J. Plasma Fusion Res. Vol.92, No.10 (2016) 743‐762

講座 画像再構成とパターン認識の数理

2．画像再構成の数理的基礎

2. Mathematical Basics of Image Reconstruction

岩 間 尚 文，大 舘　暁[1)]
IWAMA Naofumi and OHDACHI Satoshi[1)]
[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．そもそも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実例に取り上げつつ，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つくりたい．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（まと）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，周辺分野の進んだ実例に目を向けながら，今日的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ろ，**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

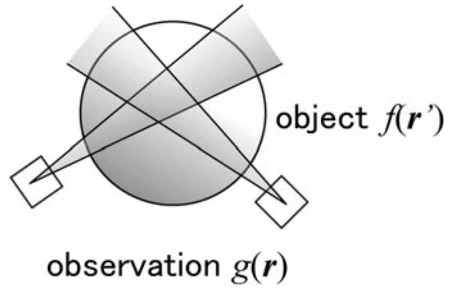


図1　物体 $f(\boldsymbol{r}')$ と観測量 $g(\boldsymbol{r})$.

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ければ，ぼ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．

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

この式は，物理量の空間分布 $f(\boldsymbol{r}')$ に関数 $h(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ が掛かって空間積分された結果，位置 $\boldsymbol{r}$ に観測量 $g(\boldsymbol{r})$ 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，$h(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 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 $g(\boldsymbol{r})$ が与えられて未知関数 $f(\boldsymbol{r}')$ 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 $f(\boldsymbol{r}')$ 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 $f(\boldsymbol{r}')$ 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 $E_{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{r})$ は物体内部の電場 $E(\boldsymbol{r}')$ とグリーン関数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ を用いて，

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{sc}}(\boldsymbol{r}) &= \int_D G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')c(\boldsymbol{r}')E(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}', \\ c(\boldsymbol{r}') &= k^2(\boldsymbol{r}') - k_{\mathrm{b}}^2 \end{aligned} \qquad (2)$$

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，$c(\boldsymbol{r}')$ はコントラスト関数と呼ばれる．物体内部の電場 $E(\boldsymbol{r}')$ は未知関数 $c(\boldsymbol{r}')$ 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 $E(\boldsymbol{r}') = E_{\mathrm{inc}}(\boldsymbol{r}')$（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 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_m$ $(m = 1, 2, \cdots, M)$ における観測値 $g(\boldsymbol{r}_m)$ を得たとき，この観測データから $f(\boldsymbol{r}')$ を求めたい．各 $\boldsymbol{r}_m$ において次の関係が成立する．

$$\int_D h(\boldsymbol{r}_m,\boldsymbol{r}')f(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}' = g(\boldsymbol{r}_m) \quad (m = 1, 2, \cdots, M) \qquad (3)$$

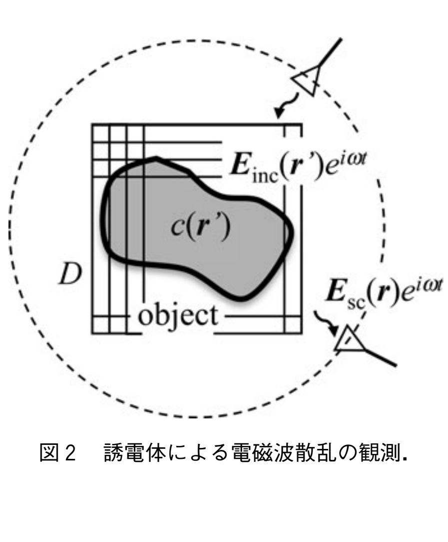


図2　誘電体による電磁波散乱の観測.

この関係から解析的に $f(\boldsymbol{r}')$ 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．

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

ここで，$\boldsymbol{r}'_n$ $(n = 1, 2, \cdots, N)$ は領域 D を適当に分割した離散点であり，$f(\boldsymbol{r}'_n)$ 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．

$$H\boldsymbol{f} = \boldsymbol{g}, \tag{5}$$

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

ただし，$h_{mn} = h(\boldsymbol{r}_m, \boldsymbol{r}'_n)\Delta \boldsymbol{r}'_n$，$f_n = f(\boldsymbol{r}'_n)$，$g_m = g(\boldsymbol{r}_m)$ と置いた．$\boldsymbol{f}$ は画素値 f_n を成分とする言わば画像ベクトル，$\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{f}$ から $\boldsymbol{g}$ 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．$\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{r}_m$ 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 $\boldsymbol{g}$ 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．(5')式は何となく，ベクトル $\boldsymbol{f}$ はベクトル $\boldsymbol{g}$ 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，式の数は観測値の数 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 $\boldsymbol{g}$ のわずかな摂動によって，解の画像 $\boldsymbol{f}$ 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 $M \geqq N$ 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 $\boldsymbol{g}$ に対して $H\boldsymbol{f} = \boldsymbol{g}$ を満たす $\boldsymbol{f}$ があるとき，$H(\boldsymbol{f}+\boldsymbol{f}') = \boldsymbol{g}$ を満たす $\boldsymbol{f}'$ は $H\boldsymbol{f}' = \boldsymbol{0}$ すなわち「観測に現れない $\boldsymbol{f}'$」である* （$\boldsymbol{0}$ 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 $\boldsymbol{f}'$ 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．解の画像は視線上以外で制約を受けないし，関係 $H(\boldsymbol{f}+\boldsymbol{f}') = \boldsymbol{g}$ からして物体 $\boldsymbol{f}$ 及び $\boldsymbol{f}'$ 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

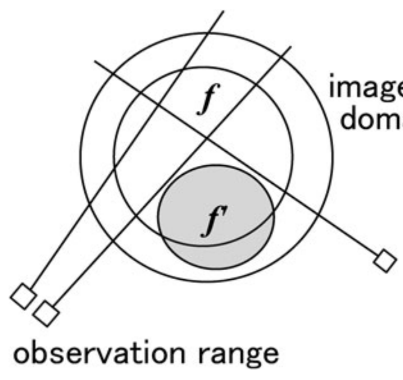


図3　線積分型の疎データ CT．ベクトル $\boldsymbol{f}$ 及び $\boldsymbol{f}'$ の成分が非ゼロの領域を示した．視線が減るほど情報のない領域が拡大し，観測がもたらす制約が減る．

*　このような $\boldsymbol{f}'$ すべての集合を線形作用素 H の零空間と言う．

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，$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$ と書ける．二つのベクトル $H\boldsymbol{f}$ および $\boldsymbol{g}$ の差 $H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{g}$ に対して，$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$ を最小にする $\boldsymbol{f}$ は新しい線形方程式（正規方程式）

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

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 $H^T\boldsymbol{g}$ 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，

$$\boldsymbol{g}_m = \sum_{n=1}^{N} h_{mn} f_n$$

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．

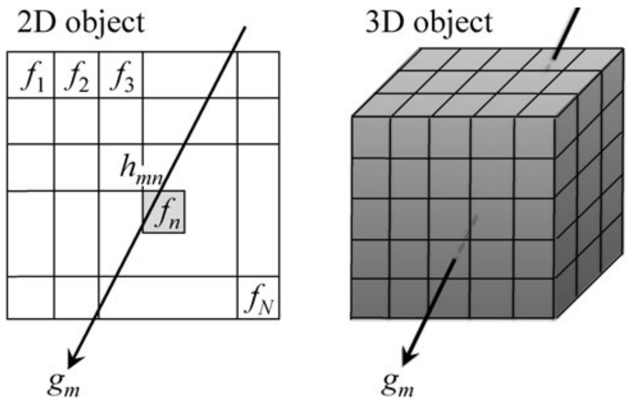


図４　線積分型 CT：理想的な線積分であれば，画素値 f_n が“交わりの長さ”h_{mn} の重みで観測値 g_m に貢献する．３次元の場合も同様．一般に h_{mn} の評価は物理的考察による．

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 $H^T\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{g}$ の積は，求める画像 $\boldsymbol{f}$ と同じ次元のベクトルになるから，$H^T\boldsymbol{g}$ はめざす物体領域 D の一つの画像である．この画像 $H^T\boldsymbol{g}$ の第 n 画素は

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

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 $(H^T\boldsymbol{g})_n$ である．結局，画像 $H^T\boldsymbol{g}$ 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うと，$H^T\boldsymbol{g}$ 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 $H^T\boldsymbol{g}$ 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]における実例を見てみよう．**図５**のように４台のボ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

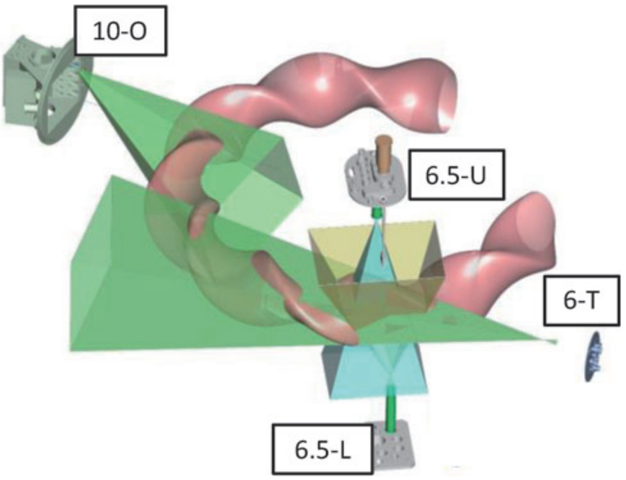


図５　核融合科学研究所の大型ヘリカル装置LHDにおける３次元CTのカメラ配置：ピラミッドビーム型ボロメータ４台を上下(U, L)・外(O)・接線(T)方向からのぞく観測窓に設置[7].

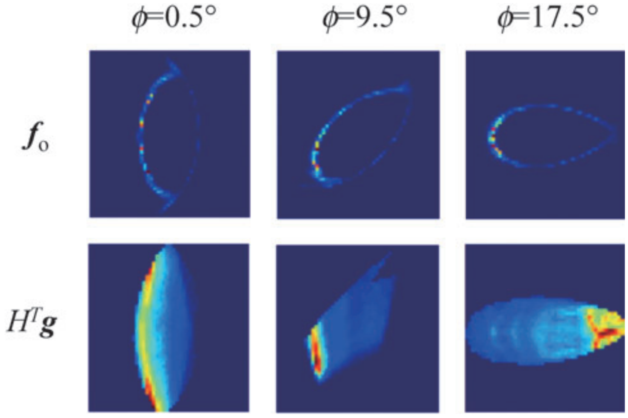


図６　LHD プラズマの（上）理論計算による放射強度分布 $\boldsymbol{f}_0$（ファントム）および（下）その逆投影画像 $H^T\boldsymbol{g}$．いずれも，３次元画像を３つのトロイダル角 ϕ におけるポロイダル断面像で表示．左がトーラス内側[8].

のシミュレーションに用いる原画像 $\boldsymbol{f}_0$ 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 $\boldsymbol{f}_0$ としよう．その投影 $H\boldsymbol{f}_0$ を求めると測定誤差のない正確な投影データ $\boldsymbol{g}$ になる．それを再分配して得られる逆投影画像 $H^T(H\boldsymbol{f}_0)$ 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（$\phi=17.5°$）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 $\boldsymbol{f}_0$ 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 $H^T\boldsymbol{g}$ はおとなしく等方的にぼけた画像になる．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，$H^T\boldsymbol{g}$ 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，$H^T\boldsymbol{g}$ 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，$H^T\boldsymbol{g}$ 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．

いずれにしろ，H^T は積分をほどく方向の $\boldsymbol{g}$ 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 $H^T\boldsymbol{g}$ 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ならない．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 $H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ 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 $g_m-(H\boldsymbol{f})_m$ 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 $\boldsymbol{f}^{(0)}$ 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

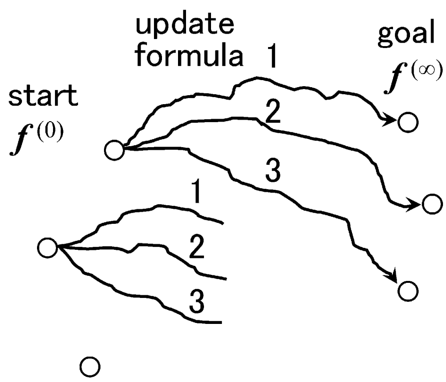


図７　解不定な線形方程式の解更新.

$\boldsymbol{f}^{(0)}=\mathbf{0}$（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$(H\boldsymbol{f})_m=\boldsymbol{g}_m$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，$H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$の解$\boldsymbol{f}$のうちノルム$\|\boldsymbol{f}\|$最小（すなわち$\|\boldsymbol{f}\|^2$最小）のものに収束する．$\|\boldsymbol{f}\|^2$はベクトル$\boldsymbol{f}$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$\boldsymbol{f}^{(0)}$に用いれば計算量は下がるが，Kaczmarz定理が初期解$\boldsymbol{f}^{(0)}=\mathbf{0}$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$H^T(\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}^{(k)})$を同時に考慮して，

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

のタイプの解更新を行う（付録Ⅰ）．ρ（>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，$\|\boldsymbol{f}\|$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回でず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$H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$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$\boldsymbol{f}=H^{-1}\boldsymbol{g}$が解である．測定誤差も含めて$\boldsymbol{g}$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

$$\boldsymbol{f}=H^\dagger\boldsymbol{g} \tag{8}$$

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$\boldsymbol{g}$を長いN次元ベクトル$\boldsymbol{f}$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$\boldsymbol{f}$は，正規方程式（6）の解のうち$\|\boldsymbol{f}\|^2$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（制約つきの最小化）

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$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$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$\|\boldsymbol{f}\|^2$が最小になる$\boldsymbol{f}$を解とする．そのためには，ラグランジュ関数

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha\|C\boldsymbol{f}\|^2+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \tag{9}$$

を$\boldsymbol{f}$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α（>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．$\boldsymbol{f}$の関数$\|C\boldsymbol{f}\|^2$はペナルティ関数と呼ばれる．

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

$$(\alpha C^TC+H^TH)\boldsymbol{f}=H^T\boldsymbol{g} \tag{10}$$

が得られる．$C=I$であれば，$C^TC=I$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，αC^TCが入ったせいで今度は逆行列が存在して

$$\boldsymbol{f}=(\alpha C^TC+H^TH)^{-1}H^T\boldsymbol{g} \tag{11}$$

と書ける．逆行列$(\alpha C^TC+H^TH)^{-1}$が，再分配画像$H^T\boldsymbol{g}$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$\boldsymbol{f}$を$\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$と書こう．いま，$HC^{-1}$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$\{\boldsymbol{u}_m\},\{\boldsymbol{v}_m\}$を用いると，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$は美しい有限級数に書ける[2]．

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}=\sum_{m=1}^{M}w_m(\alpha)\frac{(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)}{\sigma_m}C^{-1}\boldsymbol{v}_m, \tag{12}$$

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

ここで，$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$ は $\boldsymbol{g}$ と $\boldsymbol{u}_m$ 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，$w_m(\alpha)(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)/\sigma_m$ はスカラーだから，右辺はこれを係数とする画像 $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$ の重ね合わせ（線形和）になっている．ということは，$\{\boldsymbol{u}_m\}$，$\{C^{-1}\boldsymbol{v}_m\}$ はそれぞれ観測データ $\boldsymbol{g}$ と画像 $\boldsymbol{f}$ の基底系で，$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)/\sigma_m$ 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，$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)/\sigma_m$ 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（$\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_M$）に並べると，経験的に，$m$ の増加とともに基底 $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$，$\boldsymbol{u}_m$ 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 $\{C^{-1}\boldsymbol{v}_m\}$ 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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ を構成する基底 $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$ がどんな画像かを見ておこう．実例を**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 $w_m(\alpha)(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)/\sigma_m$ を付けて重ね合わせると $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ になる．正値（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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ は負値を取り得る．また，係数のなかの内積 $(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$ 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，実例を見て考えよう．$C=I$ 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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ 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 $\boldsymbol{g}$ に白色雑音を加えているので，$\boldsymbol{g}$ のスペクトル係数$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$ 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$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$ 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．この実例では，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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ 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 α（>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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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$\|H\boldsymbol{f}(\alpha)-\boldsymbol{g}\|^2$ の大きい解（雑音を含むデータ $\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ の $\boldsymbol{g}$ 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]．

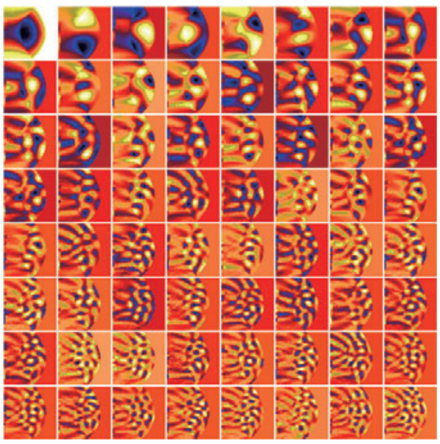


図 8　基底画像の実例：プリンストン大学球状トカマク NSTX 装置の接線方向からの 2 次元 CT．$C^{-1}\boldsymbol{v}_m$（$m=1, 2, \cdots, 64$）を左上から右下へ辞書的に表示．C にラプラシアン演算子を使用．

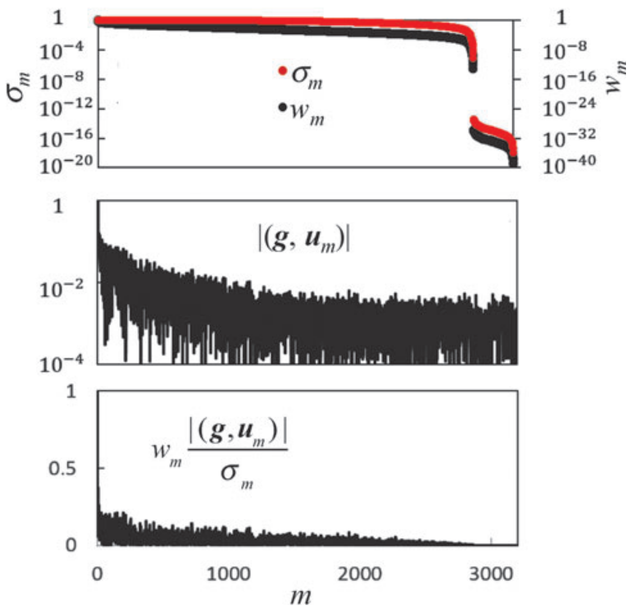


図 9　LHD の 3 次元 CT（$M=3{,}196$，$N=16{,}188$）のための数値シミュレーション．Tikhonov 解の（上）特異値 σ_m と Tikhonov 窓 w_m，（中）投影データのスペクトル係数$(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$，（下）再構成画像 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ のスペクトル係数．最初の番号 $m=1$ での値を 1 に規格化した相対表示．GCV 最小の α 値を採用[7]．

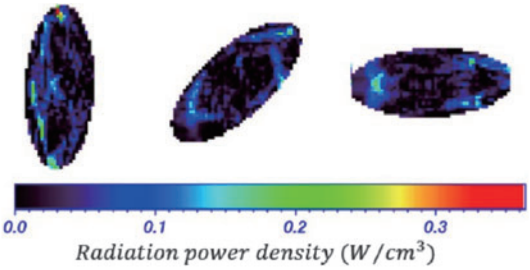


図10　図９（下）のスペクトル係数から得られる LHD プラズマの３次元再構成画像 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$：図６と同じトロイダル角 ϕ におけるポロイダル断面像で表示．負値は黒の底打ちで表示[6]．

図10の再構成画像を**図６**（下）の逆投影画像 $H^T\boldsymbol{g}$ と比べると，逆演算 $(\alpha I+H^TH)^{-1}$ 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 $\|\boldsymbol{f}\|^2$ 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，放射崩壊がトー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 $w(\alpha)$ による高周波成分の削り取りであるからには，$w(\alpha)$ をステップ関数 $w_m=1$（$1\leq m\leq M_{\mathrm{C}}$），$=0$（$M_{\mathrm{C}}<m\leq M$）にして切り落としても，実用的に良いかも知れない．これを Truncated SVD（TSVD）法と言う．

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{TSVD}}=\sum_{m=1}^{M_{\mathrm{C}}}\frac{(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)}{\sigma_m}\boldsymbol{v}_m \tag{13}$$

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，数理的に検討された[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 $\|\boldsymbol{f}\|^2$（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って許されよう，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 $\|C\boldsymbol{f}\|^2$ 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 $\|C\boldsymbol{f}\|^2$ がある値に等しい」とき，$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$ 最小の $\boldsymbol{f}$（観測データ $\boldsymbol{g}$ に最も忠実な画像 $\boldsymbol{f}$）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 $\|\boldsymbol{f}\|^2$（全光量）がある値としたとき，$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$ 最小の画像 $\boldsymbol{f}$ 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 $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$ 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と変形できる．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，$\boldsymbol{f}=H_{\mathrm{MA}}\boldsymbol{f}'$（$H_{\mathrm{MA}}$：移動平均の演算子）を（９）式に代入して，$\boldsymbol{f}'$ 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 プラズマをトー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

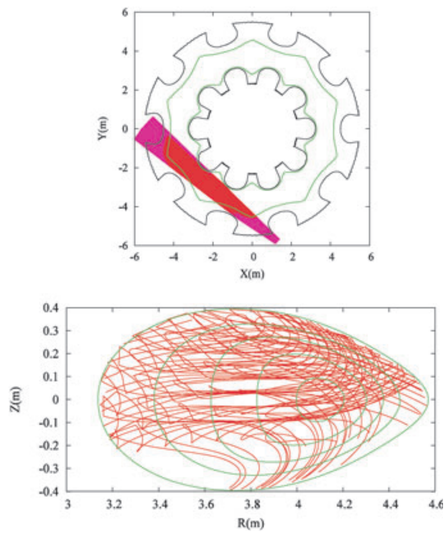


図11　LHD プラズマの接線方向 CT：真空紫外線望遠鏡の（上）実空間および（下）ポロイダル断面に射影された視線配置．緑線は磁気面を表わす[19]．

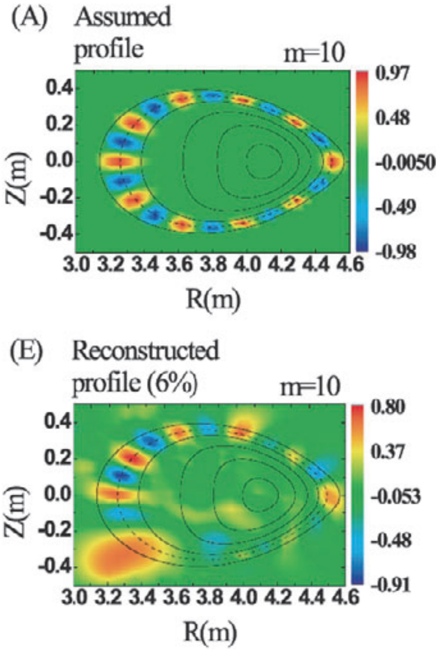


図12 LHD プラズマ揺動の(上)ファントム，(下)6％の雑音を加えた投影データから得た再構成画像．揺動だから負値がある．図中の m はポロイダルモード数[19]．

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）に設定されてはいるが，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^TC 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 $C\boldsymbol{x}=\boldsymbol{c}$（$\boldsymbol{c}$ 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

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\|\alpha^{1/2}C\boldsymbol{f}-\boldsymbol{0}\|^2+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \qquad (14)$$

と書けば，$\alpha^{1/2}C$ と H，$\boldsymbol{0}$ と $\boldsymbol{g}$ 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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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 $\boldsymbol{f}_T$ を求めたとき，$\ln\|C\boldsymbol{f}_T\|^2$ と $\ln\|H\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}-\boldsymbol{g}\|^2$ 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 $\boldsymbol{f}$ は観測データ $\boldsymbol{g}$ に関して線形である．したがって，$\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{g}$ 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，$\boldsymbol{g}$ 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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ に対して，解更新するなかで負になった画素値 f_n を正値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，正値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±20°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 $H^T\boldsymbol{g}$ 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

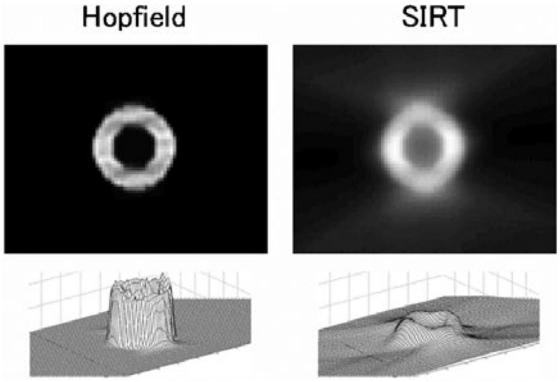


図13 電子顕微鏡 CT の投影角欠損を想定した2次元再構成の数値シミュレーション（ファントムは円環）：SIRT法とHopfield 法の再構成画像（平面表示と立体表示）[28].

的に与えつつ正値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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ において，第1項の $\|C\boldsymbol{f}\|^2$ を対数のはいった非線形関数に置き換えて次式とし，画素値 f_n を正値化する．

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha\sum_{n=1}^{N}f_n\ln f_n+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \tag{15}$$

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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ を $\boldsymbol{f}$ の各成分で微分して0と置くと，

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

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 $\boldsymbol{f}^{(0)}$ を値1の一様画像とすると，次の解 $\boldsymbol{f}^{(1)}$ は

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

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．$\boldsymbol{f}^{(0)}$ 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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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 $\|\boldsymbol{f}\|^2$ 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．$\|\boldsymbol{f}\|^2$（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，正値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．$\|\boldsymbol{f}\|^2$ 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 $\|C\boldsymbol{f}\|^2$ 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

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

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 $f(\boldsymbol{r})\cong 0$ 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 $f(\boldsymbol{r})$ 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値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 $f(\boldsymbol{r})$ 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予見できれば，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 $f(\boldsymbol{r}')$ を基底 $b_n(\boldsymbol{r}')$ の重ね合わせ

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

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 $f(\boldsymbol{r}')$ に代入すれば，

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

となる．これは観測量 $g(\boldsymbol{r})$ の級数展開であり，$b_n(\boldsymbol{r}')$ の線形変換 $B_n(\boldsymbol{r})$ が基底になっている．線積分型 CT では，基底 $b_n(\boldsymbol{r}')$ の投影 $B_n(\boldsymbol{r})$ 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 $f(\boldsymbol{r}')$ と $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r})$ 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（$n=1,2,\cdots,N_B$）を決めたら，(16)式に用いて画像 $f(\boldsymbol{r}')$ 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，$\{b_n(\boldsymbol{r}')\}$, $\{B_n(\boldsymbol{r})\}$ 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 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のとき，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ずる．

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（ウィルス粒子 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“$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2=$ 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 $\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ と書き，距離にあたるものを $d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})$ とすると，ラグランジュ関数は

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \tag{18}$$

となる．理論に引っ張られ過ぎないよう，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 $\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ にするのも一案であろう．$d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})$ として，ユークリッド距離の 2 乗

$$d_{\rm E}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})=\|C(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}_{\rm ref})\|^2,\ C=I \tag{19}$$

とか Kullback-Leibler（KL）距離

$$d_{\rm KL}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})=\sum_{n=1}^{N} f_n \ln\frac{f_n}{ef_{{\rm ref},n}} \tag{19'}$$

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

(19)式の $d_{\rm E}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\rm ref})$ を用いるとき，$\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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，

$$\boldsymbol{f}_{\rm T}=(\alpha C^TC+H^TH)^{-1}H^T(\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\rm ref})+\boldsymbol{f}_{\rm ref} \tag{20}$$

が解となる（付録Ⅴ）．$\boldsymbol{f}_{\rm ref}=\boldsymbol{0}$ と置けば，上式は(11)式に帰着する．ここで，$H\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ は参照画像 $\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ 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 $\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ から再構成を行い，得られた画像に $\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ 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．

$$\boldsymbol{f}_{\rm T}=\sum_{m=1}^{M} w(\alpha)\frac{(\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\rm ref},\boldsymbol{u}_m)}{\sigma_m}C^{-1}\boldsymbol{v}_m+\boldsymbol{f}_{\rm ref} \tag{21}$$

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 $\boldsymbol{f}_{\rm ref}$ 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 $d_{\mathrm{KL}}(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})$ 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．$\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}$ を $f_{\mathrm{ref},n} = 1/e$（$n = 1, 2, \cdots, N$）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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}$ とするのも一案であろう．

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 $\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{f}$ であるという条件のもとで，$H\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{g}$ 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

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

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 $\boldsymbol{g}$ を固定して $\ln P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ を最大にする $\boldsymbol{f}$ は何かと考えると，$\|H\boldsymbol{f} - \boldsymbol{g}\|^2$ 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 $(H\boldsymbol{f})_m$ のポアソン分布に従うと考えると，条件付き確率は

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

となる．この対数の最大化は

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

を最小化する $\boldsymbol{f}$ 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（$m = 1, 2, \cdots, M$）に固定されていることに注意されたい．

(24)式の $\Phi_{\mathrm{ML}}(\boldsymbol{f})$ は $\boldsymbol{f}$ 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]：

$$\boldsymbol{f}^{(k+1)} = D^{(k)}\boldsymbol{f}^{(k)} \tag{25}$$

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 $\boldsymbol{g}$ と $\boldsymbol{f}^{(k)}$ の投影 $H\boldsymbol{f}^{(k)}$ との対応する成分間の比 $\rho_m^{(k)} = g_m/(H\boldsymbol{f}^{(k)})_m$（$m = 1, 2, \cdots, M$）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 $\boldsymbol{e}_{\mathrm{c}}$ の逆投影画像 $H^T\boldsymbol{\rho}^{(k)}$ および $H^T\boldsymbol{e}_{\mathrm{c}}$ を求める．これら二つの逆投影画像における画素値の比

$$d_n^{(k)} = (H^T\boldsymbol{\rho}^{(k)})_n / (H^T\boldsymbol{e}_{\mathrm{c}})_n \qquad (n = 1, 2, \cdots, N) \tag{25'}$$

を $D^{(k)}$ の対角要素とする．(25)式の乗算更新からすると，h_{mn}，g_m すべてが非負の逆問題であれば，初期解 $\boldsymbol{f}^{(0)}$ 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．

$\Phi_{\mathrm{ML}}(\boldsymbol{f})$ 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ろうか．

それはともかく，(22)式と(23)式の尤度を見れば，$\Phi_{\mathrm{ML}}(\boldsymbol{f})$ の最小化は $\|H\boldsymbol{f} - \boldsymbol{g}\|^2$ の最小化と対応している．とあれば，$\Phi_{\mathrm{ML}}(\boldsymbol{f})$ 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，

$$\Lambda(\boldsymbol{f}) = \alpha d(\boldsymbol{f}, \boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}) + \Phi_{\mathrm{ML}}(\boldsymbol{f}) \tag{26}$$

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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}$ 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 $\boldsymbol{g}$ が与えられたとき，未知画像 $\boldsymbol{f}$ は何であるか？　この確率は条件付き確率 $P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ である．これが最大になる $\boldsymbol{f}$ を求めてはどうか？　ベイズ定理を使うと，前節で扱った $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ と次式でつながる．

$$P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g}) = \frac{P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})P(\boldsymbol{f})}{P(\boldsymbol{g})} \tag{27}$$

ベイズ推定論では，$P(\boldsymbol{f})$ を事前確率，$P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ を事後確率と言う．観測データ $\boldsymbol{g}$ が生起する前および後の $\boldsymbol{f}$ の生起確率という意味である．この定理は，具体的な $\boldsymbol{g}$ が生起したことによって，観測者にとって画像 $\boldsymbol{f}$ 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 $P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ が最大になる $\boldsymbol{f}$ を求めるとき，分母の $P(\boldsymbol{g})$ は $\boldsymbol{f}$ と無関係な定数である．そして，仮に $P(\boldsymbol{f})$ を $\boldsymbol{f}$ 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，“$P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ の最大化”は前節の“$P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ の最大化”（最尤推定）に帰着する．言い換えれば，$P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ の最大化による $\boldsymbol{f}$ の推定は，右辺の分子の右端に $P(\boldsymbol{f})$ が付いただけ最尤推定の拡張である．確率 $P(\boldsymbol{f})$ は，観測を行う前から，「物体画像 $\boldsymbol{f}$ がそもそも $\boldsymbol{f}$ 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ずる．

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，$P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ 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．

$$-\ln P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g}) = -\ln P(\boldsymbol{f}) + \frac{1}{2\sigma^2}\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 + \mathrm{const.} \tag{28}$$

ここで $P(\boldsymbol{f})$ が $\boldsymbol{f}$ 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 $-\ln P(\boldsymbol{f})$ は正則化の項ではないか．

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

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

を(28)式の右辺に用いると，

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

となる．よって，この $-\ln P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ の最小化（$P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ 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，$P(\boldsymbol{f})$ をラプラス分布

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

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 $P(\boldsymbol{f})$ 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で述べたように，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)式の事前確率を拡張し，画像値 f_n（$n = 1, 2, \cdots, N$）が共分散行列 $\Sigma_{\boldsymbol{f}}$ の N 次元正規分布

$$P(\boldsymbol{f}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}|\Sigma_{\boldsymbol{f}}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})^T \Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})\right] \tag{31}$$

で生起するものと見なそう．$\Sigma_{\boldsymbol{f}}$ 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)式の事前確率 $P(\boldsymbol{f})$ と(22)式の条件付き確率 $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ を(27)式の分子に用いて，この $P(\boldsymbol{f}|\boldsymbol{g})$ を最大にする $\boldsymbol{f}$ を求めると，次式が得られる（付録Ⅵ）．

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta}) = (\sigma^2\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1} + H^T H)^{-1} H^T(\boldsymbol{g} - H\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}) + \boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}} \tag{32}$$

ここで，左辺のベクトル $\boldsymbol{\theta}$ は，右辺の $\sigma^2\Sigma_{\boldsymbol{f}}$ に含まれる未知パラメータ λ_k と σ^2（観測データ $\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{\theta} = [\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_N, \sigma^2]^T$ である．上式を(20)式の Tikhonov 正則化の解 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ と比べると，正則化項の $\alpha C^T C$ が $\sigma^2\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}$ に置き換わっている．$\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}$ をこのように拡張した上で，$\sigma^2\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}$ に含まれる $\boldsymbol{\theta}$ をうまく決めれば，再構成画像 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ 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 $\boldsymbol{g}$ に正規性の誤差が加わったとし，(22)式右辺の $\boldsymbol{f}$ に $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ を代入すれば，尤度 $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta}))$ すなわち $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{\theta})$ は

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

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（$k = 1, 2, \cdots, N$）および σ^2）を決める．実際の計算では，この $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{\theta})$ 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，$\sigma^2\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1} + H^T H$ 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 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ 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 $\boldsymbol{g}$ に対して，最尤推定で

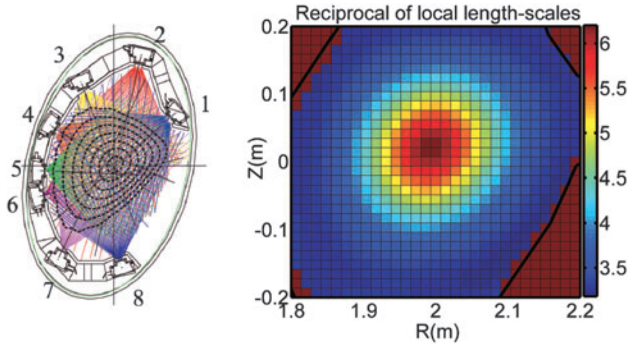


図14　Max-Planck 研究所のステラレータ装置 W7-AS の軟Ｘ線放射型 CT：(左)ポロイダル断面に設置されたピンホールカメラ８台の視線配置，(右) 求められた平滑化パラメータ $1/\lambda_k$ の空間分布[43].

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で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確かめたくなる．

この再構成においては，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}=\boldsymbol{0}$ 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 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ 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^TC 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 $\boldsymbol{f}$ を基底画像 $\boldsymbol{b}_n$ の重ね合わせ

$$\boldsymbol{f}=\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{B}}}a_n\boldsymbol{b}_n \tag{34}$$

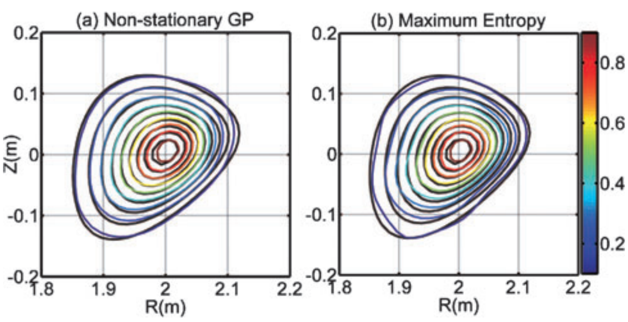


図15　W7-AS プラズマの再構成画像：（左）新しいベイズ再構成法，（右)最大エントロピー法[43].

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 $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ は

$$P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}\|\boldsymbol{g}-\sum_{n=1}^{N_B}a_nH\boldsymbol{b}_n\|^2\right] \tag{35}$$

となる．右端の $H\boldsymbol{f}$ において，演算子（行列）H の線形性を用いた．$H\boldsymbol{b}_n$ は基底 $B_n(\boldsymbol{r})$ の離散表現である．パラメータ a_n $(n=1,2,\cdots,N_{\mathrm{B}})$ および σ^2 を $\boldsymbol{\theta}$ で表わすと，未知ベクトル $\boldsymbol{f}$ が未知の $\boldsymbol{\theta}$ に集約されているから，上式の $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ は $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{\theta})$ と書いてよい．そして，(35)式を見ればすぐわかるように，$P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{\theta})$ の $\boldsymbol{\theta}$ 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 $M\to\infty$ 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「非定常ガウス過程」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っ

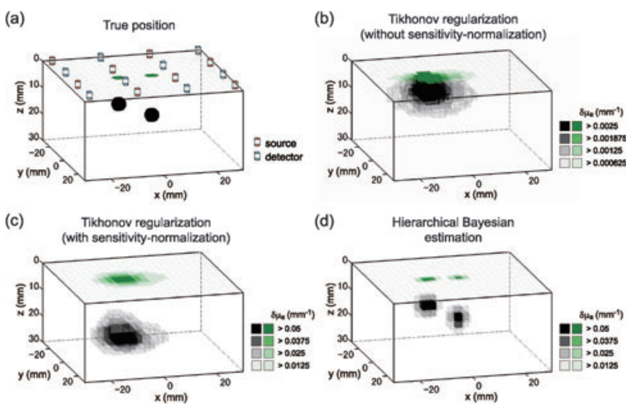


図16　拡散光トモグラフィの３次元再構成：(a)送受信点の配置とファントム，(b)Tikhonov 解（$C=I$），(c)C を視線の多い領域で強い正則化を与える対角行列に変更した再構成像，(d)ベイズ理論から分解能を改善した再構成像．脳表面へのある種のマッピング（topography）が緑色で示されている[46].

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 $H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ および最小2乗法の正規方程式 $(H^TH)\boldsymbol{f}=H^T\boldsymbol{g}$ 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，$\|\boldsymbol{f}\|^2$ ないし $\|C\boldsymbol{f}\|^2$ 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 $\boldsymbol{f}$ であれば，

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

である．これを l_2 ノルムと言う．これに対して

$$\|\boldsymbol{f}\|_1=\sum_{n=1}^{N}|f_n| \tag{37}$$

と定義される $\|\boldsymbol{f}\|_1$ を l_1 ノルムと言う．ラグランジュ関数 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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 $d_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{f},\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})$ 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 $f(\boldsymbol{r})$ の例えば勾配（gradient）$\nabla f(\boldsymbol{r})$ 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

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

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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ は非線形である．(37)式の $\|\boldsymbol{f}\|_1$ は原点で微分できない．$\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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．$H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ 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 $\boldsymbol{f}$ を再生する逆問題を Blind Deconvolution（BD）と言うが，$\boldsymbol{f}$ 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

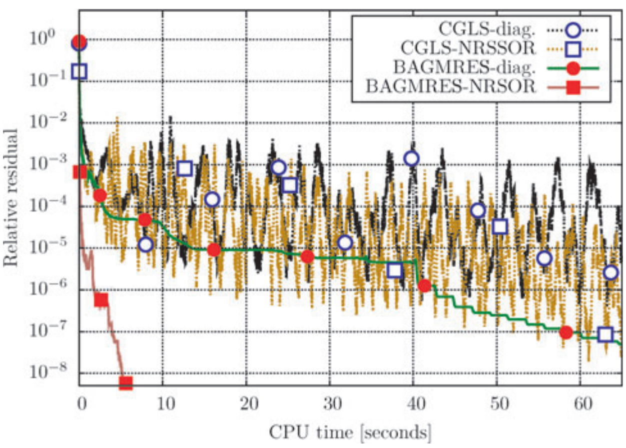


図17　ある最小2乗問題に対する収束の速さ：他の解法と比べて，Krylov 部分空間を用いる新しい解法（左下）は残差が急速に減少する[58]．

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による正値化と同様な現象が，Tikhonov正則化でも起こる[59]．また，直接解法を含めて，l_2 数理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と，地図の上で4つの大きな島と小さな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ずる．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 $\boldsymbol{d}_i$ を列ベクトルにもつ横に長い辞書行列 B_{D} をつくる．$\boldsymbol{d}_i$ 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．

$$B_{\mathrm{D}}\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{d}_1 & \boldsymbol{d}_2 & \cdot & \cdot & \cdot\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\\ \cdot\\ \cdot\\ \cdot\end{bmatrix}=\sum_i a_i\boldsymbol{d}_i \tag{39}$$

ここで，$\boldsymbol{a}$ 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 $\boldsymbol{f}$ が入ったとき，「残差2乗和 $\|\boldsymbol{f}-\boldsymbol{B}_{\mathrm{D}}\boldsymbol{a}\|^2$ がある値に等しい」を要求して，l_0 ノルム $\|\boldsymbol{a}\|_0$ が最小となるよう係数ベクトル $\boldsymbol{a}$ を決める．形式的にラグランジュ関数を書けば

$$\Lambda(\boldsymbol{a})=\alpha\|\boldsymbol{a}\|_0+\|B_{\mathrm{D}}\boldsymbol{a}-\boldsymbol{f}\|^2,\quad \|\boldsymbol{a}\|_0=\sum_i|a_i|^0 \tag{40}$$

であるが，$\|\boldsymbol{a}\|_0$ 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 $\boldsymbol{f}$ は明るさ違いの $\boldsymbol{d}_k$ であったと認識できる．一つにならなくても，画像 $\boldsymbol{f}$ の分類（clustering）に使えるだろう．項数が少なくて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，良い辞書ができたら，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，$H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ の $\boldsymbol{f}$ に制約を与えつつ $\boldsymbol{g}$ 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”．

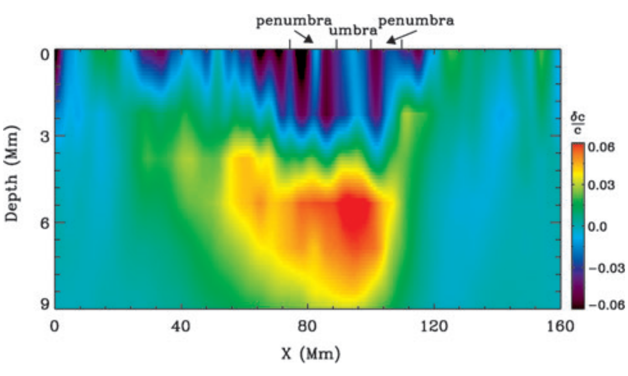


図18 太陽観測衛星「ひので」のデータから再構成された黒点内部の様子：音速（摂動分）の3次元空間分布の鉛直断面．日震波CTでは3次元流れ場も推定される．「ひので」が黒点スケールの高分解を可能にした[73]．

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みた．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．今日の目で見れば，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 $S(\boldsymbol{k},\omega)$ の測定がなされてきた．周知のように，$S(\boldsymbol{k},\omega)$ は電子密度の揺らぎ $n_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{r},t)$ のパワースペクトル．$\langle|n_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{k},\omega)|^2\rangle$ 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 $n_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{k},\omega)$ 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る．驚くべき進歩である．このとき，目標を $S(\boldsymbol{k},\omega)$ 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 $S(\boldsymbol{r},\omega)$ を求めておいて，位置の差ベクトル $\boldsymbol{r}$ についてフーリエ変換することになる．このとき $S(\boldsymbol{r},\omega)$ の $\boldsymbol{r}$ に欠損があれば，逆問題解法を使えばよい．しかし $S(\boldsymbol{r},\omega)$ 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 $c(\boldsymbol{r})$（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 $S(\boldsymbol{k},\omega)$ をゴールと見なして，式の運びを急ぎ過ぎるものを感ずる．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ろうか．

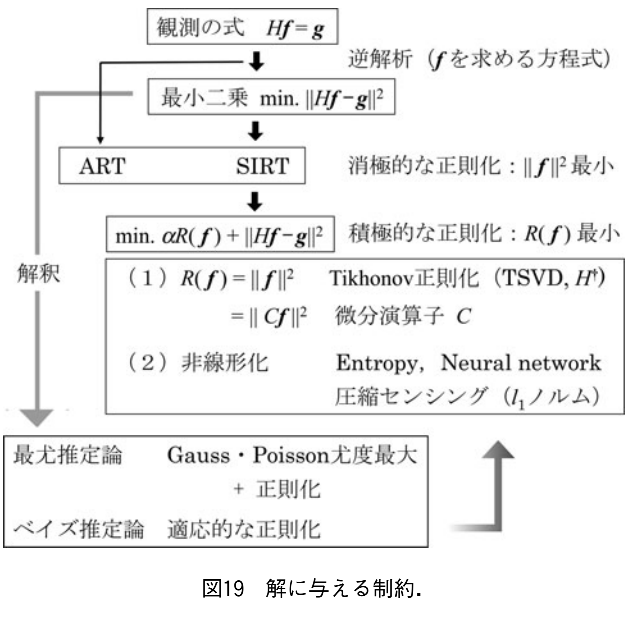


図19　解に与える制約．

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, Wellesley, 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] 杉原正顯 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*

(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 $H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ に対して，次の特定の反復解法を指す．

第 k 回目の解 $\boldsymbol{f}^{(k)}$ に加える修正項を $\Delta\boldsymbol{f}$ とする．

$$\boldsymbol{f}^{(k+1)}=\boldsymbol{f}^{(k)}+\Delta\boldsymbol{f} \tag{I-1}$$

[i]ART の Row-action 更新：

$$\boldsymbol{f}^{(0)}=\boldsymbol{0} \tag{I-2}$$

$$\Delta\boldsymbol{f}=\frac{g_m-(H\boldsymbol{f}^{(k)})_m}{\|\boldsymbol{h}_m\|}\boldsymbol{h}_m \qquad (m=1,2,\cdots,M) \tag{I-3}$$

ここで　$\boldsymbol{h}_m$ は H の第 m 行ベクトルの転置である．第 m 式の残差 $g_m-(H\boldsymbol{f}^{(k)})_m$ を求め，その行における係数 h_{mn} の比率を考慮して $\boldsymbol{f}^{(k)}$ の各画素値に分配する．Kaczmarz 定理は上式によるが，実際には $\Delta\boldsymbol{f}$ 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 $\boldsymbol{f}^{(k)}$ 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

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

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

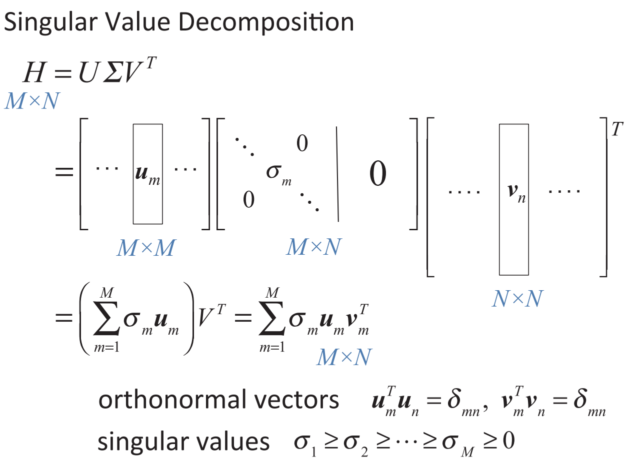
とする．D_ρ は正値の対角要素を持つ対角行列である．線積分型 CT であれば，逆投影画像 $H^T\boldsymbol{g}$ から出発して，視線の多く通る画素ほど小さく重み付けるある行列 D_ρ を用いると，$\|D_\rho^{1/2}\boldsymbol{f}\|$ 最小の解に収束する．数理系ではこの種の解法を Landweber 反復法と言う．D_ρ^{-1} を単なる緩和係数 ρ（>0）とし，初期解を $\boldsymbol{0}$ とすることが多い．このとき，ρ 値が係数行列 H に関係するある条件を満たせば一般逆行列の解 $H^\dagger\boldsymbol{g}$ 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 $U=\{\boldsymbol{u}_m\,(m=1,2,\cdots,M)\}$，$V=\{\boldsymbol{v}_n\,(n=1,2,\cdots,N)\}$ を生成する．$\boldsymbol{u}_i^T\boldsymbol{u}_j$ および $\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_j$ はベクトル間の内積であるのに対して，$\boldsymbol{u}_m\boldsymbol{v}_m^T$ 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 $\boldsymbol{u}_m\boldsymbol{v}_m^T$ 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^TA を係数行列とするとき，$A=U\Sigma V^T$ を用いると $A^TA=V(\Sigma^T\Sigma)V^T$ となる．図に示された Σ からすると，$\Sigma^T\Sigma$ は $\sigma_1^2,\sigma_2^2,\cdots,\sigma_M^2,0,\cdots,0$ を対角要素とする N 次対角行列である．これを行列 A^TA 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 $H\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ 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．



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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ 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 $\boldsymbol{p}^T$ による観測値 $q=\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{f}$（$\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{f}$ の内積）を得て，$(q-\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{f})^2$ 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，

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha\|C\boldsymbol{f}\|^2+\beta(q-\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{f})^2+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \qquad (Ⅲ\text{-}1)$$

となる．このとき，$\beta\boldsymbol{p}^T\boldsymbol{f}$ と βq を行列 H とベクトル $\boldsymbol{g}$ 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

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha\|C\boldsymbol{f}\|^2+\|H'\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}'\|^2 \qquad (Ⅲ\text{-}2)$$

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 $\boldsymbol{g}$（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 $(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)$ は $\boldsymbol{g}^T\boldsymbol{u}_m$ または $\boldsymbol{u}_m^T\boldsymbol{g}$ と書ける．内積はスカラーだから，ベクトル $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$ の右に移して $\boldsymbol{g}$ をくくり出せば，

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}=\left[\sum_{m=1}^{M}w_m(\alpha)\frac{1}{\sigma_m}C^{-1}\boldsymbol{v}_m\boldsymbol{u}_m^T\right]\boldsymbol{g} \qquad (Ⅳ\text{-}1)$$

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

$$\boldsymbol{g}=\sum_{m=1}^{M}(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)\boldsymbol{u}_m \qquad (Ⅳ\text{-}2)$$

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

$$\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}=\sum_{m=1}^{M}[1-w_m(\alpha)](\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)\boldsymbol{u}_m \qquad (Ⅳ\text{-}3)$$

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

$$\varepsilon^2(\alpha)=\|H\boldsymbol{f}_{\mathrm{T}}-\boldsymbol{g}\|^2=\sum_{m=1}^{M}[1-w_m(\alpha)]^2(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)^2 \qquad (Ⅳ\text{-}4)$$

が得られる．(12’)式から，この $\varepsilon^2(\alpha)$ 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 $b_n(\boldsymbol{r}')$ の線形変換が観測データの基底 $B_n(\boldsymbol{r})$ になるが，Tikhonov 正則化では

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

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 $C^{-1}\boldsymbol{v}_m$ の投影が投影の基底 $\boldsymbol{u}_m$ になる．σ_m は $\boldsymbol{u}_m$ 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$\{C^{-1}\boldsymbol{v}_m\}$, $\{\boldsymbol{u}_m\}$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

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{TSVD}}=\left[\sum_{m=1}^{M_{\mathrm{C}}}\frac{1}{\sigma_m}C^{-1}\boldsymbol{v}_m\boldsymbol{u}_m^T\right]\boldsymbol{g} \tag{Ⅳ-6}$$

$$\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\mathrm{TSVD}}=\sum_{m=M_{\mathrm{C}}+1}^{M}(\boldsymbol{g},\boldsymbol{u}_m)\boldsymbol{u}_m \tag{Ⅳ-7}$$

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，$\boldsymbol{f}_{\mathrm{TSVD}}$ 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

$$H^{\dagger}=\sum_{m=1}^{M_{\mathrm{C}}}\frac{1}{\sigma_m}\boldsymbol{v}_m\boldsymbol{u}_m^T \tag{Ⅳ-8}$$

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 $\boldsymbol{v}_m\boldsymbol{u}_m^T$ 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

$$\Lambda(\boldsymbol{f})=\alpha\|C(\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})\|^2+\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2 \tag{Ⅴ-1}$$

を最小化する $\boldsymbol{f}$ を求めよう．この最小化は，$\|H\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}\|^2$ 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 $\boldsymbol{a}$ のノルム$\|\boldsymbol{a}\|$ の定義から，$\|\boldsymbol{a}\|^2=(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})=\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{a}$ が成り立つ．二つのベクトル $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ を縦に積み上げたベクトルについて，次の関係がある．

$$\left\|\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\ \boldsymbol{b}\end{bmatrix}\right\|^2=[\boldsymbol{a}^T\ \ \boldsymbol{b}^T]\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\ \boldsymbol{b}\end{bmatrix}=\sum_k a_k^2+\sum_k b_k^2 \tag{Ⅴ-2}$$

よって，

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

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 $\boldsymbol{g}$ 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 $\Lambda(\boldsymbol{f})$ を最小化するための正規方程式はただちに

$$\begin{bmatrix}H\\ \alpha^{1/2}C\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}H\\ \alpha^{1/2}C\end{bmatrix}\boldsymbol{f}=\begin{bmatrix}H\\ \alpha^{1/2}C\end{bmatrix}^T\begin{bmatrix}\boldsymbol{g}\\ \alpha^{1/2}C\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}\end{bmatrix} \tag{Ⅴ-4}$$

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

$$(\alpha C^TC+H^TH)\boldsymbol{f}=H^T\boldsymbol{g}+\alpha C^TC\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}} \tag{Ⅴ-5}$$

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 $P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ 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，$P(\boldsymbol{g}|\boldsymbol{f})$ はこれら σ_m^2 を対角要素とする対角行列 $\Sigma_{\boldsymbol{g}}$ 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．

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})=(\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}+H^T\Sigma_{\boldsymbol{g}}H)^{-1}H^T\Sigma_{\boldsymbol{g}}^{-1}(\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})+\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}} \tag{Ⅵ-1}$$

ここで，H^T の右に $\Sigma_{\boldsymbol{g}}^{-1}$ 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 $\Sigma_{\boldsymbol{g}}=\sigma^2I$ と置くと，$\Sigma_{\boldsymbol{g}}^{-1}=\sigma^{-2}I$ であるから，上式は

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})=\sigma^{-2}(\Sigma_{\boldsymbol{f}}^{-1}+\sigma^{-2}H^TH)^{-1}H^T(\boldsymbol{g}-H\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}})+\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}} \tag{Ⅵ-2}$$

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 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ 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 $\boldsymbol{f}_{\mathrm{ref}}=\boldsymbol{0}$ 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．