

研究展望

先端工学における逆問題解析の研究動向

小島 史男 (大阪工大)

1 はじめに

日本AEM学会では分科会「先端工学における逆問題解析手法の調査・研究」が平成4年度に発足し、研究会での話題提供と討論を行ってきた。またここで話題を提供していただいた内容をもとに、学会誌に関連の連載記事が組まれている。具体的な活動内容は、前号の分科会報告をみていただくことにして、ここでは、逆問題解析の内外の研究動向について、筆者の知る範囲でまとめてみたい。当学会の関心事は電磁場関連であるが、この記事では特にこれにこだわらず議論を進めていく。逆問題解析は、格別新しい言葉ではないが、この名前を関した国際会議や研究会がここ数年一種のはやりとなってきている。ところでこの言葉の意味するところは分野が異なるとかなり違うため、研究会の報告の質疑では、その理解の違いからくる議論のすれ違いも少なからず見られるようである。いうまでもないことであるが、理学、工学、医学あるいは社会学や経済学に至るまで、現在のあらゆる学問は基本的には逆問題と何らかの係わりをもっている。我々に提供されるところのさまざまなデータ(結果)から、その結果を生じさせる対象(原因)に対する情報を得るというプロセスにおいて、共通の手法は何かを探るということが逆問題に課せられている命題であると筆者は考えている。この言からすると、そもそも医学・工学の応用分野で逆問題に関連しないものはないといってよいことになる。この記事では、応用数学、工学における逆問題の捉え方とそれぞれの問題点をあげて、この方面の研究展望としたい。

2 数理科学における逆問題解析の捉え方

逆問題はもともと応用数学、数理科学の一分野として古くから研究されてきた。古典的な逆問題によれば、科学的な根拠に基づき、まず因果律を数学モデルにより表現する。このとき結果は、その数学モデルの解に相当し、結果を生ずる原因は数学モデルにおけるパラメータとして表現される。いま、このパラメータの集合を Q 、その要素を q であらわし、数学モデルを $\Phi(q)$ で表現することにしよう。逆問題とは、これに対応する観測データの集合 $Y = \{y\}$ をもとに、パラメータベクトル q を求める、すなわち

$$\Phi(q) = y \quad \text{for } \forall y \in Y \quad (1)$$

の解を求めることである。この問題はしばしば汎関数

$$J(q) = \|\Phi(q) - y\|_F^2 \quad (2)$$

の q に関する最小自乗推定問題として定式化される。これは、パラメータ推定問題としてよく知られており、天文学、コンピュータトモグラフィー、石油探査、医用診断など、数理物理学および工学において生ずる逆問題の多くは、(2) 式の最適化問題として解かれてきた。これらの逆問題に共通する悩みは、逆問題のほとんどがいわゆる不適切問題(不良設定問題とも呼ぶ)となることである。不適切問題とは大ざっぱにいうと(1) 式の解の一意性、存在性および解のデータに対する連続性のうちどれかひとつでも満足されない問題のことをいう。この不適切問題のおもな原因をあげると次のようになる。

(1) 解の一意性および存在性：

数学モデルの構造によっては、ひとつのデータ y について、(1) 式の解自体が存在しない、あるいは存在したとしても解の候補がいくつもあらわれる可能性がある。

(2) 解のデータに対する連続性：

データは通常観測雑音で乱されており、(2) 式の右辺の摂動にたいして、パラメータ q の連続的な変化が保証されていない。

応用数学の分野における逆問題の研究は現在この不適切問題に向けられているといってよい。ここではまず逆問題の数学的背景をおおまかに述べてみよう。その最も基本は可同定性の概念である。

定義 1. (可同定性)¹⁾：もし如何なる $q \in Q$ に対しても

$$\Phi(q) = \Phi(q^*) \implies q = q^* \quad (3)$$

であるなら、パラメータ q は $q^* \in \tilde{Q} \subset Q$ において可同定である。

明らかにこの定義は逆問題の一意性に関する定義で最も厳しい制約である。一般的にいて、この定義が広義に成立することは期待できないが、例えばこの性質が保持される条件を決定することは重要な問題となる。ロシアのノボルシスクの逆問題の研究グループは、地層構造推定で生ずる波動方程式における逆問題に関連して、積分-微分方程式系の解の性質を調べることにより、逆問題の適切性の条件を導いている²⁾。また発展方程式系モデルの逆問題については、作用素のスペクトルに注目して可同定性の研究が中桐らにより調べられている³⁾。またこれとは別にアメリカのニューヨーク大学のクーロン研究所のグループは 1980 年代前半からおもに電気インピーダンス法を用いた非破壊検査への応用を目的として、楕円型偏微分方程式の係数同定にいわゆる Hilbert Uniqueness Method (HUM) 法を用いて、内部の欠陥の状態を推定するために境界データから材

料内部の係数が決定できる条件を詳細に調べた⁴⁾。これら一連の研究は上述した不適切性の (1) の問題に対する研究成果であり、あくまでパラメータ空間とそのモデル出力との写像の性質を調べているにすぎない。工学への応用を考えると、上述の (2) の問題、すなわち与えられた観測データとパラメータとの連続性の保持が重要な問題となってくる。逆問題における重要な概念に可同定性のほかにもうひとつ以下に示す安定性がある。

定義 2. (安定性)¹⁾：いま観測データ $y \in Y$ に関して

$$J(\hat{q}_y) = \min_{q \in Q} \|\Phi(q) - y\|_F^2 \quad (4)$$

の局所解 $\hat{q}_y$ が存在すると仮定する。

いま観測データ y の摂動を y_δ であらわそう。この摂動データ y_δ の (3) 式に対する局所解がパラメータ $\hat{q}_{y_\delta}$ に対する近傍系の要素 $\hat{q}_{y_\delta}$ として存在するとしよう。このとき、以下の不等式

$$\|\hat{q}_y - \hat{q}_{y_\delta}\|_Q \leq K \|y - y_\delta\|_F^{1/\beta} \quad (5)$$

を満足する定数 K, β が存在するならば、パラメータ q は局所解 $\hat{q}_y$ において出力自乗安定であるという。

安定性の検証は実際の逆問題解析で観測雑音の逆解に対する影響度を評価するうえで非常に重要な意味をもつ。この分野におけるロシアの数学者の研究は非常に古くからおこなわれており、特にチコノフの正則化に関する研究はあまりにも有名である。その成果は多数の成書にまとめられているが、そのなかでも文献⁵⁾はよく知られている。チコノフの正則化は (2) 式の右辺に正則項を付加し

$$J(q) = \|\Phi(q) - y\|_F^2 + \lambda^2 \|q\|_Q^2 \quad (6)$$

の q に関する最適化を実施することである。

(6) 式で Tikhonov の正則化を行わない ($\lambda \equiv 0$) 場合、観測雑音のパワーより低いレベルまで適合した最適化を行うことになり数値解は不安定となる。このことを回避するために、観測雑音の上界を σ とし、(6) 式の残差項が

$$\|\Phi(\hat{q}_\lambda) - y\|_F^2 = \sigma^2 \quad (7)$$

となるように係数 λ を選択する。これは Morozov の Discrepancy Rule としてよく知られている。この定数を求めるには誤差の上界 σ^2 が既知であることが要請されており、実際問題へこの法則を適用することは容易ではない。そこで観測雑音の上限 σ^2 に関する先験情報なしに最適な正則化係数を求める方法についていろいろな方法が古くから考えられてきた。すでに本学会の連載記事でも述べた L-curve による図式的解法は、正則化係数の実用的な選択法としてよく知られている⁶⁾。P.C.Hansen や北川らは線形最小自乗問題にこの方法を適用し、その解析を詳細におこなった⁷⁾⁸⁾。しかしながら、一般的な非線形の逆問題においては、逆解の解析的な構成がきわめて困難であるために、いまのところ L-curve の解析は理論的に行われていない。筆者は、形状推定問題にこの方法が適用できることを計算実験により示している⁹⁾。この安定性に関しては、G. Chavent の研究は安定性の評価を具体的に与える手段として注目し、定義2の不等式が成立するには、観測データの属する空間の凸性が大きく貢献している。Chavent は観測空間での距離の概念を拡張し、パラメータ空間における軌跡の観測空間への写像により構成されるモデル出力の軌跡の幾何学的構造を調べ、それらの軌跡の集合により構成される空間が凸空間からどの程度はなれているかの評価を Size $\times$ Curvature と呼ばれる条件のもとで導出した¹⁰⁾。いまのところこの方法の実際問題への貢献は明かではないが、(5)式の不等式の構成法を具体的に示した最初の研究である。また最近になって、山本は上述の安定性が Lions らの提唱している可制御性 (Exact Controllability) と深く関係していることを文献¹¹⁾で明かにしている。本節では逆問題の不適切性に関連する研究が可同定性と安定性という観点からおこなわれていることを説明した。この方面の研究に関する情報は昨年(94)の夏大阪工大で開催された第2回数値科学における逆問題に関する国際会議 (IPES'94) から入手することができる。この会議の Selected Paper は学術雑誌 Journal of Inverse and Ill-posed Problems

の特別号としてまもなく発刊される予定である。また雑誌数値科学において山本・磯らによる逆問題の紹介記事がでている¹²⁾。そこでは、数学において従来問題となってきた解の存在性や一意性よりもむしろ逆問題では安定性の評価が重要であることが述べられている。

3 逆問題解析とインテリジェント技法

数値科学における逆問題解析を工学へ応用する際のボトルネックは実システムにおける入出力関係のモデリングである。数学モデルを構成する支配方程式およびそれに付随する境界条件は実システムの構成ごとに変更する必要がある、これには多大の労力が必要となる。さらに、現在対象とされている工学の諸問題のなかには、このような定式化が困難である場合にしばしば遭遇する。現実数学モデルを構築することが不可能であったり、かりにモデル化できたとしても、現状のコンピュータの性能では計算処理時間がかかりすぎて役に立たない場合も多い。このような困難を打ち破る手法として、インテリジェント技術を逆問題に適用する試みが盛んになされている¹³⁾。本節では、逆問題において試みられているインテリジェント技法のいくつかを紹介し、逆問題におけるこの手法の適用の現状と将来について概括する。ニューラルネット、遺伝的アルゴリズムなどは前述の逆問題解析における不適切性を解決できる方法として期待されており、現在盛んに研究されている。例えば前述の不適切問題の(1)の問題に関する一般的な解決法は未だ確立されていない。そこでこの入出力関係を多層構造をもつニューラルネットワークで置き換えることができれば、モデリングに必要なシステム開発の省力化が計れる。この方面の研究が現在最も成果があがっている方法といってよいであろう。いまひとつは、(2)の問題に関する対策である。例えば、(6)式の最適化を実行する場合、従来の方法では、パラメータ q の評価汎関数の感度を計算し、準ニュートン法や共役勾配法を用いて非線形最適化を実施していた。しかしながら、観測雑音の存在は上述したように、連続性をくずしてしまうので、推定器の観

測雑音に対するロバスト性に問題が生ずる。もちろん、チコノフの正則化などすでにいろいろな対策がなされてきたが、未だ充分とはいえない。そこで考えられたのが、ボルツマンマシンや遺伝アルゴリズム等のいわゆる組み合わせ最適化手法である。この方法によれば、少なくとも上述の第2の問題は回避される。現在逆問題で考えられるインテリジェント技法の多くはこれらのどちらか、あるいは、その統合化をはかったものといつてよい。

3.1 逆問題とBP法：

逆問題をニューラルネットによる逆伝搬学習法で解決しようという試みは現在盛んにおこなわれている。特にニューロを非破壊検査システムに適用することが有力なデータ解析手法として期待されている。非破壊検査では熟練技術者が多様かつ膨大な計測データを材料欠陥に関する類型的なパターンに分類し欠陥に関する様々な状況を判断もしくは推論する必要がある。このような検査技術者の行う知的情報処理をニューラルネットを使用したパターン認識と学習に適用するのは十分に可能であるといえる。逆問題ではまず結果であるデータの集合を用意し、これらと原因となる因子の集合との定量的なマッピングを、複数の階層構造をもつニューラルネット内の結合荷重を調整するかたちで学習させる。例えば非破壊検査において効率のよい学習を実現するためには、まず膨大な検査データを検定すべき材料欠陥情報に応じて類型化できるように元データから適切な特徴抽出が可能なこと、即ち情報圧縮性が保証される必要がある。また非破壊検査の学習能力に汎化性を有することが要求される。学習の過程にもちいられた材料欠陥のパターンのみ認識できるのではなく、パターンの背後に存在する規則性から、事前には予知できない欠陥パターンも正しく認識できなければならない。特に様々な異なった環境での検査データを用いてパターン認識を実現しなければならない非破壊検査において、学習の汎化能力は非常に重要な性質である。筆者らは、赤外線

リモートセンシングにより入手された材料表面の温度分布パターンをニューラルネットワークを用いて逆伝播法により学習を行い、材料接合部の欠陥を検知する手法を提案している¹⁴⁾。また、日本AEM学会の関係ではECT技術とニューラルネットを組み合わせた傷判別の研究も数多く報告されている(例えば¹⁵⁾¹⁶⁾)。BP法による逆問題解析の適用事例はもうでくつした感があるが、今後は学習による逆問題解析の理論的な解明が待たれる。

3.2 逆問題と組み合わせ最適化：

古典的な逆問題においては最適化を実施する必要があるが、これは計算機で逐次処理により解かれる。このため、一般的に計算時間が長大になる傾向がある。ニューラルネットや遺伝アルゴリズムは多数のユニットが同時に動作する高度な並列分散処理システムであり、この並列性を活かすことにより短時間で計算処理を実施できる可能性がある。例えば、ホップフィールドネットは相互結合型のニューラルネットであるから、情報の流れは双方向におこる。しかも各ユニット間の相互結合の強さは対称的であり、また各ユニットは全く同期をとることなく完全に並列的に動作をおこなう。この性質は並列分散処理の典型であり、逆問題を解くにあたって問題となる最適化の実行アルゴリズムとして魅力的である。一方、SQUID等の先端的な磁場計測装置の開発にともない、最近磁界情報を用いた医療診断技術が注目されている。特に生体系の異常診断は、生体に何等の侵襲を加えずに内部に潜む異常等を検査する必要がある。磁場計測による診断技術とは生物の神経活動が電流によって行われることに起因して発生する磁界分布を生体の外部表面で測定し非侵襲に医学的診断を実施することが目的である。この問題は測定可能な磁気フィールド量が局所的にしか入手できないことから、有限個のデータから無限の可能性を探る、いわゆる不適切な逆問題 (ill-posed problem) となる。斎藤らによって提案されている Sampled Pattern Matching 法¹⁷⁾はニュー

ラルネットの連想記憶の概念にもとづいた一点探索型の逆解法である。これは SQUID 等で測定された磁場データから脳や心臓の渦電流分布を逆算する方法である。また、石黒らは、磁場逆解析において、電流分布推定問題を遺伝アルゴリズムにより解決している¹⁸⁾。これらのアルゴリズムでは、パラメータの評価関数に関する感度評価が必要でないで、観測雑音に対してロバストな推定器を構成できるが、そのかわり組み合わせのパターンの変換、すなわち交叉と突然変異の生成をどのように行うかという新たな問題も生ずる。そのほか、確率的な最適化手法により逆問題を解く方法も試みられている。Gottvald らによって提案されている渦電流探傷法 (ECT) における傷の形状同定法は Generation-Mutation-Annealing Strategy (GMA 法) による磁場逆解析手法のひとつである。渦電流探傷法では金属の試料における欠陥は導電率の変化を引き起こし、これが測定磁場の変化によって検出される。このプロセスは Maxwell の方程式によって記述される。この数学モデルにより傷と磁場の変化の関係のデータベースをあらかじめ準備し、解の候補を構成する。GMA 法ではまず複数の解の候補を生成し、確率的な手法によってその解の分布を更新させ、最適な解を見つける方法である。Gottvald らはこの更新において必要となる補助パラメータを最適化する手法、すなわち Meta-Optimization を用いて、ECT における逆解析が従来の非線形最適化にもとづく逆問題解析手法よりはるかに強力であると報告している¹⁹⁾。以上の逆解析は、解とデータの関係構成のために数学モデルを用いていわゆる順問題を解いているが、最適化という手段のなかでは数学モデルは直接用いてはいない。したがって特定の物理現象とは関係なしに議論をすすめることができるが、たとえば、傷の形状を同定する問題ではこれが短所となる場面がでてくる。この欠点を補うため、古典的な逆解析との統合化が考えられる。また、ニューラルネットの超並列性を利用した最適化技術を逆問題に適用する試みも今後の課題であろう。

4 おわりに

この展望記事においては、最近注目されている逆問題解析について、数理科学の分野における研究と工学において注目されている研究の両面についておもいつくままに書き連ねた。したがって双方の内容がつながっていないような印象を受けられるかもしれないが、ここでは2節で指摘した逆問題解析における不適切性にたいして、応用数学の研究者がどのような接近法を試みているか、また現実の問題を解決しなければならない宿命をもっている工学の研究では、いかなるアプローチを逆問題の不適切性にかけているかの現状を説明したつもりである。限られた紙面であれも書こうこれも書こうとおもったが、筆者の非力によりこの記事のタイトルにはほど遠いまとまりのない内容になってしまったことをおわびする。ところで、読者のなかには3節のアプローチは逆問題の範疇に入らないといわれる方もおられるかもしれない。この展望記事の冒頭で書いたように筆者の逆問題に関する基本的な態度は結果から原因を探るというプロセスを逆問題であるとした。結果と原因を結びつける要素が数理科学における因果律ではなく、人間の知識や経験則であってもよいという立場をとれば、これも逆問題であるといえる。なお、本学会においては、平成4年度より分科会「先端工学における逆問題解析手法の調査」が活動をおこなっており現在も進行中である。この分科会の活動状況は学会誌に解説記事として連載中であるが、興味をもたれる方には是非再読されることをおすすめする。またこの分科会はAEM学会員はどなたでも参加できることになっているので、関心をお持ちのかたや意見をお持ちのかたは、学会事務局またはインターネットを通じて (E-mail Address kojima@medr.med.oit.ac.jp) 当方までご連絡いただければ幸いである。

参考文献

- [1] H.T. Banks and K. Kunisch : Estimation Techniques for Distributed Parameter Systems (1989) Birkhäuser
- [2] V.G. Romanov : On the well-posedness of inverse problems with the data support located at the domain boundary, J. Inverse and Ill-posed Problems, Vol. 1, 155/168 (1993)
- [3] S. Nakagiri : Review of Japanese work of the last ten years on identifiability in distributed parameter systems, Inverse Problems, Vol. 9 143/191 (1993)
- [4] R.V. Kohn and M. Vogelius : Determining conductivity by boundary measurements, Comm. Pure. Appl. Math., Vol. 37, 289/298 (1984)
- [5] A. Tikhonov and V. Arsenine : Solutions of Ill-posed Problems, John-Wiley (1977)
- [6] 小島：連載 先端工学における逆問題解析手法 (2), 日本AEM学会誌 Vol. 1, No. 2, 41/47 (1993)
- [7] P.C. Hansen : Analysis of discrete ill-posed problems by means of L-curve, SIAM Review, Vol. 34, No. 4 (1992)
- [8] T. Kitagawa: New approaches to the optimal regularization, 工学に現れる偏微分方程式の数値解析とその周辺, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 836, 98/101 (1993)
- [9] F. Kojima : Robust analysis of boundary shape identification arising in thermal tomography, 工学に現れる偏微分方程式の数値解析とその周辺, 京都大学数理解析研究所講究録, No. 836, 78/87 (1993)
- [10] G. Chavent : Quasiconvex sets and size $\times$ curvature condition, Application to nonlinear inversion, Appl. Math. Optim. (1990)
- [11] 山本：逆問題, 数理科学, No. 370, 48/53 (1994)
- [12] 山本・磯：リレー連載 数学の方向—20世紀における発展から, 第17回応用数学 応用解析学の新しい流れ, 数理科学, No. 380, 78/83 (1995)
- [13] 小島：逆問題におけるインテリジェント技法の研究動向, 第4回機械学会インテリジェントシステムシンポジウム予稿集, 139/142 (1994)
- [14] F. Kojima : Back-propagation learning using the trust region algorithm and application to nondestructive testing in applied electromagnetics, International Journal of Applied Electromagnetics in Materials, Vol. 4, No. 1, 27/33 (1993)
- [15] 斉藤, 早野：逆問題のニューラルネット解, 第2回機械学会インテリジェントシステムシンポジウム予稿集, 129/134 (1992)
- [16] A. Ishiguro, Y. Tanaka and Y. Uchikawa : A study of genetic algorithm's application to inverse problems in electromagnetics, Nonlinear Phenomena in Electromagnetic Fields, Elsevier Studies in Applied Electromagnetics in Materials, Vol. 3,
- [17] A. Gottvald : Inverse problems, nonlinear phenomena and global optimization methods, Nonlinear Phenomena in Electromagnetic Fields, Elsevier Studies in Applied Electromagnetics in Materials, Vol. 3, 181/184 (1992)