

1 はじめに

逆問題は、現在様々な分野で使われている。ここでは、まず始めに、逆問題とは何か、またその性質、および逆問題の重要な例として使われる積分方程式の概要を示す。その後、数値解法で使われる、離散化、Tikhonov 正則化法の理論を説明し、応用例を紹介する。

2 逆問題とは

ある数学的モデル K が設定されたとき、与えられた原因から結果を決定する問題を“順問題 (direct problem)”と呼び、逆に、与えられた結果から原因を推定する問題、また、原因と結果からモデルを推定する問題を“逆問題 (inverse problem)”と呼ぶ。

input	process	output
x	$\rightarrow K$	y
cause	model	effect

3 逆問題の非適切性

逆問題を解く際に、しばしば問題となるのが適切性 (well-posedness) である。一般に、解の存在、解の一意性 (解がただ一つだけであること)、解の安定性 (データへの連続依存) の条件を満たしている順問題 $x \mapsto y = Kx$ があるとき、Hadamard の意味で“適切 (well-posed)”であるという。これに対し、逆の対応 $y \mapsto x = K^{-1}y$ は必ずしも解けず、一意でなく、また連続でない。つまり、順問題は Hadamard の意味で“適切”なのに対し、逆問題は、しばしば、“非適切 (ill-posed)”な問題となる。非適切性が逆問題の計算を困難にしている。

上記の三つの性質のうち、安定性が特に重要である。観測または数値計算には誤差が避けられないので、安定性がいえなければ、一般にそれから計算された解は真の解と全く関係ないものになり、解に関する付加的な情報が得られなければ、そのような問題を解決することはできない。ゆえに、逆問題では解析手法の工夫が順問題に比べて格段に重要となってくる。逆問題では解の存在を仮定した上で、一意性や、安定性、さらには再構成の問題を考察するのが、一般的である。

特に、逆問題の重要な例として、第一種積分方程式 $Kx = y$ を解く問題がしばしば現れる。

4 第一種積分方程式

Fredholm 型の積分方程式の最も標準的なものには、以下のような第一種積分方程式 (4.1) と第二種積分方程式 (4.2) がある。

$$g(x) = \int_a^b K(x, y)f(y)dy, \quad (4.1)$$

$$f(x) = g(x) + \gamma \int_a^b K(x, y)f(y)dy. \quad (4.2)$$

核である関数 $K(x, y)$ と関数 $g(x)$ は既知であり、 γ は与えられた定数パラメータである。

5 離散化と数値解法

非適切な問題の近似解を得る手法として離散化がある。IFK(4.1) に対する離散化数値解法を考える。点 x_i で、

$$g(x_i) = \int_a^b K(x_i, y)f(y)dy \quad (5.1)$$

となる。これを離散化する。分点を N とし、 w を数値積分法の重みとすると、

$$g(x_i) = \sum_{j=1}^N K(x_i, y_j)\omega_j f(y_j)h. \quad (5.2)$$

これは、行列で表された方程式となる。

$$\mathbf{g} = \mathbf{K}\mathbf{f} \quad (5.3)$$

\mathbf{K} が逆行列を持つとき、 \mathbf{f} を得ることができる:

$$\mathbf{f} = \mathbf{K}^{-1}\mathbf{g} \quad (5.4)$$

分点数 N が比較的小さいとき、 \mathbf{K}^{-1} が数値計算に堪える。これが離散化による正則化である。

6 正則化と数値解法

非適切な問題の近似解を得る手法として最もよく使われるのが Tikhonov 正則化法であり、逆問題における誤差の拡大を防ぐため、 K^{-1} の代わりに、 $(K + \gamma I)^{-1}$ を計算する。これはまた、次のような汎関数の最小化問題としても定式化できる:

$$\mathcal{F}(f, \gamma) = \int_a^b dx \left[\tilde{g}(x) - \int_a^b K(x, y)f(y)dy \right]^2 + \gamma \int_a^b |f(y) - f_0(y)|^2 dy$$

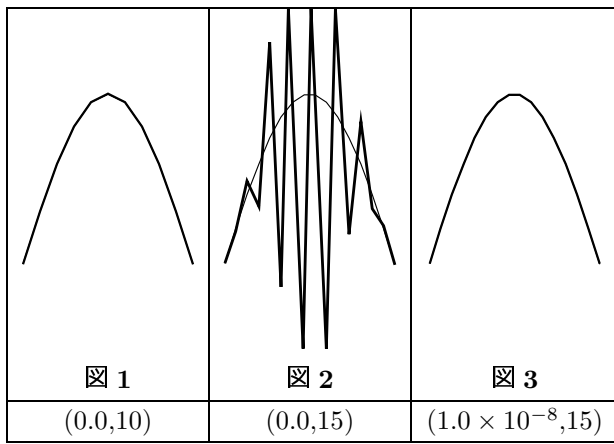
ここで、 f_0 は先見的知識に基づく f の推定値である。この汎関数の第一項は f が真の解に近いほど小さくなる。しかし、逆は必ずしも成り立たない。平滑化のため、 K が滑らかだと、 f が真の解からかけはなれていても、この項が小さくなり得る。このとき、一般に第二項が大きくなるので、この項を追加することでそれを防いでいる。しかし、 γ が大きすぎると、 f のノルムが小さいことだけが優先されるので、滑らかになりすぎて、真の解から離れすぎてしまう。実用的には最適な γ の選択が重要な問題となる。

7 正則化パラメータの必要性

実際に、例として、

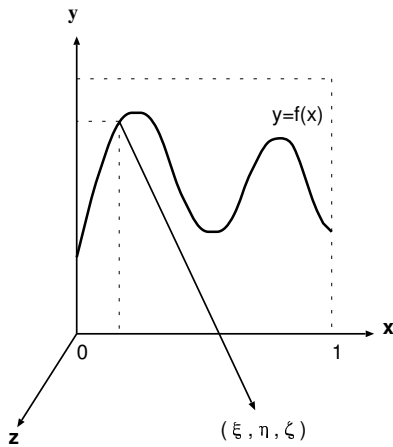
$$g(x) = \int_0^1 \frac{f(y)dy}{\sqrt{(x-y)^2 + 1}} \quad (7.1)$$

を解いたプログラムで比較してみると、以下のような結果になった。 $f(y) = y^2$ の解を考えた。太い線が近似値で、細い線が真の値である。



まず、図1と図2を比べると、分割数が増加すると荒れることがわかる。また、図2と図3を比べると、正則化パラメータが 1.0×10^{-8} という小さい値にもかかわらず、十分正則化されていることがわかる。

8 応用例



x - y 平面に電荷が等密度に分布した誘電体の弦があるとする。この弦の形 $y = f(x)$ はカーテンで隠れて、分からないものとし、この弦の電荷密度 (electric charge) を ρ とし、それが定める静電ポテンシャルをある地点 (ξ, η, ζ) で観測する。観測値を g とすると、以下の式で表される。

$$g(\xi, \eta, \zeta) = \int_L \frac{\rho ds}{\sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + (z-\zeta)^2}} \quad (8.1)$$

簡単のために、 $\rho = 1$ とする。また、

$$ds = \sqrt{dx^2 + dy^2} = \sqrt{1 + f'(x)^2} dx \quad (8.2)$$

となるので、式(8.1)は、

$$g(\xi, \eta, \zeta) = \int_0^1 \frac{\sqrt{1 + f'(x)^2} dx}{\sqrt{(x-\xi)^2 + (f(x)-\eta)^2 + (z-\zeta)^2}} \quad (8.3)$$

と、表せる。

$0 \leq \xi \leq 1, \eta = 0, \zeta = 1$ の条件で観測する。

$$g(\xi, 0, 1) = \int_0^1 \frac{\sqrt{1 + f'(x)^2} dx}{\sqrt{(x-\xi)^2 + f(x)^2 + 1}} \quad (8.4)$$

9 Newton法による定式化

式(8.4)は、積分方程式であるが、未知関数 f について非線型なので、反復法で解くことを考える。 f の初期推測 (initial guess) として $f_0(x) = 0$ を取り、以下 $f_n(x)$ から $f_{n+1}(x)$ への更新には、Newton法を用いる。そのためまず、汎函数

$$F[f] = \int_0^1 \frac{\sqrt{1 + f'(t)^2}}{\sqrt{(x-t)^2 + f(t)^2 + 1}} dt \quad (9.1)$$

のFréchet微分を計算する。簡単のため $h(0) = h(1) = 0$ とし、境界積分項を無視すると、

$$\begin{aligned} DF(f)[h] &= - \int_0^1 \left\{ \left(\frac{\sqrt{1 + f'(t)^2}}{\sqrt{(x-t)^2 + f(t)^2 + 1}} \frac{f'(t)}{1 + f'(t)^2} \right)' \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{1 + f'(t)^2}}{\sqrt{(x-t)^2 + f(t)^2 + 1}} \frac{f(t)}{(x-t)^2 + f(t)^2 + 1} \right\} h(t) dt \end{aligned} \quad (9.2)$$

Newton法の公式は

$$F(f_n + h) = F(f_n) + DF(f_n)[h] = g \quad (9.3)$$

を解いて得られる修正項による $f_{n+1} = f_n + h$, すなわち、

$$f_{n+1} = f_n - DF(f_n)^{-1}[F[f_n] - g]$$

で求まる。以下これを実装する。

$h(0) = h(1) = 0$ と仮定してしまったので、曲線 $y = f(x)$ の両端はカーテンの影から見えており、 $f(0) = f(1) = 0$ であるとして、間の形だけを推定する。よってまずそのような設定の元でモデルを用意し、 $g(x)$ を作る。

10 実験プログラムの基本方針

式(9.2)の核を $K(x, y)$ とし、その行列 A とすると、

$$\begin{aligned} f_0 &\mapsto f_1 = f_0 - A(f_0)^{-1}[Ff_0 - g] \\ f_1 &\mapsto f_2 = f_1 - A(f_1)^{-1}[Ff_1 - g] \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$f_{n-1} \mapsto f_n = f_{n-1} - A(f_{n-1})^{-1}[Ff_{n-1} - g]$$

となる。 f_0 は与えられるので、 f_n は求めることができる。

11 今後の課題

今回、Fredholm型積分方程式を扱った。Fredholm型積分の上端を変数にしたVolterra型積分の応用例も今後考え、実験したい。

参考文献

- [1] Wing, G. Milton, "A primer on integral equations of the first kind : the problem of deconvolution and unfolding", Society for Industrial and Applied Mathematics, 1991.
- [2] Hendry, W. L, "A Volterra integral equation of the first kind", J. Math. Anal. Appl. , 54(1976), pp. 266-278.