

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 5 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011～2012

課題番号：23654034

研究課題名（和文）応用逆問題におけるモデル化誤差の評価とその正則化

研究課題名（英文）“Estimation of modeling errors and their regularization in applied inverse problems”

研究代表者

磯 祐介 (ISO YUUSUKE)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：70203065

研究成果の概要（和文）：逆問題解析においては、現象の数理モデルである微分方程式に対する数学解析による理論的研究と、工学視点による開発指向の応用逆問題解析の研究では、成果に相違があることはよく知られている。これは偏微分方程式の逆問題の殆んどが数学的には非適切であることがその一因である。本課題研究ではモデル化誤差の観点からこの相違を検証し、光トモグラフィ（DOT）の基礎研究の充実を図った。先行研究における拡散方程式モデルと輸送方程式モデルで理解に齟齬があることを突き止め、「常識」化しているこれまでの基礎的知見の問題点を明らかにし、今後の新たな研究方向を定めた。

研究成果の概要（英文）： We have obtained some new results as fundamental study for the diffused optical tomography (DOT), which is considered as a coming technology. The results are deduced through deep consideration, from both mathematics and computing, about mathematical models corresponding to DOT.

In the project study, we focus on modeling errors which arise in mathematical modeling; we restrict ourselves to modeling errors in the transport equation model which is regarded as the fundamental mathematical one for propagation of photons in biomedical tissues. Through theoretical arguments and computings, we have pointed out some fatal misunderstanding in the past studies for DOT based on mathematical analysis of the inverse problems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確率論・統計学）

キーワード：数学一般・応用数学・数値数学・数理モデル・応用解析・数値解析・逆問題解析・光トモグラフィ

1. 研究開始当初の背景  
 先端医療の現場では、様々な断層撮影法（tomography）が数値計算を通して可視化され、医用CT（computer tomography）とし

て利用されている。この技術は電磁波等の波動の生体内での伝播・透過性を利用するもので、特に脳検査に利用されるX線CTは顕著な成功例である。CT技術は外科的方法に依

らずに体内の患部等を可視化するという点で安全であるが、X線については被曝放射線の問題もあり、超音波や比較的安全な電磁波のCT利用を目指した様々な研究が行われている。この中で近赤外光を利用し、NIRSの応用として近年脚光を浴びている“光トモグラフィ(拡散光トモグラフィ、Diffused Optical Tomography, (DOT))”を本課題研究では取り上げている。

この基礎研究では、拡散方程式を数理モデルとする数学的な研究が広く行なわれているが、光トモグラフィを実現可能とするような実用的な成果が得られないままに至っている。この従来法の問題点を明らかにすると共に、本来的ではあるものの解析が困難な「輸送方程式モデル」の逆問題解析の必要性が望まれていた。

## 2. 研究の目的

次世代技術の一つである“光トモグラフィ”(拡散光トモグラフィ、Diffused Optical Tomography, (DOT))の実現および高解像度化に向けた基礎研究を輸送方程式の逆問題として捉え、この逆問題を数学解析および数値解析の両面から研究を進めることが本課題研究の目的である。併せて、この逆問題を高速高精度に処理する数値計算環境の開発研究も関連事項として重要な研究目的に加えている。強い太陽光の下に掌をかざすと毛細血管が見えるが、これは可視光レベルの光の生体透過によるものである。“ひかり”のこの性質を断層撮影技術に利用するものが“光トモグラフィ”であり、実験室レベルでは近赤外光のレーザー光を利用した動物実験が数多く行われており、DOT実現の可能性が期待されている。

生体内における光の伝播は既に周波数毎に詳しく実験的に調べられており、特に近赤外光はNIRSとしての知見も確立されているが、生体内では散乱と拡散を伴うことが特徴である。そもそも光の生体内の伝播は光子で記述し、「輸送方程式(transport equation)」を数理モデルとすることが広く知られている。一方で、数学上ではよく知られているように、輸送方程式の解は拡散方程式の解で近似される。このため、殆どどのDOTの先行研究では、境界観測による拡散方程式の係数決定逆問題を光トモグラフィの基礎研究に置き換え、開発指向の基礎研究が行なわれてきた。我が国でも、この研究方向に沿って乳癌の画像診断のための試作機が作られているものの、画像の解像度に対する問題点から全く実用に至っていない。

一般に逆問題はHadamardの意味で非適切(ill-posed)であることが多く、多くの研究者がこれまでに採用した拡散近似は、DOTの基礎研究としての逆問題解析において問題があるのではないかと代表者は考えてきた。また現象面でも、生体内の近赤外光の伝播では“強い前方散乱”がその特徴といわれているが、拡散近似を数理モデルとして考えた場合、この重要な性質は全く考慮さ

れていないことも大きな問題と考えられる。

このような事情を背景とし、光トモグラフィの高解像度化を輸送方程式の逆問題の解の高精度な再構成として目指すことが本課題研究の目的である。これ迄は数学解析の困難さから避けられていた“輸送方程式の逆問題解析”を正面から取り組むことは、挑戦的な萌芽研究として極めて適切と考え、本課題研究に取り組んでいる。なお併せて、多倍長数値計算環境についての申請者と分担者等の過去の成果をふまえ、ill-posedな逆問題の数値計算をより安定に行ない得る計算環境の一層の整備も必要と判断し、本課題研究の研究目的のひとつに加えている。

## 3. 研究の方法

具体的な研究方法は、数学解析を背景とする理論的なアプローチと数値計算によるシミュレーションが主であるが、平行して分担者のグループが行なった光実験のデータとの比較も行なった。計算環境の開発面では、GPUの応用も考慮したアプローチを行なっている。

輸送方程式の逆問題解析を行なうためには、順問題についての十分な知見が必要となる。有界領域における輸送方程式の(順問題としての)初期値境界値問題に対する研究、特に安定な高精度スキームの確立等の数値解析面からの研究を優先して研究を進めた。DOTの数学的な問題設定は、現象を記述する数理モデル(偏微分方程式)に含まれる光学特性値の決定逆問題である。これに対して、輸送方程式の未知項決定逆問題の研究(特に解の再構成)、その数値計算のための高速多倍長数値計算の環境整備とコンピューティングを当初計画として研究を遂行した。これらは研究手法面からいえば、数学解析に立脚した理論面からのアプローチと、高速多倍長数値計算環境を利用した数値計算によるアプローチ、ならびに計算環境構築に向けたプログラミングによるものである。後述の通り、実験を行ない得る分担者との共同研究を当初より計画し、可能な限り、光実験におデータとの比較検証も行なうこととした。結果的には、この議論が研究を深める契機を与えてくれている。本課題研究は、高解像度の次世代光トモグラフィの基礎理論の充実に焦点を当てたが、経費上の設備の制約から、先行の光トモグラフィ試作機を利用した実証的なアプローチは計画には含めなかった。

一般に、逆問題においては問題の設定と利用する観測データの関係は極めて微妙で、理論研究者の思い込みや勝手な判断による問題設定では次に控える応用研究に結びつかない数学上の“演習問題”を設定する危険がある。代表者の考えでは、DOTに関わる過去の先行研究の幾つかはこの問題を含んでおり、この点を実際に検証することが重要である。さらに、DOTに関する実験でも、データの取り方に時間依存の場合と定常状態の場合の二つがあるため、本課題研究においても定常輸送方程式と時間依存輸送方程式を同

時並行で論じている。

研究組織に関しては、挑戦的萌芽研究としての成果が出るように申請時より工夫を重ね、十分な配慮を行なっている。研究代表者の平素の研究活動の近辺では、“偏微分方程式の逆問題”は共通の研究テーマの1つとされており、これ迄にも光トモグラフィについての勉強会を行ってきた経緯がある。具体的には、研究代表者の所属する講座の久保雅義講師、藤原宏志助教ならびに東森信就講師（課題研究採択後に他大学に転出）とは、平素から数学をベースとした応用逆問題とその数値計算についての意見交換がなされており、応用逆問題の研究に関しは我が国の中でももっとも高い知見を有した持った研究組織が既に有機的にでき上がっているといえる。このため本課題研究の推進に際しても、この研究組織を活用した。また高速多倍長数値計算については、藤原宏志助教ならびに今井仁司教授（徳島大）との過去の共同研究では多くの成果を挙げており、この方面においても強固な研究組織が既に出来上がっていることを前提に、それを利用した。さらに、脳内血流の研究の第一人者であり、先行の光トモグラフィ試作機の設計にも関わった学内医学研究科福山秀直教授に研究協力をお願いして参画頂いたことが特徴的で、福山教授の研究室の研究員を分担者に加えて「光実験の実データに基づいた議論」が継続的に行なえたことは極めて有意義であった。この他、劉太平教授（Stanford 大学数学教室、台湾中央研究院数学研究所）を外国人共同研究者として定期的に意見交換を行ない、輸送方程式の数学解析についての代表者の知見の不足を研究連絡により補強を図った。なお、申請時にはロシア科学アカデミー・Sobolev 数学研究所の D. S. Anikonov 教授の参画も計画していたが、先方事情により、メールによる意見交換に留まった。

平成 21 年度には過去の関連する多くの研究のレビューを、研究協力者の京都大学の大学院生と共に行ない、解決すべき具体的な問題の鮮明化を図っている。実は、輸送方程式の適切性 (well-posedness) については既に多くの成果があるものの、逆問題解析のために一部の評価の精密化が必要であり、その研究を遂行した。また数値解析に関しては、安定性及び収束性が証明された数値計算スキームは殆んど知られていない。このため、この数値計算法を確立することが基礎研究の中では喫緊の課題と考え、分担者の藤原助教に、輸送方程式の数値計算の研究の深化を図った。研究連絡において、劉太平教授からは、輸送方程式の第一近似の拡散方程式と、第二近似の電信方程式の比較の重要性が指摘され、両者の逆問題の安定性評価を再検討するという重要な提案が行なわれた。極めて教務部会話題ではあるが、の研究は残念ながら本課題研究の期間内には成果得るに至らなかった。

平成 22 年度は生体内の光伝播を記述す

る「輸送方程式」の正当性検証を重要なテーマと位置づけ、申請時の研究計画並びに平成 21 年度の研究方向と比べて非抜本的な方向転換を行ない、視点を変えて研究を行なった。ここでは主として数値計算を活用した研究を行なっている。先行研究の詳細な検討を行なうと、生体内での光学物性値並びに散乱核の在り方自体に大きな問題があり、何を逆問題のデータとするか事態を根本的に考えるべき判断に至った。この種の発想の転換による研究は、一般的な観点から「挑戦的萌芽研究」として相応しい方向と考えられるが、この方向転換による研究によって DOT 基礎研究の新たな知見が具体的に得られたことは、本課題研究の成果として評価に値するものと考えている。また、計算環境の整備の点では、近年話題となっていた GPU (Graphic Processing Unit) の一般利用 (いわゆる GPGPU) による進歩的なアプローチを行なった。

今般の挑戦的萌芽研究の遂行に当って、経費の基金化が大変有効であった。過去には年度内の経費の帳尻を合わせるため、いわゆる「予算消化を目的とする対応」がやむを得ず行なわれた。当該課題が挑戦的な萌芽的研究であれば、研究計画や手法の変更は日常茶飯事である。基金化による経費管理は、この弾力的な変更に対して極めて有益であり、結果として、制度の充実によって無駄のない研究経費の執行が行なわれたと考えている。

#### 4. 研究成果

本課題研究により、拡散光トモグラフィ (DOT) に関する新たな知見が得られ、DOT に関する今後の基礎科学的研究を進めるにあたって重要な礎が見い出された。実際、幾つかの内容は発展的に平成 25 年度採択の基盤研究 (B)「数値解析・応用数学的アプローチによる高解像度光トモグラフィの実現のための基礎研究」に引き継がれている。この観点から、本課題研究は挑戦的萌芽研究としての使命を十分に果たしたものと考えている。

逆問題解析は先端的な科学・技術を支える新たなアプローチとして脚光を浴び、我が国においては特にこの 20 年ほどの間に大きな成果を挙げている。数理科学においては現象の数理モデルを構成することから議論が始まる。多くの場合はこの数理モデルに対する入力と出力の関係は「常識的に」定まっておき、いわゆる順問題解析として研究が行なわれてきた。数理モデルと関係する逆問題では、この入力と出力の関係が「常識」とは逆になり、現象論的には系の観測から系自体を同定・決定する問題と位置づけられる。微分方程式を数理モデルとする場合には、微分方程式の解を求めることが「常識的」な設定であるの対し、微分方程式の解に関する情報から (定義域や境界条件を含めて) 微分方程式自体を決定する問題が逆問題である。

順問題の解析では安定な解が一意的に存在する枠組みを「適切 (well-posed)」と呼んでその構造を論じるため、その枠組みの中で

は数学的な基礎研究と工学等の開発研究は相互関係が強い。一方で、逆問題解析においては、数理モデルとしての微分方程式に対する数学解析による理論的研究と、工学視点による開発指向の応用逆問題解析の研究では、成果に相違があることはよく知られている。順問題の場合とは異り、偏微分方程式の逆問題の殆んどは数学的には「非適切 (ill-poses)」であり、本質的に非適切な問題では安定で信頼できる数値計算が行なえない。しかし一方で、幾つかの非破壊検査やトモグラフィ等の応用逆問題では、実用に供する程度の近似解が求められて成果を挙げている。この相違を深く検討することで光トモグラフィの基礎研究を行なったものが本課題研究であり、数理モデルの持つ誤差に関して知見が得られている。より具体的には、逆問題に関する数学解析的基礎研究と応用研究の相違をモデル化誤差の観点から深く掘り下げることにより光トモグラフィ (DOT) の基礎研究を行ない、常識化している先人の業績の問題点を指摘し、今後の研究方向を新たに定めるに至った。

現象の数理モデル化ではモデル化に伴う誤差が不可避であるが、数理モデルから出発する数学解析ではこの誤差は考慮外となる。光トモグラフィの先人の基礎研究の多くは、生体内の光伝播については数理モデルに含まれていることを教義的に理解し、微分方程式の逆問題として論じてきた嫌いがある。このため、現象と掛け離れた数学上の「純粋」な研究が行なわれ、その結果としてこの新技術の実現に寄与しない現状を作り出していると考えられる。本課題研究では、このモデル化誤差の解析に焦点を当て、様々な角度からの検討を行なった。

最終的に得られた成果であるが、まず第一の成果は、輸送方程式の解の拡散近似を利用したアプローチに対する問題点の指摘である。良く知られるように、生体内の光伝播の数理モデルと考えられる輸送方程式の解は、拡散方式の解で近似される。実際、生体内の光伝播自体 (順問題設定) の解析では、この近似は有効に機能している。しかし、逆問題解析では、この近似から派生する「数理モデル誤差」が極めて大きいに関わらず、この方程式から議論が始まるために、その存在さえもが全く考慮されていない。この事実を数値計算と光実験との比較によって示し、問題点を明確化した。第二は、逆問題設定自体に対するパラダイムチェンジの提案である。先行研究では、拡散方程式の逆問題に関する過去の成果の適用を念頭に置いているため、光現象としては観測不可能なデータの利用が前提となっている。逆問題設定自体を変えることで、技術開発の観点から現実的な問題設定への発想の転換を提唱している。ただし、この方向の研究を推進するには、ヘモグロビンの効果を数理モデル化することが必要と考えられ、方向性は示されたものの、研究としては端についたばかりといえる。第三は、光学定数の測定についての問題点の指摘である。生体における光学定数の測定自体に数

値シミュレーションが使われているが、このシミュレーション法の相違から定数に大きな相違が生じることを指摘した。関連して、上流型差分法による輸送方程式の数値解析の理論と計算を充実させ、証明のついた信頼できる差分スキームの提案を通して、計算科学・計算力学の点においても成果を挙げた。第五に、GPGPU を利用した並列化計算環境の構築である。部分的には廉価で極めて高速な環境の実現ができたものの、環境の汎用性での問題点も明らかとなった。なお、研究題目には「正則化」も挙げているが、この点については正則化一般的に関する知見以上の特筆する成果は得られていない。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 13 件)

(1) "Estimates for solutions to the transport equation under the perturbation of its attenuation and scattering terms" (査読有), D. Tanaka, N. Higashimori, Y. Iso, Tamkang J. of Math., vol. 43, pp. 313-320, (2012)

(2) "輸送方程式の初期・境界値問題に対する差分法と台形公式による数値解析" (査読無), 東森信就, 藤原宏志, 数理解析研究所講究録 vol. 1791, pp. 122-130,

(3) "A Challenge to Diffuse Optical Tomography using the Radiative Transport Equation" (査読有), N. Oishi, H. Fukuyama, Proc. of the 2012 IEEE Intn'l Conference on Complex Medical Engineering, vol. 1, pp. 261-266, (2012)

(4) "Temporal lobe epilepsy with amygdala enlargement: a morphologic and functional study" (査読有), S. Takaya, A. Ikeda, N. Oishi (第 6 著者), H. Fukuyama 他 (全 10 名), J. Neuroimaging. (in press), (2012)

(5) "Selective white matter abnormalities in a novel rat model of vascular dementia" (査読有), A. Kitamura, Y. Fujita, N. Oishi (第 3 著者), H. Fukuyama 他 (全 13 名), Neurobiol Aging, vol. 33E, pp. 25-35, (2012)

(6) "Convergence of a semi-discrete finite difference scheme applied to the abstract Cauchy problem on a scale of Banach spaces" (査読有), Y. Iso, Proc. Japan Acad. Ser. A, vol. 87, pp. 109-113, (2011)

(7) "Simple numerical judgement on the singularity of the matrix by using the multiple-precision arithmetic" (査読有), H. Sakaguchi, H. Imai, Y. Iso,

Theoretical and Applied Mechanics Japan, vol. 60. pp. 343-351, (2011)

(8) "Approximate Steady State Models for Magnetic Resonance Elastography", (査読有), Y. Jiang, H. Fujiwara, and G. Nakamura, SIAM J. of Appl. Math., Vol.71, pp.1965-1989, (2011)

(9) "多重格子法による輸送方程式の定常問題に対する差分法の高速解法" (査読有), 藤原 宏志, 計算数理工学論文集, Vol.11 pp.13-18, (2011)

(10) "Numerical Simulation on Non-existence and Non-uniqueness of Solutions for the Tricomi Equation" (査読有), H. Imai, H. Sakaguchi, Y. Iso, GAKUTO Intn'l Ser., Mathematical Sciences and Applications, Vol.34, pp.39-58, (2011)

(11) "スペクトル選点法を用いた遅延微分方程式の数値計算" (査読有), 安部 公輔, 今井 仁司, 中村 正彰, 日本大学理工学部一般教育教室彙報, Vol.89, pp.1-10 (2011)

(12) "Effects of adolescent substance abuse on executivefunction, personality, and behavior - An analysis of juvenile reformatory students -" (査読有), Y. Moriguchi, N. Oishi, T. Murai, H. Fukui, H. Fukuyama, The Asian J. of Child Care, vol.2, pp.55-67, (2011)

(13) "輸送方程式の散乱核の等方性・異方性と数値解の挙動" (査読無), 藤原宏志, 東森信就, 第60回理論応用力学講演会講演論文集, (2011)

[学会発表] (計2件)

(1) "Effective use of multiple-precision arithmetic for the inverse Laplace transform(招待講演)", at: Laplace Transform Methods and Thier Applications (2011, Nov., National Institute for Mathematical Science, Korea) Y. Iso

(2) "光トモグラフィの基礎 - 次代を拓くためのアプローチ" (特別講演) at: 第13回日本ヒト脳機能マッピング学会 (2011年9月, 国立京都国際会館) 藤原宏志

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計1件)

名称: 光トモグラフィ装置  
発明者: 中路晴雄、福山秀直、磯祐介、浦山慎一、大石直也、藤原宏志,

権利者: 国立大学法人京都大学、住友電気工業株式会社

種類:

番号: 特願 2011-105488,

出願年月日: 2011年5月10日

国内外の別: 国内

○取得状況 (計0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

取得年月日:

国内外の別:

[その他]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

磯 祐介 (ISO YUUSUKE)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号: 70203065

### (2) 研究分担者

久保 雅義 (KUBO MASAYOSHI)

京都大学・情報学研究科・講師

研究者番号: 10273616

藤原 宏志 (FUJIWARA HIROSHI)

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号: 00362583

大石 直也 (OOISHI NAOYA)

京都大学・医学(系)研究科(研究院)・研究員

研究者番号: 40526878

今井 仁司 (IMAI HITOSHI)

徳島大学・ソシオテクノサイエンス研究部・教授

研究者番号: 80203298

東森 信就 (HIGASHIMORI NOBUYUKI)

一橋大学・経済学研究科(研究院)・講師

研究者番号: 10397573

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号: