常的一点ずつ計測を行う方法と比べてS/Nは式(20)に示すように改善するという利点がある。一方、前節で示した通り、多点の計測器を用いる場合、その検出器の数やサイズが目的の計測の要求を満たすものであれば、HLIF法よりもノイズや効率の面で、優れた方法である。HLIF法は、検出器の数やサイズに制約がある際や、多点の計測器が準備できないような場合において有用な手法である。

5.2.3.2 HLIF法を用いた2次元分布計測

HLIF法を用いた別の応用例を示す。レーザー光をシート状にした体系にすることで、2次元分布の計測を行うことができる。大気圧条件下における中性流体のLIF計測においては、既に行われている方法であるが、大抵の場合、プラズマ密度は中性流体の密度よりも著しく低いので、蛍光強度が弱くシート状のレーザーで蛍光強度を計測することは困難であった。しかし、HLIF法を用いた2次元分布計測においては、式(20)により多点になるほどS/Nの向上が可能であるので、シート状のレーザーを用いることで、2次元分布計測を適用できる可能性がある。図6に、シート状のレーザーを用いた、磁場に垂直な面での周方向流れ（温度）の径方向分布（図6(a)）と磁場に平行な流れ（温度）の計測手法（図6(b)）を示す。

5.2.4 おわりに

アダマール変換を基礎とした、アダマール変換光学系の概要と、それを用いたLIFへの応用例を示した。アダマール変換光学系を用いることで、空間構造を一点ずつ計測するような体系よりS/Nを良くすることができる。また、検出器を動かさずにアダマールマスクのみを変更することで空間構造を得ることができるため、空間分解能の高分解能化や、計測の効率化が行える非常に有用な手法であると考えられる。

本稿は、科研費(JP15H02335)ならびに、九州大学応用光学研究所共同研究の支援を得た。ここに謝意を表す。

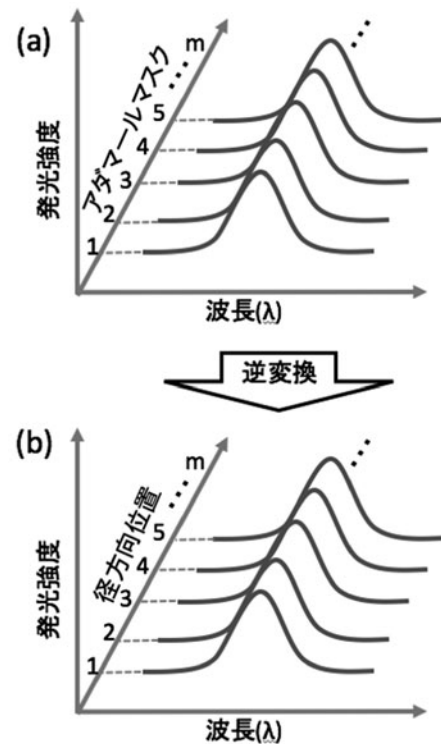


図5 (a)HLIF法を用いたアダマールマスクごとに、レーザー波長ごとの蛍光強度。(b)それぞれの径方向位置のレーザー波長ごとの蛍光強度分布。

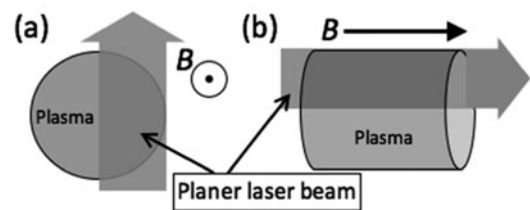


図6 シート状レーザーを用いた、(a)磁場に垂直な面での周方向流れ（温度）の径方向分布と(b)磁場に平行な流れ（温度）の計測手法[4]。

参考文献

- [1] H. Arakawa *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **51**, 085001 (2009).
- [2] 喜安善市：アダマール行列とその応用（電子情報通信学会，2000）。
- [3] M. Harwit and N.J. Sloane. *Hadamard Transform Optics* (Academic Press, London 1979).
- [4] H. Arakawa *et al.*, Plasma Fusion Res. **10**, 1201085 (2015).
- [5] J. Gourlay *et al.*, Opt. Lett. **18**, 201745 (1993).
- [6] R.A. Stern and J.A. Johnson. Phys. Rev. Lett. **34**, 1548 (1975).
- [7] F. Anderegg *et al.*, Phys. Rev. Lett. **57**, 329 (1986).
- [8] E. Scime *et al.*, Phys. Plasmas, **14**, 043505 (2007).
- [9] M. Blacksell *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **79**, 10F506 (2008).
- [10] H. Arakawa *et al.*, Sci. Rep. **6**, 33371 (2016).

講座執筆者紹介

第4章



さいとう なおき
齋藤直樹

1982年東京大学工学部計数工学科卒業。1984年同大学大学院工学系研究科計数工学専攻修士課程修了。1984-86年日本シュルンベルジェ(株)。1986-97年シュルンベルジェードル研究所(米・コネティカット州)。1994年イェール大学大学院数学科・応用数学博士課程修了。Ph.D. 1997年-2001年カリフォルニア大学デイヴィス校数学科准教授。2001年同校教授、現在に至る。応用・計算調和解析の研究に従事。趣味は多種の楽器演奏。https://plus.google.com/+NaokiSaitoMathMusicも参照して下さい。

第5.1章



あきやま つよし
秋山毅志

核融合科学研究所 准教授。色々と興味はあるのですが、ここ最近には主にレーザーを使った計測器の開発・設計をしています。核融合研究の共同研究や、自然科学研究機構の分野間連携研究プロジェクト、日米協力、ITERなど、様々な先生方と一緒に仕事をさせていただく機会が増えました。技術面でもマネジメントの面でも、いつも目からウロコのことばかりで、共同研究や分野間交流の重要性を実感しております。



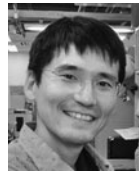
はやの ゆたか
早野裕

自然科学研究機構国立天文台先端技術センター・准教授。専門は補償光学、光学赤外線天文観測装置の研究開発。近年は補償光学をさらに発展させ、生体ライブイメージング、プラズマ計測などへの応用にも挑戦している。



はつとり まさゆき
服部雅之

自然科学研究機構基礎生物学研究所(2013年～) 研究員。補償光学を中心に、光学に関する研究を続けている。早稲田大学理工学部 助手(1998年～)、通信総合研究所 研究員(2001年～、現、情報通信研究機構)、自然科学研究機構国立天文台研究員(2003年～)。近年は、すばる望遠鏡の補償光学系に携わったのち、生物の研究所で光学顕微鏡用の補償光学の研究を本格的に進めている。



たまだ ようすけ
玉田洋介

基礎生物学研究所 助教。2005年京都大学大学院生命科学科博士課程修了。専門は発生生物学で、「細胞の運命がいつ、どのように変わるか?」という疑問を、主に植物の受精や幹細胞化に着目して解明しようとしている。細胞の運命が変わる瞬間を精細に観察するために、様々な光学系を顕微鏡に取り入れようと勉強中。

第5.2章



あらかわ ひろゆき
荒川弘之

帝京大学福岡医療技術学部診療放射線学科 助教。現在はプラズマ乱流・計測の研究と共に、医療用CTの被ばく減少・画質改善へ向けた研究も行っています。別の分野では、研究に対してアプローチの仕方が異なっていたり、一歩も二歩も進んだ手法が用いられていたりしていろいろと勉強になります。様々な分野の研究手法を取り入れながら新しい研究を進めていけたらと日々考えています。



6. トカマクにおける軟X線データの正則化

6. Regularization of Soft-X-Ray Data in a Tokamak Application

ANDREAS Wingen

Oak Ridge National Laboratory

(原稿受付：2016年12月7日)

接線カメラや軟X線(SXR)検出器アレイで観測する線積分イメージからポロイダル断面上の局所X線放射イメージを得るため、DIII-D トカマクにてイメージの逆変換スキームを開発した。逆問題は一般的に非適切(ill-posed)であるから、本スキームではTikhonov正則化を用いる。Tikhonov正則化では一般化特異値分解(GSVD)を用いて自由正則化パラメータに依存する解を求める。ここで、正則化パラメータの選択が問題となる。最適な正則化パラメータを選択するLカーブ法について概説する。代表的なテストデータを用い、逆変換スキームの特性、逆変換の精度、正則化の強度、イメージの解像度、を研究した。SXRアレイは線形逆問題における代表的な劣決定系(under-determined case)であり、一方、接線カメラは優決定系(over-determined case)である。劣決定系は情報が不足しているにも関わらず粗いが適正なイメージに、優決定系は高精細なイメージに変換できることがわかった。

Keywords:

regularization, inversion, soft X-ray, Tikhonov, L-curve

6.1 はじめに

コンピュータトモグラフィ法は多くの分野、医療、非破壊材料試験、地球物理学、大気研究で使われ、核融合プラズマにも応用されている[1, 2]。どれも線積分のような非局所的計測に対して数学的演算を行い放射率や吸収といった局所物理量を見積もる点が共通している。核融合研究では、トカマク[3]やステラレータでのプラズマコアからの軟X線検出に長い歴史(例えばMHDの検出[4]、磁気島の診断[5]、不純物密度の解析[6])がある。多くのトモグラフィ法が用いられたが、空間分解能や検出器間の感度較正に制限があった[7]。歴史的には接線イメージの方が空間分解能は良かったが、3次元磁力線構造上での線積分イメージであり、解釈は自明ではなく、Tikhonov正則化法[10]のようなより高度な逆変換法[8, 9]が必要である。

ここではDIII-D トカマク[11]について考える。ポロイダル断面全体をカバーするアレイによる線積分SXR計測はプラズマコアにおける巨視的なスケールの構造を検出するために用い、接線イメージングシステムはエッジの揺動を見る。Tikhonov正則化の必要条件を決定し、特にイメージング計測に関して高精細で高品質な逆変換を探すアルゴリズムを開発した。精細さと品質は乱れたプラズマ周辺部に現れると予測される微弱(信号雑音比小さい)で微細な構造の同定と特徴付けに必要である。DIII-Dの軟X線イメージングシステム(SXRIS[12])は接線カメラであり、プラズマエッジ領域の線積分した軟X線放射を測る。X線はピンホール光学によりシンチレータ上に集光され、可視光イ

メージに変換される。このシステムはRMPに対するプラズマの応答[13]による構造変化を測ろうとするものである。異なるエネルギーフィルタを用いれば異なる場所からの放射を区別することができる。H-mode ベデスタル[14]の急峻な勾配領域にて5 cmに至るヘリカル変位があることが、SXRを対象としたシミュレーション統合計測(synthetic diagnostic)でわかった[15]。計測データを解釈する際、線積分されたイメージの逆変換という非適切問題の安定解を得るのにTikhonov正則化を用いた[16]。

次節ではTikhonov正則化について概説し、GSVDを用いて正則解を求める。GSVDを用いた手法は文献[10]で開発され、文献[4, 5]のように適用された手法と等価であるが、本手法は側面拘束演算子による直接逆変換を必要としない。最適正則化パラメータ同様、この側面拘束(side constraint)についても議論する。Tikhonov正則化は劣決定系同様優決定系を扱うことができる。劣決定系については6.3でSXRアレイを例に議論し、優決定系についてはSXRISへの適用を6.4で示す。両者とも解析的テストイメージに対して正則化を行い、逆変換の品質と解像度について研究した。6.5では逆変換法の結果についてまとめた。

6.2 高精細逆変換法への数学的アプローチ

3次元SXR放射体積を数学的に $n = n_x n_y n_z$ 個の領域に分ける。それぞれの領域は大きさ dr^3 の立方体である。放射体積の片面にSXRを記録する検出器をおく。検出器はカメラであり、 m ピクセルの2次元イメージ、又は m コードの

Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831, USA

※本原稿の英文原本は、p.98~104に掲載されています。

author's e-mail: wingen@fusion.gat.com

アレイを返す。ピクセル、又はアレイコードは一つの視線に対応し、視線上の全ての放射体積からの放射を記録する。図1に系のセットアップを示す。それぞれの体積領域における放射 $\epsilon \in \mathbb{R}^3$ と線積分放射の関係は、カメラの場合、イメージ平面上のそれぞれのピクセルの値を $s \in \mathbb{R}^m$ とすると、以下の線形方程式で与えられる。

$$L \cdot \epsilon = s \tag{1}$$

ここで L は幾何変換 $m \times n$ 行列であり、詳細は6.4で議論する。

A. Tikhonov 正則化アプローチ

式(1)において、 $m > n$ 、即ち系は優決定問題とする。この系の解は

$$\epsilon_0 = \underset{\epsilon}{\operatorname{argmin}} \|L \cdot \epsilon - s\|, \tag{2}$$

で与えられるが、不適切問題である。正則化はこのような不適切問題(悪条件行列 L に関連している。即ち、 L の行はほぼ線形従属であり、したがって L は特異である)の安定解を見つける良く知られた手法である。不適切問題の解は一般的に微小摂動(数値的丸め誤差を含む)に非常に敏感である。 L の直接逆変換や標準的手法による ϵ の直接計算はかなり不適切な解を生む。悪条件行列 L を L から求めた良条件行列に置き換えることは必ずしも意味ある解を導くとは限らない。正則化は微小誤差揺らぎに対する解の安定性を与える。そこで、本講座ではTikhonov正則化スキーム[17-19]を適用し、以下を解く。

$$\epsilon_\lambda = \underset{\epsilon}{\operatorname{argmin}} \left\| \begin{pmatrix} L \\ \lambda C \end{pmatrix} \cdot \epsilon - \begin{pmatrix} s \\ \lambda C \cdot \epsilon^* \end{pmatrix} \right\|, \tag{3}$$

ここで $\|x\| = (\sum x_i^2)^{1/2}$ はユークリッドノルムで λ は自由正則化パラメータであり、側面拘束 $\min \|\lambda C \cdot (\epsilon - \epsilon^*)\|$ を制御する。 ϵ^* は解の事前仮定であり、0(即ち仮定なし)または想定した局所放射分布(これは解を強制する)である。本講座では事前仮定は行わない。

B. 一般特異値分解

一般特異値分解を用いて式(3)を解く、

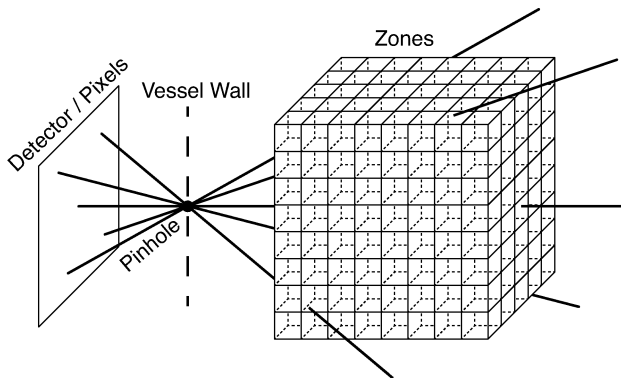


図1 線積分 SXR 放射計測のセットアップ。カメラピクセルから出たいくつかの視線(コード)はピンホールを通り多くのゾーンに分割した放射領域を通り抜ける。

$$\begin{aligned} U^T \cdot L \cdot Z &= \operatorname{diag}(\sigma) \\ V^T \cdot C \cdot Z &= \operatorname{diag}(\mu) \end{aligned} \tag{4}$$

ここで $U \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は正規直行行列、そして $Z \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は非特異行列、 $\operatorname{diag}(\sigma)$, $\operatorname{diag}(\mu)$ は $\mathbb{R}^{n \times n}$ 対角行列であり、

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sigma_1 \leq \dots \leq \sigma_n \leq 1 \\ 1 &\geq \mu_1 \geq \dots \geq \mu_n \geq 0 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\sigma^T \cdot \sigma + \mu^T \cdot \mu = I_n. \tag{6}$$

とすると比

$$\gamma_i = \frac{\sigma_i}{\mu_i}, \quad i = 1 \dots n \tag{7}$$

は行列対 (L, C) の一般特異値である。 $C = I_n$ の場合、GSVD は標準の SVD となる。

文献[10]では正則解は行列 $L \cdot C^{-1}$ の標準 SVD を用いて表される。一方で式(4)の定義より、

$$L \cdot C^{-1} = U \cdot \operatorname{diag}(\gamma) \cdot V^T, \tag{8}$$

これは文献での定義と同一である。したがって、ここでの正則解は $L \cdot C^{-1}$ の標準 SVD を用いた解と等価である。違いは GSVD 法では演算子 C の直接逆変換を必要としない点である。GSVD を用いて

$$\beta = U \cdot s^T, \quad \omega = Z^{-1} \cdot \epsilon^*, \tag{9}$$

を定義し、以下のフィルタ係数を持つ正則解を探す。

$$\epsilon_{\lambda,i} = \sum_{j=1}^n z_{ij} f_j \left[\frac{\beta_j}{\sigma_j} + \frac{\lambda^2}{\gamma_j^2} \omega_j \right], \tag{10}$$

ここでフィルタ係数 f_j は以下で与えられる

$$f_j = \frac{\sigma_j^2}{\sigma_j^2 + \lambda^2 \mu_j^2} = \frac{\gamma_j^2}{\gamma_j^2 + \lambda^2}. \tag{11}$$

C. 側面拘束の選択

$C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は側面拘束を表す演算子である。実際の非適切最小化問題の意味ある解を探すのに必要である。数値的には、式(3)にて $\lambda = 0$ を用いれば式(2)を満たす最小解 ϵ_0 が得られる。しかし、非適切問題では ϵ_0 は典型的には図8(a)のように非常に振動するか、真の解から非常に遠くなる。側面拘束は指定境界で得られた最小解に従い、連続解を強制し、あるいは問題特有の特性を確保する。もし考慮する問題に明らかな側面拘束が無い場合、 C にはしばしば単位行列 I_n やラプラス演算子のような微分演算子が使われる。 $C = I_n$ の場合、側面拘束は解のノルムを小さくし、解の有界性を確保する。一方で微分演算子の場合、側面拘束は勾配を制限し、あるレベルで解のスムーズ性を確保する。

DIID 放電での SXR 放射の場合、プラズマの内部で強く、外部では弱い(あるいは0)、そして強い勾配が周辺にある、と考えられる。したがって解及びその勾配(一次の空間微分)を制限したくない。一方で解の雑音的フラグ

メンテーションのような高周波数揺動成分は抑えたい。このため、解が十分に滑らかであることを確保するようラプラス演算子（2次の空間微分）を用いる。この時 λ は解の滑らかさを制御する。 $\varepsilon_{ij} = \varepsilon(R_i, Z_j)$, $i = 0, \dots, n_R - 1$, $j = 0, \dots, n_Z - 1$ を図6(c)における格子の放射領域（領域の大きさは全次元で h とする）とすると、ラプラス演算子は2次の有限差分法により

$$(\partial_R^2 + \partial_Z^2)\varepsilon_{ij} = (\varepsilon_{i+1,j} + \varepsilon_{i-1,j} - 4\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{i,j+1} + \varepsilon_{i,j-1})/h^2 \quad (12)$$

と近似され、 $k = j \times n_R + i = 0, \dots, n - 1$ を用いて $n \times n$ 行

$$C_{k,k} = -4 \quad C_{k,k\pm 1} = 1 \quad C_{k,k\pm n_R} = 1 \quad (13)$$

(式(13)以外では $C = 0$)を定義する。グリッド内部では C の要素は明確に定義されているが、境界では $C_{0,-1}$ のような要素は存在しないため、定義が明確ではない。したがって更なる ε_{ij} の境界条件が必要である。非周期的な場合、以下の二つの選択がある。

1. デリクレ境界条件： (R_i, Z_j) がグリッドの外であれば $\varepsilon_{ij} = 0$ 。 C は i, j が共に0から $n-1$ の間で式(13)で与えられる。
2. フォンノイマン境界条件：境界で ε の1次の微分は0.1次微分の対称有限差分を用いると、 $\varepsilon_{-1,j} = \varepsilon_{1,j}$, $\varepsilon_{i,-1} = \varepsilon_{i,1}$ である。この場合、 C の各要素は1ではなく2にセットされる。

以下ではデリクレ境界条件を用いる。

D. 正則パラメータの選択

パラメータ λ は正則化の“強さ”，即ち C によって与えられる式(2)の解の制限に関する側面拘束の重みを決定する。 $\lambda = 0$ で解 ε_λ は正則化されておらず、典型的な非適切問題のように残差 $\|\mathbf{L} \cdot \varepsilon_\lambda - \mathbf{s}\|^2$ が非常に小さいにもかかわらず、高周波数成分が減衰しない。一方、 λ が非常に大きいと残差が大きくなり ε_λ はもはや実際の問題において意味のある解ではなくなる。最適な λ を見つけることが肝要であるがそれは自明では無い。最適な正則化パラメータを見積もるいくつかの手法が文献に見られる[20]。ここではLカーブ基準を適用する[21]。

与えられた正則化パラメータ λ とTikhonov法により得た正則解 ε_λ に関して残差ノルムと半ノルムを定義する。

$$\rho^2 = \|\mathbf{L} \cdot \varepsilon_\lambda - \mathbf{s}\|^2 = \lambda^4 \sum_{i=1}^n \left(\frac{\beta_i - \sigma_i \omega_i}{\gamma_i^2 + \lambda^2} \right)^2 \quad (14)$$

$$\eta^2 = \|\mathbf{C} \cdot (\varepsilon_\lambda - \varepsilon^*)\|^2 = \sum_{i=1}^n \left(\gamma_i \frac{\beta_i - \sigma_i \omega_i}{\gamma_i^2 + \lambda^2} \right)^2. \quad (15)$$

最適な正則化パラメータ λ を決定する一つの方法は、図2のように様々な λ に対して半ノルムを残差ノルムに対して両対数軸でプロットすることである。でき上がる曲線は典型的な“L字”形であるため、Lカーブと呼ぶ。演算の最適点はLカーブのコーナーである。その点は問題を解くことと側面拘束の最も良いトレードオフを与える。 λ の増加は正則化のレベルを上げる、即ち、ラプラス演算子では解を過度に滑らかにし、残差ノルムは急激に増加する。一方で λ の減少は正則化レベルを下げ、解はよりノイジーになり、

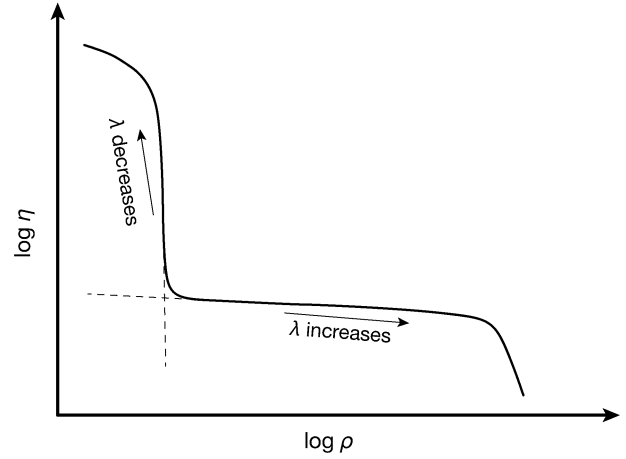


図2 典型的なLカーブ。

半ノルムは増加する。ここでLカーブコーナーの定位による最適正則パラメータを決定する。Lカーブを視覚的に評価する以外に、2つの典型的なLカーブコーナーの数値的的定位法がある。LカーブコーナーではLカーブの曲率

$$\kappa = \frac{\eta''(\rho)}{(1 + \eta'(\rho)^2)^{3/2}}, \quad (16)$$

は極大となり、また、コーナーでは原点からの距離 $\sqrt{\rho^2 + \eta^2}$ が極小になる。両者から得られた点は一致しなければならないが、 η は隠れた自由スケールパラメータ $\alpha \neq 0$ を含むので、実際はそうとは限らない。式(3)に対して、2つの定位を、それぞれ1, 2とインデックスをつけ、

$$L_1 = L_2, \quad s_1 = s_2, \quad \varepsilon_1^* = \varepsilon_2^*, \quad (17)$$

$$C_1 = \alpha C_2, \quad \lambda_1 = \lambda_2 / \alpha \quad (18)$$

とすると明らかに

$$\varepsilon_{\lambda,1} = \varepsilon_{\lambda,2}. \quad (19)$$

一方、式(14), (15)より、

$$\rho_1 = \rho_2, \quad \eta_1 = \alpha \eta_2. \quad (20)$$

したがって、両条件式を用いて最大曲率を与える点と最小距離を与える点が一致するように α を決定する。対応する ρ は最適正則化パラメータを与える。経験的に α は $O(\alpha \|C\|) \approx O(\|L\|)$ のように、即ち、両行列のフロベニウスノルムが同程度の大きさになるように調整される。

E. イメージ逆変換の定量化

実施した正則化スキームをテストし定量化するため、解析的テストイメージを用いる。テストイメージは実際の放電で見られると期待される構造を持つ。テストは以下のように行う。

- step1. ポロイダル断面上の2次元局所放射イメージを解析的に生成し、数値的にベクトル ε_0 とする。
- step2. 幾何変換 L を求め、線積分テストSXR放射 $\mathbf{s} = L \cdot \varepsilon_0$ を得る。
- step3. Tikhonov正則化により局所放射 ε_λ を再構築し、Lカーブを通じて最適正則パラメータ λ_{opt} を決定する。

step4. 正則解 $\varepsilon_{\lambda_{opt}}$ を ε_0 と比較し、逆変換のクオリティを定量化する。メジャーとして性能指数 (figure of merit) をゾーン格子内で

$$\varepsilon_{FOM} = \frac{\|\varepsilon_{\lambda_{opt}} - \varepsilon_0\|}{\|\varepsilon_0\|}, \quad (21)$$

で定義する。この ε_{FOM} は厳密解に対する正則解の相対誤差 (%) である。

6.3 トモグラフィ計測のための軟X線アレイ計測の逆変換

Tikhonov 正則化は、 $m < n$ の条件数不足 (劣決定問題) な場合にも対応できる。典型的な例として、ポロイダル断面上でプラズマからの放射を角度の異なる複数の視線で積分して計測する軟X線アレイのセットを考える。個々のアレイは広いエリアをカバーし、同じ領域を異なるアレイが同時に観測するようなタイプである。ここでは、16本の視線を持つ4つのアレイの場合を取り上げる。総計64本の視線が相互に交差していることになる。アレイの構成を図3(b)に示す。破線が視線を示し、等高線が軟X線の局所的な放射強度を示す。放射ゾーンは二次元格子状に配列されて全断面をカバーする。ここではゾーンを正方形にとっている。図3(a)は典型的なグリッドを「テストSX放射強度」上に示したものである。グリッドのサイズは7cmであり、 $18 \times 43 = 774$ 個の放射ゾーンを意味する。解像度はずいぶん荒く思えるが、 $n = 774$ はこれでも $m = 64$ の10倍に達していて、かなりの条件数不足といえる。

テスト放射強度は、摂動磁場が加えられてわずかに3次元化したDIII-Dの平衡をもとにした磁場のトポロジーを使って作られた。放射強度は同一の磁気面上で一定でありコアで極値をとって、周辺に向かって減少させている。プラズマのセパトトリクスより外では放射強度は0にしている。図3で示されたテスト放射強度は解像度が高く、微

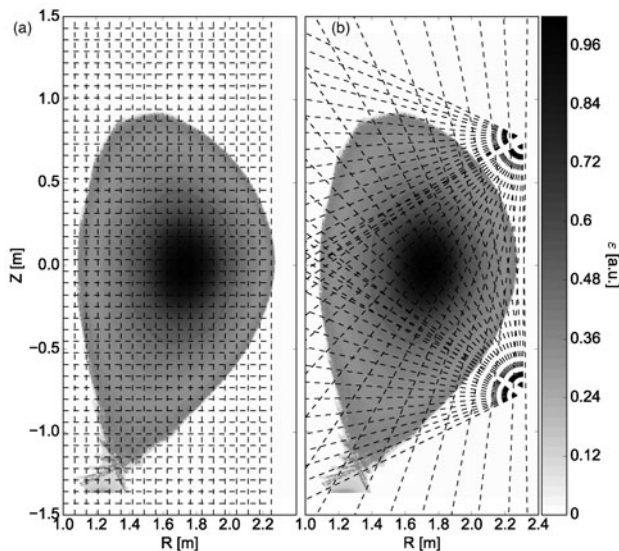


図3 局所テスト放射イメージ。(a)ゾーン格子、(b)視線コード、を重ねた。

細構造を有している。幾何変換行列 L を使って、テスト放射強度イメージから線積分値を得るために、放射強度イメージをグリッドの解像度まで落とす必要がある。図4(a)は解像度を落とした放射強度イメージとなる。すべての微細構造はこの段階で失われている。

図4(a)の局所放射分布を用いて、step2に従い線積分テストデータが構築される。こうして得られたデータに対してTikhonov正則化を適用することは、真の極小化の問題ではない。それは、図4は逆問題の厳密解だからである。テストをより現実的なものにするために、線積分された信号に対して最大で1%のランダムノイズを加える。Tikhonov正則化を、この「ノイズ」なデータセットに対して適用し、最適な正則化パラメータを持つ局所放射イメージを決定する。結果を図4(b)に示す。放射分布が中心でピークしているというような、プラズマ全体での特徴はよく再現されている。しかし、プラズマの形状と、より細かな構造は、解像度を落とした放射分布に比べてやや不鮮明になっている。性能指数は23.3%であり、かなり大きな相対誤差と言える。この理由は明らかで、774の格子点のデータを再現するのに64個のデータしか使えないからであり、局所放射イメージの細部を再現するには十分なデータではないからである。この結果はノイズを除去してもあまり改善せず、ノイズを加えると悪化する。正則化パラメータを減少または増加させると、画像はぼらぼらになるか、またはよりぼやけてしまい、性能指数は悪化する。このことについては、次節での優決定系での試行の時に詳しく議論する。

グリッドの分解能を変化させることは、潜在的には逆変換の品質に影響を与える。解像度を減少させると、系は幾分劣決定系ではなくなるが、同時に、解像度を落とした分

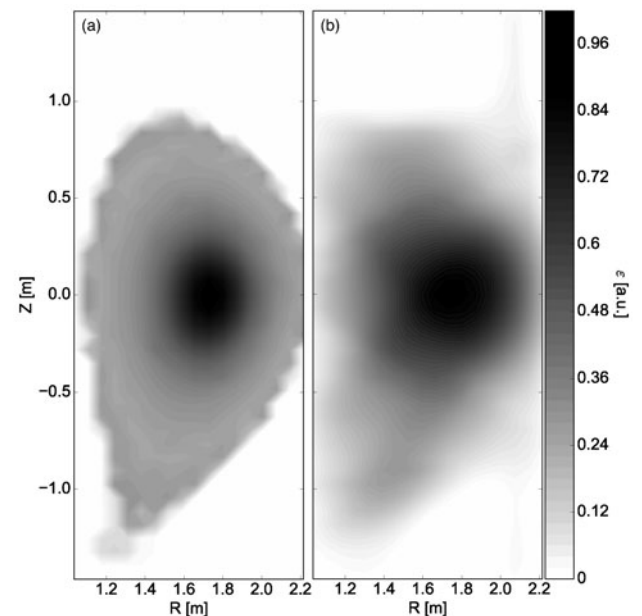


図4 (a)ゾーン格子の分解能までダウンサンプリングしたテスト放射イメージ、(b)逆変換して再構築した放射イメージ。最適正則パラメータは $\lambda = 1.73$ で性能指数標は $\varepsilon_{FOM} = 23.3\%$ 。

布は荒く扱い難い。解像度を増加させると、系はより劣決定系となり、解がバラバラにならないためにはより強い正則化が必要となるため、像はよりぼやけてしまう。図5に解像度に対する性能指数を示す。ここで $n_R = \sqrt{n/a}$ であり、固定されたアスペクト比 $a = n_Z/n_R = 2.4$ を使っている。明瞭な極小値が $n_R = 18$ の時にあり、それは図4の解像度 ($n = 774$) に対応している。

6.4 トカマクの接線からの二次元 SX 放射強度像の逆変換

トカマクの局所的な軟X線放射強度分布を図1で示したような軟X線カメラの計測で決定したい。実際の配置図はトカマクを上から見た図6(a)に示される。ピンホールは外壁上に存在し、灰色のエリアで示されるカメラの視野はトカマクを接線方向にとらえている。局所放射分布に対して意味のある統計量を得るためには、放射体積を互いに異なった角度を持つ十分に多い数の視線が貫く必要がある。ピクセルの数は、グリッドの数よりも十分多い $m > n$ である必要がある。すなわちこれは典型的な優決定系の例である。放射体積は三次元的であり、ピクセルは二次元的であって、同時に $m > n$ の条件を保ち、無理のない解像度を達成しようとするとその計算は大変困難なものになる。トカマクでは、平衡磁場の磁力線のヘリカル対称性という仮定を用いることができる。

図6(b)はDIII-Dのポロイダル断面で、セパトトリックスと、複数の磁気面が示されている。磁気面はトロイダル方向に対称だが、磁力線はヘリカル形状である。カメラの視野は灰色の領域をカバーしており、カメラの視線の中心が×で示されている。ヘリカルな磁力線の対称性を生かすため、我々は、軟X線の放射強度は図6(c)の磁力線トレースに示すような磁力線に沿って一定であるという基本的な仮定を用いる。ここでトレースの長さは磁力線にそって0 m から 1.2 m に及ぶ。熱速度をもつ電子は磁力線に沿って移動[22]、磁力線平行方向の輸送は垂直方向に比べて十分大きいので、標準的な軸対称を仮定する平衡配位の下では磁気面上で電子密度と電子温度が一定と考えられるため、この仮定は軟X線領域では妥当である。ここではSXR

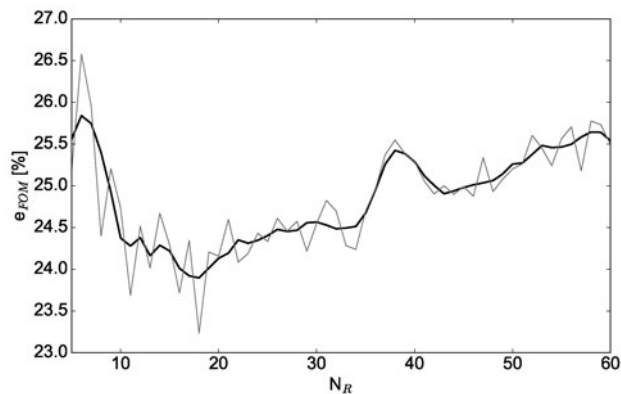


図5 最適正則パラメータによる逆変換の性能指数のゾーン格子の分解能依存性。灰色は生データであり、黒線はスムージングしたものである。

放射は磁気面上で一定の仮定する必要は無いことを注記する。図6(c)に示すように、視線上の各点を接平面に投影する(曲線は視線の接平面へのトロイダル投影を示す)、そしてその各点から磁力線を接平面まで追跡する。この磁力線に沿ったトレースは図中に短い線として示されている。これらのトレースと、接平面との交点に対応する放射ゾーン(ハイライトした正方形)を与える。この手法によって、放射領域を、接平面上の $n = n_R n_Z$ 個の矩形領域に分割された2次元領域へと次元を落とすことができる。解像度は矩形領域の一辺の長さで $dR = dZ = h$ となる。放射ゾーングリッドは下部では容器の壁に、両側では規格化ポロイダルフラックス $\psi = 1.1$ のスクレープオフ領域に、さらに、最も上部の視線によって上部を制約されている。

幾何変換行列または L 行列は各列ごとに構築される。各列は一つの視線、つまり一つの画素に対応する。一方各行はそれぞれの放射ゾーンに対応している。一つの視線は間隔 ds で離散化される。十分は統計精度を得るために ds は dR より小さくする必要がある。 i 番目の視線上の点に対して、対応する放射ゾーングリッド j が平衡磁力線をたどって存在しているとき、 $L_{ij} = L_{ij} + 1$ となるように幾何行列の要素の値が増加される。幾何行列は疎行列であることに注意する必要がある。

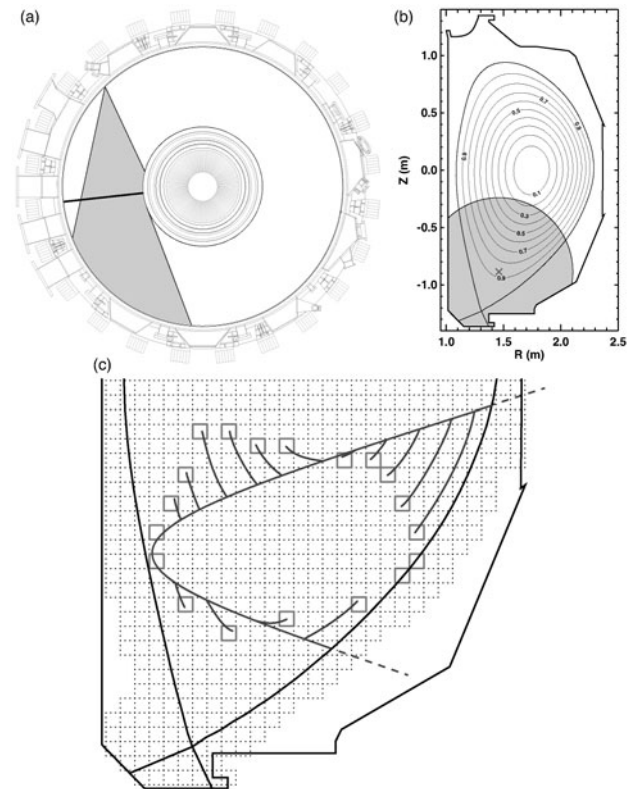


図6 (a)トカマクのトップビュー。灰色の領域はピンホールによるビューコーンを示し、それを横切る直線は光軸の接平面を示す。(b)DIII-Dにおける接平面のプラズマポロイダル断面。灰色の円領域はカメラの視野を示す。セパトトリックスと磁気面も示す。(c)カメラの視野の拡大図。曲線は視線のトロイダル写像であり、視線上のいくつかの点から磁力線を接平面まで追跡している。対応する接平面上の放射ゾーンを四角で強調している。軌跡のトロイダル写像はその四角と曲線を結び短い線である。

A. テストイメージの構築とその特徴

代表的なテストイメージを作るために、典型的な DIII-D の磁場配位を用いた。この配位は軸対称の平衡磁場に加えて、小さな非軸対称な摂動成分を持ち、軟 X 線放射強度は磁力線侵入長構造を経験的に示す $\epsilon(\psi)$ で与えた。さら

に、2次元の放射強度分布を単純な移動平均フィルタによって平滑化する。この手続きによって作られたテストイメージは文献[15]のテストイメージに近いものである。

逆変換の step 1 と 2 の結果を図 7 に示す。イメージは幾何行列がカバーする放射領域によって制約されている。図 7 (a) は制作したテストイメージ ϵ_0 である。テスト放射強度は実際の実験で観測したいいくつかの特徴を備えている。最も典型的な特徴は、プラズマからの放射が 0 以上の値をとることである。プラズマの大部分の放射分布は以下に示すような巨視的構造を持っている。放射強度のピークは周辺部にあり、コアに向かって減少したのち、コア部で再度増加する。巨視的構造の上いくつかの微細構造が摂動磁場によって生じている。一つは、ローブ構造と呼ばれるプラズマの境界の変形で、セパトリックスの下隅の容器内壁まで伸びている。プラズマエッジの内側には、放射強度が強いいくつかの小さな領域、“島”が見られる。テスト放射強度からの放射強度の線積分値を求めたものを図 7 (b) に示す。テスト放射イメージの特徴の多くは、線積分の結果見えにくくなる。線積分イメージは円形の検出領域に限られている上に、その中も容器内壁によって制約されている。センターポストは図 6 (b) の左側の垂直の内壁として見えるが、線積分イメージでも垂直方向の切断面として明瞭に観測される。第 4 章の残りでは図 7 (b) を線積分テスト SXR 放射とし、Thikonov 正則化を行う。

B. 正則化パラメータ λ の効果

逆変換の手法と正則化されたイメージの質と逆変換の成否は、いくつかのパラメータに依存している。最も明白なものは、もちろん正則化パラメータ λ である。幾何変換行列 L を使って直接的に線積分イメージ s を得たのだから、テストイメージ ϵ_0 は式 (1) の厳密解となる。逆変換手法の有効性を検証するために、小さなレベルのホワイトノイズ (最大信号の 2%) を加え、実際に式 (2) で与えられる最小化問題として逆変換を行う。

図 8 は三つの正則化パラメータ λ に対応する正則解を示す。最初に示すのは強い未正則解 ($\lambda = 0.2$) 解 (図 8 (a)) で、高い周波数の振動とフラグメンテーションを示している。次には L-Curve を使った最適正則解 ($\lambda = 6.9$) で (図 8

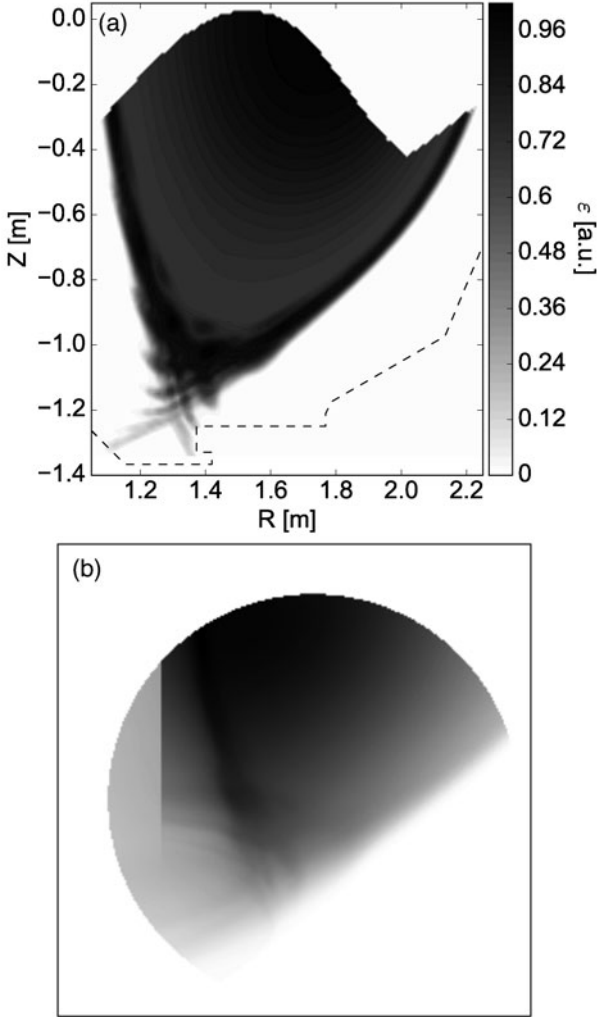


図 7 (a) テスト放射イメージ, (b) (a) から作成した SXR カメラで見た線積分された放射イメージ。

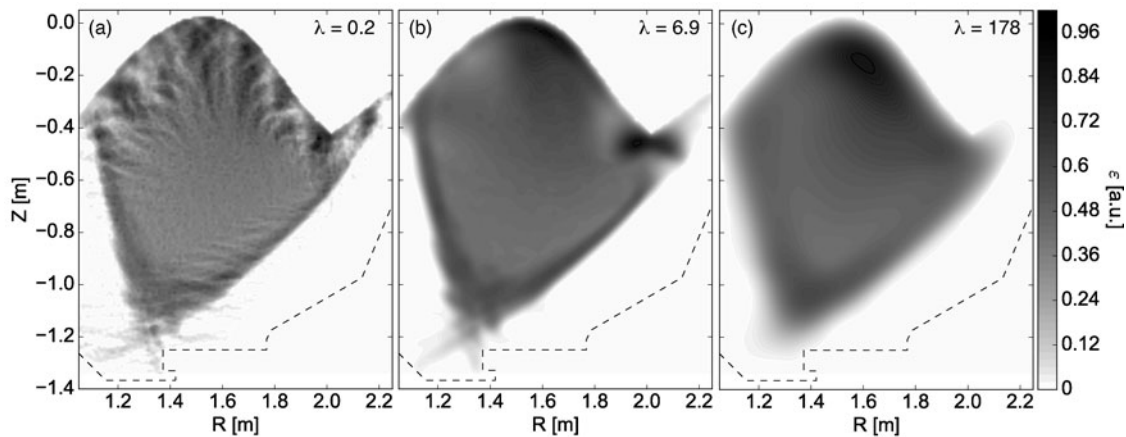


図 8 図 7 (b) に 2% のノイズを与えたイメージを Tikhonov 正則化した。(a) $\lambda = 0.2$, (b) $\lambda = 0.69$ (最適値), (c) $\lambda = 178$ 。

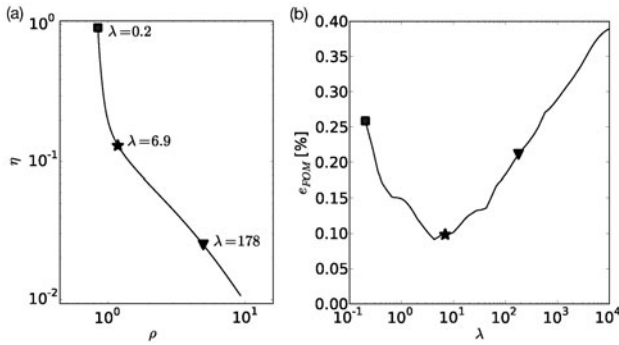


図9 (a) Lカーブ。3つの点は図8(a)-(c)の解に対応する。(b) 性能指数の正則パラメータ依存性。

(b), テスト放射強度と良い一致を示している。プラズマの中心部のみならず、周辺のローブ構造や、磁気島についても再現されている。ただしコア部であるイメージの最上部ではテスト放射強度と、逆変換されたイメージに違いが見られる。これは正則化によって生じた仮想的な構造(アーティファクト)である。これは、システムティックに現れるもので、事前情報なしには回避することができない。イメージの上限は視線がカバーするゾーンの制限から生じており、イメージの下部とは異なり、当該ゾーンを通過する視線が非常に少なく、不確実性が大きくなっているためである。図8(c)は強い過正則解であり、平滑化が効き過ぎていて、プラズマ領域のすべての微細構造が消えてしまっている。

対応するLカーブを図9(a)に示す。理論的な予測値である図2ほどははっきりした形状を示してはいないが、6.2のD節で示したアルゴリズムはLカーブのコーナーを的確に示している。このことは図9(b)に示すように性能指数(式(21))により検証された。Lカーブのコーナーは黒い星で示されているが、その位置は性能指数が極小値を示す位置と極めて近い。図8(b)は可能な限り最もよい近似解であり、性能指数は9.8%となる。この値は加えたノイズからすると無視できない値であるが、それでも、図8(a)と図8(c)の性能指数25.8%と21.1%に比べれば十分小さい(ここで、性能指数の計算においてはアーティファクトの現れない、 $Z < -0.6$ に限った)。

6.5 結論

検出器アレイを使った計測およびSXRISカメラでの計測から、DIII-Dトカマクのポロイダル断面における局所放射強度を逆変換する手法を開発した。逆変換が非適切問題であるために、この手法はTikhonovの正則化法に基づいたものである。正則化パラメータによらない解を得るために、一般化特異値分解を使った数値的手法を作り上げた。正則化パラメータは慎重に決定する必要がある。ここでは我々はLカーブ法という手法を使って、残差の最小化と、応用面での制約のバランスがとれた最適化された正規化パラメータを決定している。この逆変換の特徴を調べるために、DIII-Dのようなトカマクの真空磁気配位における軟X線放射強度分布を仮定してテスト放射イメージを作成

した。線積分イメージは容易に得られ、我々の手法を使って逆変換された、劣/優決定系での解が検討されたが、軟X線アレイは前者の例であり、SXRISカメラは後者の例となる。

軟X線アレイの場合では、逆変換は情報量不足の影響を受けた。Tikhonov正則化法により逆変換イメージを生成できた。分解能は悪かったが、プラズマの大部分での放射強度を再現し、プラズマコアでのピークも再現できた。テスト放射強度と逆変換との間の相対誤差はアレイの視線数の10倍程度の格子データを仮定した場合に最小となった。

SXRISカメラの場合には、テスト放射イメージと良い一致を示す逆変換が得られた。プラズマコアに近い画像の最上部ではアーティファクトが現れた。逆変換イメージには二つの誤差源があった。多数の視線が交差するグリッドと、少数の視線が交差するグリッドが共存する。それぞれの放射ゾーンを貫く視線の数として定義された精度は、幾何学的配置と関連し、したがって逆変換スキームの一つの特性である。上部の境界はカバーする視線が少なく、精度が制限された。二つ目のエラーの原因は低い信号・エラー比である。詳細と、実際のデータに基づく逆変換については文献[23]で議論されている。

(訳：大館 暁, 稲垣 滋)

謝辞

本研究は米国 Department of Energy Under DE-AC-05-00R22725.によってサポートされた。

参考文献

- [1] G.Fuchs *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **36**, 307 (1994).
- [2] M. Anton *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **38**, 1849 (1996).
- [3] J. Wesson, *Tokamaks* (Clarendon Press, Oxford, 2004).
- [4] S. Ohdachi *et al.*, Plasma Fusion Res. **2**, S1016 (2007).
- [5] S. Ohdachi *et al.*, Plasma Sci. Technol. **8**, 45 (2006).
- [6] L.C. Ingesson *et al.*, Nucl. Fusion **38**, 1675 (1998).
- [7] L.C. Ingesson *et al.*, Fusion Sci. Technol. **53**, 528 (2008).
- [8] S.H. Lee *et al.*, Current Appl. Phys. **10**, 893 (2010).
- [9] J. Mlynar *et al.*, Fusion Sci. Technol. **58**, 733 (2010).
- [10] N. Iwama *et al.*, Appl. Phys. Lett. **54**, 502 (1989).
- [11] J.L. Luxon, Nucl. Fusion **38**, 614 (2002).
- [12] M.W. Shafer *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **81**, 10E534 (2010).
- [13] J.-K. Park *et al.*, Phys Plasmas **16**, 056115 (2009).
- [14] S.-I. Itoh and K. Itoh, Nucl. Fusion **29**, 1031 (1989).
- [15] A. Wingen *et al.*, Nucl. Fusion **54**, 064007 (2014).
- [16] M.W. Shafer *et al.*, Plasma Fusion Res. **6**, 2402041 (2011).
- [17] A.N. Tikhonov and V.Y. Arsenin, *Solutions of ill-posed problems* (Wiley, New York, 1977).
- [18] G.H. Golub *et al.*, SIAM J. MATRIX ANAL. APPL. **21**, 185 (1997).
- [19] P.C. Hansen, Numer. Algorithms **6**, 1 (1994).
- [20] G.H. Golub, U. von Matt, *Tikhonov regularization for large scale problems* (Scientific Computing, Springer, 1997).
- [21] P.C. Hansen *et al.*, IAM J. Sci. Comput. **14**, 1487 (1993).
- [22] A. Wingen *et al.*, Phys Plasmas **21**, 012509 (2014).
- [23] A. Wingen *et al.*, J. Comput. Phys. **289**, 83 (2015).



6. Regularization of Soft-X-Ray Data in a Tokamak Application

ANDREAS Wingen

Oak Ridge National Laboratory

An image inversion scheme for soft X-ray (SXR) diagnostics at the DIII-D tokamak is developed to obtain the local soft X-ray emission at a poloidal cross-section from the spatially line-integrated image taken by either a set of SXR arrays or a tangential camera. The scheme uses the Tikhonov regularization method since the inversion problem is generally ill-posed. The regularization technique uses the generalized singular value decomposition (GSVD) to determine a solution that depends on a free regularization parameter. The latter has to be chosen carefully, and the so called *L-curve* method to find the optimum regularization parameter is outlined. A representative test image is used to study the properties of the inversion scheme with respect to inversion accuracy, amount/strength of regularization and image resolution. The SXR arrays thereby represent an under-determined case while the tangential camera is an over-determined case of the linear inversion problem. It is found that the under-determined case suffers from lack of information but can still return a coarse, but fair image, while the camera data can be well inverted with high resolution.

6.1 Introduction

Methods for computed tomography are used in many fields like medicine, nondestructive materials testing, geophysics, atmospheric research and have also been applied to magnetically confined fusion plasmas [1,2]. The common characteristic is that many nonlocal measurements, such as line integrals, are processed mathematically to estimate local physical quantities, such as emissivity or absorption.

Fusion has a long history of Soft x-ray (SXR) detection in the plasma core of tokamaks [3] and stellarators to e.g. detect core MHD modes [4], diagnose core islands [5] or analyze impurity concentrations [6]. A number of tomography methods, which have found applicability to SXR, bolometer, and other tomography diagnostics in magnetically confined fusion plasmas, have been used to various levels of success. Those methods have been limited in spatial resolution and/or cross-detector calibrations [7]. Tangential imaging has historically given better spatial resolution, but interpretation of the images is nontrivial due to the 3-D line-of-sight integration and requires advanced inversion techniques [8,9], like the Tikhonov regularization [10].

A tokamak confines the plasma inside a torus-shaped vacuum chamber by a strong magnetic field. The magnetic field of a tokamak equilibrium is given by a strong toroidal magnetic field and the poloidal field, generated by the strong toroidal plasma current. The resulting total field is helical in nature; we will exploit this helical property later in the paper.

The field lines are organized on surfaces of constant poloidal magnetic flux Ψ , so called *flux surfaces*. All field lines on such a flux surface wind themselves helically around the torus and have a constant ratio of toroidal to poloidal rotations, the so called *safety factor* q . Typically q is monotonically increasing from the center towards the separatrix, which is the last closed surface that then determines the plasma boundary and separates the closed field lines inside from the open ones in the so called *scrape-off layer*. The flux surface configuration is then toroidally axisymmetric. This symmetry allows to project volume quantities, like SXR emission, into a single plane, the tangency plane; we will make use of this later in the paper. Here we focus on the DIII-D tokamak [11].

Line integrated SXR diagnostics are mainly used in the plasma core to detect large scale structures. Here we use a set of arrays, that cover a poloidal cross-section as well as a tangential imaging system that views the perturbed tokamak plasma edge region. In this work, we determine the requirements for the Tikhonov regularization and develop an algorithm to find, especially for the imaging diagnostic, high-resolution and high-quality inversions. The latter are needed to identify and characterize features with potentially low signal to noise and high spatial structure, which are predicted by plasma theory to appear in the perturbed plasma edge.

The soft-X-ray imaging system (SXRIS) [12] at DIII-D is a tangential camera that measures the line-integrated SXR

Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37831, USA

author's e-mail: wingen@fusion.gat.com

The Japanese version of this article (including all figures and references) can be found on pages 91-97 of this journal.

emission in the plasma edge region. The system uses pinhole optics focusing radiation onto a scintillator, which is imaged with visible optics. It is used to diagnose structural changes due to plasma response [13] to externally applied resonant magnetic perturbations (RMPs). The diagnostic can use different energy filters to discriminate between different spatial regions. Within the steep gradient region of the H-mode pedestal [14], helical displacements of up to 5 cm, which change with the poloidal angle are found, which can be modeled and explained through a synthetic diagnostic [15]. To interpret the measured data, the Tikhonov regularization, found to be applicable to the SXRIS [16], is used to obtain stabilized solutions to the ill-posed problem of inverting line-integrated images.

In the next section we give an overview on the Tikhonov regularization method and construct its solution using the generalized singular value decomposition (GSVD). The method using the GSVD is equivalent to the method developed in Ref. 10 and applied in Refs. 4, 5, but does not require the direct inversion of the side constraint operator. The side constraints as well as the optimum regularization parameter is discussed. Tikhonov regularization can address under- as well as over-determined cases. The former is discussed in Sec. III on the example of SXR arrays, while the latter applies to the SXRIS setup, shown in Sec. IV. In both cases, we apply the regularization to an analytic test image and study the inversion quality with respect to resolution and regularization. The conclusions summarize the inversion method's results.

6.2 Mathematical approach to high resolution inversion

Mathematically, the 3-D volume of SXR emission is divided into $n = n_x n_y n_z$ emission zones. Each zone is a cube of size d^3 inside the volume. On one side of the volume is a detector, which records the SXR emission. Note that later on we will reduce the emission volume to 2-D by e.g. exploiting a system symmetry. The detector itself can be a camera, which returns a 2-D "image" which has m number of pixels, or just an array of m chords. Each pixel of the image or array chord has exactly one line-of-sight and records all emission from the volume along its line-of-sight. **Figure 1** shows a schematic sketch of the described setup.

The relation between local emission, the emission in each zone of the volume, $\boldsymbol{\varepsilon} (\in \mathbb{R}^3)$ and line integrated emission, in case of a camera the value at each pixel (literally a camera pixel) in the image plane, $\boldsymbol{s} (\in \mathbb{R}^m)$ is given by the linear equation

$$\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{s} \quad (1)$$

with the geometric transform $m \times n$ matrix \mathbf{L} , which will be discussed in more detail in Sec. IV.

A. Tikhonov regularization approach

In Eq. (1), we use $m > n$, so the system is overdetermined. The solution to this system of equations is given by

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \underset{t}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{s}\|, \quad (2)$$

but the problem is ill-posed. Regularization is a well known method to find stable solutions to ill-posed problems of such form, which are associated with an ill-conditioned matrix \mathbf{L} , i.e. the columns of \mathbf{L} are nearly linear dependent and therefore \mathbf{L} is nearly singular. The solution of an ill-posed problem is in general very sensitive to small perturbations, including numerical rounding errors. A direct inversion of \mathbf{L} or a direct calculation of $\boldsymbol{\varepsilon}$ by standard methods usually result in highly inaccurate solutions, which are typically no way near the "real" solution. Replacing the ill-conditioned matrix \mathbf{L} with a well-conditioned matrix, derived from \mathbf{L} , does not necessarily lead to a meaningful solution. Regularization provides a stabilization of the solution with respect to small error fluctuations. In the following, we apply the Tikhonov regularization scheme [17-19] and instead solve

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda = \underset{t}{\operatorname{argmin}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{L} \\ \lambda \mathbf{C} \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \begin{pmatrix} \boldsymbol{s} \\ \lambda \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^* \end{pmatrix} \right\|, \quad (3)$$

where $\|\boldsymbol{x}\| = (\sum x_i^2)^{1/2}$ is the Euclidean norm and λ is the free regularization parameter which controls the side constraint $\min \|\lambda \mathbf{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^*)\|$. $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ is an *a priori* assumption about the solution itself, which can either be zero, i.e. no assumption is made (used throughout the paper), or some assumed local emission distribution within the zones, which is then forced onto the solution.

B. Generalized singular value decomposition

To solve Eq. (3), we use the generalized singular value decomposition (GSVD)

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^T \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{Z} &= \operatorname{diag}(\boldsymbol{\sigma}) \\ \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{Z} &= \operatorname{diag}(\boldsymbol{\mu}) \end{aligned} \quad (4)$$

with the orthonormal matrices $\mathbf{U} (\in \mathbb{R}^{m \times m})$ and $\mathbf{V} (\in \mathbb{R}^{n \times n})$ the non-singular matrix $\mathbf{Z} (\in \mathbb{R}^{n \times n})$ and the diagonal matrices $\operatorname{diag}(\boldsymbol{\sigma})$ and $\operatorname{diag}(\boldsymbol{\mu})$, both $\in \mathbb{R}^{n \times n}$ with

$$\begin{aligned} 0 \leq \sigma_1 \leq \dots \leq \sigma_n \leq 1 \\ 1 \geq \mu_1 \geq \dots \geq \mu_n \geq 0 \end{aligned} \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \boldsymbol{\mu} = \mathbf{I}_n, \quad (6)$$

Then the ratios

$$\gamma_i = \frac{\sigma_i}{\mu_i}, \quad i = 1 \dots n \quad (7)$$

are the generalized singular values of the matrix pair (\mathbf{L}, \mathbf{C}) . Note that for $\mathbf{C} = \mathbf{I}_n$ the GSVD becomes the standard SVD.

In Ref. 10, the regularized solution is constructed by using the standard SVD of the Matrix $\mathbf{L} \cdot \mathbf{C}^{-1}$. By using the defi-

nitions in Eq. (4) we find SVD

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{C}^{-1} = \mathbf{U} \cdot \text{diag}(\boldsymbol{\gamma}) \cdot \mathbf{V}^T, \quad (8)$$

which is identical to the definition in the reference. Therefore, the regularized solution constructed here is equivalent to the one using the SVD of $\mathbf{L} \cdot \mathbf{C}^{-1}$. The difference is that the GSVD method does not require the direct inversion of the operator \mathbf{C} . Using the GSVD we define

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{s}^T, \quad \boldsymbol{\omega} = \mathbf{Z}^{-1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^*, \quad (9)$$

and find for the regularized solution

$$\varepsilon_{\lambda,i} = \sum_{j=1}^n z_{ij} f_j \left[\frac{\beta_j}{\sigma_j} + \frac{\lambda^2}{\gamma_j^2} \omega_j \right], \quad (10)$$

with the filter factors

$$f_j = \frac{\sigma_j^2}{\sigma_j^2 + \lambda^2 \mu_j^2} = \frac{\gamma_j^2}{\gamma_j^2 + \lambda^2}. \quad (11)$$

C. Choice of side constraint

\mathbf{C} ($\in \mathbb{R}^{n \times n}$) is an operator which represents the side constraint. It is a necessary contribution to the actual ill-posed minimization problem to find a meaningful solution. Numerically, a minimizer $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ of Eq. (2), using $\lambda = 0$, can be found, but for ill-posed problems it is typically highly oscillatory (see e.g. **Fig. 8(a)**) or far away from the "real" solution. The side constraint can keep the obtained minimum solution within specified bounds, can force a continuous solution or can ensure other problem-specific properties. If there is no other obvious side constraint to the considered problem, \mathbf{C} is often used as either the identity matrix \mathbf{I}_n or a derivative operator like the Laplace operator. In case of $\mathbf{C} = \mathbf{I}_n$ the side constraint forces the norm of the solution to be small and therefore ensures a bounded solution. A derivative operator on the other hand limits gradients within the solution and ensures a certain level of smoothness.

In the case of SXR emission in DIII-D discharges, we expect to see high emission from within the plasma, low or even no emission outside and possibly a steep gradient at the plasma edge. So we neither want to limit the solution itself nor its gradients, i.e. the first-order spatial derivative. On the other hand, we want to suppress high frequency fluctuations, like a noisy fragmentation, in the solution. So, we use the Laplacian operator, the second-order spatial derivative, to ensure that the solution is sufficiently smooth, while λ controls the amount of smoothness. Let $\varepsilon_{i,j} = \varepsilon(R_i, Z_j)$, $i = 0, \dots, n_R - 1$, $j = 0, \dots, n_Z - 1$, be an emission zone of the grid in **Fig. 6(c)** with the zone size h in both dimensions, then we approximate the Laplacian operator by the second order finite difference scheme

$$(\partial_R^2 + \partial_Z^2) \varepsilon_{i,j} = (\varepsilon_{i+1,j} + \varepsilon_{i-1,j} - 4\varepsilon_{i,j} + \varepsilon_{i,j+1} + \varepsilon_{i,j-1}) / h^2 \quad (12)$$

and with $k = j \times n_R + i = 0, \dots, n - 1$, we define the $n \times n$ Ma-

trix

$$C_{k,k} = -4 \quad C_{k,k \pm 1} = 1 \quad C_{k,k \pm n_R} = 1 \quad (13)$$

and zero elsewhere. Inside the grid, the elements of \mathbf{C} are well defined, but not at the boundary, because elements like $C_{0,-1}$ obviously do not exist. So, we have to define additional boundary conditions for the emission $\varepsilon_{i,j}$. There are two common choices for non-periodic cases:

1. Dirichlet boundary conditions, which set $\varepsilon_{i,j} = 0$ if (R_i, Z_j) is outside the grid. Then \mathbf{C} is given by Eq.(13) with both indices between 0 and $n - 1$.
2. Von Neumann boundary conditions, which set the first-order derivative of $\boldsymbol{\varepsilon}$ to zero at the boundary. Using the symmetric finite difference for the first-order derivative, we find that $\varepsilon_{-1,j} = \varepsilon_{1,j}$ and $\varepsilon_{i,-1} = \varepsilon_{i,1}$. In those cases, the respective elements of \mathbf{C} are set to 2 instead of 1.

In the following we use Dirichlet boundary conditions.

D. Choice of regularization parameter

The parameter λ determines the "strength" of the regularization, i.e. the weight of the side constraint, which is given by \mathbf{C} , relative to the solution constraint, Eq. (2). For $\lambda = 0$ the solution $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$ is unregularized and therefore, as it is typical for ill-posed problems, undamped with high frequency components, although the residual $\|\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda - \mathbf{s}\|^2$ is very small. Very large values of λ on the other hand lead to $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$ which are no longer meaningful solutions to the actual problem since the residual becomes arbitrarily large. It is imperative to find the optimum regularization parameter, which is a non-trivial task. Several methods are known to literature to estimate the optimum regularization parameter [20]; here we apply the *L-curve* criterion [21].

For a given regularization parameter λ and its regularized solution $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$, as obtained by the Tikhonov method, we define the residual norm.

$$\rho^2 = \|\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\lambda - \mathbf{s}\|^2 = \lambda^4 \sum_{i=1}^n \left(\frac{\beta_i - \sigma_i \omega_i}{\gamma_i^2 + \lambda^2} \right)^2 \quad (14)$$

and the semi-norm

$$\eta^2 = \|\mathbf{C} \cdot (\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda - \boldsymbol{\varepsilon}^*)\|^2 = \sum_{i=1}^n \left(\gamma_i \frac{\beta_i - \sigma_i \omega_i}{\gamma_i^2 + \lambda^2} \right)^2. \quad (15)$$

One method to determine the optimum regularization parameter λ is to plot the semi-norm versus the residual norm for various values of λ on a double log scale, as shown by the schematic in **Fig. 2**. The resulting curve has the typical form of an "L", hence the name L-curve. The optimum point of operation is at the corner of the L-curve, which is the best trade off between solving the problem and satisfying the side constraint. Increasing λ also increases the level of regularization, i.e. oversmooths the solution in case of a Laplacian operator; the residual norm strongly increases. Decreasing λ on the other hand reduces the regularization, i.e. the solution

becomes more noisy and the semi-norm rises.

Here we use the L-curve to determine the optimum regularization parameter by localizing the L-curve corner. Besides assessing the L-curve visually, there are two typical ways of localizing the L-curve corner numerically. First, the corner of the L-curve represents a local maximum in the the L-curve's curvature, as given by

$$\kappa = \frac{\eta''(\rho)}{(1 + \eta'(\rho)^2)^{3/2}}, \quad (16)$$

and second, at the corner the distance of the L-curve from the origin $\sqrt{\rho^2 + \eta^2}$ is locally minimal. Both points should coincide, but in a practical application this is not necessarily the case because η contains a hidden free scaling parameter $\alpha \neq 0$. Considering two regularizations as given by Eq. (3), indexed '1' and '2' respectively, with

$$L_1 = L_2, \quad s_1 = s_2, \quad \varepsilon_1^* = \varepsilon_2^*, \quad (17)$$

$$C_1 = \alpha C_2, \quad \lambda_1 = \lambda_2 / \alpha \quad (18)$$

then obviously leads to

$$\varepsilon_{\lambda_1} = \varepsilon_{\lambda_2}. \quad (19)$$

From Eqs (14) and (15) we find

$$\rho_1 = \rho_2, \quad \eta_1 = \alpha \eta_2. \quad (20)$$

Therefore we use both criteria to determine α , so that the point of maximum curvature coincides with the point of minimal distance. The corresponding ρ then gives the optimum regularization parameter. Empirically we find that α scales C in such a way that $O(\alpha \|C\|) \approx O(\|L\|)$, i.e. the Frobenius norm of both matrices are in the same order of magnitude.

E. Image inversion quantification

To test and quantify the implemented regularization scheme, we use an analytic test case. The structures in the test image reflect features one could expect to see in a real discharge application. The test inversion consists of several steps:

- step1. Generate analytically a 2-D image of local emission in a poloidal cross-section. This 2-D local emission is numerically represented by the vector ε_0 .
- step2. Construct the geometric transform L and obtain the line integrated test SXR emission $s = L \cdot \varepsilon_0$.
- step3. Apply the Tikhonov regularization to reconstruct the local emission ε_λ and determine the optimum regularization parameter λ_{opt} through the L-curve.
- step4. Compare the regularized solution $\varepsilon_{\lambda_{\text{opt}}}$ with the analytic local emission ε_0 to quantify the quality of the inversion.

As a measure, a *figure of merit* or *FOM* is defined inside the zone grid

$$\varepsilon_{\text{FOM}} = \frac{\|\varepsilon_{\lambda_{\text{opt}}} - \varepsilon_0\|}{\|\varepsilon_0\|}, \quad (21)$$

which is the relative error, given in %, of the regularized solution with respect to the known, exact solution.

6.3 Inversion of tomographic SXR array measurements

Tikhonov regularization can treat underdetermined cases with $m < n$. A typical example is a set of SXR arrays, where multiple view chords measure the line integrated emission in a poloidal cross section, each under a different angle, so that every array covers a wide area of the cross-section, while chords from different arrays intersect each other. Here we pick a case of 4 arrays, each consists of 16 view chords. So, the set has a total of $m = 64$ view chords that intersect with each other. The array setup is shown in **Fig. 3** (b); each of the red lines represent one view chord, while the color contours represent local SXR emission for the test case. The emission zones on the other hand are arranged in a 2 D grid, which has to cover the entire cross-section. Here we choose each zone to be square. **Figure 3** (a) shows a typical zone grid layed on top of the local test SXR emission. The shown grid size has a 7 cm resolution, which means the grid has $18 \times 43 = 774$ emission zones. This is still a fairly coarse resolution, but n is already more than 10 times larger than m . So the system is highly underdetermined.

The test emission is constructed from the magnetic topology of a perturbed, weakly 3-D DIII-D equilibrium, by prescribing an emissivity profile and assign emission to magnetic flux. The profile itself assumes emission is constant on a flux surface and is peaked in the core and then falls off towards the plasma edge. The emission is zero outside of the plasma separatrix. The emission shown in **Fig. 3** is highly resolved and includes many fine structures. In order to obtain the line integrated test SXR emission through the geometric transform L of the arrays, the local emission needs to be down sampled to the zone grid resolution. **Figure 4**(a) shows the down sampled local emission. Note that all the fine structure is lost already.

Using the local emission in **Fig. 4**(a), the line integrated data is constructed following step 2 of the test inversion scheme. Applying the Tikhonov regularization to the obtained data set is not a real minimization problem, because the local emission in **Fig. 4** is an exact solution of the inverse problem. So, to make the test problem more realistic, a small amount of white noise is added to the line integrated data set; here we use a random noise of at most 1% of the signal. The Tikhonov regularization is then applied to the "noisy" data set and the local emission for the optimum regularization parameter is calculated. The result is shown in **Fig. 4** (b). As you can see, the plasma bulk is fairly recovered, as is the peaking of the emission in the core. But the plasma shape and other more detailed features, even of the down sampled emission, remain somewhat obscure. The figure of merit is

at 23.3%, which is a quite significant relative error. The reason is quite simple, only a set of 64 data points is available to reconstruct local emission at 774 grid points. There is simply not enough data to recover a more detailed local emission. The result hardly changes by removing the noise but gets worse if the noise is increased. Furthermore, the result becomes either more fragmented or more blurred, if the regularization parameter is de- or increased respectively; the FOM goes up in either case. This will be discussed in more detail for the overdetermined case in the next section.

Changing the zone grid resolution can potentially have an impact on the inversion quality. If the resolution is decreased, the system becomes less underdetermined, but the down sampled emission becomes more coarse and bulky at the same time. If the resolution is increased, the system becomes even more underdetermined, which means more regularization is required for a not-fragmented result. The result becomes more blurred instead. **Figure 5** shows the figure of merit for various zone grid resolutions $n_R = \sqrt{n/a}$ with a fixed aspect ratio of $a = n_z/n_R = 2.4$. A clear minimum is found at $n_R = 18$, i.e. $n = 774$, the resolution used in **Fig. 4**.

6.4 Inversion of tangential 2-D SXR images in tokamaks

We aim to determine the local SXR emission inside a tokamak plasma from SXR camera measurements as sketched by **Fig. 1**. The actual setup is shown in **Fig. 6(a)**, which is a top down view of the tokamak cross-section. The pinhole is located at the outer wall, while the camera views tangentially into the torus; the view cone is given by the grey area. To achieve meaningful statistics of local emission we need a sufficiently high number of different line-of-sights to penetrate the emission volume. This number of pixels should be larger than the number of zones, i.e. $m > n$. So, this is a typical example for the overdetermined case. Since the emission volume is 3-D while the pixel plane is 2-D, maintaining $m > n$ and simultaneously achieving a reasonable resolution of local emission can easily become computationally challenging. In a tokamak the helical symmetry of the equilibrium field line configuration can be exploited.

Figure 6(b) shows a poloidal cross-section in DIII-D; it is the tangency plane of the camera's optical axis marked by the cross. The separatrix and multiple flux surfaces are given, indexed by the poloidal flux which is normalized to 1 at the separatrix and 0 at the magnetic axis in the plasma center. The flux surface configuration as shown in **Fig. 6(b)** is toroidally axisymmetric but the field lines are helical. The view cone of the camera covers the grey highlighted area.

To make use of the helical field line symmetry, we imply the fundamental assumption that SXR emission is constant along magnetic field lines for the length of the trace in **Fig. 6(c)**, which is between 0 m and 1.2 m along a field line. This

assumption is reasonable in the SXR emission regime, because thermal electrons follow field lines quite closely [22] and parallel transport is much larger than perpendicular, while electron density and electron temperature are assumed constant on flux surfaces in standard axisymmetric equilibrium reconstructions. Note, that we do not need to assume constant SXR emission on flux surfaces here. So, as shown in **Fig. 6(c)**, we step along a line-of-sight (the curved line is the toroidal projection of it into the tangency plane) and trace each point along a magnetic field line towards the tangency plane. Such traces are shown by the small lines in the figure. The intersections of the various traces with the tangency plane then give the respective emission zones, which are represented by the highlighted boxes within the dashed zone grid. By this procedure we can reduce the emission volume by one dimension to the 2-D tangency plane, which is divided into a 2-D grid of $n = n_R n_z$ square emission zones with resolution $dR = dz = h = \text{const}$. The zone grid is thereby limited by the vessel wall at the bottom, by the $\psi = 1.1$ scrape-off-layer surface at the left and right and by the uppermost line-of-sight at the top.

The geometric transform, or L -Matrix, is then built up row by row, starting out as a row of zeros. Each row represents one line-of-sight, i.e. one pixel, while each column represents one emission zone. A line-of-sight is discretized with a step size ds which should be smaller than the zone resolution dR to get reasonable statistics. For each point along the line-of-sight j the respective emission zone j is located by following an equilibrium field line. Then the value of the emission zone i, j is increased by one, i.e. $L_{ij} = L_{ij} + 1$. Note that the resulting matrix is sparse in nature.

A. Test image development and characterization

To create a representative test image, we use a typical magnetic field configuration in DIII-D, consisting of the axisymmetric equilibrium field plus a non-axisymmetric small perturbation field, and assign SXR emission to the field line penetration depth structure via an empirical emissivity profile. $\epsilon(\psi)$ Then we smooth the resulting 2-D emission by a simple moving average filter. The procedure of creating a test image is similar to the SXR modeling efforts described in Ref. 15.

The results of the inversion steps 1 and 2 can be seen in **Fig. 7**. **Figure 7(a)** shows the created test image ϵ_0 . Note that the image is limited to the emission zones covered by the geometric transform. The test emission shows multiple different features, which we also would like to resolve in a real discharge application. The most obvious feature is the plasma bulk, given by any emission greater than zero. The plasma bulk is characterized by a coarse structure; the emission peaks along the edge, decreases further inwards and then increases again in the core. On top of the coarse structure, several different fine-structure features appear due to

the perturbation. One feature is the boundary shape, showing several so called *lobes*, that reach out towards the vessel wall at the lower corner of the separatrix. Inside the plasma edge small regions of increased emission can be found. Those features are created by *islands* in the magnetic structure. The line integrated test emission as obtained from the test image is shown in **Fig. 7(b)**. Many of the test image's features are obscured due to the line integration. Note that the line integrated image is limited by the circular detection plane, while the emission inside is limited by the vessel wall. The centerpost, which is the vertical wall segment on the left side in **Fig. 6(b)**, is clearly visible by the vertical cut-off in the line integrated emission. For the remainder of Sec. IV, **Fig. 7 (b)** is the starting image \mathbf{s} for the Tikhonov regularization.

B. Effect of the regularization parameter λ

The inversion scheme and therefore the quality and success of the regularized image depends on multiple parameters. The most obvious one is of course the regularization parameter λ itself. Since we obtained the line integrated test emission \mathbf{s} in the last section (**Fig. 7(b)**) directly through the geometric transform \mathbf{L} , the test image ϵ_0 is the exact analytic solution to Eq. (1). To study the effectiveness of the inversion scheme in a closer approximation to a practical application, we convert the test problem setup to an actual minimization problem as Eq. (2) by adding a small level of random white noise to \mathbf{s} as a perturbation; here we use 2% of the maximum signal.

Figure 8 shows three different regularized solutions for three different regularization amounts λ . First, a strongly under-regularized solution for $\nu = 0.2$ in **Fig. 8(a)**, which is characterized by high frequency oscillations and fragmentation. Second, the optimum regularized solution $\epsilon_{\lambda_{opt}}$ according to the L-curve criterion for $\lambda = 6.9$ in **Fig. 8(b)**, which shows good agreement with the test image. All features of the original test image, which is the exact solution to the regularized problem, are well reconstructed in $\epsilon_{\lambda_{opt}}$, not only the plasma bulk, but also the lobes and the islands. Only at the very top, in the core region, there are differences between $\epsilon_{\lambda_{opt}}$ and ϵ_0 . These deviations are artifacts of the regularization, which are systematic and therefore unavoidable without additional a-priori information. The upper boundary of the emission zone grid is defined by the limit of line-of-sight coverage. This implies that, compared to the lower part of the zone grid, only very few line-of-sights intersect with emission zones at the upper boundary and therefore the uncertainty becomes large in this region; hence artifacts appear. **Figure 8(c)** gives a strongly over-regularized solution for $\lambda = 178$, which is over-smoothed and smears out any structure besides the overall plasma bulk itself.

The corresponding L-curve is shown in **Fig. 9(a)**, which is not as strongly shaped as suggested by the theoretical curve in **Fig. 2**. Nevertheless, the algorithm described in Sec.

IID successfully located the L-curve corner. This is verified by the FOM, Eq. (21), as shown in **Fig. 9(b)**. The L-curve corner, given by the black star marker is also located very closely to the minimum of FOM, which means that the corresponding solution, **Fig. 8(b)**, gives the best possible fit with the test image at $\epsilon_{FOM} = 9.8\%$. This value is not negligible due to the applied noise, but still much smaller than the FOMs of **Figs. 8(a)&(c)**, which are at 25.8% and 21.1% respectively. Note that we limit the FOM calculation to the region with $Z < -0.6$ to exclude the artifacts.

6.5 Conclusions

We developed an image inversion scheme for the SXR diagnostics at the DIII-D tokamak, to obtain the local SXR emission at a poloidal cross-section from the spatially line-integrated data, either taken by a set of arrays or the SXRIS camera. The scheme is based on the Tikhonov regularization method, since the inversion problem is generally ill-posed. We constructed a numerical algorithm, using the generalized singular value decomposition to determine a solution in dependence of a free regularization parameter. The latter has to be chosen carefully. Here we applied the L-curve method to determine the optimum regularization parameter, which is the best trade-off between the residual error and the applied side constraint. To study the properties of the inversion scheme, we first considered a representative test image, which was constructed by assigning SXR emission to the simulated vacuum magnetic field structure, typical to DIII-D. Line-integrated data was obtained and subsequently inverted by our regularization algorithm. An under- and an over-determined case have been considered; the former is represented by SXR arrays while the latter is the SXRIS camera.

In case of the SXR arrays, the inversion generally suffers from the lack of information. Nevertheless, the Tikhonov regularization was able to compute an inverted image that, although is coarse in nature, still fairly reconstructs the plasma bulk and the emission peak in the plasma core. It is found that the relative error between the test image and the inversion becomes minimal for a zone resolution that is about 10 times larger than the number of chords in the arrays.

For the SXRIS camera, all features were reconstructed with excellent agreement to the test image. Only at the top boundary, inside the plasma core region, artifacts appeared. The inverted image has two main sources of error. Some emission zones get intersected by many sight-lines, while others only get intersected by few. Precision, defined as the relative amount of sight-line intersections for each emission zone, is linked to the geometric setup and therefore a property of the inversion scheme. The top boundary suffers from very low sight-line coverage, which limits the precision. The second source of error is a low signal/noise ratio. More de-

tails and the application of the inversion scheme to actual data can be found in Ref. 23.

Acknowledgment

This work was supported by the US Department of Energy under DE-AC05-00OR22725.

Figure Captions

Fig. 1: Schematic setup for recording line-integrated SXR emission. Several line-of-sights (chords), starting at some camera pixels and going through the pinhole, penetrate the emission volume, which is divided into multiple zones.

Fig. 2: Schematic of a typical L-curve.

Fig. 3: Local test emission with (a) the zone grid and (b) the array chords overlaid.

Fig. 4: (a) Local test emission down sampled to zone grid resolution. (b) Inversion result for optimum regularization parameter $\lambda = 1.73$ and $\epsilon_{\text{FOM}} = 23.3\%$.

Fig. 5: Figure of Merit of inversions at respective optimum regularization parameter for various zone grid resolutions. Raw (grey) and smoothed (black) data.


Fig. 6: (a) Schematic top down view of the tokamak. The grey area shows the view cone of the pinhole camera. The line

across it represents the tangency plane of the optical axis. (b) The poloidal cross-section of the tangency plane in DIII-D. The grey circle represents the area seen by the camera. The cross is the center, where the optical axis intersects. The separatrix and multiple plasma equilibrium flux surfaces are shown. (c) A magnification of the area viewed by the camera, divided into emission zones. The curved line is the toroidal projection of a line-of-sight into this poloidal cross-section. Various points along the line-of-sight are traced along the magnetic field lines (lines from curved line to highlighted boxes), based on their helicity, to the respective emission zones (highlighted boxes) in the tangency plane, which are then the source of emission along this line-of-sight.

Fig. 7: (a) Test image of local emission, (b) Line integrated emission image as seen by SXR camera. Created from (a).

Fig. 8: Tikhonov regularization of Fig.7(b) with 2% noise added. (a) Regularized image for $\lambda = 0.2$. (b) Regularized image for the optimum regularization parameter $\lambda = 6.9$. (c) Regularized image for $\lambda = 178$.

Fig. 9: (a) The L-curve. The three markers show the position of solutions [Figs. 8(a)-(c)] on the L-curve. (b) Figure of Merit evolution for the full range of regularization parameters used in (a). Again the markers give the FOMs for the solutions [Figs. 8(a)-(c)].



Andreas Wingen

Andreas Wingen graduated from the Heinrich--Heine University Düsseldorf, HHU, (Düsseldorf, Germany) in 2002 with a diploma in physics and received his PhD in Plasma Physics in 2006. He then continued working at the HHU as a postdoctoral research associate. In 2011 Dr. Wingen completed his Habilitation at the HHU and was awarded the title of Private Lecturer. He then joined Oak Ridge National Laboratory in 2012, first as a postdoctoral research associate and later as a staff scientist. Dr. Wingen is on long--term assignment at the DIII--D National Fusion Facility at General Atomics in San Diego. During his career he primarily focused on effects of applied 3D magnetic perturbation fields in tokamaks. His research is mainly theoretical and numerical, but is always closely coupled with experimental data. Recent research efforts involve 3D equilibrium reconstruction in tokamaks with applied perturbation fields.



7. おわりに

7. Epilogue

大館 暁

OHDACHI Satoshi

核融合科学研究所

(原稿受付：2017年1月19日)

7.1 数理的手法の有効性

全6回にわたって画像再構成とパターン認識の数理についての講座をお送りしてきた。数理的な基盤をしっかりと整備することで、逆変換のプロセスで最大限の情報が引き出されていることを納得していただければ、講座のまとめ役として大変うれしい。

逆変換の手法のなかで最も基本的な手法である Tikhonov 正則化が、ベイズ推定の結果とみなすこともできることは、岩間尚文氏による本講座第2章「2. 画像再構成の数理的基礎」[1]によって詳しく議論された。このベイズ推定を使った機械学習、画像認識は、近年大変大きな発展を遂げており、本講座シリーズでも内田誠一氏によるパターン認識についての講座第3章「3. パターン認識入門～人工知能の基盤技術」[2]で詳説された。解説では、なぜパターン認識技術が急速な発展をとげたかについて、1)大規模なデータセットの整備、2)ディープラーニングのような有効な認識手法の開発という理由づけとともに、3)オープンサイエンスによる取り組みがあげられている。たとえば、機械学習を行うライブラリ群は、複数のグループから大規模かつ高度なものが提供されており (tensorflow [3], chainer [4] など)、テスト用のデータも公開されていることから機械学習という研究分野に参入する障壁が大変低くなっている。激しい競争と、参入の容易さからくる裾野の広がり、多くのアルゴリズムが試される状況を生み、急速な進歩を生んでいると考えられる。このように画像再構成とパターン認識に関する研究は大変活気を帯びている。

逆問題を解く際に関数や行列を互いに直交する要素の線形結合で書き表すことは、非常に有効な手法である。画像逆変換においても、任意の画像を直交する要素で書き表すことは重要であり、パターン認識においても、特徴抽出に使われる技法のベースとなっている。本講座第4章では、斎藤直樹氏により、この正規直交系を任意の形状の領域で構築するラプラシアン固有関数について詳しく解説いただいた[5]。

7.2 プラズマ計測への適用

本講座第5章ではプラズマのイメージング計測の新たなアプローチについて紹介されている。秋山毅志氏らの自然科学機構連携チームから大型望遠鏡で用いられている補償光学で利用される波面センサーをプラズマ乱流計測に適用する試み[6]、荒川弘之氏からは符号化開口法の一種である符号化アダマル変換分光による空間分解能の向上、についてそれぞれの計測原理が説明された[7]。両者に通ずるのは計算によって解像度を上げる点である。画像再構成の数理や情報学の知見がキーとなっており、コンピュータシミュレーションと呼ばれている。コンピュータトモグラフィはコンピュータシミュレーションの最もよく知られている例である。このように計算による分解能の向上、計算による再構成を前提にする計測手法が今後増えていくと考えられる。

第6章では核融合プラズマでの例として DIII-D での SXR 計測を用いたコンピュータトモグラフィが紹介された。Andreas Wingen 氏により、Tikhonov 正則化を用いた線積分計測から局所 SXR 放射イメージの再構成について、逆変換の解像度と精度が評価された。磁力線が螺旋状であることを利用して、視線がより多くの放射領域を通過するようにする等、トロイダルプラズマならではの工夫も紹介された[8]。

7.3 コミュニティ形成

核融合研究のコミュニティにおいては、プラズマ・核融合学会誌での岩間氏の優れた解説などによって[9]、画像再構成・逆変換問題をどう取り扱うかについて共通の認識がこれまでも形成されてきた。それが現在の活発な研究状況に結びついている。さらに一歩踏み込んで、データ解析用のライブラリの公開や、逆問題解法を試すための実験データをセットの公開などを行い[10]、研究をより活性化したいと考えている。これまで、本講座で取り上げた画像再構成や、それに隣接する数理的課題について議論するワークショップなどを開催してきたが[11]、今後も続けて行い、コミュニティの拡大を図っていききたいと考えてい

る。オープンサイエンスめざした取り組みに協力いただける方にも、我々の試みにぜひ参加をお願いしたい。

参考文献

- [1] 岩間尚文, 大館 暁: プラズマ・核融合学会誌 92, 743 (2016).
- [2] 内田誠一: プラズマ・核融合学会誌 92, 839 (2016).
- [3] <https://www.tensorflow.org/>
- [4] <http://chainer.org>

- [5] 斎藤直樹: プラズマ・核融合学会誌 92, 904 (2016).
- [6] 秋山毅志 他: プラズマ・核融合学会誌 92, 912 (2016).
- [7] 荒川弘之: プラズマ・核融合学会誌 92, 917 (2016).
- [8] A. Wingen: プラズマ・核融合学会誌 93, 91 (2017).
- [9] 岩間尚文, 大館 暁: プラズマ・核融合学会誌 82, 399 (2006).
- [10] 既に京都大学の藤井恵介氏のグループは Github 上で種々のライブラリ類の公開を始めている。
- [11] https://workshop.nifs.ac.jp/gazo_keisoku2015/



おお だち さとし
大 館 暁

核融合科学研究所・ヘリカル研究部・高密度プラズマ物理研究系。専門は磁場閉じ込めプラズマの MHD 不安定性, イメージング技法を使った揺動解析。データ解析に

Ruby を愛用してきたのだけど (拙作のプロットライブラリ: <https://github.com/ohdachi/ogreplot>), 最近, 機械学習の人気もあって地位を不動のものにした Python に大差をつけられていて少し悲しいです。私自身も Python に移行する必要を感じるので, 最近解析プログラムは Python で書くようにしています。